

**МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ
ЛИНИИ РОСТА ДЕНДРИТА В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ
ЧИСТОГО ВЕЩЕСТВА**

Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.

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

Введение. Проблема роста кристалла из переохлажденного расплава чистого вещества имеет следующий важный аспект: морфологические свойства фронта кристаллизации и возникновение боковых ветвей дендрита. Современное состояние теоретических и экспериментальных исследований дендритообразования представлено в статьях [1-6]. 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. Предвестниками неустойчивости макроскопических форм поверхности роста служат изломы, изгибы, складки, генерирующие возмущение кривизны исходной поверхности.

Цель данной работы: проанализировать устойчивость / неустойчивость возмущенного состояния дендрита и определить взаимосвязи между пространственно-временными параметрами его вершины.

Уравнение роста и его решения. Рассмотрим двухмерный плоский случай. Фазовую границу кристаллизации (**ФГК**) моделируем плоской линией сильного разрыва $x - F(y, t) = 0$. Средняя кривизна этой границы равна $K = (\partial^2 F / \partial y^2) / G^3$, $G = (1 + (\partial F / \partial y)^2)^{1/2}$. Здесь координата x направлена вдоль оси симметрии в сторону твердой фазы; y – поперечная декартова координата. Для дальнейших рассуждений важное значение имеет угол θ , который образует

нормаль \mathbf{n} границы с осью x : $\cos \theta = 1/G$. ФГК перемещается со скоростью N справа налево ($N = N\mathbf{n}$, $N < 0$), и на ее вершине $\partial F / \partial y = 0$, $\cos \theta = 1$. По мере удаления от вершины $\cos \theta$ монотонно убывает: $\cos \theta \rightarrow 0$, $\theta \rightarrow \pi/2$. Угол заострения линии роста равен $\theta_1 = (\pi/2) - \theta$, рисунок 1.

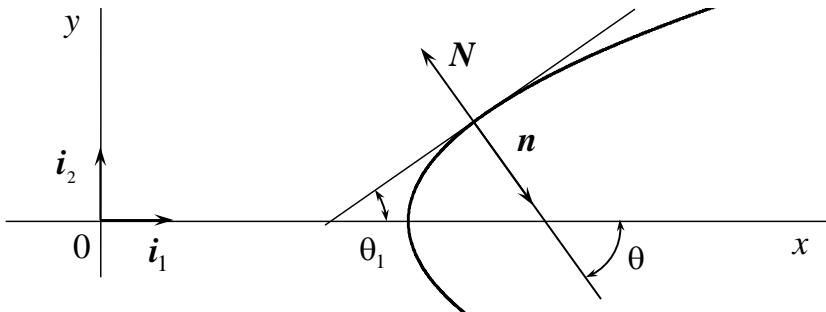


Рис. 1. Угол θ_1 заострения линии роста

Теплофизические свойства расплава и кристалла берем постоянными. Это допущение оправдано тем, что относится к уже сформировавшемуся сильному разрыву.

Уравнение роста $N \equiv (\partial F / \partial t) / G = -\mu(T_e - T_j)$ имеет вид [7]:

$$\partial^2 F / \partial y^2 = \alpha B + \varphi (\partial F / \partial t) [1 + (\partial F / \partial y)^2], \quad \alpha = L / (U T_c), \quad \varphi = \alpha / \mu. \quad (1)$$

Приняты обозначения: L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; μ – кинетический коэффициент роста; T_e – температура равновесия между твердой и жидкой фазами; T_c – равновесная температура кристаллизации; U – поверхностная энергия границы раздела фаз; B – переохлаждение на вершине дендрита; ΔT – переохлаждение расплава; c – объемная теплоемкость; λ – коэффициент теплопроводности.

Дифференциальное уравнение, описывающее малое возмущение стационарного контура линии роста, имеет вид

$$\partial^2 f / \partial y^2 = B_1 (\partial f / \partial y) + B_2 (\partial f / \partial t), \quad (2)$$

$$B_1 = 2\varphi A_1 A_2 < 0, \quad B_2 = (1 + A_2^2)\varphi > 0, \quad \alpha = L / (U T_c), \quad \varphi = \alpha / \mu,$$

$$A_1 = -\mu B / (1 + A_2^2) < 0, \quad B \equiv \text{const}, \quad A_2 > 0. \quad (3)$$

