УДК 548.232.4

Кинетика роста вершины дендрита в глубоко переохлажденном расплаве
Часть I. Уравнение фазовой границы кристаллизации

О.Н. Шабловский

Представлены результаты теоретического исследования кинетики роста вершины дендрита при закритическом переохлаждении однокомпонентного чистого расплава. Дан вывод системы уравнений, определяющих скорость и кривизну плоской двумерной фазовой границы кристаллизации. Получена связь возмущения кривизны с возмущениями скорости, ускорения и другими параметрами линии роста.

PACS: 64.70.Dv
Ключевые слова: высокоскоростная кристаллизация, локально-неравновесный теплоперенос; неустойчивость линии роста; кривизна фазовой границы.

Введение

Экспериментальные и теоретические исследования высокоскоростного затвердевания расплавов направлены на решение проблемы создания конструкционных материалов с повышенными эксплуатационными свойствами. В работах [1—3] получены экспериментальные зависимости скорости роста кристалла N от переохлаждения расплава ΔT для трех элементов: никеля, меди, германия при глубоких (до $300\ \text{K}$) переохлаждениях. В этих опытах наблюдались скорости роста от 2 до 70 м/с и при этом было обнаружено, что для каждого элемента существует критическое переохлаждение $\Delta\overline{T}$. А именно: в окрестности $\Delta T = \Delta\overline{T}$ при малом изменении ΔT происходит резкое изменение скорости $N(\Delta T)$. Например, для никеля $\Delta\overline{T} = 160\ \text{K}$.

Современное состояние проблемы высокоскоростного затвердевания металлических систем изложено в [4]. В данной работе предметом исследования являются кинетические свойства фазовой границы кристаллизации (ФГК) при росте кристалла из однокомпонентного чистого переохлажденного расплава. По мере увеличения переохлаждения усиливается роль локально-неравновесного теплопереноса, поэтому мы применяем здесь релаксационную модель Максвелла [5], учитывающую конечную скорость распространения тепловых возмущений. Различие между докритической $[0 < \Delta T < \Delta\overline{T}]$ и закритической $[\Delta T > \Delta\overline{T}]$ температурными областями состоит в следующем [6]. По отношению к скорости распространения тепловых возмущений в твердой фазе скорость ФГК «сверхзвуковая» в докритической области и «дозвуковая» в закритической области [см. далее формулы (5), (6)]. В настоящей работе изучается плоская двумерная линия роста вершины дендрита при закритическом переохлаждении расплава.

Цели исследования — получить систему уравнений, определяющих скорость и кривизну ФГК, а также дать аналитическое описание неустойчивостей (расщепление вершины, предвестник складки), сопровождающих рост вершины дендрита.

Тепловая модель ФГК

Уравнение двумерной плоской линии роста кристалла возьмем в виде $\tilde{f}(x,\ y,\ t) \equiv x - F(y,\ t) = 0$, где $x,\ y$ — прямоугольные декартовы координаты; t — время. Координатная ось x направлена вдоль оси симметрии дендрита в сторону твердой фазы; y — поперечная координата. Считаем, что ФГК движется справа налево, т.е. в сторону отрицательных значений x. Ортогональный базис $\mathbf{n}$, $\mathbf{s}$ соответствует главной нормали и касательной к линии роста. Единичный вектор главной нормали равен $\mathbf{n} = \mathbf{G}/G$, $\mathbf{G} = \operatorname{grad}\tilde{f}$, $G = |\mathbf{G}|$ и направлен в сторону кристаллической фазы. Вектор $\mathbf{s}$ указывает положительное направление отсчета дуговой координаты от вершины дендрита. Скорость точки на ФГК можно представить в виде

$$\chi = \mathbf{i}_1\chi_1 + \mathbf{i}_2\chi_2 = \mathbf{n}\chi_n + \mathbf{s}\chi_s\,,$$

$$\chi_1 \equiv \dot{x} = dx/dt = F_t + \dot{y}F_y\,,\ \chi_2 \equiv \dot{y} = dy/dt\,, \quad (1)$$

$$\chi_n \equiv N = F_t/G\,,\ \chi_s = (\dot{x}F_y + \dot{y})/G\,,\ G = (1+F_y^2)^{1/2}\,,$$

Шабловский Олег Никифорович, профессор.
Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого,
Беларусь, 246746, г. Гомель, пр. Октября, 48.
E-mail: shablovsky-on@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 20 октября 2013 г.

