ГРАДИЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ТЕПЛОВОГО ПОЛЯ НА ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА

О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого», ***shablovsky-on@yandex.ru***

Введение. Процессы высокоскоростной кристаллизации глубоко переохлажденного расплава служат основой перспективных способов получения материалов с новыми функциональными свойствами. В настоящее время в экспериментальных условиях достигнуты скорости роста 20–70 м/с при глубине переохлаждения расплава до $300°\mathrm{K}$. История данного вопроса и библиография изложены в [1].

Важным аспектом проблемы роста является дендритное ветвление и анализ морфологической неустойчивости фазовой границы (**ФГ**). В настоящей статье рассматривается рост кристалла из однокомпонентного переохлажденного расплава с позиций теории локально-неравновесного теплопереноса [2]. Данная работа продолжает исследования [3]–[6] и имеет следующие цели: 1) изучить градиентные свойства теплового поля на линии роста; 2) проанализировать корреляцию «кривизна – скорость перемещения вершины дендрита».

Нормальные производные температуры и компонентов вектора теплового потока. Рассмотрим ФГ (двумерную плоскую либо осесимметричную), обладающую нестационарной кривизной. Уравнение линии роста постулируем в следующем виде:

$$f \equiv x + A(t) - \left[B(y)\right]^{p(t)} = 0 .$$

Эта априорная зависимость основана на экспериментальных сведениях о нестационарных свойствах скорости и кривизны ФГ. Здесь t - время; в плоском ($\nu = 0$) двухмерном случае x, y – прямоугольные декартовы координаты; в случае осевой симметрии ($\nu = 1$) координата x соответствует оси симметрии; y – радиальная координата; $B = B(y)$ – непрерывная функция; $B(y) \ge 1$, $\dot{B}(y) \equiv dB/dy \ge 0$ при $y \ge 0$, причем $B(y=0) = 1$. Закон движения вершины дендрита ($y = 0$): $x_j(t, y=0) \equiv x_0(t) = 1 - A(t)$, $t \ge 0$. ФГ движется влево, $dx_0/dt = -\dot{A}(t) < 0$.

Геометрические свойства ФГ представляются формулами:

$$G = \left|\mathrm{grad} f\right|, \quad G = \left[1 + p^2 B^{2(p-1)} \dot{B}^2\right]^{1/2}, B_1 = pB^{p-1}\dot{B}, \quad p = p(t) \ge 1,\ \sin\beta = \frac{1}{G}, \quad \cos\beta = \frac{B_1}{G}.$$

Алгоритм построения криволинейных координатных осей с ортогональным базисом $\boldsymbol{s}$, $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{b}$ (касательная, главная нормаль и бинормаль к поверхности ФГ) изложен в [7], см. также [6]. ФГ $x_j = B^p - A$ перемещается со скоростью $N = \left(\dot{p}B^p \ln B - \dot{A}\right)/G$ и обладает средней кривизной

$$K = K_1 + K_2, \quad K_1 = \frac{B_2}{G^3}, \quad K_2 = \frac{\nu B_1}{yG},\ B_2 = B_2(y,t) = pB^{p-1}\ddot{B} + p(p-1)B^{p-2}\dot{B}^2 . \qquad (1)$$

В случае $p(t) \equiv 1$ получаем зависимости для ФГ стационарной формы. Работаем с двумерными уравнениями теплопереноса:

$$c\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q_1}{\partial x} + \frac{\partial q_2}{\partial y} + \frac{\nu}{y} q_2 = 0,\ q_1 + \gamma\frac{\partial q_1}{\partial t} = -\lambda\frac{\partial T}{\partial x},\ q_2 + \gamma\frac{\partial q_2}{\partial t} = -\lambda\frac{\partial T}{\partial y};\ \nu = 0, 1.$$