Линеаризация уравнения (1) была выполнена на следующем точном решении:

$$F(y, t) = F^0(y, t) + f(y, t), \quad F^0 = A_1 t + A_2 y.$$

В ходе дальнейшего анализа нам понадобится параметр роста

$$\Phi = \frac{\mu T_c U}{N_m L}, \quad N_m = -N > 0, \quad (4)$$

который имеет размерность длины и несет информацию о кинетических свойствах ФГК. Выражение (4) есть произведение безразмерной скорости $\mu T_c / N_m$ на дробь U/L , характеризующую теплофизические свойства расплава. В книге [8] была изучена корреляция $\Delta T \leftrightarrow N_m$ для глубоко переохлажденных расплавов никеля, меди и германия. В работе [9] дана библиография наших работ, в которых представлен способ теплофизического истолкования связи $\Delta T \leftrightarrow N_m$ и получены полуэмпирические зависимости кинетического коэффициента $\mu = \mu(\Delta T)$ от переохлаждения расплава. Эти сведения позволяют определить параметр роста (4) и дать количественную оценку свойств возмущенной линии роста.

В данной работе нами проведены три серии расчетов. Началу расчетов предшествует вычисление зависимостей $\Phi = \Phi(\Delta T)$, $N_m = N_m(\Delta T)$ и построение соответствующих аппроксимирующих функций.

Числовые расчеты выполнены для меди. Входные параметры: $\Delta T = 180 \text{ K}$, $|N| = 11,0 \text{ м/с}$, $T_c = 1357 \text{ K}$, $L = 1,77 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$, $c = 4,17 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 317 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,35 \text{ Дж/м}^2$, $\mu = 10,056 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$. Масштабы величин: $y_b = 10^{-6} \text{ м}$, $t_b = 10^{-7} \text{ с}$. Расчеты проведены в безразмерных переменных.

Расчет-1. Берем за основу решение

$$f(y, t) = H \exp(ky) \sin(k_1 y + rt) \quad (5)$$

$$2k = B_1 - (B_1^2 + 4k_1^2)^{1/2} < 0, \quad r = -k_1 (B_1^2 + 4k_1^2)^{1/2} / B_2 < 0.$$

$$f_0(y) = f_1 \exp(ky), \quad k < 0, \quad y \geq 0. \quad (6)$$

Здесь $f_0(y)$ представляет неоднородный по y фон перед устойчивой волной, которая движется вверх, от вершины на периферию дендрита. Скорость волны

равна

$$\frac{U}{N_m} = 2 \left(2 \frac{y_*}{y_1} - 1 \right) \cos \theta_1, \quad 0 < y_1 < y_*, \quad (7)$$

$$y_* = \frac{\Phi}{2} \sin \theta_1 \operatorname{tg} \theta_1, \quad 0 < \theta_1 < \frac{\pi}{2},$$

где $y_* = 1/(-k_*)$ – критический размер зоны неоднородности фона, $k_* = B_1$. В том случае, когда $k > B_1$ решение неустойчивое и дает состояние, предшествующее началу бокового ветвления дендрита.

Порядок расчетов: задаем угол заострения θ_1 ; зная $\Phi = \Phi(\Delta T)$, вычисляем $y_* = y_*(\Delta T)$; после этого подсчитываем безразмерную скорость волны V/N_m и ее размерное числовое значение

$$V(\Delta T) = 2 \left(2 \frac{y_*}{y_1} - 1 \right) N_m(\Delta T).$$

Вычисления проводятся для нескольких фиксированных углов θ_1 .

Расчет-2. Уравнению (2) удовлетворяет решение

$$f(y, t) = H \cos k y \exp \left[h_2 y + t \left(h_1 - \frac{k^2}{B_2} \right) \right], \quad y \geq 0, \quad t \geq 0, \quad (8)$$

$$h_1 = -B_1^2/(4B_2) < 0, \quad h_2 = B_1/2 < 0.$$

$$f_0(y) = H \cos k y. \quad (9)$$

Здесь $f_0(y)$ представляет периодический по y фон. Скорость волны отрицательная: имеем движение фронта волны с периферии дендрита к его вершине:

$$\frac{V}{N} = \Phi^2 k^2 \sin^3 \theta_1 \operatorname{tg} \theta_1 + \cos \theta_1. \quad (10)$$

Возмущение (9) затухает экспоненциально: $f \sim \exp(-n_1 t)$,

$$v_1 = \frac{n_1}{(N_m/y_1)} = \frac{1}{S} \left[(1 - S) \frac{y_1}{\Phi} + \pi^2 S^2 \frac{\Phi}{y_1} \right], \quad (11)$$

$$S = \sin^2 \theta_1, \quad y_1 = \frac{\pi}{k}, \quad \theta_1 \in \left(0, \frac{\pi}{2} \right).$$

В данном случае y_1 – ширина зоны неоднородности возмущения (10). Порядок

расчетов: задаем θ_1 ; выбираем числовое значение k ; находим безразмерные зависимости V/N и v_1 от ΔT , а также соответствующие им размерные функции $V(\Delta T)$ и $n_1(\Delta T)$. Выполняем варьирование значений θ_1 и k .

