

磁场对双扩散液层热毛细对流的影响¹⁾

李 炜²⁾ 姜燕妮 颜君毅 陈启生

(中国科学院力学研究所国家微重力实验室, 北京 100190)

摘要 通过数值模拟的方法对磁场作用下的双扩散液层热毛细对流进行了研究, 模型中同时考虑了热毛细效应和溶质毛细效应的存在. 研究结果显示, 外部磁场能够有效削弱液层内热毛细对流的强度, 改变热毛细对流的对流结构; 随着磁场强度的增大, 液层内热毛细对流的对流强度逐渐减小, 热质传递过程中扩散效应逐渐得到增强; 最终, 溶质浓度沿水平方向呈梯度分布. 因此, 当磁场强度足够大时能够实现晶体生长中所需的纯扩散条件.

关键词 热毛细对流, 磁场, 双扩散, 水平温度梯度

中图分类号: TK121 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2012)03-0481-06

引 言

在晶体生长和其他材料生长中, 熔体在敞开的水平容器中存在结晶和凝固现象. 在这一过程中, 除了温度和溶质浓度引起的浮力对流外, 由表面张力驱动的流动对晶体生长也具有重要影响. 早在 1981 年, Schwabe^[1] 对封闭容器和敞开容器中晶体生长的区别进行了分析, 阐述了热毛细效应对晶体生长的影响. 随后, 许多研究者对矩形熔体中单-双扩散对流中的浮力和热毛细对流问题开展了研究. Thorp 等^[2] 和 Chen 等^[3] 分别实验报道了稳定的水平液层在水平温差作用下存在一系列近似水平的双扩散对流流动. 在每一层液层内部, 温度和溶质浓度较高的流体从温度的较高的边界流出, 而温度和溶质浓度较低的回流从冷壁面处流出. 这一特殊的温度和浓度梯度的分布易于产生盐角不稳定性. 随后, 盐角不稳定性被 Chan 等^[4] 所证实. Bergman^[5] 首次采用数值模拟的方法研究了矩形腔体在水平温度梯度和浓度梯度作用下的双扩散热毛细对流, 结果显示, 在没有浮力作用下且自由表面的表面张力差满足滞止条件时, 矩形腔体内的流体也会发生对流. 游仁然等^[6] 对浮区中热毛细对流与溶质浓度毛细对流的耦合进行了研究, 发现浓度 Marangoni 数对浮区中的流场和浓度场有明显的影响, 但对温度场的影响相对较小. 王守元^[7] 对热盐双扩散对流系统的非

线性稳定性进行了研究, 考虑了交叉扩散的影响. 李友荣等^[8] 采用渐近线方法对水平温度梯度作用下环形腔内双层薄液层热毛细对流的基本特性进行了研究, 主流区渐近解与数值模拟结果温和很好. Chen 等^[9] 采用线性稳定性方法对浮力和表面张力驱动的双扩散热毛细对流进行了研究, 结果显示由表面张力驱动的迁移波不稳定性在较大的 Marangoni 数时很活跃. 最近, 詹杰民等^[10-12] 对矩形腔体内双扩散热毛细对流的对流起始、对流不稳定性以及向混沌状态的转捩进行了广泛而细致的研究. 现有的研究表明, 目前研究者们对双扩散热毛细对流及其不稳定性机理已经开展了较为广泛而深入的研究, 但对磁场作用下的双扩散热毛细对流还未见相关报道. 与此同时, 通过引入外部磁场对热对流进行抑制在晶体生长过程中已被广泛采用^[13-15]. 因此, 本文在现有的双扩散热毛细对流研究的基础上, 进一步对外部磁场作用下的双扩散热毛细对流进行研究, 这对于了解磁场作用下的双扩散热毛细对流的流动特性及优化晶体生长过程都具有重要意义.

1 物理数学模型

图 1 显示的是简化的研究模型, 液层的厚度为 $d = 0.01 \text{ m}$, 长度为 $L = 0.04 \text{ m}$. 液池的左右壁面保持恒定的温度和溶质浓度, 且右侧壁面的温度 (T_2)

2011-08-22 收到第 1 稿, 2011-10-31 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (10972226).