Основные обозначения: T – температура, $\boldsymbol{q}(q_1, q_2)$ – вектор удельного теплового потока; λ – коэффициент теплопроводности; c – объемная теплоемкость; γ – время релаксации теплового потока; $w^2 = \lambda/(\gamma c)$ - квадрат скорости распространения тепловых возмущений. После перехода от аргументов (x, y, t) к (s, n, t) получаем уравнения для функций T, q_n, q_s:

$$\left(\frac{c\xi_{3t}}{G}\right)\frac{\partial T}{\partial n} + \frac{\partial q_n}{\partial n} = \Pi_1, \tag{2}$$

$$\Pi_1 = \frac{\nu}{y}\left(q_n \cos\beta - q_s \sin\beta\right) - c\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{cB_1}{G}\xi_{1t}\frac{\partial T}{\partial s} - q_s\frac{\partial}{\partial y}\left(\sin\beta\right) + q_n\frac{\partial}{\partial y}\left(\cos\beta\right) - \frac{\partial q_s}{\partial s};$$

$$\frac{\lambda}{G}\frac{\partial T}{\partial n} + \left(\gamma\sin\beta\frac{\xi_{3t}}{G}\right)\frac{\partial q_n}{\partial n} + \left(\gamma\cos\beta\frac{\xi_{3t}}{G}\right)\frac{\partial q_s}{\partial n} = \Pi_2, \tag{3}$$

$$\Pi_2 = -\frac{B_1}{G}\lambda\frac{\partial T}{\partial s} - \gamma\frac{B_1^2}{G^2}\xi_{1t}\frac{\partial q_s}{\partial s} - \gamma\cos\beta\frac{\partial q_s}{\partial t} - \gamma\frac{B_1}{G^2}\xi_{1t}\frac{\partial q_n}{\partial s} - \gamma\sin\beta\frac{\partial q_n}{\partial t} -$$
$$-\gamma\left(q_n\frac{\partial \sin\beta}{\partial t} + q_s\frac{\partial \cos\beta}{\partial t}\right) - q_n \sin\beta - q_s\cos\beta;$$

$$-\frac{\lambda B_1}{G}\frac{\partial T}{\partial n} - \left(\gamma\cos\beta\frac{\xi_{3t}}{G}\right)\frac{\partial q_n}{\partial n} + \left(\gamma\sin\beta\frac{\xi_{3t}}{G}\right)\frac{\partial q_s}{\partial n} = \Pi_3, \tag{4}$$

$$\Pi_3 = -\frac{\lambda}{G}\frac{\partial T}{\partial s} + \gamma\frac{B_1^2}{G^2}\xi_{1t}\frac{\partial q_n}{\partial s} - \gamma\frac{B_1}{G^2}\xi_{1t}\frac{\partial q_s}{\partial s} + \gamma\cos\beta\frac{\partial q_n}{\partial t} - \gamma\sin\beta\frac{\partial q_s}{\partial t} -$$
$$-\gamma\left(q_s\frac{\partial \sin\beta}{\partial t} - q_n\frac{\partial \cos\beta}{\partial t}\right) + q_n\cos\beta - q_s\sin\beta.$$

Здесь $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{q}_n + \boldsymbol{q}_s$; $q_1 = q_n\sin\beta + q_s\cos\beta$, $q_2 = -q_n\cos\beta + q_s\sin\beta$.

$$\xi_{1t} = \dot{A} + \frac{\partial}{\partial t}\int\frac{dy}{B_1(y,t)},\quad \xi_{3t} = \dot{A} - \dot{p}B^p\ln B;\quad \frac{\partial G}{\partial t} = \frac{B_1}{G}\frac{\partial B_1}{\partial t},\quad \frac{\partial B_1}{\partial t} = \dot{p}\dot{B}B^{p-1}(1 + p\ln B),$$
$$\dot{p} = dp(t)/dt,\quad \dot{B} = dB(y)/dy.$$

Данные три уравнения образуют систему линейных неоднородных алгебраических уравнений по отношению к нормальным производным $\frac{\partial T}{\partial n}$, $\frac{\partial q_n}{\partial n}$, $\frac{\partial q_s}{\partial n}$. Определитель этой системы равен

$$\Delta = \frac{\lambda\gamma\xi_{3t}}{G}\left(M^2 - 1\right),\ M^2 = \frac{N^2}{w^2},\ N = -\frac{\xi_{3t}}{G}. \tag{5}$$

Нормальные производные подсчитываем по формулам:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \frac{\Delta_1^1}{c\gamma G(N^2 - w^2)}, \tag{6}$$

$$\frac{\partial q_n}{\partial n} = \frac{\Delta_2^1}{c\gamma G^2(N^2 - w^2)}, \tag{7}$$

$$\frac{\partial q_s}{\partial n} = \frac{\Pi_3 + B_1\Pi_2}{\gamma\xi_{3t}}. \tag{8}$$

$$\Delta_1^1 = \Pi_1\gamma\xi_{3t} + B_1\Pi_3 - \Pi_2;\ \Delta_2^1 = c\xi_{3t}(\Pi_2 - B_1\Pi_3) - \lambda\Pi_1 G^2.$$

