

Форма поверхности роста и предвестники ветвления дендрита в переохлажденном расплаве

О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль

Изучен рост свободного дендрита в однокомпонентном переохлажденном расплаве. Учтено, что по мере увеличения переохлаждения усиливается роль локально-неравновесного теплопереноса, повышается степень нестационарности процессов на фазовой границе. Предметом исследования являются морфологические свойства фронта кристаллизации и возникновение боковых ветвей дендрита. Рассмотрен класс поверхностей роста, скорость перемещения которых есть физически содержательная функция локального угла наклона поверхности к оси дендрита. Математическим аналогом такого подхода является задача отыскания формы тел, которые подвергаются аэродинамическому нагреву и уносу массы с обтекаемой поверхности. Изучены два (неособый и особый) автомодельных режима эволюции поверхности роста. В неособом случае по мере заострения вершины сохраняется вид первоначального контура поперечного сечения; например, впадина сужается в направлении роста. Особое автомодельное решение дает в начальном состоянии вершину, которая расщеплена на четыре самостоятельные ветви; в течение конечного промежутка времени наблюдается слияние этих ветвей в одну точку – вершину дендрита. Прикладные аспекты данной работы связаны с методами высокоскоростного затвердевания расплава и получением материалов с улучшенными эксплуатационными свойствами.

Ключевые слова: эволюция фазовой границы, морфологическая устойчивость, вершина дендрита, боковая ветвь.

Введение

Проблема роста кристалла из переохлажденного расплава чистого вещества имеет следующий важный аспект: морфологические свойства фронта кристаллизации и возникновение боковых ветвей дендрита (древовидной ветвящейся структуры). Современное состояние теоретических и экспериментальных исследований дендритообразования представлено в статьях [1–7]. На основе этих результатов можно сформулировать две главные предпосылки выполненной нами работы.

1. Рост поверхности свободного дендрита характеризуется высокой степенью нестационарности. По мере увеличения переохлаждения однокомпонентного расплава усиливается роль локально-неравновесного теплопереноса, поэтому

при формулировке исходной задачи применяется релаксационная модель Максвелла, а математической моделью фазовой границы кристаллизации служит поверхность сильного разрыва, на которой выполнены условия динамической совместности. Рассматривается класс поверхностей роста, скорость перемещения которых зависит только от локальной формы этой поверхности [2].

2. Предвестниками неустойчивости макроскопических форм поверхности роста служат изломы, изгибы, складки, генерирующие возмущенные кривизны исходной поверхности. Кроме того, при росте дендрита экспериментально наблюдается расщепление вершины и колебания, сопровождающиеся втягиванием и вытягиванием носика. Аналитическое описание этих процессов (из [1–7] ясно, что таких работ совсем немного) выполнено главным образом для плоского двухмерного параболического (второй степени) контура. Отметим еще статью [8], в которой установлены нетривиальные закономерности поведения острых кромок и точек перегиба, а также указаны ссылки на наши предшествующие работы по обсуждаемой проблеме.

Цель данной статьи – изучить морфологические закономерности появления предвестников ветвления дендрита для следующих ситуаций: вы-

Шабловский Олег Никифорович, д.ф.-м.н., профессор.
Кроль Дмитрий Григорьевич, к.ф.-м.н., доцент.
Гомельский государственный технический университет
имени П. О. Сухого.
Беларусь, 246746, г. Гомель, пр. Октября, 48.
Тел.: +375-(232)-40-11-72, +375-(232)-40-57-47.
E-mail: shablovsky-on@yandex.by; kr-dmitry@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 30 мая 2018 г.

© Шабловский О. Н., Кроль Д. Г., 2018

тягивание и втягивание носика дендрита; стадия перехода от вогнутого к выпуклому профилю поверхности; расщепление вершины при автомодельном режиме роста. Перечень этих физических явлений лежит в основе структурирования текста.

Уравнение роста вершины дендрита

Рассмотрим трехмерное пространство $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$ с ортонормированным базисом \mathbf{i}_ε , $\varepsilon = 1, 2, 3$. Для гладких температурных полей дифференциальное уравнение энергии

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div} \mathbf{q} = 0 \quad (1)$$

следует из интегрального закона сохранения энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{(v)} u dV = - \int_{(S)} q_n dS.$$

Любое решение уравнения Максвелла для теплового потока [9]

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\lambda}{\gamma} \text{grad} T = - \frac{\mathbf{q}}{\gamma} \quad (2)$$

удовлетворяет следующему интегральному закону сохранения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{(v)} \mathbf{q} dV &= - \int_{(v)} \frac{\mathbf{q}}{\gamma} dV - \int_{(S)} V \mathbf{n} dS; \\ u &= \int_0^T c(T) dT, \quad V = \int_0^T \frac{\lambda(T)}{\gamma(T)} dT. \end{aligned}$$

Здесь t – время; T – температура; \mathbf{q} – вектор удельного теплового потока; λ – коэффициент теплопроводности; c – объемная теплоемкость; γ – время релаксации теплового потока; S – поверхность, ограничивающая объем v ; \mathbf{n} – единичный вектор нормали поверхности S . Фазовую границу кристаллизации моделируем поверхностью сильного разрыва $f(x, y, z, t) = 0$. Считаем, что вершина дендрита движется вдоль оси x в отрицательном направлении, справа налево. Построим ортогональный базис $\mathbf{s}, \mathbf{n}, \mathbf{b}$, соответствующий касательной, главной нормали и бинормали к поверхности роста. Вектор внутренней нормали $\mathbf{n} = \text{grad} f / |\text{grad} f|$ направлен в сторону кристаллической фазы, $\mathbf{i}_1 \times \text{grad} f \geq 0$. Единичный вектор касательной \mathbf{s} лежит в плоскости $(\mathbf{i}_1, \mathbf{n})$, он указывает положительное направление отсчета дуговой