2) E-mail: liweinml@126.com

和浓度 (C_2) 高于左侧壁面的温度 (T_1) 和浓度 (C_1); 自由表面和底面为绝热壁面, 所有壁面都满足绝缘条件. 施加的外部磁场为沿着 y 轴方向的均匀磁场. 同时, 假设流体为不可压缩的牛顿型黏性流体; 液层的自由表面为水平且不发生变形; 液层在 Marangoni 效应的作用下流动仍是层流; 流体表面张力是温度和溶质浓度的线性函数, 且表面张力随温度和溶质浓度的变化关系表示为

$$\sigma(T, C) = \sigma_0 - \gamma_T(T - T_0) - \gamma_s(C - C_0) \quad (1)$$

其中, γ_T 为表面张力温度系数, γ_s 为表面张力溶质浓度系数, 初始表面张力 $\sigma_0 = \sigma(T_0, C_0)$.

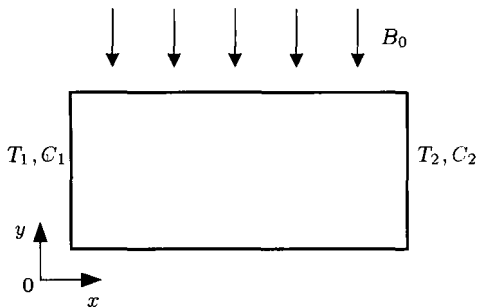


图 1 研究模型

Fig.1 Physical model

基于以上假设, 液层中双扩散热毛细对流的无量纲控制方程可以表示为

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \tau} + \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} = -\nabla P + \nabla^2 \mathbf{V} + Ha^2(\mathbf{J}^* \times \mathbf{B}^*) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \mathbf{V} \cdot \nabla \theta = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \theta \quad (4)$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial \tau} + \mathbf{V} \cdot \nabla C^* = \frac{1}{Pr \cdot Le} \nabla^2 C^* \quad (5)$$

式中分别以 $U_0 = \nu/L$ 和 L 作为特征速度和特征长度, \mathbf{V} 是速度矢量. 各无量纲变量表示为: 速

度 $(U, V) = \frac{(u, v)}{U_0}$, 温度 $\theta = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}$, 浓度 $C^* = \frac{C - C_1}{C_2 - C_1}$, 坐标 $(X, Y) = \frac{(x, y)}{L}$, 时间 $\tau = \frac{tU_0}{L}$, 压力 $P = p/(\rho U_0^2)$, 诱导电流 $\mathbf{J}^* = \mathbf{J}/(B_0 \sigma_m U_0)$, 磁场强度 $\mathbf{B}^* = \mathbf{B}/B_0$. 无量纲数为: Hartmann 数, $Ha = B_0 L \sqrt{\frac{\sigma_m}{\mu}}$; Pr 数, $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$; Lewis 数, $Le = \frac{\alpha}{D}$; 磁雷诺数, $Re_m = \mu_m \sigma_m U_0 L$. α 为热扩散系数, μ 为动力黏度, ν 为运动黏度, D 为质量扩散系数, μ_m 为介电常数, σ_m 为电导率.

流场和磁场相互耦合的控制方程可以表示为

$$\frac{\partial \mathbf{b}^*}{\partial \tau} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{B}^* = \frac{1}{Re_m} \nabla^2 \mathbf{b}^* + (\mathbf{B}^* \cdot \nabla) \mathbf{V} \quad (6)$$

其中 \mathbf{B}^* 为无量纲磁场强度, 包括外加磁场 B_0 和诱导磁场 \mathbf{b}^* . 诱导电流可以表示为: $\mathbf{J}^* = \frac{1}{Re_m} \nabla \times \mathbf{B}^*$.

