

ЭВОЛЮЦИЯ И РАЗРУШЕНИЕ ЛИНИИ РОСТА КРИСТАЛЛА В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ

О.Н. Шабловский

Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, г. Гомель,
Республика Беларусь
E-mail: shablovsky-on@yandex.by

Аннотация. Изучена макроскопическая форма линии роста кристалла в переохлажденном расплаве чистого вещества. Центральным пунктом проведенного анализа является учет пространственной неоднородности переохлаждения на фазовой границе кристаллизации. Показано, что существует пороговое значение параметра неоднородности, и этому порогу соответствует периодическая по поперечной направлению роста координате ячеистая структура фронта кристаллизации. Отношение периода структуры к радиусу кривизны отдельной ячейки равно числу π . По обе стороны порога вершина линии роста имеет клиновидную форму, а при переходе через порог наблюдаются бифуркативные ситуации, обусловленные тем, что ячейки являются промежуточной структурой между плоским фронтом и дендритами. Анализ выполнен для случая, когда малой величиной первого порядка малости является угол между нормалью и осью симметрии линии роста. В рамках такого приближения уравнение роста имеет вид уравнения Бюргера. Известным в литературе точным решением этого уравнения дана новая физическая интерпретация, позволившая рассмотреть следующие процессы: волна возмущения, вызванного разрывом кривизны; волна разрушения – предвестник расщепления вершины; излом – сильный разрыв угла заострения; опрокидывание линии роста – предвестник втягивания внутрь носика вершины. Выполнен сопоставительный анализ устойчивого и неустойчивого изломов линии роста. Обнаружено, что различия между затуплением вершины за изломом и опрокидыванием обусловлены именно направлением перехода через пороговое значение параметра неоднородности. Даны примеры расчетов, иллюстрирующие свойства скорости волн возмущения и разрушения.

Ключевые слова: высокоскоростная кристаллизация; ячеистая структура; форма дендрита; расщепление вершины; морфологическая неустойчивость.

Введение. В задаче о росте кристалла из однокомпонентного чистого переохлажденного расплава важное место занимают вопросы о свойствах ячеистой и дендритной структур и о форме вершины дендрита [1–3]. В данной работе рассматривается макроскопическая форма линии роста кристалла и основное внимание обращено на морфологическую устойчивость/неустойчивость ее вершины. Известно [1–3], что ячейки являются промежуточной структурой между плоским фронтом и дендритами. Это обстоятельство существенно при изучении закономерностей формирования и разрушения линии роста. Дендритный режим наблюдается при достаточно больших переохлаждениях ΔT : например, для никеля при $\Delta T > 57$ К. Боковые ветви дендрита инициируются возмущениями кривизны фазовой границы кристаллизации (ФГК): изломами, изгибами и складками на поверхности роста [1–6].

Эти фундаментальные задачи служат теоретической основой при разработке современных технологий кристаллизации веществ в неравновесных условиях [7, 8]. При больших переохлаждениях расплава тепловые процессы в твердой фазе обладают отчетливо выраженными локально-неравновесными свойствами, поэтому применяем модель Максвелла [9], учитывающую релаксацию теплового потока:

$$\mathbf{q} + \gamma(\partial\mathbf{q}/\partial t) = -\lambda\text{grad } T.$$

Уравнение энергии имеет вид

$$c(\partial T/\partial t) + \text{div } \mathbf{q} = 0.$$

Здесь T – температура; \mathbf{q} – вектор удельного теплового потока; $c = \rho c_p$ – объемная теплоемкость; ρ – плотность; t – время; γ – время релаксации теплового потока. Далее рассматриваем двухмерную задачу на плоскости декартовых координат (x, y) . Моделируем ФГК линией сильного разрыва теплового поля. Применяем известный алгоритм [10] и выводим динамическое условие совместности на этом разрыве как следствие интегрального закона сохранения энергии. Отличительная черта изучаемых решений – учет пространственной неоднородности переохлаждения на фронте кристаллизации. Детальный анализ этого подхода к исследованию свойств линии роста представлен в [11, 12].

Цель настоящей работы – определить закономерности влияния конечного возмущения кривизны на устойчивость/неустойчивость линии роста в окрестности ее вершины.

Уравнение роста. Двухмерная фазовая граница (линия сильного разрыва) $x - F(y, t) = 0$ перемещается со скоростью N справа налево: $N = N\mathbf{n}$, $N < 0$ (рис. 1). Координатная ось x направлена вдоль оси симметрии в сторону твердой фазы; y – поперечная декартова координата. Внутренняя нормаль \mathbf{n} границы образует угол θ с осью x : $\cos\theta = 1/G$, $G = (1 + (\partial F/\partial y)^2)^{1/2}$. Отсчет угла θ выполняется от \mathbf{n} в сторону оси x . Угол $\theta_1 = (\pi/2) - \theta$ характеризует заострение линии роста и отсчитывается от оси x тоже против хода часовой стрелки (см. рис. 1). Возрастание/убывание с течением времени угла θ_1 относится к режимам затупления/заострения линии роста.