координаты s от вершины к периферии дендрита. Вектор бинормали $\mathbf{b} = \mathbf{s} \times \mathbf{n}$ вместе с \mathbf{s}, \mathbf{n} образует правую систему векторов, рис. 1. Скорость перемещения поверхности роста равна

$$\mathbf{N} = N \mathbf{n}, \quad N = - \frac{\partial f}{\partial t} / |\text{grad} f|. \quad (3)$$

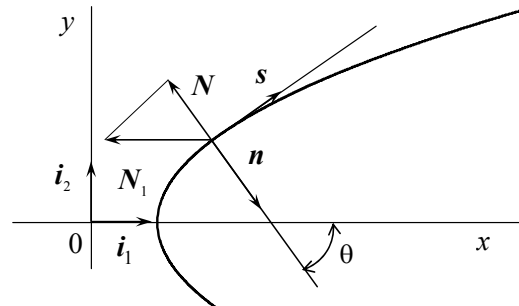


Рис. 1. Основные геометрические параметры фазовой границы кристаллизации.

Нормаль \mathbf{n} существует, если вектор $\text{grad} f$ определен однозначно в каждой точке фазовой границы. Значит, данная формула верна до момента излома поверхности. Динамические условия совместности являются, как известно, следствием интегральных законов:

$$\begin{aligned} N\{u\} &= \{q_n\} + Q; \quad N\{\mathbf{q}\} = \{V\} \mathbf{n}; \\ Q &= L \left(N + \gamma \frac{dN}{dt} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

где фигурные скобки – символ скачка функции при переходе через разрыв; q_n – нормальная составляющая теплового потока; L – теплота фазового перехода единицы объема вещества. В касательном и бинормальном направлениях имеем нулевые скачки теплового потока: $\{q_s\} = 0$, $\{q_b\} = 0$.

Направление \mathbf{n} характеризуется локальными углами наклона нормали к координатным осям $\theta_\varepsilon = (\mathbf{n}, \mathbf{i}_\varepsilon)$, $\varepsilon = 1, 2, 3$. Учитывая направление роста, заключаем, что приоритетное значение имеет угловая координата $\theta_1 \equiv \theta$. Кинетическое условие роста основано на связи скорости перемещения N с переохлаждением $T_e - T_j$ на фазовой границе:

$$|N| = M(T_e - T_j), \quad T_e = T_c [1 - (UK/L)], \quad (5)$$

где T_e – температура равновесия между твердой и жидкой фазами; T_j – температура кристалла за фронтом сильного разрыва; T_c – равновесная температура кристаллизации; U – поверхностная

энергия границы раздела фаз; $K = K_1 + K_2$ – средняя кривизна фазовой границы, равная сумме главных кривизн. Считается, что $K > 0$, если граница вогнута в сторону кристалла. Вид функции $M(T_e - T_j)$ зависит от разнообразных физических и физико-химических процессов [10].

Общая постановка тепловой задачи для однокомпонентной системы заключается в том, чтобы решить в каждой фазе уравнения теплопереноса, для которых заданы следующие граничные условия: 1) условия (4) и (5) на неизвестной поверхности дендрита; 2) условия теплообмена системы «расплав – твердая фаза» с внешней средой. Ясно, что нелинейная трехмерная нестационарная задача очень сложна. Рассмотрим более простой (полуобратный) подход к проблеме, позволяющий выяснить многие существенные детали процесса формирования поверхности дендрита. Для этого разделим решение на два этапа: 1) кинематическая задача о построении фазовой границы $f(x, y, z, t) = 0$ на основе уравнения (3), в котором функция N задана до построения решения основной задачи; 2) динамическая задача о тепловом поле, содержащем сильный разрыв $f(x, y, z, t) = 0$; этот вопрос составляет предмет отдельного исследования, см. [11]. В данной работе мы будем изучать кинематические свойства поверхности роста дендрита, предполагая, что $N = N(t, \theta)$ и априори задавая физически содержательные зависимости N от угловой координаты. Известно, что такой подход оказался плодотворным в задачах отыскания форм тел, которые подвергаются аэродинамическому нагреву и уносу массы с обтекаемой поверхности; библиография этой проблемы приведена в [12]. В дальнейшем используем некоторые математические результаты работы [12] и дадим им новую физическую интерпретацию, рассматривая свойства поверхности раздела «расплав – кристалл». Для интегрирования и анализа решений нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка применяем методы, изложенные в [13].

Будет показано, что простое исходное предположение о зависимости N от локального угла наклона θ дает нетривиальные результаты о предвестниках боковых ветвей, и эти результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными наблюдениями роста дендрита. Данный факт объясняется тем важным обстоятельством, что функция $N = N(t, \theta)$ содержит неявным образом информацию о кривизне поверхности роста. Например, для двухмерной фазовой границы (плоской либо осесимметричной) выполнено равенство $\partial\theta/\partial s = K_1$, где K_1 – первая главная кривизна. Справедливость этой формулы устанавли-

вается непосредственными аналитическими вычислениями.

Уравнение поверхности фазовой границы возьмем в виде

$$f \equiv x - F(y, z, t) = 0, \quad p = \partial F / \partial y, \quad q = \partial F / \partial z, \quad (6)$$

выделяя явно координату x ; $G = (1 + p^2 + q^2)^{1/2}$, $\cos \theta = 1/G > 0$; полубесконечная поверхность роста движется справа налево, $N < 0$. Для размерного и безразмерного уравнения (3), (6) применяем одинаковую форму записи, полагая $x \rightarrow x'$, $y \rightarrow y'$, $z \rightarrow z'$, $t \rightarrow t'$, $N \rightarrow N'$, $x = x'_b$, $y = y'_b$, $z = z'_b$, $t = t'_b$, $N = N'_b$, $N_b = x_b / t_b$, $y_b = z_b$, где нижним индексом b отмечены масштабы координат, времени и скорости. Штрих, который относится к безразмерным переменным, далее не пишем. Все вычисления выполнены в безразмерных переменных.

