

АВТОМОДЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ВОЗБУЖДЕНИЯ ЛИНИИ РОСТА ОДИНОЧНОГО ДЕНДРИТА

Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.

Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого,
Гомель, Республика Беларусь, *shablovsky-on@yandex.ru*

Введение. Теоретические и экспериментальные задачи высокоскоростной кристаллизации чистых веществ обусловлены разработкой перспективных технологий получения материалов в неравновесных тепловых условиях. Современные экспериментальные установки позволяют переохлаждать расплавы до 300 К, [1]. В этих условиях были получены высокие (20 – 70 м/с) скорости роста кристалла. Дендритный режим роста наблюдается при глубоких переохлаждениях ΔT расплава: например, для никеля при $\Delta T > 57$ К, для меди при $\Delta T > 90$ К. Состояние исследований этой фундаментальной проблемы изложено в [1 – 7].

Цель работы: изучить автомодельный режим роста одиночного дендрита в переохлажденном расплаве чистого вещества.

Автомодельная линия роста. Рассмотрим двухмерную плоскую фазовую границу кристаллизации (ФГК) $x - F(y, t) = 0$. Уравнение роста дендрита имеет вид [8]:

$$\frac{1}{\varphi} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} = \mu B G^{3-\delta} + \frac{\partial F}{\partial t} \left[1 + \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^2 \right], \quad G = \left[1 + \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (1)$$

где координата x направлена вдоль оси симметрии дендрита в сторону твердой фазы; y - поперечная декартова координата. Кинетическая связь $|N| = \mu(T_e - T_j)$, $T_e = T_c[1 - (UK/L)]$ определяет нормальный механизм роста из расплава; здесь μ - кинетический коэффициент; T_e - температура равновесия между твердой и жидкой фазами; T_c - равновесная температура кристаллизации; U - поверхностная энергия границы раздела фаз; L - теплота фазового перехода единицы объема вещества; ; $\varphi = \alpha/\mu$; $\alpha = L/(UT_c)$; $K = (\partial^2 F / \partial^2 y) / G^3$ - средняя

кривизна ФГК; $B = T_c - T_j(y=0)$ - переохлаждение на вершине дендрита; δ - параметр неоднородности переохлаждения ФГК по отношению к угловой координате θ ; θ - угол между нормалью линии роста и осью x , т.е. $\partial F / \partial y = \tan \theta$; угол заострения линии роста равен $\theta_1 = (\pi/2) - \theta$. Расплав находится в однородном отрелаксировавшем состоянии. ФГК перемещается справа налево со скоростью $N < 0$. Другие подробности изложены в наших предшествующих публикациях [8-12].

Далее рассматриваем автомодельный случай

$$F(y,t) = A_1 t + A_2(\zeta), \quad \zeta = y - mt, \quad A_1, m - \text{const}, \quad A_1 < 0, \quad \delta \in (0,1]. \quad (2)$$

При $\delta = 1$ уравнение роста (1) можно записать в виде

$$\frac{dA}{d\zeta} = (\alpha B + \varphi A_1 - m\varphi A)(1 + A^2), \quad \frac{dA_2(\zeta)}{d\zeta} = A(\zeta). \quad (3)$$

Выражение (2) означает, что плоская фазовая граница $x = A_1 t$ перемещается влево с постоянной скоростью $A_1 < 0$ и испытывает конечное автомодельное возмущение $A_2(\zeta)$. Волна $\zeta = 0$, $y = mt$ распространяется по однородному нулевому фону: $A(\zeta = 0) = 0$. На основе (3) проанализированы два волновых режима возмущения, при которых кривизна положительная, $K > 0$: 1) волна $y = mt$, $t \geq 0$ идет вверх, на периферию, удаляясь от оси симметрии дендрита, $m > 0$, $0 \leq A < (\mu_1 B_1)/m$, $\mu_1 B_1 = \mu B + A_1 > 0$; 2) волна $y = mt + y_0$, $y_0 > 0$ идет вниз, с периферии к вершине, $m < 0$, $A \geq 0$. Процесс длится конечное время t_1 , в течение которого волна достигает оси симметрии $mt + y_0 = 0$.

Обсудим знак производной $dN/dA = (\partial N / \partial t) / (\partial A / \partial t)$, которая характеризует корреляцию между знаком $\partial N / \partial t$ (ускоренное либо замедленное движение) и знаком $\partial A / \partial t$ [$dA > 0$, $d\theta_1 < 0$ – заострение либо $dA < 0$, $d\theta_1 > 0$ – затупление линии роста. Из (3) следует, что знак dN/dA противоположен знаку выражения $(m + A_1 A)$. Знак dK/dA противоположен знаку выражения $(m + A \mu_1 B_1)$.