где $\mathbf{i}_1$, $\mathbf{i}_2$ — орты прямоугольной декартовой системы координат; χ_n, χ_s — нормальная и касательная к линии роста компоненты вектора скорости. Применение независимой переменной в качестве нижнего индекса означает частное дифференцирование по этой переменной: $F_t = \partial F / \partial t$, $F_y = \partial F / \partial y$ и т.д. В частном случае линии роста стационарной формы имеем $\dot{y}(t) \equiv 0$.

Локально-неравновесная модель Максвелла переноса тепла в неподвижной среде состоит из уравнения энергии и уравнения для теплового потока [5]:

$$c\frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{q} = q_\upsilon\,,\ \ \mathbf{q} + \gamma\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -\lambda \operatorname{grad} T\,, \qquad (2)$$

где $T = T(x,\ y,\ t)$ — температура; $\mathbf{q}(q_1,\ q_2)$ — вектор удельного теплового потока; λ — коэффициент теплопроводности; c — объемная теплоемкость; γ — время релаксации теплового потока; $q_\upsilon < 0$ м объемный сток энергии, который моделирует отвод тепла от твердой фазы. Тепловые возмущения распространяются с конечной скоростью $w = (\lambda / c\gamma)^{1/2}$, и это дает возможность рассматривать ФГК как линию сильного разрыва, на которой выполнено динамическое условие совместности — следствие интегрального закона сохранения энергии. Подробный вывод и анализ термодинамически допустимых соотношений на сильном разрыве теплового поля в переохлажденном расплаве изложен в [7—9]. Воспользуемся здесь этими результатами и укажем формулы, которые понадобятся нам в дальнейшем.

ФГК моделируем линией сильного разрыва $x = F(y,\ t)$, на которой выполнен баланс энергии

$$N(u_j - u_*) - Q = (\mathbf{q}\cdot\mathbf{n})_j - (\mathbf{q}\cdot\mathbf{n})_*\,, \qquad (3)$$

$$Q = L[N + \gamma_j(\partial N / \partial t)]\,,$$

где $N < 0$ — скорость перемещения ФГК; L — теплота фазового перехода единицы объема вещества; звездочкой отмечены параметры расплава перед ФГК; индекс j указывает, что значение функции вычислено на правой стороне разрыва, в твердой фазе. Касательная к разрыву компонента вектора теплового потока непрерывна:

$$(\mathbf{q}\cdot\mathbf{s})_j = (\mathbf{q}\cdot\mathbf{s})_*\,. \qquad (4)$$

Термодинамически допустимая ФГК удовлетворяет одной из цепочек неравенств:

$$w_*^2 < D < N^2 < w_j^2\,,\ \Delta T > \Delta\overline{T}\,; \qquad (5)$$

$$w_j^2 < D < N^2 < w_*^2\,,\ 0 < \Delta T < \Delta\overline{T}\,; \qquad (6)$$

$$D = (V_j - V_*) / (u_j - u_*)\,,$$

$$u(T) = \int_0^T c(T)dT\,,$$

$$V = \int_0^T [\lambda(T) / c(T)]dT = \int_0^u w^2(u)du\,,$$

где $u_* = u(T_*)$, $u_j = u(T_j)$ и т.п. Принципиальное значение имеют нелинейные свойства функции состояния системы $V = V(u)$. В работе [6] дана теплофизическая интерпретация экспериментальных зависимостей [1—3] «переохлаждение — скорость роста кристалла» для однокомпонентных систем (никель, медь, германий). Установлено, что для фазового перехода в докритической области наблюдается знакопеременная выпуклость функции $V(u)$, $[(d^2V / du^2)_* > 0,\ (d^2V / du^2)_j < 0]$, и параметры процесса удовлетворяют условиям (6). В закритической области функция состояния обладает знакопостоянной выпуклостью $[(d^2V / du^2)_* > 0,\ (d^2V / du^2)_j > 0]$ по обе стороны ФГК, и термодинамически устойчивый разрыв удовлетворяет условиям (5). Далее мы изучаем рост вершины дендрита именно в закритической области. Чтобы замкнуть систему граничных условий на разрыве (3), (4), возьмем известную кинетическую связь

$$|N| = \mu(T_e - T_j)\,,\ T_e = T_c[1 - (UK / L)]\,. \qquad (7)$$

Здесь μ — кинетический коэффициент; T_e — температура равновесия между твердой и жидкой фазами; T_c — равновесная температура кристаллизации; U — поверхностная энергия границы раздела фаз. Считается, что $K > 0$, если фазовая граница вогнута в сторону кристалла. Расположение векторов $\mathbf{n}$, $\mathbf{s}$, $\mathbf{q}$ характеризуется углами β_*, β_j, которые отсчитываются от оси x так, как показано на рис. 1; $\sin\beta_* = 1/G$. Это означает, что β_j есть угол поворота вектора теплового потока за ФГК. Условия (3), (4) запишем в следующей форме:

$$q_{nj} \equiv q_j \sin(\beta_* - \beta_j) = q_* \sin\beta_* + Q_1\,,$$

$$q_j = |\mathbf{q}_j|\,, (8)$$

$$q_{sj} \equiv q_j \cos(\beta_* - \beta_j) = q_* \cos\beta_*\,,$$

$$Q_1 = N(u_j - u_*) - Q\,, (9)$$

$$0 < T_* < T_j < T_c\,,$$

где $q_{nj} = (\mathbf{q}_j)_n$, $q_{sj} = (\mathbf{q}_j)_s$; нижние индексы n, s относятся к нормальной и касательной компонентам вектора. Для упрощения записи теплофизические параметры расплава и кристалла берем постоянными. Это допущение оправдано тем, что относится к уже сформировавшемуся разрыву. Тогда имеем: $u_j - u_* = c_jT_j - u_0$, $u_0 = c_*T_* - T_c(c_* - c_j)$

, $\Delta T = T_c - T_*$. Баланс энергии на ФГК принимает вид

$$q_{nj} = N(c_j T_j - u_0) - L(N + \gamma_j N_t)\,. \qquad (10)$$

Из (8), (9) следует, что

$$\mathrm{tg}\beta_j = -Q_1\cos\beta_* / (Q_1\sin\beta_* + q_*)\,.$$

Далее будем рассматривать случай, когда расплав находится в однородном пострелаксационном состоянии: $q_* \equiv 0$, $T_* \equiv \mathrm{const}$. Тогда имеем $\mathrm{tg}\beta_j = -\mathrm{ctg}\ \beta_*$, $q_{sj} \equiv 0$, т.е. тепловой поток в твердой фазе направлен вдоль нормали $\mathbf{n}$: $\beta_j = \beta_* + (3\pi/2)$.

При выводе уравнения ФГК в закритической области будем следовать алгоритму, который в математическом отношении аналогичен алгоритму [10], применявшемуся в газодинамической теории ударных волн.