Трехмерная поверхность роста

Для скорости перемещения N примем следующую зависимость: $N = F_t / G$, $N = \tilde{A}(t)B(\cos \theta) < 0$, $\tilde{A}(t) > 0$, $t \geq 0$; $B = B_0(\cos \theta)^{1+2k}$, $B_0 \equiv \text{const} < 0$, где $k \geq 0$; $\theta \in [0, 90^\circ]$. Это значит, что $|N|$ монотонно убывает до нуля по мере удаления от вершины. Параметрическая форма решения:

$$y = \left(\frac{\Phi_p}{\Phi_r} \right)_0 A + h_1, \quad z = \left(\frac{\Phi_q}{\Phi_r} \right)_0 A + h_2,$$

$$F = \left[\frac{1}{\Phi_r} (p\Phi_p + q\Phi_q + r\Phi_r) \right]_0 A + F_0(h_1, h_2);$$

$$\Phi \equiv -B_0 + r(1 + p^2 + q^2)^k = 0,$$

$$A = \int_0^t \tilde{A}(t) dt \geq 0, \quad r = \partial F / \partial A,$$

где h_1, h_2 – параметры; нижний нулевой индекс означает, что соответствующее выражение подсчитывается с помощью начальных условий на исходном профиле фазовой границы. Правые части данных формул вычисляются с помощью соотношений: $r = B_0 / G^{2k}$, $\Phi_p = 2B_0kp / G^2$, $\Phi_q = 2B_0kq / G^2$, $\Phi_r = G^{2k}$. Частный случай $k = 1$ дает решение, полученное в [14]. Начальное состояние поверхности: $t = 0$, $A(0) = 0$, $y = h_1$, $z = h_2$, $x = F_0(h_1, h_2)$. Таким образом, мы постро-

или решение вида $y = y(h_1, h_2, t)$, $z = z(h_1, h_2, t)$, $x = F(h_1, h_2, t)$, $t \geq 0$, где h_1, h_2 – два свободных параметра. В каждый фиксированный момент времени $t = t^1$ паре значений (h_1, h_2) соответствует точка на трехмерной поверхности $x = F(y, z, t^1)$.

Пример расчета: эллиптический параболоид, для которого

$$x = \frac{y^2}{2A_2} + \frac{z^2}{2A_3}, \quad A_2 > 0, \quad A_3 > 0; \quad y = h_1,$$

$$z = h_2, \quad F_0(h_1, h_2) = \frac{h_1^2}{2A_2} + \frac{h_2^2}{2A_3};$$

$$h_1 \in [h_1^{(1)}, h_1^{(2)}], \quad h_2 \in [h_2^{(1)}, h_2^{(2)}]. \quad (7)$$

Здесь $h_1^{(1)} < 0$, $h_2^{(1)} < 0$, $h_1^{(2)} > 0$, $h_2^{(2)} > 0$; задавая априорно левые и правые границы этих интервалов, мы тем самым указываем размер носика дендрита при $t = 0$. В начальном состоянии вершина дендрита находится в начале координат. Рассматриваем несколько режимов движения поверхности:

$$\tilde{A}(t) = N_m^0 + A_{11} \exp(-r_1 t), \quad r_1 > 0, \quad t \geq 0;$$

$$\tilde{A}(t = 0) = N_m^0 + A_{11} > 0, \quad \tilde{A}(t \rightarrow \infty) = N_m^0 > 0;$$

$A_{11} = 0$ – постоянная скорость движения носика; $A_{11} > 0$ – замедленное движение; $A_{11} < 0$ – ускоренное движение. Первая группа расчетов имеет

целью показать, как выглядит параболоид в последовательные моменты времени $t = 0$; $t_1 > 0$; $t_2 > t_1$ и т. д. Отметим, что интервалы (7) – одни и те же при всех $t \geq 0$. Вторая группа расчетов: для отдельных фиксированных моментов времени $t = t^{(1)}$, $t = t^{(2)} > t^{(1)}$ и т. д. строим на плоскости (y, z) поперечные сечения, чтобы детально проиллюстрировать форму поверхности по мере удаления от носика дендрита. Например, сечение плоскостями $x = x^{(1)}$, $x = x^{(2)} > x^{(1)}$, $x = x^{(3)} > x^{(2)}$ и т. д. дает несколько эллипсов на плоскости (y, z) . Эти эллипсы располагаются один внутри другого либо чередуются иным образом в соответствии с условиями роста. В ходе вычислительного моделирования было обнаружено, что при ускоренном / замедленном движении происходит втягивание / вытягивание носика. Именно такая корреляция наблюдалась экспериментально при росте льда в переохлажденной воде [5]. Начальная стадия вытягивания / втягивания носика сопровождается увеличением / уменьшением кривизны поверхности на вершине. При вытягивании носика «отрицательные» изолинии располагаются внутри сечения $x = 0$, причем с ростом $|x|$ поперечный размер изолинии уменьшается, рис. 2, а. Втянутый носик изображен на рис. 2, в: одному значению $x < 0$ могут соответствовать две разные линии с одинаковым номером; в указанном здесь примере это изолинии $x = -25$ и $x = -26$. На рис. 2, б показан в пространстве (x, y, z) типичный пример вытянутого носика в фиксированный момент времени.