ФГ кристаллизации моделируем поверхностью сильного разрыва теплового поля. Динамические условия совместности получаем обычным образом [8]:

$$q_{sj} \equiv q_j\cos(\beta - \beta_j) = q_*\cos\beta; \tag{9}$$

$$q_{nj} \equiv q_j \sin(\beta-\beta_j) = q_* \sin\beta + N(u_j - u_*) - L\left(N + \gamma\frac{\partial N}{\partial t}\right); \tag{10}$$

$$T_j = T_c - \frac{T_c U}{L} K - \frac{|N|}{\mu};\ q_j = |\boldsymbol{q}_j|,\ q_* = |\boldsymbol{q}_*|;\ U, \mu - \mathrm{const}. \tag{11}$$

Звездочкой отмечены параметры расплава; индекс j указывает, что значение функции определено на правой стороне разрыва, в твердой фазе; L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; μ – кинетический коэффициент роста; U – поверхностная энергия границы раздела фаз; T_c – равновесная температура кристаллизации; $c = du/dT$. Подробное обсуждение условий (9) - (11) имеется в [6]. Здесь допускается случай одномерного нестационарного теплового поля расплава, $q_* = q_*(x,t)$, $T_* = T_*(x,t)$. Для определенности анализируем вариант $\boldsymbol{N} = N\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{q}_* = q_*\boldsymbol{i}_1$, принимая $N < 0$, $q_* > 0$. Функции T_j, q_{nj}, q_{sj} определяем с помощью (9)–(11) через параметры расплава q_*, T_*. Продифференцировав по касательной координате формулы (9)–(11), находим

$$\left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_j = \frac{\partial T_j}{\partial s},\ \left(\frac{\partial q_n}{\partial s}\right)_j = \frac{\partial q_{nj}}{\partial s},\ \left(\frac{\partial q_s}{\partial s}\right)_j = \frac{\partial q_{sj}}{\partial s}.$$

Нормальные производные на ФГ

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_j,\ \left(\frac{\partial q_n}{\partial n}\right)_j,\ \left(\frac{\partial q_s}{\partial n}\right)_j \tag{12}$$

подсчитываем на основе (9)–(11) и их дифференциальных следствий, получаемых воздействием операторов $\dfrac{\partial}{\partial s} = \dfrac{\partial}{\partial x}\cos\beta + \dfrac{\partial}{\partial y}\sin\beta$ и $\dfrac{\partial}{\partial n} = \dfrac{\partial}{\partial x}\sin\beta - \dfrac{\partial}{\partial y}\cos\beta$.

Обсуждение результатов. Математической моделью появления боковой ветви дендрита на ФГ служит градиентная катастрофа, с наступлением которой производные (12) становятся неограниченно большими. Анализ полученных выражений позволяет утверждать, что существуют три причины разрушения теплового поля на линии роста.

I. Из (6), (7) ясно, что разрушение происходит в «звуковой» точке (x_j^1, y^1, t^1), когда $N^2(y^1,t^1) = w_j^2$; здесь $x_j^1 = x_j(y^1,t^1)$.

II. Согласно (5), (8), градиентная катастрофа наступает в точке остановки (x_{jr}, y_r, t_r) ФГ, когда $N(y_r,t_r) = 0$, т.е. $(\dot{p}B^p \ln B)_r = (\dot{A})_r$. Этот вариант возможен только при нестационарной кривизне ФГ, когда функция $p(t)$ не является тождественной константой. В частном случае, когда $p(t) \equiv \mathrm{const}$, кривизна стационарна ($\partial K/\partial t \equiv 0$, см. (1)), и градиентная катастрофа может появиться только в «звуковой» точке.

Отметим еще, что в кинематическом отношении $\dot{A}(t)$ характеризует скорость, отвечающую поступательной компоненте движения ФГ; $\dot{p}(t)$ определяет угловую скорость касательной к ФГ в каждой ее точке. В физическом отношении $\dot{A}(t)$ описывает скорость движения вершины дендрита; $p(t)$ входит в формулу для кривизны $K(y=0,t) = p(t)\ddot{B}(y=0)$.

