

РАСЩЕПЛЕНИЕ ВЕРШИНЫ И БОКОВОЕ ВЕТВЛЕНИЕ ДЕНДРИТА ПРИ РОСТЕ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА

О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль

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

Введение. Проблема макроскопического роста кристалла из переохлаждённого расплава чистого вещества требует исследования морфологических свойств межфазной границы. Первостепенное значение имеют закономерности пространственно-временной эволюции поверхности роста и возникновение боковых ветвей дендрита. Современное состояние теоретических и экспериментальных исследований дендритообразования представлено в статьях [1–4]. В данной работе рассматривается класс поверхностей роста, скорость перемещения которых зависит только от локальной формы этой поверхности [1]. Учитывается, что предвестником морфологической неустойчивости одиночного дендрита служат изгибы и складки, генерирующие возмущение кривизны исходной поверхности. Цель исследования: дать численно-аналитическое описание режимов роста, сопровождающихся образованием боковых ветвей и расщеплением вершины.

Уравнение роста. 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 [5], а математической моделью фазовой границы кристаллизации служит поверхность сильного разрыва $f(x, y, z, t) = 0$, на которой выполнены условия динамической совместности. Здесь t – время; x, y, z – прямоугольные декартовы координаты в трехмерном пространстве с ортонормированным базисом i_ε , $\varepsilon = 1, 2, 3$. Считаем, что вершина дендрита движется прямолинейно вдоль оси x в отрицательном направлении, справа налево. Ортогональный базис s, n, b соответствует касательной, главной нормали и бинормали к поверхности роста. Вектор внутренней нормали $n = \text{grad}f / |\text{grad}f|$ направлен в сторону кристаллической фазы. Единичный вектор касательной s указывает положительное направление отсчета дуговой координаты s от вершины к периферии дендрита. Вектор бинормали $b = s \times n$ вместе с s, n образует правую систему векторов. Скорость перемещения поверхности роста равна

$$N = Nn, N = -\frac{\partial f / \partial t}{|\text{grad}f|}. \quad (1)$$

Направление n характеризуется локальными углами наклона нормали к координатным осям $\theta_\varepsilon = (n, i_\varepsilon)$. Учитывая направление роста, заключаем, что доминирующая роль принадлежит угловой координате $\theta_1 \equiv \theta$. Общая постановка тепловой задачи для однокомпонентной системы заключается в том, чтобы решить в каждой фазе уравнения теплопереноса, для которых заданы следующие граничные условия: 1) кинетическая связь, которая определяет нормальный механизм роста из расплава и динамические условия совместности на неизвестной поверхности сильного разрыва (следствия из интегральных законов сохранения); 2) условия теплообмена системы «расплав – твёрдая фаза» с внешней средой. Ясно, что даже двухмерная нестационарная задача очень сложна. Рассмотрим более простой (полуобратный) подход к проблеме, позволяющий выяснить многие существенные детали процесса формирования поверхности роста дендрита. Будем изучать кинематические свойства линии роста дендрита, предполагая,

что $N = N(t, \theta)$ и априорно 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 [6]. Здесь мы используем некоторые математические результаты этих работ и даем им новую физическую интерпретацию, рассматривая свойства поверхности раздела «расплав – кристалл». Для размерного и безразмерного уравнения (1) применяем одинаковую форму записи, полагая $x \rightarrow x'$, $y \rightarrow y'$, $z \rightarrow z'$, $t \rightarrow t'$, $N \rightarrow N'$, $x = x'x_b$, $y = y'y_b$, $z = z'z_b$, $t = t't_b$, $N = N'N_b$, $N_b = x_b/t_b$, 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.