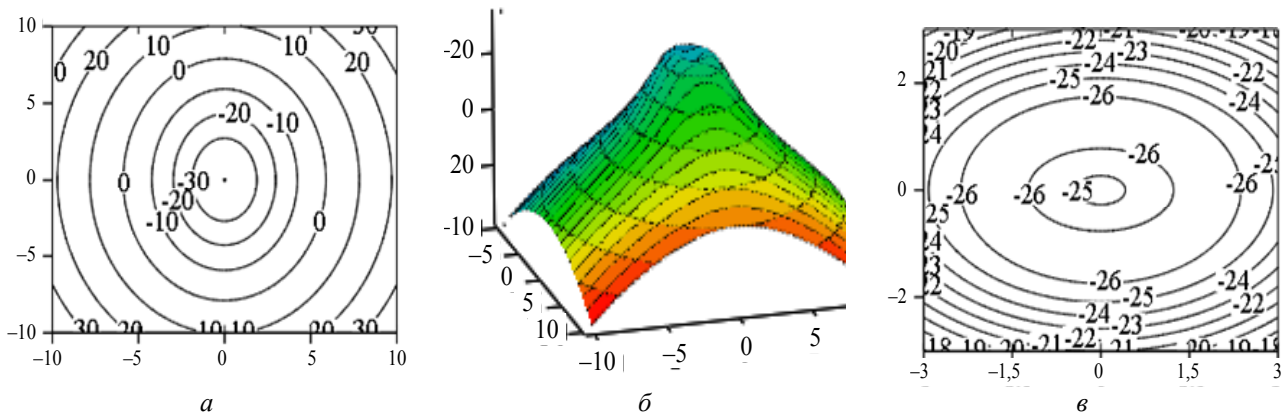


Рис. 2. Морфологические свойства трехмерной поверхности роста: а, в – изолинии $x = x^{(0)}$ поперечных сечений дендрита; б – конфигурация вершины дендрита при $t = 25$. Входные параметры: а, б – $A_2 = 2$; $A_3 = 3$; $B_0 = -1$; $k = 1$; $N_{m0} = 1$; $A_{11} = 1$; $r_1 = 0,2$; в – $A_2 = 3$; $A_3 = 2$; $B_0 = -1$; $k = 0,5$; $N_{m0} = 1$; $A_{11} = -0,1$; $r_1 = 0,5$.

Стационарная форма фазовой границы

Предположим, что $N = N(G, t)$, т. е. $\partial F / \partial t = GN(G, t)$. Следуя алгоритму [12], рассмотрим класс задач о поверхности роста стацио-

нарной формы, для которой $GN(G, t) = N_1(t)$ (см. рис. 1):

$$F(y, z, t) = F_0(y, z) + \int_0^t N_1(t) dt.$$

Здесь $N_1(t)$ – функция, описывающая нестационарные свойства скорости; функция $F_0(y, z)$ представляет начальную форму поверхности. В частном случае, когда $N \sim \cos \theta$, любая поверхность будет поверхностью стационарной формы. Итак, поверхность стационарной формы обладает свойством: $G^2 \equiv 1 + (\partial F / \partial y)^2 + (\partial F / \partial z)^2 = c^2 > 1$, $c \equiv \text{const}$, которое представляет собой дополнительную связь для искомого функции $F(y, z, t)$. Точки поверхности перемещаются вдоль оси x со скоростью $N_1(t)$. Возьмем $F = H\sqrt{c^2 - 1}$, $H = H(y, z)$ и получим уравнение эйконала: $(\partial H / \partial y)^2 + (\partial H / \partial z)^2 = 1$. Начальное условие: $z = h$, $y = y_0(h)$, $H_0 = 0$, где h – параметр. Ясно, что разным значениям постоянной c^2 соответствует семейство поверхностей стационарной формы. Сечение $H_0 = 0$ может быть сколь угодно близким к вершине дендрита, но не совпадает с ней. Решение имеет вид:

$$\begin{aligned} z &= h \mp \frac{2\alpha y'_0(h)}{\sqrt{1 + (y'_0)^2}}, \\ y &= y_0(h) \pm \frac{2\alpha}{\sqrt{1 + (y'_0)^2}}, \\ H &= 2\alpha, \end{aligned} \quad (8)$$

где α – параметр; $y'_0 = dy_0 / dh$; в расчетах был принят верхний знак. Выбор фиксированного α означает выбор поперечного сечения дендрита $x = \text{const}$, т. е. параметр α служит аналогом координаты x : значение $\alpha = 0$ есть начальное сечение дендрита $x = x^{(0)}$; последующие шаги такие: $\alpha = \alpha_1 > 0 \rightarrow x = x^{(1)} > x^{(0)}$; $\alpha = \alpha_2 > \alpha_1 \rightarrow x = x^{(2)} > x^{(1)}$ и т. д. Границы интервала $h \in [h^{(1)}, h^{(2)}]$ выбираем для каждого отдельного примера, учитывая начальный профиль поперечного сечения на плоскости (y, z) . Каждому h соответствует точка (y, z) : в итоге получаем линию, указывающую, как именно выглядит поперечное сечение. Эти линии располагаются одна внутри другой; чем больше α , тем размеры поперечного сечения больше; интервал, в котором меняется h , один и тот же для всех $\alpha \geq 0$ при изучении выбранного вида начального ($\alpha = 0$) про-

филя. Для другого вида начального профиля применяется другой интервал $[h^{(1)}, h^{(2)}]$.

Пример 1. Начальное сечение – эллипс: $y_0(h) = [b(a^2 - h^2)^{1/2}] / a$, $h \in (-a, a)$, $\alpha \geq 0$. Эти формулы относятся к правой части эллипса: $y \in (0, b]$, $z \in (-a, a)$. Чтобы построить левую половину, надо взять $y_0(h) = -[b(a^2 - h^2)^{1/2}] / a$, $h \in (-a, a)$, $\alpha \leq 0$.