III. При подсчете производной $(\partial q_n/\partial t)_j$, входящей в Π_2, Π_3 появляется $\partial^2 N/\partial t^2$, т.е. формулы (12) содержат производные третьего порядка $d^3A(t)/dt^3$, $d^3p(t)/dt^3$. Градиентная катастрофа появляется, когда $p(t)$ и (или) $A(t)$ содержат входящую аддитивно степенную либо логарифмическую особенности:

$$(t_3-t)^{3-\alpha},\ t_3>0,\ 0<\alpha<1;\ (t_3-t)^3\ln(t_3-t),\ t_3>0.$$

Из рассмотрения аналитических выражений Π_2 и Π_3 ясно, что локальная неравновесность проявляет себя не только по отношению к тепловому потоку (см. слагаемые, содержащие множители $\gamma\partial q_n/\partial t$, $\gamma\partial q_s/\partial t$), но и по отношению к углу β, характеризующему двумерные геометрические свойства ФГ (см. слагаемые содержащие множители $\gamma\partial\sin\beta/\partial t$, $\gamma\partial\cos\beta/\partial t$). Таким образом, нормальные производные (6) - (8) содержат слагаемые вида $\gamma\dfrac{\partial}{\partial t}(q_n\cos\beta)$, $\gamma\dfrac{\partial}{\partial t}(q_s\cos\beta)$, а это значит, что на фоне локальной неравновесности процесса роста наблюдается нелинейное (мультипликативное) взаимодействие тепловых и морфологических свойств ФГ. На рисунках 1 и 2 представлены результаты расчета плоской ФГ при

$$A_1(t)=a_1(1-\cos\omega_1 t)/\omega_1,\ B(y)=1+n_1 y,\ p(t)=1+a_2(1-\sin\omega_2 t),\ a_2>0,\ t\ge 0$$

$$q_*(x)=q_*^1\sin^2(k_* x);\ q_*^1, k_*-\mathrm{const},\ q_*^1>0,\ \ x\in[x_1,0],\ x_1<0,\ N_m=-N\ .$$