Боковые ветви дендрита. Уравнение поверхности фазовой границы возьмем в виде

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

выделяя явно координату x ; $G = (1 + p^2 + q^2)^{1/2}$, $\cos \theta = 1/G > 0$; полубесконечная поверхность роста движется справа налево, $N < 0$. Предположим, что $N = N(G, t)$, т.е. $\partial F / \partial t = GN(G, t)$. Следуя алгоритму [6], рассмотрим класс задач о поверхности роста стационарной формы, для которой $GN(G, t) = N_1(t)$:

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

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 искомой 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. Решение имеет вид:

$$z = h - \frac{2\alpha y'_0(h)}{\sqrt{1 + (y'_0)^2}}, \quad y = y_0(h) + \frac{2\alpha}{\sqrt{1 + (y'_0)^2}}, \quad H = 2\alpha,$$

где α – параметр; $y'_0 = dy_0/dh$. 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.

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 рисунке 1 показаны контуры поперечного сечения поверхности роста кристалла для последовательных значений $\alpha \geq 0$. Сплошной линией черного цвета отмечено исходное сечение $\alpha = 0$; по мере роста α контур расширяется и включает в себе предшествующие контуры. На рисунке 1А, Б контур выпуклый; при $\alpha \rightarrow \infty$, $x \rightarrow \infty$ поперечное сечение стремится к окружности радиуса (рисунок 1А) либо к эллипсу (рисунок 1Б). На рисунке 1В, Г исходный контур вогнутый (фрагмент гиперболы). Оказывается, что при $\alpha \rightarrow +\infty$ тоже происходит асимптотический переход к эллипсовидному профилю, но этому переходу предшествует (вдоль оси x) конечный интервал, на котором наблюдается ветвление стационарного контура.