Уравнение ФГК

Уравнения теплопереноса (2), определяющие двумерное плоское нестационарное температурное поле, запишем в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial q_1}{\partial x} = R_2\,,\ R_2 = q_\upsilon - \frac{\partial q_2}{\partial y}\,; \qquad (11)$$

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} + w^2\frac{\partial u}{\partial x} = R_1\,,\ R_1 = -q_1/\gamma\,; \qquad (12)$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} = - \quad \frac{\partial}{\partial y} - \frac{q_2}{\gamma}\,. \qquad (13)$$

Здесь и далее $w^2 \equiv \lambda/(c\gamma) = w_j^2$, $\gamma = \gamma_j$, $\lambda = \lambda_j$, $c = c_j$. Основным объектом нашего внимания являются уравнения (11), (12). Ясно, что они имеют два семейства характеристик $dx/dt = \pm w$; знаки $\pm$ относятся к характеристикам 1-го и 2-го семейства соответственно. Отсюда выводим условия

$$dq_1 \pm w du = R^\pm dt\,,\ R^\pm = R_1 \pm wR_2\,, \qquad (14)$$

которые выполняются в пространстве $(x,\ y,\ t)$ вдоль проходящих через ось y характеристических поверхностей. В записи (14) оператор d/dt есть производная по аргументу t в характеристическом направлении $dx/dt = \pm w$. Для уравнения (13) имеем условие $dq_2 = R_3 dt$, $R_3 = -(q_2/\gamma) - w^2(du/dy)$ вдоль характеристической поверхности $dx/dt = 0$; эти уравнения далее не понадобятся. Важное значение имеют условия симметрии на оси дендрита

$$y = 0\,,\ q_2 = 0\,,\ \partial q_{1j}/\partial y = 0\,,\ \partial T_j/\partial y = 0\,,$$

$$\partial F/\partial y = 0\,,\ \partial N/\partial y = 0\,,$$

потому что они упрощают структуру аналитических выражений вблизи $y = 0$. В окрестности вершины дендрита ограничимся линейным приближением, а именно, считаем, что $\partial F/\partial y$, $\partial N/\partial y$, $\partial T_j/\partial y$, $\partial q_{1j}/\partial y$ и т.п. — величины 1-го порядка малости и пренебрегаем величинами 2-го [например, $(F_y)^2$] и более высокого порядков малости. Тогда $N = F_t$, $q_{nj} = q_{1j}$, а условие (4) непрерывности касательной компоненты вектора $\mathbf{q}$ дает

$$q_{2j} = -q_{1j}F_y\,. \qquad (15)$$

Условие $N^2 < w_j^2$, см. (5), означает, что скорость N определяется взаимодействием ФГК с догоняющими ее тепловыми возмущениями, $0 < (-N) < w_j \equiv w$. Запишем условия (14) в виде конечных разностей на малом отрезке времени $t \in [t_1, t_3]$, (см. рис. 2).

В плоскости $y = 0$ элементарный треугольник $1-2-3$ образован линией ФГК $1-3$ и двумя характеристиками $2-1$ и $2-3$, выпущенными из точки 2, находящейся в окрестности вершины дендрита:

$$t_0 - t_2 = t_2 - t_1\,,\ H = -N(t_3 - t_1) = w(t_3 - t_0)\,,$$

$$(t_3 - t_2)/(t_3 - t_1) = (w - N)/2w < 1\,, \qquad (16)$$

$$(t_2 - t_1)/(t_3 - t_1) = (w + N)/2w < 1\,. \qquad (17)$$

Вдоль характеристики 2-го семейства (линия $2-3$) имеем

$$q_1^{(3)} - q_1^{(2)} - w(u_3 - u_2) = R^-(t_3 - t_2)$$

или, что то же самое:

$$\begin{aligned} &q_1^{(3)} - q_1^{(1)} - w(u_3 - u_1) = \\ &= q_1^{(2)} - q_1^{(1)} - w(u_2 - u_1) + R^-(t_3 - t_2) \end{aligned}, \qquad (18)$$