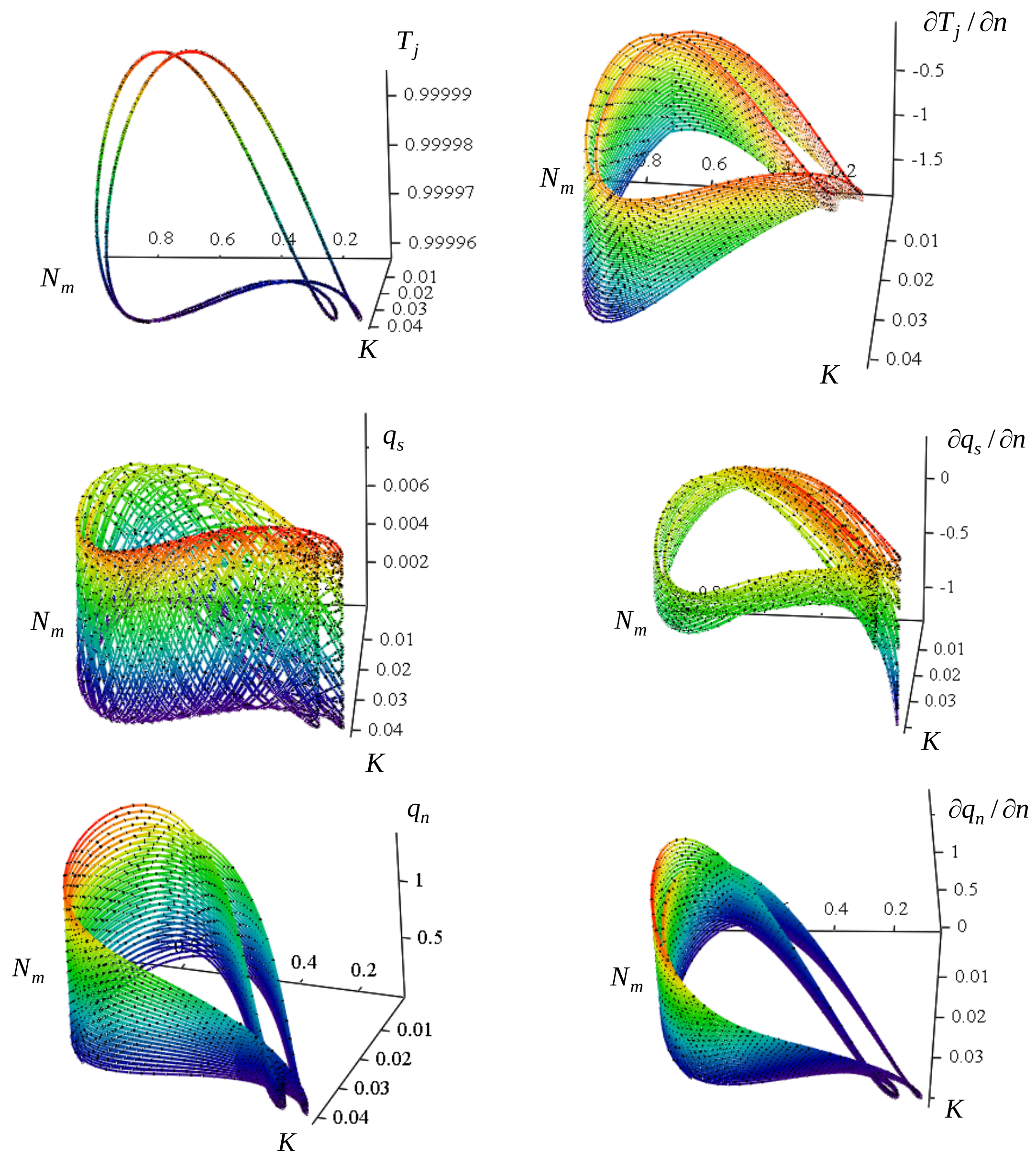

Рис. 1. Тепловые процессы на периферии дендрита

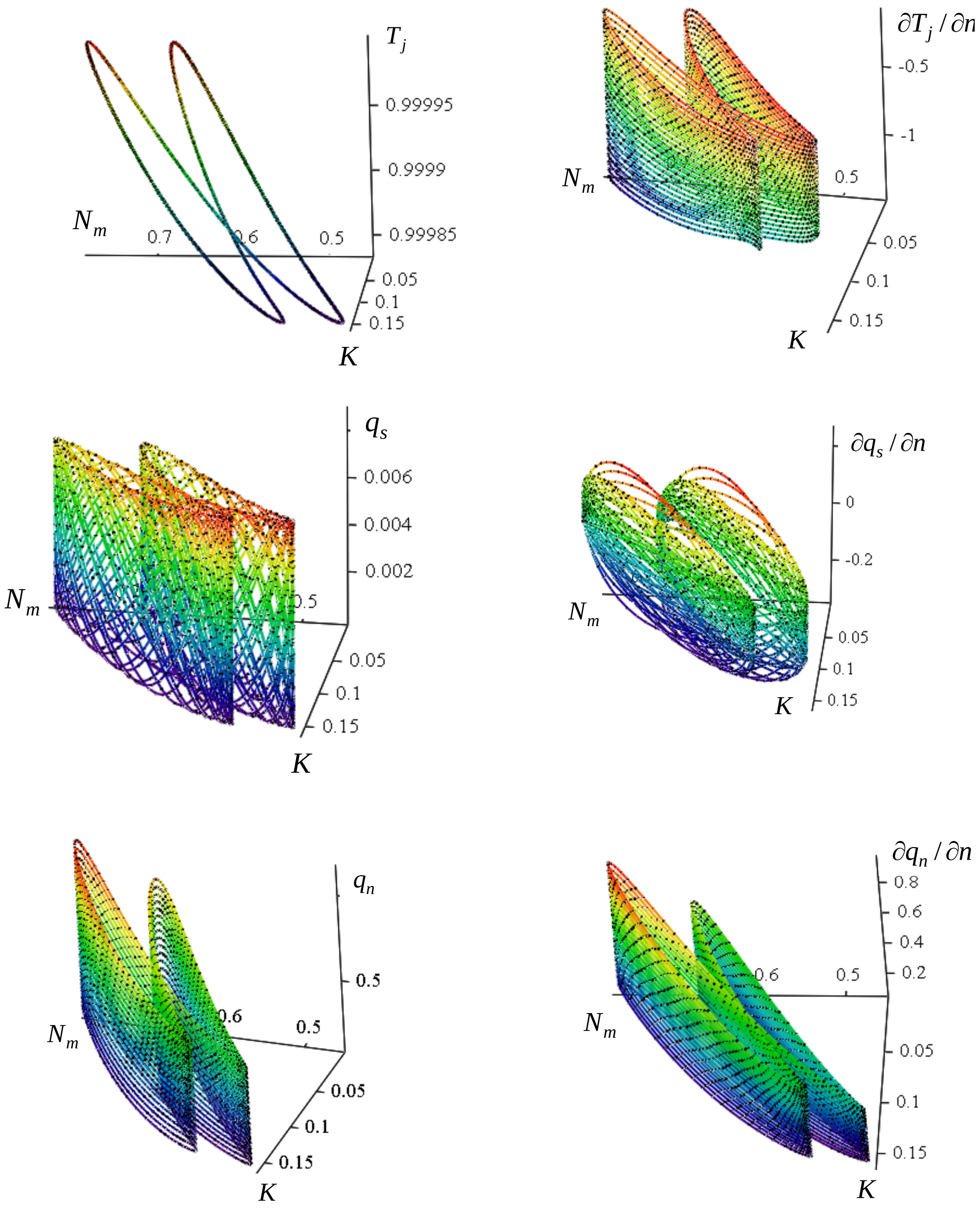

Рис. 2. Тепловые процессы в конечной окрестности вершины дендрита

Здесь мы учитываем известные в литературе данные о существовании периодических по времени возмущений скорости и кривизны вершины дендрита. Расчеты были проведены в безразмерных переменных. В качестве масштабов величин при обезразмеривании были приняты теплофизические параметры расплава чистого никеля, переохлажденного на 67°K, см. [5].

Пример расчета: $\nu = 0,\ n_1 = 1; k_* = 1;\ \ q_*^1 = 0{,}01;\ \omega_1 = 0{,}5;\ \omega_2 = 1;\ a_1 = 0{,}1;\ \ a_2 = 0{,}4$. Информация, представленная на рисунках 1 и 2, позволяет судить об интервалах, в которых меняются основные параметры теплового поля на линии роста. Расчеты показали, что характер колебаний функции $p(t)$ не влияет принципиальным образом на свойства данной теплофизической системы. Меняются отдельные фрагменты фазовых портретов, но основные закономерности эволюции линии роста сохраняются. Рисунок 1 относится к периферии дендрита: $y = 1{,}0$; рисунок 2 демонстрирует свойства процесса в конечной окрестности вершины $(y = 0{,}01)$, где большая кривизна линии роста в значительной степени влияет на градиентные свойства теплового поля.

Заключение. Представлены результаты аналитического и численного исследования тепловых свойств двухмерных линий роста, обладающих плоской и осевой симметриями. Анализ выполнен для случаев периодического по времени возмущения скорости и кривизны фазовой границы. Обнаружены существенные