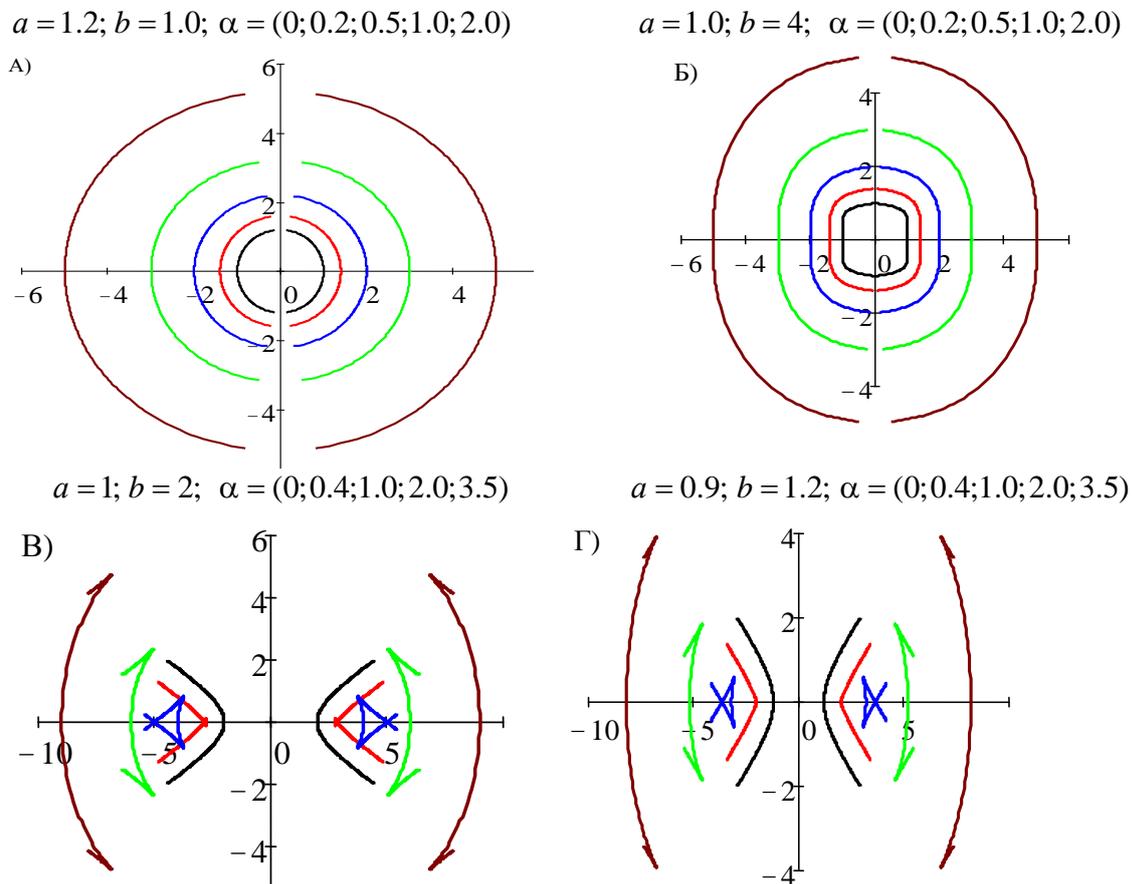


Рис. 1. Влияние направления вогнутости начального контура дендрита на формирование боковых ветвей

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

$$\partial F/\partial A = D(G), \quad D(G) = GB(G); \quad F(y, z, A=0) = F_0(y, z); \quad A = \int_0^t \tilde{A}(t) dt \geq 0. \quad (2)$$

Автомодельное решение записываем с учетом начальных условий:

$$y = y_0 \omega(A), \quad z = z_0 \omega(A), \quad F = \omega(A) F_0(y_0, z_0), \quad \omega(A=0) = 1.$$

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 $F_0(y_0, z_0)$:

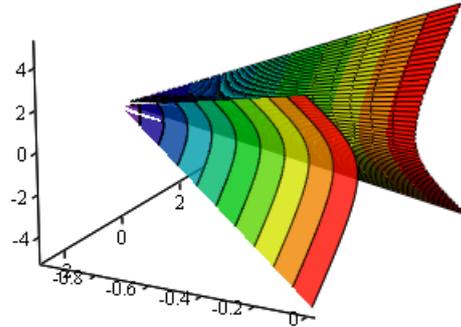
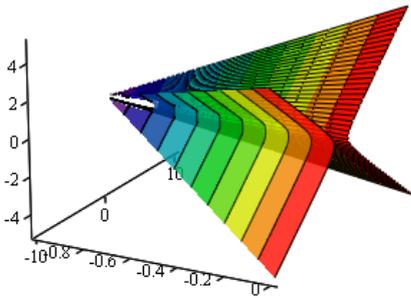
$$\Phi_0 \equiv F_0 - y_0 \frac{\partial F_0}{\partial y_0} - z_0 \frac{\partial F_0}{\partial z_0} - D(G_0) = 0, \quad (3)$$

и (2) превращается в обыкновенное дифференциальное уравнение

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

$$a = 0,5; \quad b = 1; \quad B_0 = -1/2; \quad B_1 = -1/2$$

$$a = 2; \quad b = 1; \quad B_0 = -1/2; \quad B_1 = -1/2$$



$$a = 3; \quad b = 1; \quad B_0 = -1; \quad B_1 = -1/2$$

$$a = 1; \quad b = 2; \quad B_0 = -1/2; \quad B_1 = -1/2$$

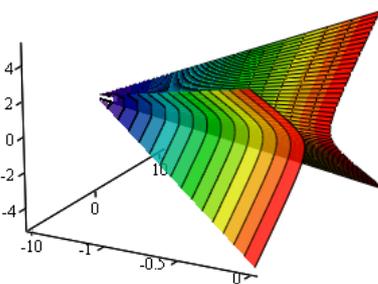
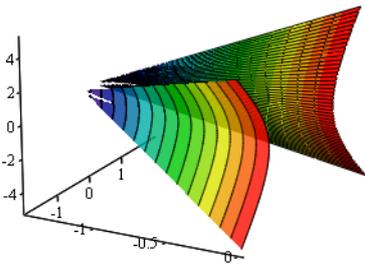


Рис. 2. Автомодельный неособый режим эволюции продольной впадины на поверхности роста