Пусть $m > 0$. Режим $dN/dA < 0$, при котором торможение [$N < 0, dN > 0$] сопровождается затуплением [$d\theta_1 > 0$] либо ускоренное движение [$N < 0, dN < 0$] сопровождается заострением [$d\theta_1 < 0$], существует при $m^2 < (-A_1) \mu_1 B_1$,

$0 < A < [m/(-A_1)]$. Режим $(dN/dA) > 0$, при котором наблюдается корреляция «торможение – заострение» $[N < 0, dN > 0, d\theta_1 < 0]$ либо корреляция «ускорение – затупление» $[N < 0, dN < 0, d\theta_1 > 0]$, существует тоже при $m^2 < (-A_1)\mu_1 B_1$, но здесь другой интервал значений A : $[m/(-A_1)] < A < (\mu_1 B_1/m)$.

Вывод: при $m > 0$, $m^2 < (-A_1)\mu_1 B_1$ существует пороговое значение $A = m/(-A_1)$. Слева от порога имеем корреляции «торможение / ускорение – затупление / заострение». Справа от порога: «торможение / ускорение – заострение / затупление»; эти два режима эволюции линии роста наблюдались в экспериментах [13] при изучении кристаллизации льда в переохлажденной воде. При всех $m > 0$ поведение кривизны определяется неравенством $(dK/dA) < 0$.

Пусть $m < 0$. Единственно возможный режим $(dN/dA) > 0$ существует при $0 \leq A < (A_1/m)$, т.е. угол заострения θ_1 не является слишком малым, и реализуются экспериментально наблюдавшиеся корреляции «ускорение – затупление», «торможение – заострение».

Бегущая волна возбуждения линии роста. Автомодельная линия роста (2), согласно (1), определяется следующими выражениями для скорости и кривизны:

$$N = \frac{A_1 - mA}{(1 + A^2)^{1/2}}, \quad K = \frac{\varphi}{(1 + A^2)^{1/2}} \left[A_1 - mA + \mu B (1 + A^2)^{(1-\delta)/2} \right]; \quad \delta > 0, \quad A \geq 0.$$

Оценка параметров задачи основана на неравенствах $N < 0$, $K > 0$, определяющих регулярный режим роста: $mA - A_1 > 0$; $\mu_1 B_1 > mA$, $0 < \delta < 1$.

При $m > 0$, когда волна $\zeta = 0$ бежит вверх, условие $N < 0$ выполнено, а условие $K > 0$ дает ограничение на угол заострения: $0 < A < (\mu_1 B_1/m)$. Напомним, что здесь $A = \operatorname{tg}\theta = \operatorname{ctg}\theta_1$. При $m < 0$, когда волна $\zeta = 0$ бежит вниз, условие $K > 0$ выполнено, а неравенство $N < 0$ означает, что $0 < A < (A_1/m)$. Именно для таких углов заострения существует автомодельный режим возбуждения линии роста. Для $\delta \in (0,1)$ анализ знака dN/dA дает такие же оценки параметров, как при $\delta = 1$ для $m > 0$ и $m < 0$.

Числовые расчеты при $\delta \in (0,1)$ проведены для никеля при следующих

значениях теплофизических параметров $T_c = 1728 \text{ К}$, $T_* = 1562 \text{ К}$,
 $L = 2,14 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$, $c = 5,62 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 69 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,81 \text{ Дж/м}^2$,
 $\gamma = 1,3804 \cdot 10^{-7} \text{ с}$, $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$, $N_b = 5,3 \text{ м/с}$, $\Delta T = 166 \text{ К}$, $B = 1 \text{ К}$. Все расчеты
 выполнены в безразмерных величинах. Соответствие между безразмерными и
 размерными параметрами выглядит так: $A_1 \rightarrow (A_1 t_b / y_b) = (-N_b t_b / y_b)$; безразмерная
 скорость m волны определена в долях основной скорости ($-A_1$). Индексом b
 отмечены масштабы величин, применяемые при обезразмеривании: $t_b = 10^{-7} \text{ с}$,
 $y_b = 10^{-6} \text{ м}$.