количественные различия между режимами колебаний вблизи вершины дендрита и на конечном удалении от нее. Показано, что основными параметрами влияния на тепловое состояние линии роста являются частота и фаза колебаний. Установлено, что система «расплав – кристалл» проявляет определенную стабильность по отношению к изменению режимов колебаний кривизны.

Список литературы

1. Herlach, d. M. Metastable solids from undercooled melts / d. M. Herlach, p. Galenko, d. Holland-moritz. – oxford: pergamon, 2007. – 448 p.
2. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас-баскес, Дж. Лебон. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 528 с.
3. Шабловский, о. Н. Релаксационный теплоперенос в нелинейных средах / о. Н. Шабловский. – гомель: ггту им. П.о. сухого, 2003. – 382 с.
4. Шабловский, о. Н. Тепловые свойства фронта кристаллизации однокомпонентного чистого переохлажденного расплава / о. Н. Шабловский, д. Г. Кроль // расплавы. – 2005. – № 4. – с. 69–81.
5. Шабловский, о. Н. Расчет кинетических параметров фронта кристаллизации глубоко переохлажденного расплава / о. Н. Шабловский, д. Г. Кроль // материалы, технологии, инструменты. – 2007. – т. 12, № 1. – с. 5–10.
6. Шабловский, о. Н. Тепловая градиентная катастрофа и рост двумерного свободного дендрита в переохлажденном расплаве / о. Н. Шабловский // прикладная физика. – 2007. – №3. – с. 29–37.
7. Emanuel, g. Shock wave derivatives / g. Emanuel, min-shan lin // phys. Fluids. – 1998. – vol. 31, № 12. – p. 3625–3633.
8. Седов, л. И. Механика сплошной среды / л. И. Седов. – м.: наука, 1973, т.1. – 536 с.