边界条件及初始条件:

当 $X = 0, \theta = C^* = 0, \mathbf{V} = \mathbf{0}, J_x^* = 0;$

当 $X = 1, \theta = C^* = 1, \mathbf{V} = \mathbf{0}, J_x^* = 0;$

当 $Y = 0, \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{\partial C^*}{\partial Y} = 0, \mathbf{V} = \mathbf{0}, J_y^* = 0;$

当 $Y = d/L, \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{\partial C^*}{\partial Y} = 0, \mathbf{V} = \mathbf{0},$

$$\frac{\partial U}{\partial Y} = -Re_T \frac{\partial \theta}{\partial X} - Re_s \frac{\partial C^*}{\partial X}, J_y^* = 0;$$

当 $\tau = 0, \mathbf{V} = \mathbf{0}, \theta = C^* = 0.$

式中, $Re_T = \frac{\gamma_T \Delta T L}{\mu \nu}$, $Re_s = \frac{\gamma_s \Delta C L}{\mu \nu}$. 流体系统中的热 Marangoni 数表示为 $Ma = Re_T \cdot Pr$, 浓度 Marangoni 数表示为 $Ma_s = Re_s \cdot Pr$. 热 Marangoni 效应和浓度 Marangoni 效应相对大小表示为 $R_\sigma = \frac{Ma_s}{Ma}$. 本文计算中所采用物性参数如表 1 所示.

表 1 Ge_xSi_{1-x} 热物性参数

Table 1 Thermal properties of Ge_xSi_{1-x}

density $\rho/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	5246	thermal diffusivity $\alpha/(\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1})$	2.199×10^{-5}
dynamic viscosity $\mu/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1})$	7.35×10^{-4}	mass diffusivity $D/(\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1})$	1.0×10^{-8}
kinematic viscosity $\nu/(\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1})$	1.4×10^{-7}	thermal conductivity $/(W\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$ λ	51.1
electric conductivity $\sigma_m/(\text{s}\cdot\text{m}^{-1})$	2.5×10^6	temperature coefficient of surface tension $\gamma_T/(\text{kg}\cdot\text{s}^{-2}\cdot\text{K}^{-1})$	-8.1×10^{-5}
specific heat capacity $C_p/(\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	443	solute concentration coefficient of surface tension $\gamma_s/(\text{kg}\cdot\text{s}^{-2})$	2.2×10^{-3}

2 数值方法

采用非均匀交错网格对控制方程进行空间离散, 其中在左右壁面、自由表面、底面附近对网格进行局部加密. 采用有限体积法离散方程, 对流项采用对流项的二次迎风插值 (quadratic upstream interpolation for convective kinematics, QUICK) 格式, 扩散项采用中心差分, 压力隐式分裂算子 (pressure-implicit splitting of operators, PISO) 算法用于求解 N-S 方程, 时间项采用二阶隐式推进法. 诱导磁场方程的离散和求解采用与动量方程相同的格式, 动量方程中洛伦兹力的求解是采用上一个时间步的诱导电流和磁场强度. 当速度、温度、压力等变量相对变化率小于 10^{-5} 时认为计算收敛. 本文计算区域划分为 $121(x) \times 51(y)$ 个网格, 网格的独立性已得到验证, 计算中采用时间步长为 0.001 s. 为了验证本程序计算结果的正确性, 采用 Kamotani 等^[16] 开展的热毛细对流实验进行了数值模拟, 并与其实验结果进行了比较, 图 2 显示的是稳态自由表面温度分布比较图, 可以看出两者的变化趋势相一致.

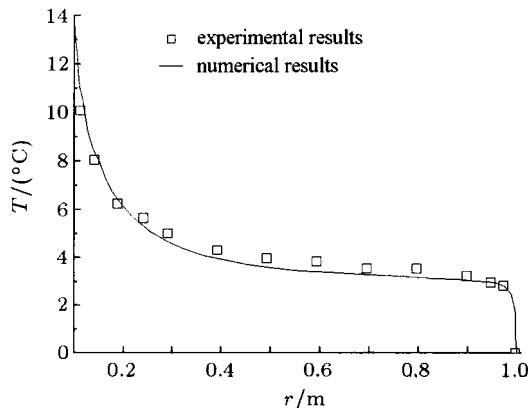


图 2 实验结果与计算结果比较
Fig.2 Comparison of numerical results with experimental results

3 计算结果

由于腔体的左右壁面之间存在温度差和浓度差, 因而在流体自由表面会产生由温度梯度和溶质浓度梯度导致的表面张力梯度 (即热毛细力和溶质毛细力), 从而驱动流体的流动. 本文所采用流体的表面张力随温度和溶质浓度的变化呈相反的变化关系, 因而流体的对流方向取决于热 Marangoni 效应和浓度 Marangoni 效应的相对大小 R_σ . 计算中所采用 $Re_s = 1.11 \times 10^5$, $Re_T = -3.15 \times 10^5$, 其对应的

