

ВОЗМУЩЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ЛИНИИ РОСТА ДЕНДРИТА ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА

О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль

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

Введение. Современные методы высокоскоростного затвердевания глубоко переохлажденного расплава чистого металла имеют целью получение материалов с улучшенными эксплуатационными свойствами. Известные в литературе экспериментальные и теоретические результаты исследований дендритного роста кристалла указывают на важность тщательного изучения морфологических свойств и пространственно-временной эволюции фазовых границ. Библиография этой проблемы представлена в работах [1-5]. Цель данного исследования: анализ динамических свойств возмущения линии роста и определение условий появления неустойчивых состояний, предшествующих началу бокового ветвления дендрита.

Уравнение роста дендрита. Рассмотрим двухмерную плоскую фазовую границу кристаллизации (ФГК) $x - F(y, t) = 0$. Уравнение роста дендрита имеет вид [6]:

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

где координата x направлена вдоль оси симметрии дендрита в сторону твердой фазы; y - поперечная декартова координата; $\varphi = \alpha / \mu$; $\alpha = L / (U T_c)$. 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; $K = (\partial^2 F / \partial^2 y) / G^3$ - средняя кривизна ФГК. Отклонение температуры кристалла T_j от равновесного значения представляется в виде [7]:

$$T_c - T_j = (\cos \theta)^\delta B, \quad \cos \theta = 1/G,$$

где $B = T_c - T_j(y=0)$ - переохлаждение на вершине дендрита; δ - параметр неоднородности переохлаждения ФГК по отношению к угловой координате θ . ФГК моделируем линией сильного разрыва, на которой баланс энергии представляется в форме

$$q_j = N(c_j T_j - c_* T_*) + N T_c (c_* - c_j) - Q, \quad Q = L \left(N + \gamma_j \frac{\partial N}{\partial t} \right), \quad N = (\partial F / \partial t) / G,$$

где γ - время релаксации теплового потока; звездочкой отмечены параметры расплава перед ФГК; индекс j указывает, что значение функции определено на правой стороне сильного разрыва, в твердой фазе; c - объемная теплоемкость; q_j - нормальная к границе составляющая вектора теплового потока; расплав находится в однородном отрелаксировавшем состоянии: $q_* \equiv 0$, $T_* \equiv \text{const}$. Теплофизические свойства расплава и кристалла берем постоянными. Это допущение оправдано тем, что относится к уже сформировавшемуся сильному разрыву. ФГК перемещается справа налево со скоростью $N < 0$. В данной работе мы изучаем уравнение (1) при $\delta = 3$: в этом случае существует точное аналитическое решение

$$F^0(y, t) = A_1 t + A_2(y), \quad A_2(y) = \frac{1}{a^2} \ln \left(\frac{1+E}{2} \right) - \frac{b}{a} y, \quad E = \exp(2aby),$$

определяющее плоский стационарный контур $A_2 = A_2(y)$, скорость перемещения которого не зависит от времени; $A_1 \equiv \text{const} < 0$. Изучим примеры возмущенных состояний этой стационарной линии роста.

Колебания вершины дендрита. Возьмем за основу следующее аналитическое выражение $F(y, t) = A_1 t + A_2(y) + f(y, t)$, где $f(y, t)$ - малое возмущение стационарного контура. После линеаризации получаем уравнение

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \varphi(1 + A^2) \frac{\partial f}{\partial t} + 2A_1 \varphi A \frac{\partial f}{\partial y}, \quad \frac{dA_2(y)}{dy} \equiv A(y) = \frac{b(E-1)}{a(E+1)}.$$

Решение строим в виде

$$f(y, t) = [B_2(y) \sin kt + D_2(y) \cos kt] \exp(rt), \quad t \geq 0; r < 0, k \geq 0, y \geq 0, \quad (2)$$

$$\frac{1}{\varphi} \frac{d^2 B_2}{dy^2} = (1 + A^2)(B_2 r - D_2 k) + 2A_1 A \frac{dB_2}{dy}, \quad (3)$$

$$\frac{1}{\varphi} \frac{d^2 D_2}{dy^2} = (1 + A^2)(B_2 k + D_2 r) + 2A_1 A \frac{dD_2}{dy}. \quad (4)$$