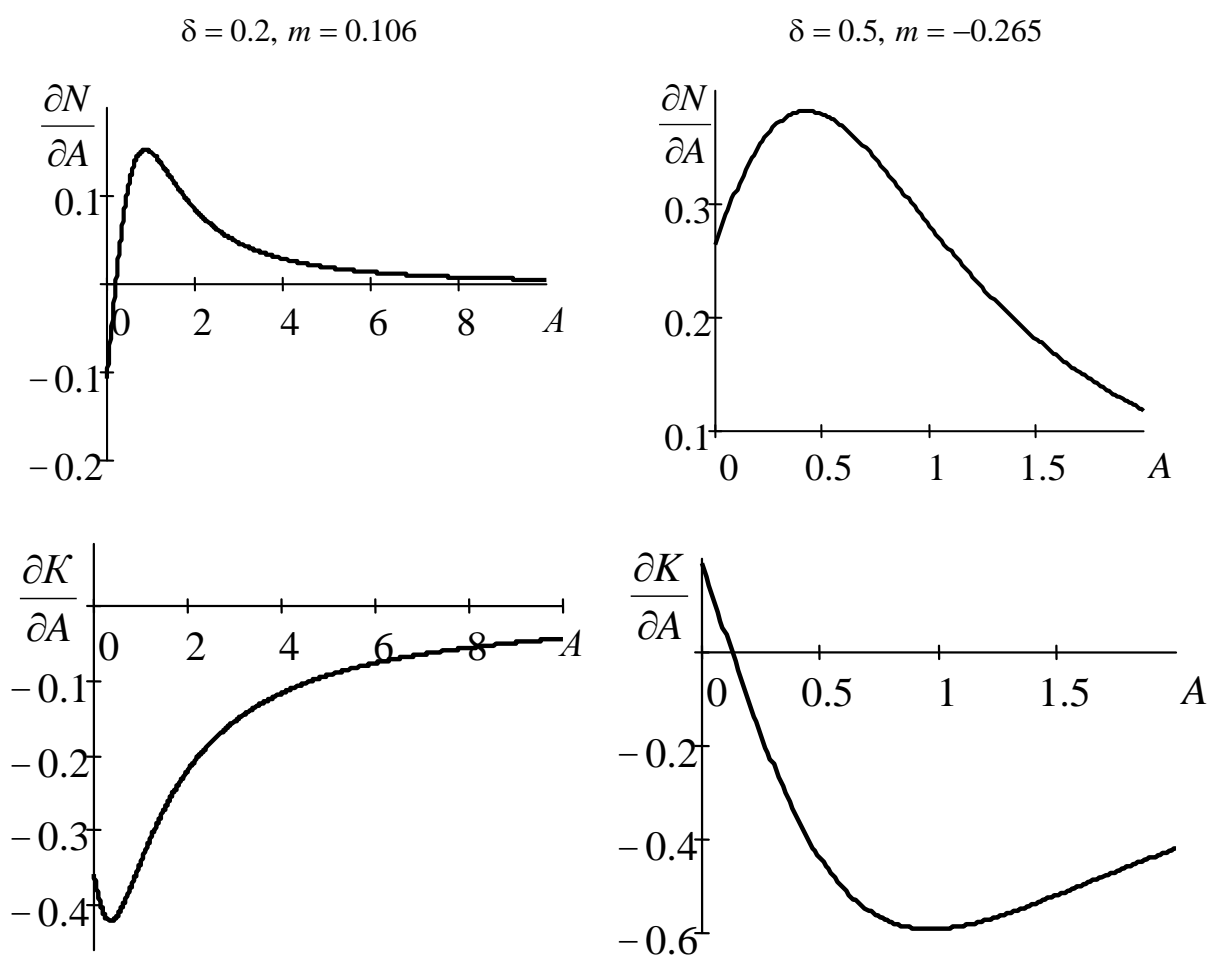


Рис. 1. Автомоделная линия роста: влияние угла заострения на скорость и кривизну фазовой границы. Входные параметры: $N_b = 5.3 \text{ м/с}$, $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$

Результаты расчетов представлены на рисунках 1-3. На рисунку 1 даны типичные примеры поведения линии роста. Для волны бегущей вверх отчетливо

прослеживается корреляция $m \leftrightarrow (-N)$, а именно: чем больше $m > 0$, тем больше модуль скорости $(-N)$ фазовой границы; производная $\partial N / \partial A$ - знакопеременная. Если же волна возмущения бежит вниз, $m < 0$, то $\partial N(A, m) / \partial A$ не меняет свой знак, а производная $\partial K(A, m) / \partial A$ - знакопеременная. Закономерности поведения скорости $N(A, m)$ и кривизны $K(A, m)$ как функций угла заострения и скорости волны возмущения, даны на рисунках 2 и 3: представленные здесь изолинии позволяют получить не только качественную, но и количественную информацию о влиянии A и m на свойства линии роста дендрита.