Принимаем здесь $\omega_1 = 1$, $\omega = A \pm 1$, где знаки «+» и «-» относятся к неособому и особому решениям уравнения (3). Выбор этих знаков обусловлен принятым в задаче направлением роста. Неособое решение дает поверхность, имеющую стационарную форму: с течением времени размеры поверхности увеличиваются, но безразмерные геометрические параметры процесса сохраняются без изменения. В соответствии с автомодельной структурой решения по мере заострения дендрита сохраняется вид первоначального контура поперечного сечения. Гиперболический профиль вогнутости сужа-

ется в направлении роста, т.е. впадина располагается в конечной окрестности вершины, рисунок 2. Автомоделное особое решение дает в начальном ($t = 0$) состоянии вершину, которая расщеплена на четыре отдельные ветви, рисунок 3. В течение конечного промежутка времени эти ветви сливаются в одну точку – острёе вершины дендрита.

$$B_0 = 2; k = 1/\sqrt{2}, p_0 = 1.5, q_0 = 1.5$$

$$B_0 = 2; k = 1/200, p_0 = 1.5, q_0 = 1.5$$

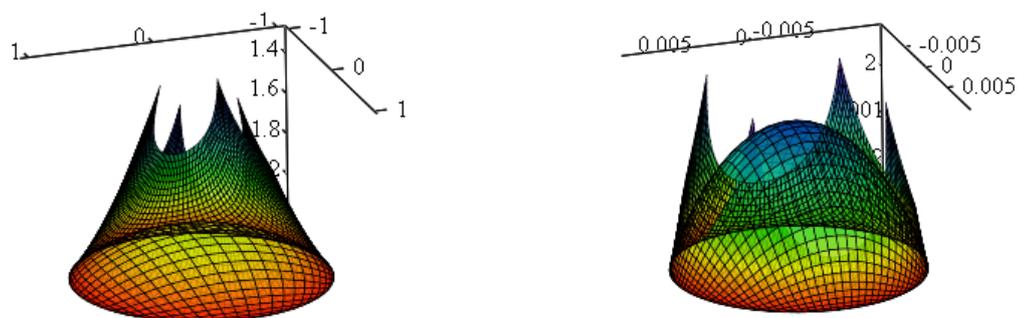


Рис. 3. Автомоделный особый режим расщепления вершины на самостоятельные ветви

Заключение. Изучен процесс роста кристалла в однокомпонентном переохлажденном расплаве чистого вещества. Фазовая граница кристаллизации рассматривается как поверхность сильного разрыва, на которой выполнены условия динамической совместности, являющиеся следствием интегральных законов сохранения. Рассмотрен класс движений, для которого скорость фазовой границы есть функция локального угла наклона нормали к поверхности роста. Представлены результаты аналитического и численного исследования предвестников морфологической неустойчивости фазовой границы.

Список литературы

1. Veenendaal, E. Simulation of crystal shape evolution in two dimensions / E. Veenendaal, A.J. Nijdam, J. Suchtelen // *Journal of Crystal Growth*. – 2002. – Vol. 235. – P. 603–618.
2. Шибков, А.А. Связь нестационарного роста вершины дендрита с образованием боковых ветвей / А.А. Шибков, А.А. Леонов, А.А. Казаков, С.С. Столбенников // *Материаловедение*. 2005. – №7. – С. 2–9.
3. Glicksman, M.E. Capillary-mediated interface perturbations: Deterministic pattern formation / M.E. Glicksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
4. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.
5. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас-Баскес, Дж. Лебон. – Москва–Ижевск: ниц «регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 528 с.
6. Апштейн, Э.З. Стационарная форма тел при их разрушении под действием тепловых потоков, зависящих от локального угла наклона поверхности / Э.З. Апштейн, Н.Н. Пилюгин // *Известия АН СССР. Механика жидкости и газа*. – 1981. – №6. – С. 137–143.