где $u_1 = u(t_1)$, $q_1^{(1)} = q_1(t_1)$ и т.п. Вдоль характеристики 1-го семейства, т.е. на отрезке $2-1$, имеем:

$$q_1^{(2)} - q_1^{(1)} - w(u_2 - u_1) = R^+(t_2 - t_1)\,.$$

Подставляем это выражение в (18) и получаем разностное соотношение

$$\frac{q_1^{(3)} - q_1^{(1)}}{(t_3 - t_1)} - w\frac{(u_3 - u_1)}{(t_3 - t_1)} =$$
$$= -2w\frac{(u_2 - u_1)}{(t_2 - t_1)}\frac{(t_2 - t_1)}{(t_3 - t_1)} + \frac{(t_2 - t_1)}{(t_3 - t_1)}R^+ + \frac{(t_3 - t_2)}{(t_3 - t_1)}R^-,$$

которое при $(t_3 - t_1) \to 0$ дает дифференциальное уравнение

$$\begin{aligned} &\frac{\partial q_{1j}}{\partial t} - w\frac{\partial u_j}{\partial t} = -(w + N)\left[\frac{\partial u_j}{\partial t} + w\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j\right] + \\ &+ \frac{1}{2w}\Big[(w + N)R^+ + (w - N)R^-\Big]_j\,. \end{aligned} \qquad (19)$$

Здесь учтены формулы (16), (17) и то обстоятельство, что отношение разностей

$(u_2-u_1)/(t_2-t_1)$ вычислено вдоль характеристики $2-1$: после предельного перехода $t_3 \to t_1$ эта дробь дает производную

$$[(du/dt)_{2-1}]_j = [(\partial u/\partial t) + w(\partial u/\partial x)]_j .$$

Для локальной производной по времени выполнено равенство $(\partial u/\partial t)_j = \partial u_j/\partial t = c_j \partial T_j/\partial t$; $T_j(y,\ t) = T(x=F,\ y,\ t)$, $q_{1j} = q_1(x=F,\ y,\ t)$. Вычисление производных вида $(\partial/\partial x)_j$ на ФГК выполняем на основе уравнений теплопереноса (11) — (13) и, в частности, находим

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j = \\ = [(F_t)^2 - w^2]^{-1}\left[\frac{q_1}{\gamma} + \frac{\partial q_1}{\partial t} + F_t\left(\frac{\partial q_2}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial t} - F_y\frac{\partial q_2}{\partial x} - q_\upsilon\right)\right]_j . \quad (20)$$

Запись выражений $(\partial q_1/\partial x)_j$, $(\partial q_2/\partial x)_j$ здесь не приводится. В рамках линейного приближения $[G \cong 1,\ K \cong F_{yy},\ N \cong F_t]$ кинетическое соотношение (7) дает формулу для температуры:

$$T_j = T_c - (T_c U/L)F_{yy} + (N/\mu),\ \mu \equiv \mathrm{const} . \quad (21)$$

Применяя (15), (20) и удерживая в (19) лишь члены 1-го порядка малости по отношению к F_y, получаем, что локальный закон распространения ФГК подчиняется уравнению, которое справедливо в окрестности вершины дендрита (вблизи $y=0$):

$$\begin{aligned} &N_t(L + L_* + U_2K) + (N/\gamma)(L_* + U_2K) - \\ &-(cN^2/\gamma\mu) - (3cNN_t/\mu) + \\ &+ L\gamma N_{tt} + 2U_2NK_t + N(q_\upsilon + q_{nj}K) = 0 \end{aligned} , \quad (22)$$

$$K_t = N_{yy} , \quad (23)$$

где $N = F_t$, $K = F_{yy}$,

$$q_{nj} = N[(cN/\mu) - U_2K - L_*] - L\gamma N_t ,\ U_2 = cT_cU_1 ,$$

$$U_1 = U/L ,\ L_* = L - c_*\Delta T .$$

В этой записи учтены формулы (10) и (21). Для объемного стока энергии $q_{\upsilon j}$ примем условие

$$dq_{\upsilon j}(y,\ t)/dt \equiv (\partial q_{\upsilon j}/\partial t) + \dot{y}(\partial q_{\upsilon j}/\partial y) = 0 ,$$