Расчет-3. Берем за основу решение

$$f(y, t) = H \exp(-ky) \exp\left[\left(h_1 + \frac{k^2}{B_2}\right)t + h_2 y\right], \quad y \geq 0, \quad t \geq 0, \quad (12)$$

$$f_0(y) = H \exp(-ky), \quad k > 0, \quad y \geq 0. \quad (13)$$

Неоднородность фона (13) аналогична (6). Волна движется с отрицательной скоростью

$$\frac{V}{N} = \left(1 - \frac{y_{**}^2}{y_1^2}\right) \cos \theta_1, \quad (14)$$

$$y_{**} = \Phi \sin \theta_1 \operatorname{tg} \theta_1, \quad \theta_1 \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right). \quad (15)$$

Коэффициент затухания во времени равен

$$v_2 = \frac{n_2}{(N_m/y_1)} = \frac{1}{S} \left[(1 - S) \frac{y_1}{\Phi} - S^2 \frac{\Phi}{y_1} \right], \quad (16)$$

$$S = \sin^2 \theta_1, \quad y_1 = 1/k.$$

Порядок расчетов такой же, как в предыдущем варианте (8)–(10).

Результаты расчетов.

Расчет-1. Скорость волны, бегущей от вершины по апериодическому фону, в значительной степени зависит от параметра y_1 неоднородности фона. Например, при увеличении y_1 в два раза, скорость волны уменьшается еще сильнее – более чем в два раза. Скорость волны, отнесенная к скорости ФГК V/N_m , ведет себя немонотонно (имеет минимум) при росте ΔT . Вместе с тем размерная скорость волны $V = V(\Delta T)$ – близкая к линейной возрастающая функция переохлаждения.

Расчет-2. Движение волны, бегущей с периферии к вершине по периодическому фону, анализируем для низкочастотного $[k < (1/\Phi_2)]$ и высокочастотного $[k > (1/\Phi_1)]$ вариантов. Здесь Φ_1 и Φ_2 – левая и правая границы

интервала $\Phi \in [\Phi_1, \Phi_2]$, соответствующего изучаемому интервалу переохлаждений. Скорость волны реагирует ощутимым образом на рост y_1 только при достаточно большом $[\theta_1 > (\pi/4)]$ затуплении линии роста. Вместе с тем при $y_1 = 10^{-6}$ м скорость V_m ведет себя немонотонно по отношению к θ_1 (есть минимум), а при $y_1 = 2.5 \cdot 10^{-6}$ м эта зависимость монотонно убывающая. Нетривиальное поведение параметра затухания наблюдается при переходе «игла – квазиплоская ФГК»: безразмерная величина $v_1(\Delta T)$ имеет максимум при не слишком большом затуплении; на квазиплоской ФГК – минимум. Размерный коэффициент затухания – близкая к линейной возрастающая функция $n_1 = n_1(\Delta T)$ и при этом возмущение затухает быстрее всего на «игле». Типичный пример, иллюстрирующий свойства параметра затухания, представлен на рисунке 2.