Пример 2. Начальное сечение образовано двумя смыкающимися при $y = 0$ фрагментами парабол: левая часть $y_0 = y_1 + ah^{2b}$, $y_1 < 0$, $a > 0$, $2b > 1$; $\alpha \leq 0$; правая часть определяется такой же формулой при $y_1 > 0$, $a < 0$, $\alpha \geq 0$. Здесь $2b$ – четное целое число; $h^{(1)} = -(-y_1 / a)^{1/2b} < 0$, $h^{(2)} = (-y_1 / a)^{1/2b} > 0$.

Пример 3. Начальное сечение – фрагмент гиперболы, моделирующий впадину – вогнутый вдоль оси y профиль поперечного сечения дендрита. Правая ветвь $y_0(h) = [b(a^2 - h^2)^{1/2}] / a$, $\alpha \geq 0$; левая ветвь $y_0(h) = -[b(a^2 - h^2)^{1/2}] / a$, $\alpha \leq 0$.

Далее для определенности говорим о положительном параметре α . На рис. 3 показаны контуры поперечного сечения поверхности роста кристалла для последовательных значений $\alpha \geq 0$. Внутренней сплошной линией отмечено исходное сечение $\alpha = 0$; по мере роста α контур расширяется и включает в себе предшествующие контуры. Например, на рис. 3, а внешняя линия $\alpha = 1, 2$ охватывает контуры меньших размеров для $\alpha = 0, 6$, $\alpha = 0, 2$ и $\alpha = 0$ соответственно. На рис. 3, а, б контур выпуклый; при $\alpha \rightarrow \infty$, $x \rightarrow \infty$ поперечное сечение стремится к окружности радиуса 2α (рис. 3, а) либо к эллипсу (рис. 3, б). На рис. 3, в исходный контур вогнутый (фрагмент гиперболы). Оказывается, что при $\alpha \rightarrow +\infty$ тоже происходит асимптотический переход к эллипсоидному профилю, но этому переходу предшествует (вдоль оси x) конечный интервал, на котором наблюдается ветвление стационарного контура. На рис. 3, в показана эволюция впадины по мере удаления от начального состояния. Хорошо видно, что исходная вогнутость профиля сменяется выпуклостью, но между этими состояниями существует интервал, на котором располагаются боковые ветви дендрита.

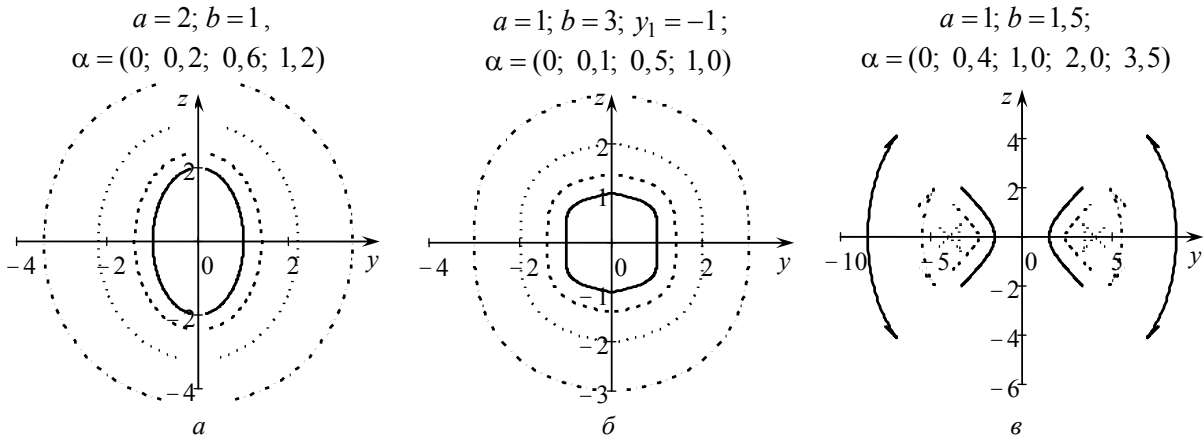


Рис. 3. Трансформирование поперечного сечения дендрита по мере удаления от вершины: а – начальное сечение – эллипс; б – начальное сечение образовано двумя смыкающимися ветвями параболы; в – начальное сечение – вогнутый гиперболический профиль; внешняя сплошная линия определяет асимптотический эллипсовидный профиль.

Геометрической моделью боковой ветви служит линия, представляющая собой неоднозначную зависимость между координатами y, z . На рис. 3, в показаны отдельные стадии перемены направления вогнутости контура; здесь же показана боковая ветвь, на которой одному значению координаты z соответствуют два либо три значения координаты y . Следовательно, если исходное сечение имеет впадину на плоскости (y, z) , то переход от вогнутого к выпуклому контуру сопровождается появлением конечного интервала ветвления. Такой интервал есть геометрический предвестник появления боковой ветви дендрита.