Будем рассматривать аperiодический и периодический по времени режимы возмущения вершины дендрита, когда испытывают возмущение кривизна и скорость роста. Аperiодическое возмущение имеет вид: $k = 0$,

$$f(y, t) = D_2(y) \exp(rt), \quad \frac{d^2 D_2}{dy^2} = \varphi \left[(1 + A^2) D_2 r + 2A_1 A \frac{dD_2}{dy} \right], \quad y = 0, \quad D_2(0) = D_2^0;$$

$$dD_2/dy = 0.$$

Если $D_2^0 > 0$, то носик дендрита вытянут вперед (в направлении роста), если $D_2^0 < 0$, то в начальном состоянии ($t = 0$) носик втянут внутрь. Периодическое ($k > 0$) возмущение (2) определяется решением системы обыкновенных дифференциальных уравнений (3), (4) с начальными условиями $y = 0$, $D_2 = D_2^0$, $B_2 = B_2^0$, $dD_2/dy = 0$, $dB_2/dy = 0$.

Приведем результаты расчетов для никеля и меди. Входные параметры:
 Никель, Ni: $\Delta T = 166 \text{ К}$, $N = 5,3 \text{ м/с}$, $T_c = 1728 \text{ К}$, $L = 2,14 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$,
 $c = 5,62 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 69 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,81 \text{ Дж/м}^2$, $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$.
 Медь, Cu: $\Delta T = 180 \text{ К}$, $N = 11,0 \text{ м/с}$, $T_c = 1357 \text{ К}$, $L = 1,77 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$,
 $c = 4,17 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 317 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,35 \text{ Дж/м}^2$, $\mu = 10,056 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$.

Масштабы величин: $y_b = 10^{-6} \text{ м}$, $t_b = 10^{-7} \text{ с}$. Расчеты проведены в безразмерных переменных. Сопоставление друг с другом рисунков 1А, 1Б, 1В говорит о том, что при фиксированных значениях параметра затухания r частота k колебаний по времени принципиальным образом влияет на характер поведения возмущения $f(y, t)$ по отношению к координате y . А именно: наблюдается последовательная смена режимов «периодический процесс затухания» - «гармонические колебания» - «резонансная неустойчивость». На рисунке 2 дан пример апериодической устойчивости по времени, существующей на фоне затухающих периодических возмущений по координате.

Формирование боковой ветви. Перейдем к анализу системы уравнений (3), (4) при больших $y \gg 1$, когда $(E - 1)/(E + 1) \cong 1$, т.е. $A \cong (b/a) \equiv \text{const}$. В этом случае имеем:

$$\frac{d^2 B_2}{dy^2} = \alpha_1 (B_2 r - D_2 k) - 2\varphi_1 \frac{dB_2}{dy}, \quad \frac{d^2 D_2}{dy^2} = \alpha_1 (B_2 k + D_2 r) - 2\varphi_1 \frac{dD_2}{dy}$$

$$\alpha_1 = \alpha B / (-A_1) > 0, \quad \varphi_1 = -\varphi A_1 b / a > 0.$$

Апериодический по времени режим ($k = 0$, см. (2)) приводит при $r < 0$ к обычному уравнению затухающих колебаний. Затухание по координате y происходит в периодическом режиме, если $\varphi_1^2 + \alpha_1 r < 0$; процесс затухания апериодический, если $\varphi_1^2 + \alpha_1 r > 0$. Следовательно, устойчивость по времени $[r < 0; \exp(rt) \rightarrow 0, t \rightarrow \infty]$ соотносится с устойчивостью по координате y .