которое означает, что вдоль линии роста функция $q_{\upsilon j}(y,\ t)$ сохраняет фиксированное (постоянное) значение. Далее будем рассматривать фазовые границы, для которых поперечная скорость $\dot{y}$ — малая величина 1-го порядка. Тогда, учитывая условие симметрии $(\partial q_{\upsilon j}/\partial y)_{y=0} = 0$, получаем, что в окрестности вершины сток энергии является стационарным и постоянным: $q_{\upsilon j} \equiv \mathrm{const}$, $t \ge 0$. Касательная к линии роста компонента скорости χ_s, см. (1), имеет 1-й порядок малости.

Форма записи (22), (23) представляет собой систему двух дифференциальных уравнений для неизвестных функций $K(y,\ t)$, $N(y,\ t)$. Очевидно, что (22) можно рассматривать как уравнение 3-го порядка для неизвестной функции $F(y,\ t)$.

Фазовая граница стационарной формы

Уравнение (22) имеет точное решение

$$F_0(y,\ t) = N_0t + (K_0y^2/2) , \quad (24)$$

$$\begin{aligned} &(K_0N_0^2c/\mu) - N_0[K_0L_1 + \\ &+(c/\gamma\mu)] + (L_1/\gamma) + q_\upsilon = 0 \end{aligned} , \quad (25)$$

$$L_1 = L_* + K_0U_2 ;\ N_0 < 0 ,$$

$$K_0 > 0 ;\ K_0,\ N_0 - \mathrm{const} .$$

Алгебраическому уравнению (25) удовлетворяет только один физически содержательный корень $N_0 < 0$, который существует при условии, что $(L_1/\gamma) + q_\upsilon < 0$. Точное решение (24) определяет ФГК стационарной формы, перемещающуюся с постоянной скоростью. При фиксированном переохлаждении расплава ΔT, т.е. при фиксированных $\gamma,\ \mu$, формула (25) представляет собой связь между тремя параметрами: скоростью N_0, кривизной K_0 и стоком энергии $q_\upsilon < 0$. Функция $q_\upsilon(K_0, N_0)$ в (25) ─ монотонная по своим аргументам: $\partial|q_\upsilon|/\partial K_0 > 0$, $\partial|q_\upsilon|/\partial|N_0| > 0$.

Объемный сток энергии и толщина теплового слоя

Рассмотрим качественную картину отвода тепла от твердой фазы во внешнюю среду при $\partial N/\partial t \equiv 0$. Одномерные $[\partial/\partial y \equiv 0;\ q_1 \equiv q,\ q_2 \equiv 0]$ уравнения теплопереноса (11), (12) представим в виде

$$q - \gamma N_0\dot{q} = -\lambda\dot{T} ,\ \dot{q} - cN_0\dot{T} = q_\upsilon ,$$

где $T = T(z)$, $q = q(z)$, $z = x - N_0t$, $\dot{T} = dT/dz$, $\dot{q} = dq/dz$. Линия $z=0$ есть образ ФГК $x_j = N_0t$. Эти уравнения определяют теплоперенос в малой правой окрестности линии роста, $z \in [0,\ \delta]$. На толщине δ теплового слоя происходит основная часть резкого уменьшения $q_j = q(z=0) > 0$ до значения $q_\delta = \varepsilon q_j$, $0 < \varepsilon << 1$, где q_δ ─ тепловой поток на правой границе твердой фазы. Состояние теплового слоя определяется локальным по z решением $T(z) = T \equiv \mathrm{const}$, для которого $q_\upsilon = \dot{q}_j/(\gamma N) < 0$, $\dot{q}(z=0) = q_\upsilon$. С помощью этих формул строим ряд Тейлора в окрестности $z=0: q(z) = = q_j + \dot{q}(z=0)z + \mathrm{o}(z^2)$ и отсюда находим $q(z=\delta) \equiv q_j[1 + (\delta/\gamma N_0)] = q_\delta$.Значит, $\delta = (1-\varepsilon)\gamma(-N_0)$ Идеализированный вариант $q_\delta = 0$ дает оценку сверху: $\delta = -\gamma N_0$. Такой же результат получается с помощью решения (24), (25) при $K_0 = 0$.