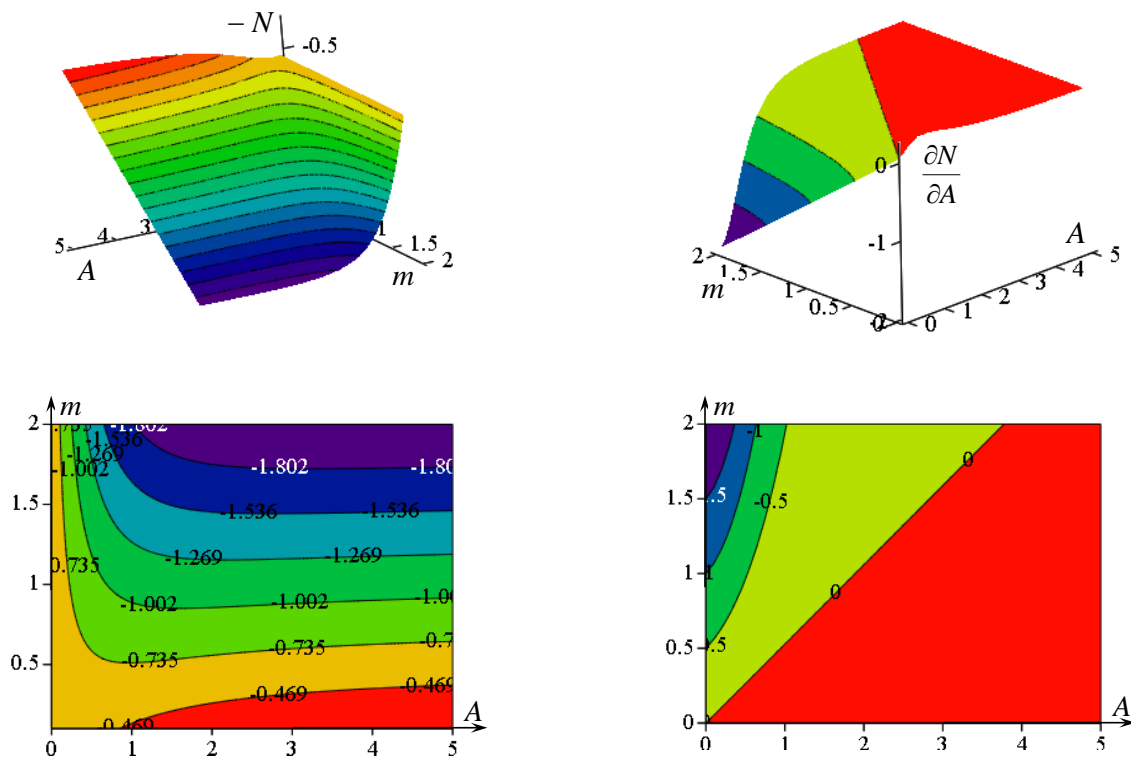


Рис. 2. Автомодельная линия роста: свойства скорости фазовой границы, $\delta = 0.5$.

Нижняя часть рисунка: слева - изолинии $N(A, m) = \text{const}$, справа – изолинии $[\partial N(A, m) / \partial A] = \text{const}$.

Отметим еще, что была получена (график не приводится) зависимость скорости волны $m = m_*(A)$ вдоль линии нулевой кривизны $K(A, m) = 0$: при малых положительных значениях A эта функция резко убывает и при $A > 2$ меняется слабо.