$$\text{А) } r = -0.2, k = 0.2, D_2^0 = -0.5, B_2^0 = 0.5$$

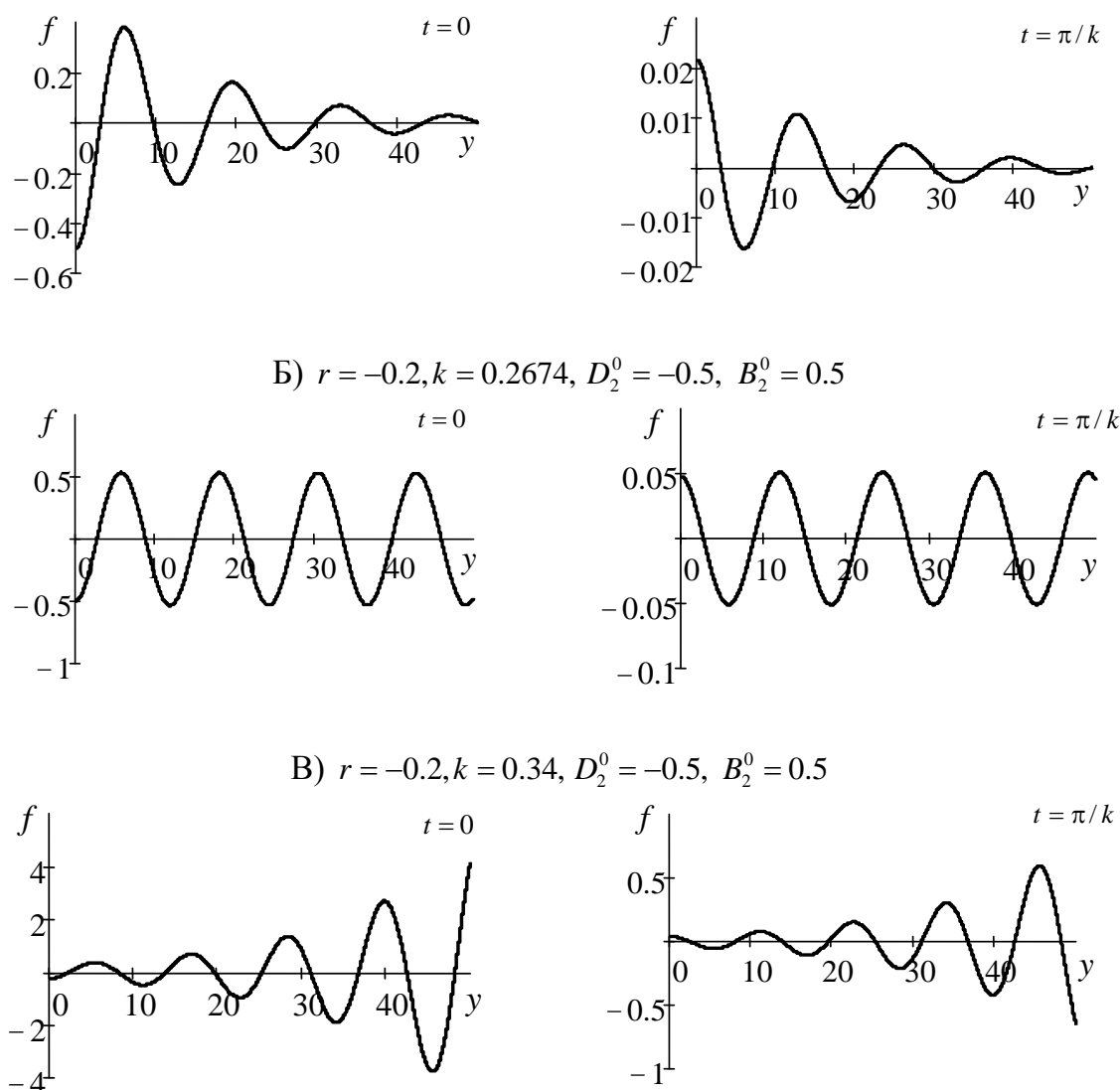


Рис. 1. Никель. Затухающий периодический (А), гармонический (Б) и неустойчивый по резонансному типу (В) режимы возмущения линии роста