Для проведения оценочных расчетов применяем числовые значения $\gamma,\ \mu$, полученные в [6, 11] при теплофизической интерпретации экспериментов [1–3] с никелем, медью и германием. Приведем два примера для чистого никеля при $c_* = c_j = c =$ 5,77·10^6 Дж/ (м^3 ·град); λ = 69 Вт/(м·град); U = 0,35 Дж/м^2; L = 2,14·10^9 Дж/м^3.

Пример 1: $\Delta T = 198{,}2$ К; γ = 0,65 ·10^{-7}с; μ = 11,65 м/ (град·с); $|N_0|$ = 6 м/с; δ = 0,39·10^{-6}м.

Пример 2: $\Delta T = 290$ К; γ = 0,914 ·10^{-7}с; μ = 189,7 м/ (град·с); $|N_0|$ = 7,8 м/с; δ = 0,713·10^{-6}м.

Эти значения теплового слоя имеют порядок $\delta \sim 10\ R_0$, где $R_0 \sim 10^{-7}$ м есть оценка [12] радиуса кривизны вершины дендрита никеля в переохлажденном расплаве.

Малые возмущения линии роста

Проведем линеаризацию уравнения роста (22) на точном решении (24):

$$F(y,\ t) = F_0(y,\ t) + f(y,\ t),\ t \ge 0\ ;$$

$$N(y,\ t) = N_0 + \nu(y,\ t)\ ,$$

$$K(y,\ t) = K_0 + \kappa\ (y,\ t)\ ,$$

$$\nu = f_t\ ,\ \ \kappa = f_{yy}\ ,$$

где $f(y,\ t)$ — малая добавка к основному решению; $\nu(y,\ t)$, $\kappa(y,\ t)$ — малые возмущения скорости и кривизны фазовой границы. Линеаризованное уравнение ФГК (22), определяющее функцию $f(y,\ t)$, имеет вид:

$$(f_{tt} - \alpha_0 f_{yy})_t + \alpha_1 f_t + \alpha_2 f_{tt} = \alpha_3 f_{yy} \qquad (26)$$

$$\alpha_i = s_i / (L\gamma),\ \ i = 0,\ 1,\ 2,\ 3\ ;$$

$$s_0 = -2N_0 U_2\ ,$$

$$s_1 = (2K_0 N_0^2 c / \mu) - (cN_0 / \gamma\mu) - K_0 N_0 L_* - K_0^2 N_0 U_2\ ,$$

$$s_2 = L + L_* + K_0 U_2 - (3cN_0 / \mu) - K_0 N_0 L\gamma\ ,$$

$$s_3 = 2K_0 N_0^2 U_2 + N_0^2 L_* - (N_0 U_2 / \gamma) - (cN_0^3 / \mu)\ .$$

Числовые расчеты показывают, что в экспериментальных точках [1–3] эти коэффициенты удовлетворяют неравенствам $\alpha_3 > \alpha_0\alpha_2,\ \alpha_2^2 > 4\alpha_1$.