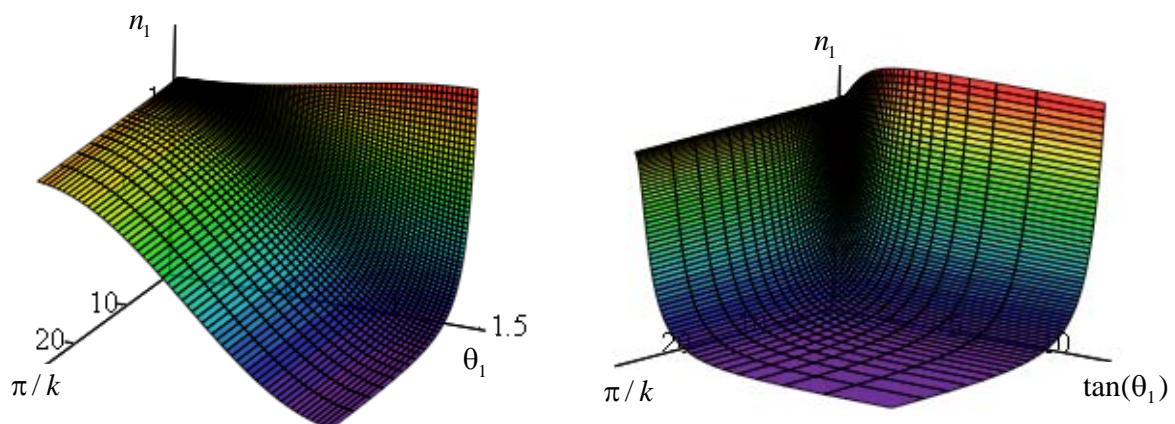


Рис. 2. Зависимость параметра затухания от ширины зоны неоднородности и от угла заострения линии роста

Расчет-3. Главное отличие от процессов, относящихся к расчету-1 в том, что здесь волна движется с периферии к вершине; фон перед волной – апериодический. В данном случае линия, определяющая зависимость относительной скорости V/N от ΔT обращена выпуклостью вверх. В левой части рисунка 3 показан пространственно-временной портрет линии роста на периодическом фоне; в правой части рисунка 3 изображен пример складки на линии роста дендрита.

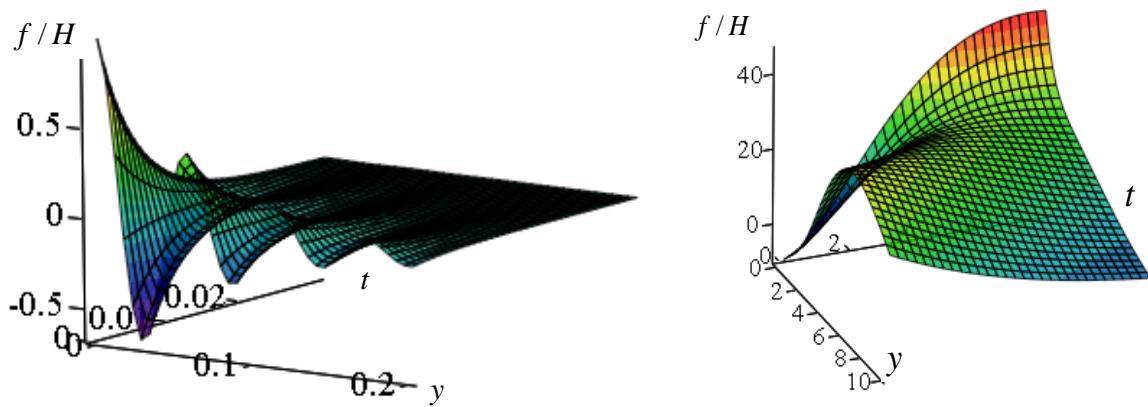


Рис. 3. Пространственно-временной портрет линии роста

Заключение. Обнаружено, что устойчивость / неустойчивость волнового возмущения определяется направлением движения фронта волны (скорость $V > 0$ - движение от вершины на периферию; $V < 0$ - движение с периферии к вершине), а также пространственно-временными корреляциями между фоном $f_0(y)$ перед волной и состоянием $f(y, t)$ линии роста за фронтом волны. Корреляция «апериодический фон вида $f_0 \sim \exp(ky)$, $k < 0$, $y \geq 0$ » - «периодический по t режим за волной, $V > 0$ » демонстрирует существование порогового значения параметра неоднородности $k = k_*$: процесс устойчив при $k < k_*$, а при $0 > k > k_*$ формируется боковая ветвь.

Список литературы

1. Brener, E.A. Pattern selection in two-dimensional dendritic growth / E.A. Brener, V.I. Mel'nikov // Advances in Physics. – 1991. – Vol. 40. – №1. – P. 53-97.
2. 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.
3. Mullis, A.M. Deterministic side-branching during thermal dendritic growth / A.M. Mullis // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – Vol. 84. – 012071. – P. 1-9.

4. Glicksman, M.E. Capillary-mediated interface perturbations: Deterministic pattern formation / M.E. Glicksman // Journal of Crystal Growth. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
5. 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.
6. Strickland, J. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing – A Review / J. Strickland, B. Nenchev // Crystals. – 2020. – 10(7). – P. 627.
7. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // Прикладная физика. – 2012. – №4. – С. 40–46.
8. Herlach, D.M. Metastable Solids from Undercooled Melts / D.M. Herlach, P. Galenko, D. Holland-Moritz –Oxford: Pergamon, 2007. – 448 p.
9. 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.