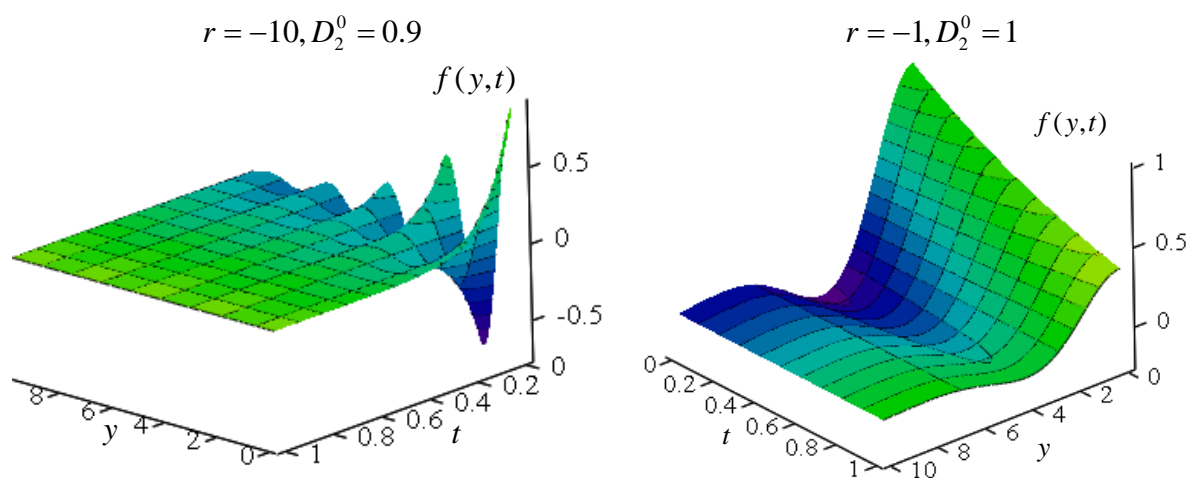


Рис. 2. Медь. Возмущенное состояние вершины дендрита – аperiodическая устойчивость по времени

Ситуация меняется при $r > 0$: неустойчивость по времени $[\exp(rt) \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty]$ соотносится с неустойчивостью по координате. Функция $B_2(y)$ определяется из дифференциального уравнения четвертого порядка:

$$\frac{d^4 B_2}{dy^4} + 4\varphi_1 \frac{d^3 B_2}{dy^3} + (4\varphi_1^2 - 2\alpha_1 r) \frac{d^2 B_2}{dy^2} - 4\alpha_1 \varphi_1 r \frac{dB_2}{dy} + \alpha_1^2 (k^2 + r^2) B_2 = 0.$$

Частное решение ищем в виде $B_2(y) = \exp(yZ)$, и получаем характеристическое уравнение $Z^4 + 4\varphi_1 Z^3 + (4\varphi_1^2 - 2\alpha_1 r)Z^2 - 4\alpha_1 \varphi_1 r Z + \alpha_1^2 (k^2 + r^2) = 0$. Корень этого уравнения запишем в виде $Z = Z_1 + iZ_2$, а затем выделим действительную и мнимую части. В результате находим:

$$r = \frac{Z_1(Z_1^2 - Z_2^2) + \varphi_1(3Z_1^2 - Z_2^2) + 2\varphi_1^2 Z_1}{\alpha_1(\varphi_1 + Z_1)}, \quad g_2 = Z_1^2 - Z_2^2, \quad h_2 = 2Z_1 Z_2,$$

$$k^2 + r^2 = \frac{1}{\alpha_1^2} [4\alpha_1 \varphi_1 Z_1 r + 2\alpha_1 Z_2 r - 4\varphi_1^2 g_2 - 4\varphi_1 g_3 - g_4], \quad (5)$$

$$g_3 = Z_1(Z_1^2 - 3Z_2^2), \quad h_3 = Z_2(3Z_1^2 - Z_2^2), \quad g_4 = g_2^2 - h_2^2, \quad h_4 = 2g_2 h_2.$$