$R_\sigma = -0.35$, 表明流体系统的热 Marangoni 效应强于浓度 Marangoni 效应. 图 3 显示的是不同强度磁场作用下双扩散热毛细对流的流线分布. 可以看出, 在无磁场作用时, 液层中形成了两个对流涡循环, 其中靠近左侧壁面的逆时针循环的对流涡的对流强度较强, 而位于右侧底部的顺时针对流涡的对流强度较小. 这是由于自由表面处的热毛细力由右侧壁面指向左侧壁面, 驱动自由表面处的流体流向左侧壁面, 而在壁面的阻挡作用下形成对流涡循环. 当对流强度较大时, 在液层的右下部需要形成顺时针对流涡循环来满足质量守恒. 当 Ha 数为 100 时, 液层的对流结构表现为飞轮型的对流涡, 右下部的顺时针对流涡被磁场抑制, 整个液层内部形成了一个完整的对流循环, 表明磁场产生的洛伦兹力削弱了液层的对流强度. 当 Ha 数进一步增大为 200 时, 原来位于左侧壁面处的飞轮型对流结构被抑制, 同时, 整个液层形成了一个规则的对流循环, 其对流涡的核心位于自由表面附近. 这是由于磁场产生的洛伦兹力削弱了整个液层流动, 而在自由表面处由于 Marangoni 效应的存在导致这一区域的流速相对

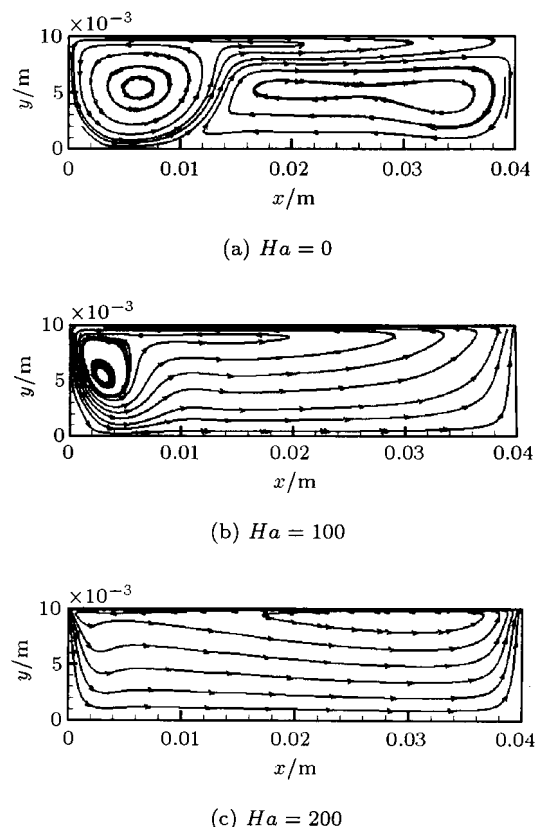


图 3 不同强度磁场作用下流线分布
Fig.3 Streamlines distribution under different magnetic field intensities

较大. 对涡流结构的变化进一步体现了磁场对热毛细对流的抑制作用.

图 4 给出了不同强度磁场作用下液层内部的温度等值线分布. 可以看出, 在无磁场作用时温度等值线表现出明显的扭曲, 特别是位于左侧壁面区域, 这是由于这一区域的对流强度较大. 随着磁场强度增大, 温度等值线的扭曲度逐渐减小, 表明液层的热毛细对流效应逐渐减弱, 热扩散效应逐渐在热量的传递中起主导作用.