Автомоделная поверхность роста

Допустим, что фазовая граница имеет скорость $N = \tilde{A}(t)B(G)$, причем $\tilde{A}(t) > 0, B(G) < 0$. Тогда получаем уравнение роста:

$$\begin{aligned} \partial F / \partial A &= D(G), \quad D(G) = GB(G); \\ F(y, z, A=0) &= F_0(y, z); \\ A &= \int_0^t \tilde{A}(t) dt \geq 0. \end{aligned} \tag{9}$$

Автомоделное решение [12] записываем с учетом начальных условий:

$$\begin{aligned} y &= y_0 \omega(A), \quad z = z_0 \omega(A), \\ F &= \omega(A) F_0(y_0, z_0), \\ \omega(A=0) &= 1. \end{aligned} \tag{10}$$

Искомая функция выглядит так:

$$F(y, z, A) = \omega(A) F_0 \left(\frac{y}{\omega(A)}, \frac{z}{\omega(A)}, 0 \right).$$

В итоге получаем уравнение для $F_0(y_0, z_0)$:

$$\Phi_0 \equiv F_0 - y_0 \frac{\partial F_0}{\partial y_0} - z_0 \frac{\partial F_0}{\partial z_0} - D(G_0) = 0, \tag{11}$$

и (9) превращается в обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{dA} &= \omega_1; \\ \omega_1 &= D(G_0) \left[F_0 - y_0 \frac{\partial F_0}{\partial y_0} - z_0 \frac{\partial F_0}{\partial z_0} \right]^{-1} \equiv \text{const}. \end{aligned}$$

Не умаляя общности, возьмем $\omega_1 = 1$, $\omega = A \pm 1$, где знаки «+» и «-» относятся к неособому и особому решениям уравнения (11). Выбор этих знаков обусловлен принятым в задаче направлением роста. Далее применяются следующие формулы:

$$\begin{aligned} p_0 &= -\frac{\partial \Phi_0}{\partial z_0}, \quad q_0 = -\frac{\partial \Phi_0}{\partial y_0}, \\ D_1 &= \frac{1}{G_0} \frac{dD}{dG_0}, \quad G_0 = [1 + p_0^2 + q_0^2]^{1/2}, \\ \frac{\partial \Phi_0}{\partial p_0} &= -p_0 D_1(G_0) - z_0, \\ \frac{\partial \Phi_0}{\partial q_0} &= -q_0 D_1(G_0) - y_0, \quad \frac{\partial \Phi_0}{\partial F_0} = 1. \end{aligned}$$

Возьмем исходный контур в начальном сечении $x_0 = 0$: $z_0 = \alpha$, $y_0 = y_1(\alpha)$, где α – параметр. Неособое решение, проходящее через заданную кривую, имеет вид:

$$\begin{aligned} z_0 &= \alpha E - (1-E)p_0 D_1, \\ y_0 &= y_1 E - (1-E)q_0 D_1, \\ F_0 &= (1-E) \left[-(p_0^2 + q_0^2) D_1 - \alpha p_0 - y_1 q_0 \right], \\ E &= \exp(-h), \end{aligned} \quad (12)$$

где h – параметр, отсчитываемый вдоль характеристик, соответствующих уравнению (11). К этим трем выражениям нужно присоединить еще два:

$$\begin{aligned} \alpha p_0 + y_1 q_0 + D(G_0) &= 0; \\ dF_0 / d\alpha &\equiv p_0 + q_0 dy_1 / d\alpha = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Первое из этих соотношений – уравнение (11), записанное при $x_0 = 0$ с учетом исходного контура, второе – условие того, что $x_0 = 0$ вдоль кривой $y_0 = y_1(\alpha)$. Значит, семь величин $z_0, y_0, F_0, p_0, q_0, \alpha, h$ подчинены пяти уравнениям (12), (13): p_0, q_0 определяем как функции α из (13); затем из (12) находим $z_0(\alpha, h), y_0(\alpha, h), F_0(\alpha, h)$, тем самым завершая построение линейчатой поверхности роста $F_0 = F_0(y_0, z_0)$. Здесь в решении (10) $\omega = A + 1$, следовательно, речь идет о поверхности, имеющей стационарную форму: с течением времени размеры поверхности увеличиваются, но безразмерные геометрические параметры процесса сохраняются без изменения. При проведении расчетов поступаем следующим образом. Задаем исходное сечение $h = 0, E = 1, y_0 = y_1(\alpha), z_0 = \alpha, x_0 = 0$. Вид этого сечения на плоскости (y_0, z_0) дает возможность выбрать интервал, в котором изменяется $\alpha \in [\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}]$. В трехмерном пространстве (F_0, y_0, z_0) строим поверхность $F_0 = F_0(\alpha, h), y_0 = y_0(\alpha, h), z_0 = z_0(\alpha, h), h \geq 0$.

Каждой паре значений (α, h) соответствует точка (F_0, y_0, z_0) .

Вариант 1. Неоднородная линейная зависимость N от $\cos \theta = 1/G$:

$$B = B_1 + (B_0/G_0), \quad D_1 = B_1/G_0. \quad (14)$$

Функция $q_0(\alpha)$ определяется как корень нелинейного уравнения

$$\begin{aligned} q_0 \left(y_1 - \alpha \frac{dy_1}{d\alpha} \right) + B_0 + B_1 \left[1 + q_0^2 \left(\frac{dy_1}{d\alpha} \right)^2 + q_0^2 \right]^{1/2} &= 0, \\ B_0 < 0, \quad B_1 < 0. \end{aligned}$$

В частном случае $B_1 = 0$ легко найти $q_0(\alpha)$ в явном виде.

Вариант 2. Однородная кубическая зависимость N от $\cos \theta$:

$$B = B_0/G^3, \quad D_1 = -2B_0/G_0^4, \quad B_0 < 0. \quad (15)$$

Здесь $q_0(\alpha)$ определяются из уравнения

$$q_0 \left(y_1 - \alpha \frac{dy_1}{d\alpha} \right) + B_0 \left[1 + q_0^2 \left(\frac{dy_1}{d\alpha} \right)^2 + q_0^2 \right]^{-1} = 0.$$

В качестве исходных кривых применялись парабола и гипербола. Параболический профиль имеет вид: $y_1 = y_{11} + ay^{2b}$, $2b > 1$. Здесь для левой ветви $y_{11} < 0, a > 0$; для правой ветви $a < 0, y_{11} > 0$. Профиль, вогнутый вдоль оси y_0 , изменяется как фрагмент гиперболы: $y_1 = \pm [b(a^2 + \alpha^2)^{1/2}] / a$.