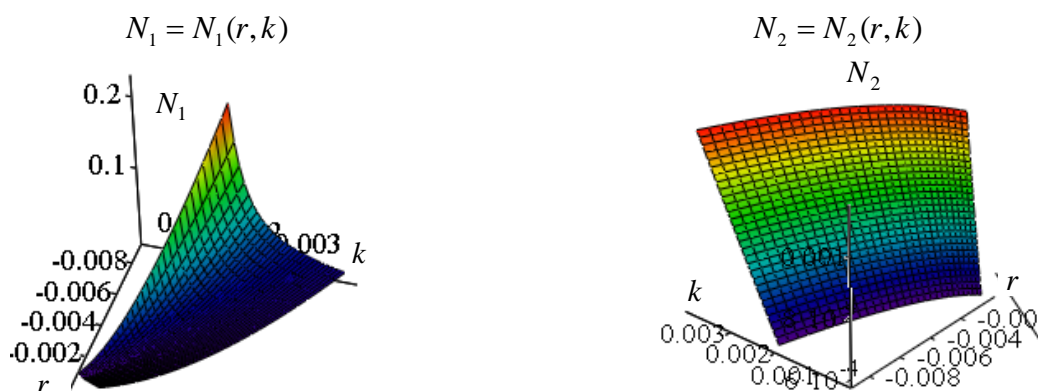


Рис. 3. Никель. Свойства скоростей волн возбуждения боковой ветви линии роста.

$$D_2^0 = 0,1, \quad B_2^0 = 0,1.$$

Возмущение $f(y, t)$ содержит в качестве аргументов волновые координаты $yZ_1 + rt$, $yZ_2 \pm kt$. Скорость $N_1 = -r/Z_1 > 0$ вычисляется при $r < 0$, $Z_1 > 0$, а для скорости $N_2 = k/Z_2$ следует принять $k > 0$, $Z_2 > 0$. Таким образом, Z_1 - параметр затухания по координате y , Z_2 - частота колебаний по y . Условие $r < 0$ дает неравенство $Z_1^2 + 2\varphi_1 Z_1 < Z_2^2$. Именно в этом случае существуют бегущие волны со скоростями перемещения N_1 и N_2 , и на фоне затухающих по времени колебаний линии роста $[r < 0, \exp(rt) \rightarrow 0, t \rightarrow \infty]$ эти волны возбуждают боковую ветвь дендрита: $Z_1 > 0$, $\exp(yZ_1) \rightarrow \infty$, $y \rightarrow \infty$. Пусть $r = 0$, т.е. линия роста гармонически колеблется по t с частотой k ; тогда параметры Z_1 и Z_2 связаны соотношением $Z_2^2 = Z_1^2 + 2\varphi_1 Z_1$, а формула (5) записывается так:

$\alpha_1^2 k^2 = 4(Z_1 + 2\varphi_1)Z_1(\varphi_1^2 + Z_2^2) > 0$, и решение неустойчивое по отношению к координате y . На рисунке 3 показаны зависимости скоростей N_1 и N_2 от параметров r, k , характеризующих поведение возмущения по времени t .

Заключение. На вершине дендрита рассмотрены аperiodический и периодический по времени режимы возмущения скорости и кривизны ФГК. Обнаружено, что при росте частоты колебаний по времени происходит последовательная смена режимов возмущения по отношению к поперечной координате: «периодический процесс затухания» - «гармонические колебания» - «неустойчивость по резонансному типу». Даны оценки скорости волны, бегущих вдоль линии роста и возбуждающих боковую ветвь дендрита. Представлены результаты численных расчетов для чистых расплавов никеля и меди.

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. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.
7. Шабловский О. Н. Производство энтропии на фазовой границе кристаллизации // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2010. №12. С. 81-87.