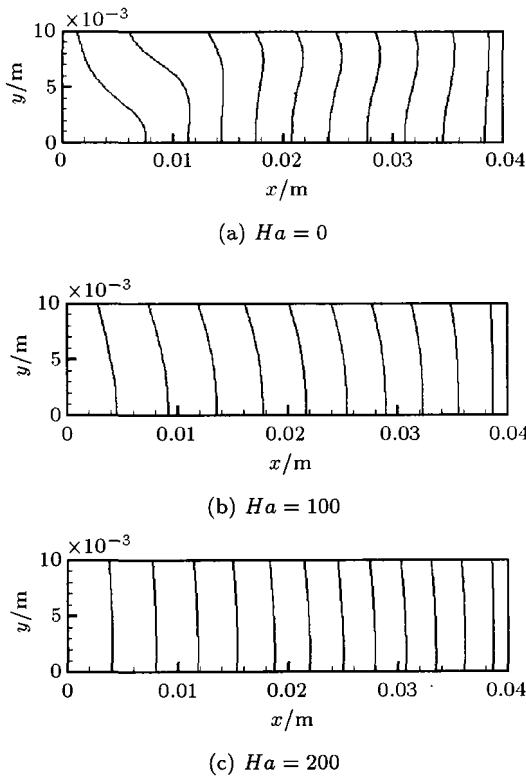


图 4 不同强度磁场作用下温度等值线分布
Fig.4 Isotherms distribution under different magnetic field intensities

图 5 显示的是不同强度磁场作用下溶质质量分数分布. 在无磁场作用下, 液层中对流效应非常明显, 因而溶质浓度在液层中的分布表现出非常不均匀的分布. 由于自由表面处热毛细力的驱动, 溶质沿着自由表面输运到左侧壁面处, 并在壁面的阻挡下液层底部产生回流, 向右侧壁面处发生迁移. 当外加磁场的 Ha 数为 100 时, 溶质的对流效应明显减小, 表现出右侧壁面高浓度的溶质沿着自由表面向左侧方向迁移, 而左侧壁面处低浓度的溶质沿着底面向右侧方向迁移, 同时浓度等值线的扭曲度较为明显. 当 Ha 数为 200 时, 浓度等值线的分布转变为沿水平方向均匀分布, 扩散效应占据主导地

位. 表明磁场大大削弱了液层内的热毛细对流, 溶质的扩散效应得到大大增强, 这对于晶体生长中所需要的纯扩散条件非常有利.

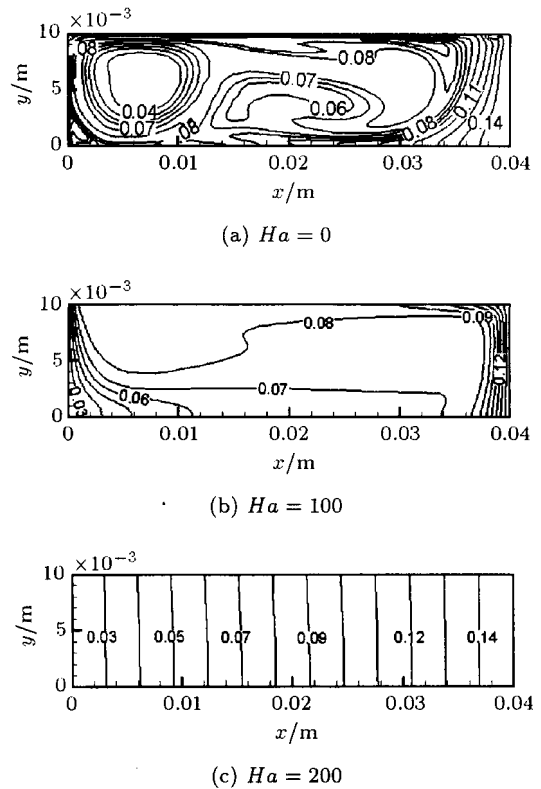


图 5 不同强度磁场作用下溶质质量分数分布
Fig.5 Concentration distribution under different magnetic field intensities