Проведенные численные расчеты позволяют утверждать следующее. Между однородным и неоднородным вариантами (15) и (14) нет принципиальных качественных различий; этот вывод относится и к выпуклому (две параболы со смыкающимися ветвями) и к вогнутому (две ветви гиперболы) исходным профилям. В соответствии с автомодельной структурой решения по мере заострения дендрита сохраняется вид первоначального контура поперечного сечения. На рис. 4, a для варианта (15) показан типичный пример заострения вершины дендрита как результат эволюции исходного параболического профиля. Гиперболический профиль вогнутости сужается в направлении роста, т. е. впадина располагается в конечной окрестности вершины (эти рисунки здесь не приводятся).

Для особого решения выполнено предположение

$$\left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial p_0} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial q_0} \right)^2 = 0$$

и справедливы формулы

$$\begin{aligned} z_0 + \frac{\partial D(G_0)}{\partial p_0} &= 0, \quad y_0 + \frac{\partial D(G_0)}{\partial q_0} = 0, \\ \frac{\partial D(G_0)}{\partial p_0} &= p_0 D_1, \quad \frac{\partial D(G_0)}{\partial q_0} = q_0 D_1. \end{aligned} \quad (16)$$

Существенно, что для y_0, z_0 характеристическое начальное условие выполняется тождественно, независимо от выбора исходного контура. Особое решение, согласно (10), (16) представляется формулами

$$z = \omega z_0 = (1 - A) \frac{\partial D(G_0)}{\partial p_0}, \quad y = \omega y_0 = (1 - A) \frac{\partial D(G_0)}{\partial q_0},$$

$$x = \omega F_0 = (1 - A) \left[p_0 \frac{\partial D(G_0)}{\partial p_0} + q_0 \frac{\partial D(G_0)}{\partial q_0} - D(G_0) \right], \quad A \in [0, 1]. \quad (17)$$

$a = 2; b = 2; y_1 = -1; B_0 = -1,5; B_1 = 0$

$B_0 = -1; k = 2, p_0 \in [-0,75; 0,75],$
 $q_0 \in [-0,75; 0,75]$

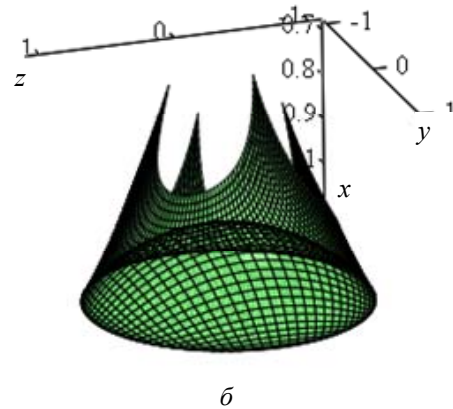
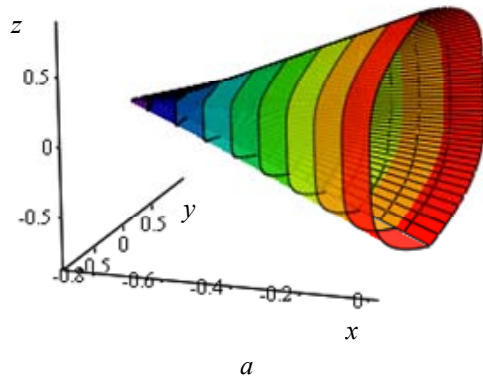


Рис. 4. Эволюционные процессы в окрестности вершины дендрита: а – автомодельный неособый режим роста параболического профиля; б – автомодельный особый режим роста: начальное состояние расщепленной вершины.

При фиксированном A каждой паре значений параметров (p_0, q_0) соответствует одна или несколько точек в пространстве (x, y, z) . Это решение справедливо на конечном интервале времени $t \in [0, t_1]$, где $A(t = t_1) = 1$. При $t = t_1$ особое решение вырождается в точку $(x = 0, y = 0, z = 0)$, представляющую собой острие вершины дендрита. В тех областях, где имеется взаимно однозначное соответствие $(p_0, q_0) \leftrightarrow (x, y, z)$, решение (17) дает поверхность вращения вокруг оси x . В этом нетрудно убедиться, приняв во внимание, что $z_0^2 + y_0^2 = (p_0^2 + q_0^2)D_1$, где D_1 есть функция аргумента $p_0^2 + q_0^2$. В общем случае (и это подтверждает практика наших расчетов) трехмерная поверхность (17) имеет изгиб, и существуют области неоднозначной зависимости $(p_0, q_0) \leftrightarrow (x, y, z)$.

Пример: $N \sim (\cos \theta)^{2k+1}, \quad B = B_0 / G^{2k+1},$
 $D = B_0 / G^{2k}, \quad B_0 < 0, \quad k > 0$. На рис. 4, б показано начальное ($A = 0$) состояние вершины, которая расщеплена на четыре самостоятельные ветви. В автомодельном особом режиме (17) наблюдается слияние этих ветвей в одну точку $(0, 0, 0)$ при $t = t_1 < \infty$.

Заключение

В работе представлены результаты аналитического и численного исследования уравнения ро-

ста кристалла для процессов, в которых скорость перемещения фазовой границы есть физически содержательная функция локального угла наклона поверхности роста к оси дендрита. Построен пример трехмерной поверхности [см. (6), (7) и рис. 2], демонстрирующей наблюдавшуюся экспериментально корреляцию: при ускоренном / замедленном движении происходит втягивание / вытягивание носика дендрита. Представлена [см. решение (8) и рис. 3] геометрическая модель ветвления стационарного контура. Выполнен анализ двух автомодельных режимов роста [см. решение (12), (17) и рис. 4], определяющих стадии заострения и расщепления вершины дендрита.