Запишем (26) в виде обыкновенного дифференциального уравнения для функции $\kappa(y,\ t)$:

$$\kappa_t + (\alpha_3 / \alpha_0)\kappa = \alpha_0^{-1}(f_{tt} + \alpha_1 f + \alpha_2 f_t)_t\ .$$

Координата y входит сюда как параметр. В результате интегрирования имеем

$$\alpha_0\kappa = \nu_t + \alpha_4\nu + \alpha_5 f - (\alpha_3\alpha_5 / \alpha_0)J\ , \qquad (27)$$

$$\alpha_4 = \alpha_2 - (\alpha_3 / \alpha_0),\ \ \alpha_5 = \alpha_1 - (\alpha_2\alpha_3 / \alpha_0) + (\alpha_3 / \alpha_0)^2\ ,$$

$$J(y,\ t) = E^{-1}\int_0^t Ef(y,\ t)dt\ ,\ \ E = \exp(t\alpha_3 / \alpha_0)\ .$$

Выражение (27) представляет собой первый интеграл уравнения (26) и говорит о том, что возмущение кривизны есть суперпозиция возмущений скорости ν, ускорения ν_t, а также возмущения f самой линии роста и его интегрального представления J. Важность корреляции «возмущение скорости — возмущение кривизны» хорошо видна также из следующей формы записи уравнения (26):

$$\nu_{tt} + \alpha_2\nu_t + \alpha_1\nu = \alpha_3\kappa + \alpha_0\kappa_t\ ,$$

где $\alpha_2^2 > 4\alpha_1$, y — параметр. Ясно, что для этого уравнения имеем самый простой вариант решения, когда отсутствует возмущение кривизны $[\kappa = f_{yy} \equiv 0]$, а возмущение скорости удовлетворяет однородному уравнению затухающих колебаний. В этом случае для линии роста стационарной формы ($K = K_0 \equiv \mathrm{const}$) существует только апериодический устойчивый во времени режим движения: $N = N_0 + \nu(y,\ t);\ \ \nu \to 0,\ \ t \to \infty$.

Заключение

В первой части статьи изложен аналитический способ изучения кинетики роста вершины дендрита в закритической области переохлаждения однокомпонентного чистого расплава. В рамках теории локально-неравновесного теплопереноса дан вывод уравнения ФГК и получено его точное решение стационарной формы. Установлено, что возмущение кривизны обусловлено не только возмущениями скорости и ускорения: оно зависит также от возмущения самой линии роста и его интегрального представления, см. (27). Далее, во второй части статьи, мы рассмотрим основные варианты возмущений линии роста, которые удовлетворяют уравнению (26) и дают возможность судить о морфологической устойчивости / неустойчивости ФГК.

Литература

1. *Herlach D.M.* // Materials Science and Engineering. 1994. A 179/A180. P. 147.

2. *Battersby S.E., Cochrane R.F., Mullis A.M.* // J. Materials Science. 1999. V. 34. P. 2049.

3. *Battersby S.E., Cochrane R.F., Mullis A.M.* // J. Materials Science. 2000. V. 35. P. 1365.

4. *Herlach D.M., Galenko P., Holland-Moritz D.* Metastable Solids from Undercooled Melts.— Germany, Elsevier, 2007.

5. *Жоу Д., Касас–Баскес Х., Лебон Дж.* Расширенная необратимая термодинамика. М.— Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006.
6. *Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.* // Расплавы. 2005. № 4. С. 69.
7. *Шабловский О.Н.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2002. № 2. С. 49.
8. *Шабловский О.Н.* Релаксационный теплоперенос в нелинейных средах.— Гомель: Изд-во ГГТУ, 2003.
9. *Шабловский О.Н.* // Прикладная физика. 2007. № 3. С. 29.
10. *Лунев В.В.* // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 2000. № 3. С. 159.
11. *Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.* // Материалы. Технологии. Инструменты. 2007. Т. 12. № 1. С. 5.
12. *Bassler B.T., Hofmeister W.H., Bayuzick R.J.* // Materials Science and Engineering. 2003. A 342. P. 80.

Kinetics of dendrite tip growth in the supercooled melt
Part I. The equation of a crystallization phase boundary

O.N. Shablovsky

The equation of a crystallization phase boundary has been obtained at research of kinetics of dendrite tip growth in the supercooled melt.

PACS: 64.70.Dv
Keywords: crystallization, heat transmission,; thermal instability, curvature, phase boundary.

Bibliography — 12 references *Received October 20, 2013*