图 6 显示的是不同强度磁场下液层自由表面速度分布情况. 可以看出, 在无磁场作用下, 液层自由表面的速度较大, 其速度变化并不是单调变化的, 这是由于液层内对流产生的二次对流涡和热毛细效应和溶质毛细效应相对大小变化所导致的. 而在磁

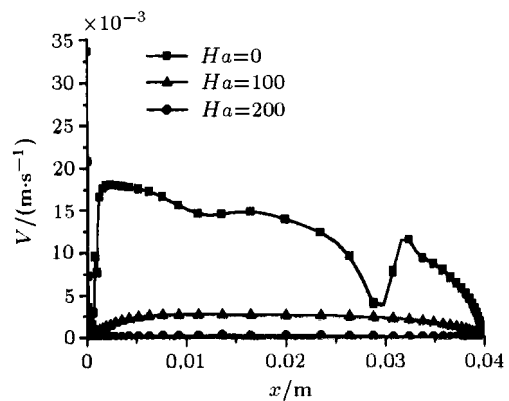


图 6 不同强度磁场下液层自由表面速度分布
Fig.6 Velocity distribution on the free surface under different magnetic field intensities

场作用下, 自由表面的速度大大减小, 且随着 Ha 数增大自由表面的速度减小. 图 7 显示的是液层内最大涡量值随磁场强度的变化情况. 从图中可以看出, 随着 Ha 数的增大, 液层内部的最大涡量值逐渐减小, 表明磁场能够有效抑制液层内的热毛细对流.

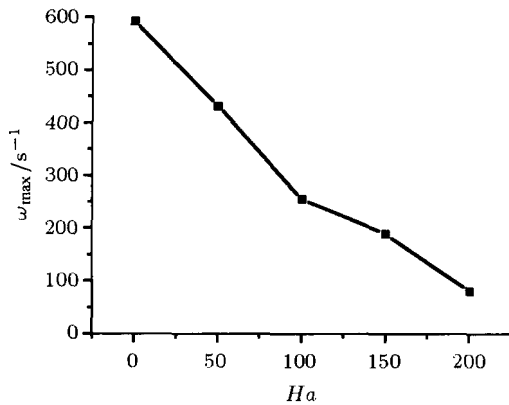


图 7 液层最大涡量值随磁场强度变化

Fig.7 Variation of the maximal vorticity magnitude with magnetic field intensity

4 结 论

本文以晶体生长过程中的热质传递现象为研究背景, 通过数值模拟的方法对磁场作用下的双扩散热毛细对流进行了研究, 模型中同时考虑了热毛细效应和溶质毛细效应的存在. 数值模拟结果表明:

(1) 外部磁场能够有效改变液层内热毛细对流的对流结构, 且随着磁场强度增强对涡流首先从双涡结构转变为飞轮型结构, 最后转变为规则的对流涡结构, 其对流涡中心被限制在自由表面附近区域;

(2) 磁场能够有效削弱液层内热毛细对流的对流强度, 随着磁场强度的增大液层内温度等值线的扭曲度逐渐减小, 热量传递过程中的热扩散机制得到增强;

(3) 沿水平方向的溶质浓度分布随着磁场强度增强逐渐呈现出梯度分布, 其溶质传递过程中的扩散效应逐渐得到增强.

因此, 当磁场强度足够大时能够实现晶体生长中所需的纯扩散条件, 这对于生长高质量的晶体材料具有重要指导意义.