ЛИТЕРАТУРА

1. Brener E. A., Mel'nikov V. I. // Advances in Physics. 1991. Vol. 40. No. 1. P. 53.
2. Veenendaal E., Nijdam A. J., Suchtelen J. // Journal of Crystal Growth. 2002. Vol. 235. P. 603.
3. Gurtin M. E., Jabbour M. E. // Arch. Rational Mech. Anal. 2002. Vol. 163. P. 171.
4. Chernov A. A., Rashkovich L. N., Vekilov P. G. // Journal of Crystal Growth. 2005. Vol. 275. P. 1.
5. Шибков А. А., Леонов А. А., Казаков А. А., Столбеников С. С. // Материаловедение. 2005. № 7. С. 2.
6. Mullis A. M. // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2015. Vol. 84. 012071. P. 1.
7. Glicksman M. E. // Journal of Crystal Growth. 2016. Vol. 450. P. 119.
8. Шабловский О. Н. // Прикладная физика. 2012. № 4. С. 40.
9. Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика. Москва-Ижевск: НИЦ «Регу-

лярная и хаотическая динамика». 2006. [Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G. *Extended Irreversible Thermodynamics*. (Springer – Verlag Berlin Heidelberg, 2001; Moscow-Izhevsk, SRC «Regular and chaotic dynamics», 2006)].

10. Багдасаров Х. С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. – М.: Физматлит, 2004.

11. Шабловский О. Н., Кроль Д. Г., Концевой И. А. // Вестник ГГТУ имени П. О. Сухого. 2018. № 1. С. 26.

12. Апштейн Э. З., Пилюгин Н. Н. // Известия АН СССР. Механика жидкости и газа. 1981. № 6. С. 137.

13. Курант Р. Уравнения с частными производными. – М.: Мир, 1964. [Courant R. *Partial Differential Equations*. (New York – London. 1962; Mir, Moscow, 1964)].

14. Коняев В. Г. // Ученые записки ЦАГИ. 1974. Т. 5. № 6. С. 125.

PACS: 64.70 Dv

Shape of the growth surface and fore-runners of dendrite branching in undercooled melt

O. N. Shablovsky and D. G. Kroll

Pavel Sukhoi State Technical University of Gomel
48 Prospect Ocyabrya, Gomel, 246746, Republic of Belarus
E-mail: shablovsky-on@yandex.by; kr-dmitry@yandex.ru

Received May 30, 2018

Growth of a free dendrite in unicomponent undercooled melt is studied. Undercooling increases the influence of locally-nonequilibrium heat transfer and the extent of nonstationarity on the phase boundary. While considering morphologic properties of the crystallization front and lateral branching of a dendrite we studied growth surfaces moving with velocities depending on the angle of their inclination to the dendrite axis. Mathematically this approach is analogous to searching for the shape of bodies subjected to aerodynamic heating and mass effusion. We proceed from the fact that fore-runners of morphologic instability of crystallization front are creases, bends, fractures of the surface and tip splitting. A nonstationary three-dimensional crystallization front with retracting/stretching tip of a dendrite while accelerating/decelerating is simulated. The results correlate with observing ice growth in undercooled water. The mobile growth surface with stationary shape displays a transition from the original concave profile to the convex ellipsoidal one. Lateral branches of a dendrite arise between the concave and convex regions. We have studied singular and non-singular self-similar regimes of the growth surface evolution. In the non-singular case tapering the tip does not affect the original cross section. Singular self-similar solution gives an originally four-some split tip with branches gradually merging to one point – the dendrite tip. Applicative aspects of the report refer to high-speed solidification of melts and obtaining material with improved properties.

Keywords: interface evolution, morphological stability, tip of dendrite, side branch.

REFERENCES

1. E. A. Brener and V. I. Mel'nikov, *Advances in Physics* **40** (1), 53 (1991).

2. E. Veenendaal, A. J. Nijdam, and J. Suchtelen, *Journal of Crystal Growth* **235**, 603 (2002).

3. M. E. Gurtin and M. E. Jabbour, *Arch. Rational Mech. Anal.* **163**, 171 (2002).

4. A. A. Chernov, L. N. Rashkovich, and P. G. Vekilov, *Journal of Crystal Growth* **275**, 1 (2005).

5. A. A. Shibkov, A. A. Leonov, A. A. Kazakov, and S. S. Stolbennikov, *Materialovedenie*, No. 7, 2 (2005).

6. A. M. Mullis, *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* **84**, 1 (2015).

7. M. E. Glicksman, *Journal of Crystal Growth* **450**, 119 (2016).

8. O. N. Shablovsky, *Prikl. Fiz.*, No. 4, 40 (2012).

9. D. Jou, J. Casas-Vazquez, and G. Lebon. *Extended Irreversible Thermodynamics*. (Springer – Verlag Berlin Heidelberg, 2001; Moscow-Izhevsk, SRC «Regular and chaotic dynamics», 2006).

10. H. S. Bagdasarov, *High-temperature crystallization from a melt* (Moscow, Fhysmatlit, 2004 [in Russian]).

11. O. N. Shablovsky, D. G. Kroll, and I. A. Kontsevov, *Vestnik GSTY*. No. 1, 36 (2018).

12. A. Z. Apshtein and N. N. Pilingin, *Mekhanika zhidkosti i gaza*, No. 6, 137 (1981).

13. R. Courant, *Partial Differential Equations*. (New York – London. 1962; Mir, Moscow, 1964).

14. V. G. Koniyaev, *Uchenye zapiski TsAGI* **5** (6), 125 (1974).