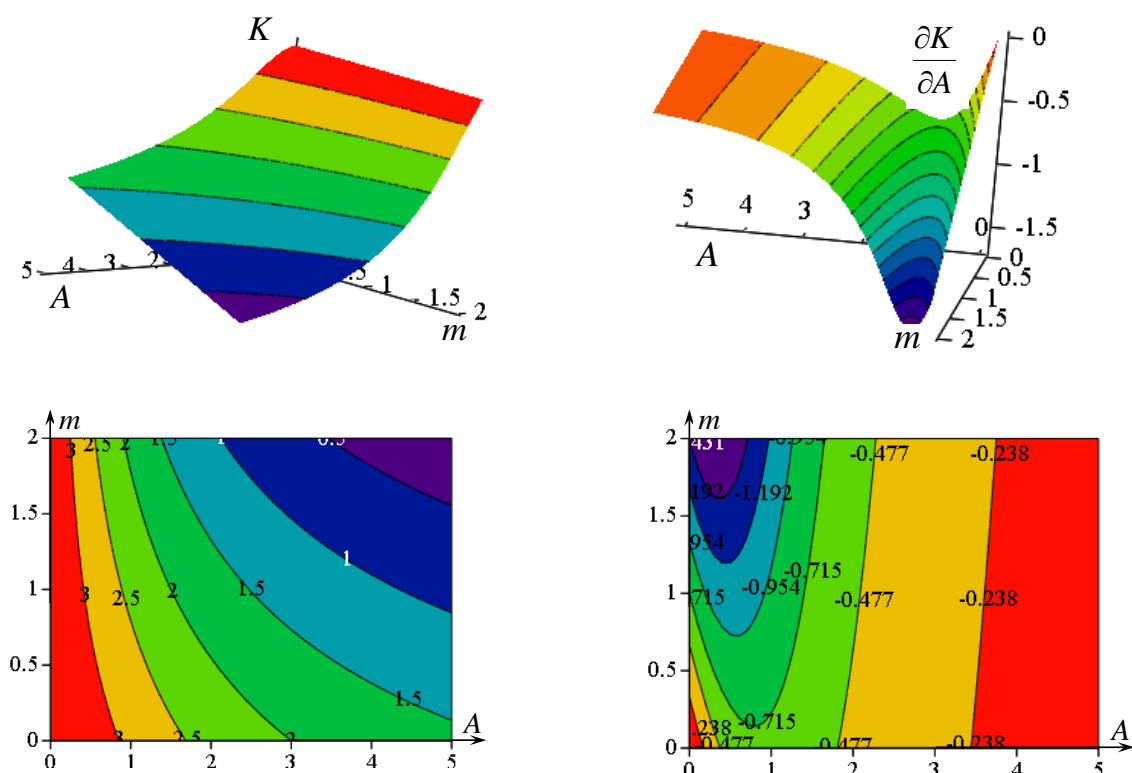


Рис. 3. Автомодельная линия роста: свойства кривизны фазовой границы, $\delta = 0.5$.

Нижняя часть рисунка: слева изолинии $K(A, m) = \text{const}$, справа – изолинии

$$[\partial K(A, m) / \partial A] = \text{const}.$$

Заключение. Дано аналитическое описание автомодельного режима эволюции линии роста, когда волна возбуждения идет вверх, на периферию дендрита либо вниз – с периферии к вершине. Получены оценки параметров задачи, при которых наблюдаются режимы роста «торможение – заострение» и «ускорение – затупление». В ходе численных расчетов для переохлажденного расплава чистого никеля определены важные качественные и количественные закономерности влияния скорости бегущей волны возбуждения на кривизну и скорость фазовой границы кристаллизации.

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. Dragnevski, K. Experimental evidence for dendrite tip splitting in deeply undercooled, ultrahigh purity Cu / K. Dragnevski, R. F. Cochrane, A.M. Mullis // *Physical review letters*. – 2002. – Vol. 89. – № 21. – P. 215502-1 – 215502-4.
3. Bassler, B. T. The solidification velocity of pure nickel / B. T. Bassler, W. H. Hofmeister, R. J. Bayuzik // *Materials Science and Engineering*. – 2003. – A. 342. – P. 80–92.
4. Mullis, A. M. A study of kinetically limited dendritic growth at high undercooling using phase-field techniques / A. M. Mullis // *Acta Materialia*. – 2003. – Vol. 51, № 7. – P. 1959–1969.
5. Gliksman, M. E. Capillary-mediated interface perturbations: Deterministic pattern formation / M. E. Gliksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
6. Strickland, J. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing – A Review / J. Strickland, B. Nanchev // *Crystals*. – 2020. – 10(7). – P. 627.
7. Kurz, W. Progress in modeling solidification microstructures in metals and alloys. Part II: dendrites from 2001 to 2018 / W. Kurz, M. Rappaz, R. Trivedi // *Int. Mater. Rev.* – 2020. – P. 1-47.
8. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.
9. Шабловский, О.Н. Кинетика роста вершины дендрита в глубоко переохлажденном расплаве. Часть 1. Уравнение фазовой границы кристаллизации / О.Н. Шабловский // *Успехи прикладной физики*. – 2013. –Т. 1. – №6. – С. 680-685.
10. Шабловский, О.Н. Кинетика роста вершины дендрита в глубоко переохлажденном расплаве. Часть II. Аналитическая структура возмущений линии роста / О.Н. Шабловский // *Успехи прикладной физики*. – 2014. –Т. 2. – №1. – С. 12-17.

11. Шабловский, О.Н. Форма поверхности роста и предвестники ветвления дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // Успехи прикладной физики. – 2018. – №4. – С. 316-324.
12. Шабловский, О.Н. Динамика неустойчивости волновых возмущений и боковое ветвление дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // Успехи прикладной физики. – 2022. – №2. – С. 189-202.
13. 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.