参 考 文 献

1 Schwabe D. Marangoni effects in crystal growth melts. *Physico Chem Hydrodynam*, 1981, 2: 263-280

- 2 Thorpe EJ, Hutt PK, Soulsby R. The effects of horizontal gradients in thermohaline convection. *J Fluid Mech*, 1969, 38: 375-400
- 3 Chen CF, Briggs DG, Wirtz RA. Stability of thermal convection in a Salinity gradient due to lateral heating. *Int J Heat Mass Trans*, 1971, 14: 57-65
- 4 Chan CL, Chen WY, Chen CF. Secondary motion in convection layers generated by lateral heating of a solute gradient. *J Fluid Mech*, 2002, 455: 2143-2159
- 5 Bergman TL. Numerical simulation of double-diffusive Marangoni convection. *Phys Fluids*, 1986, 29: 2103
- 6 游仁然, 胡文瑞. 浮区中热和溶质的毛细对流. 半导体学报, 1992, 13(4): 209-216 (You Renran, Hu Wenrui. Thermal and solutal marangoni convection in liquid zone. *J Semiconductor*, 1992, 13(4): 209-216 (in Chinese))
- 7 王守元. 计及交叉扩散时热盐双扩散对流系统的非线性稳定性分析. 力学与实践, 2010, 32(5): 22-26 (Wang Shouyuan. Analysis of nonlinear stability of double-diffusive convection with cross-diffusion in a thermohaline system. *Mech Engin*, 2010, 32(5): 22-26 (in Chinese))
- 8 李友荣, 王双成, 石万元等. 环形腔内双层薄液层热毛细对流的渐近解. 力学学报, 2010, 42(2): 306-311 (Li Yourong, Wang Shuangcheng, Shi Wanyuan, et al. Asymptotic solution of thermocapillary convection of thin two-layer system in an annular cavity. *Chinese J Theoretical App Mech*, 2010, 42(2): 306-311(in Chinese))
- 9 Chen CF, Chan CL. Stability of buoyancy and surface tension driven convection in a horizontal double-diffusive fluid layer. *Int J Heat Mass Trans*, 2010, 53: 1563-1569
- 10 Zhan JM, Chen ZW, Li YS, et al. Three-dimensional double-diffusive Marangoni convection in a cubic cavity with horizontal, temperature and concentration gradients. *Phys Rev E*, 2010, 82: 066305
- 11 Chen ZW, Li YS, Zhan JM. Double-diffusive Marangoni convection in a rectangular cavity: onset of convection. *Phys Fluids*, 2010, 22: 034106
- 12 Li YS, Chen ZW, Zhan JM. Double-diffusive Marangoni convection in a rectangular cavity: transition to chaos. *Inter J Heat Mass Trans*, 2010, 53: 5223-5231
- 13 周小明, 黄护林. 水平磁场对双层流体热毛细对流的影响. 工程热物理学报, 2008, 29(11): 1927-1929 (Zhou Xiaoming, Huang Hulin. Effects of horizontal magnetic fields on thermocapillary convection in two-layer fluids system. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2008, 29(11): 1927-1929 (in Chinese))
- 14 Series RW. Czochralski growth of silicon under an axial magnetic field. *J Cryst Growth*, 1989, 97: 85-91
- 15 Series RW. Effect of a shaped magnetic field on Czochralski silicon growth. *J Cryst Growth*, 1989, 97: 92-98
- 16 Kamotani Y, Ostrach S, Pline A. A thermocapillary convection experiment in microgravity. *Int J Heat Mass Trans*, 1995, 117(2): 611-618

(责任编辑: 周冬冬)

EFFECT OF MAGNETIC FIELD ON THERMOCAPILLARY CONVECTION IN A DOUBLE-DIFFUSIVE LIQUID LAYER¹⁾

Li Wei²⁾ Jiang Yanni Yan Junyi Chen Qisheng

(*National microgravity Laboratory, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

Abstract Effect of magnetic field on thermocapillary convection in a double-diffusive liquid layer was investigated by numerical simulation, in which both the thermal Marangoni effect and solutal Marangoni effect were considered. The computational results show that thermocapillary convection is effectively weakened by external magnetic field and the convective pattern is changed. With magnetic field intensity increasing, the convective intensity is decreased gradually; the diffusive effect in the process of heat and mass transfer is strengthened, and the solute concentration distribution indicates a gradient along the horizontal direction. Therefore, the pure diffusion process in crystal growth can be realized as magnetic field intensity is sufficiently large.

Key words thermocapillary convection, magnetic field, double-diffusive, horizontal temperature gradient

Received 22 August 2011, revised 31 October 2011.

1) The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (10972226).

2) E-mail: liweinml@126.com