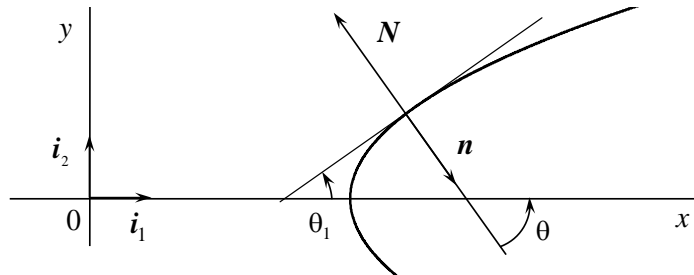


Рис. 1. Геометрические параметры линии роста

Замкнутая система трех граничных условий на фронте кристаллизации имеет следующий вид. Баланс энергии:

$$q_j = N(c_j T_j - c_* T_*) + NT_c(c_* - c_j) - Q, \quad Q = L \left(N + \gamma_j \frac{\partial N}{\partial t} \right), \quad (1)$$

где звездочкой отмечены параметры расплава, который находится в однородном отрелаксированном тепловом состоянии: $q_* \equiv 0$, $T_* \equiv \text{const}$; индекс j относится к функциям, вычисленным на правой стороне сильного разрыва, в твердой фазе; q_j – нормальная к границе составляющая вектора теплового потока; T_j – температура кристалла; T_c – равновесная температура кристаллизации; L – теплота фазового перехода единицы объема вещества. Теплофизические свойства расплава и кристалла считаем постоянными по обе стороны сформировавшегося сильного разрыва.

Кинетическое соотношение

$$|N| = \mu(T_e - T_j), \quad T_e = T_c [1 - (UK/L)] \quad (2)$$

определяет нормальный механизм роста из расплава. Здесь μ – кинетический коэффициент роста; U – поверхностная энергия границы раздела фаз; T_e – температура равновесия между твердой и жидкой фазами; средняя кривизна границы равна $K = (\partial^2 F/\partial y^2)/G^3$.

Зависимость переохлаждения ФГК от угловой координаты θ постулируем в виде

$$T_c - T_j = (\cos\theta)^\delta B, \quad B, \delta - \text{const}, \quad (3)$$

который обусловлен отклонением температуры кристалла T_j от равновесного значения T_c . Здесь $B = T_c - T_j(\theta = 0) > 0$; положительный параметр δ характеризует пространственную неоднородность переохлаждения $T_c - T_j$. Существенно, что правая часть выражения (3) неявным образом зависит от кривизны $K = \partial\theta/\partial s$, где s – дуговая координата, которая отсчитывается от вершины вдоль линии роста. Дополнительные сведения, относящиеся к анализу формулы (3), имеются в

[11]. Выражения (1)–(3) составляют замкнутую систему уравнений для трех неизвестных функций N , T_j , q_j . Уравнение роста, определяющее зависимость $F = F(y, t)$, получаем из (2), (3) с учетом формулы $N = (\partial F / \partial t) G^{-1} < 0$:

$$\varphi \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial^2 F / \partial y^2}{1 + (\partial F / \partial y)^2} - \alpha B \left[1 + \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right)^2 \right]^{(1-\delta)/2}. \quad (4)$$

$$\alpha = L / (UT_c), \quad \varphi = \alpha / \mu.$$

Безразмерные и размерные уравнения записываем в одинаковой форме, взяв следующее соответствие между безразмерными и размерными величинами: $x \rightarrow (x/x_b)$, $y \rightarrow (y/y_b)$, $T \rightarrow (T/T_b)$, $\mu B \rightarrow (\mu B)/|N_b|$, $B \rightarrow (B/T_b)$, $\varphi \rightarrow \varphi y_b |N_b|$, $\alpha \rightarrow \alpha y_b T_b$, $x_b = y_b = |N_b| t_b$. Нижним индексом b отмечены масштабы величин, применяемые при обезразмеривании; $|N_b|$ – масштаб модуля скорости ФГК.

Ясно, что $\partial F / \partial y = \operatorname{tg} \theta$, поэтому (4) можно записать в виде

$$\varphi \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial y} - \alpha B [\cos \theta]^{\delta-1}. \quad (5)$$

Модуль скорости перемещения линии роста и ее кривизна выглядят так:

$$-N \equiv N_m = \mu \left[(\cos \theta)^\delta B - \frac{1}{\alpha} \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial y} \right], \quad K = \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}. \quad (6)$$

Ячеистая периодическая структура. Уравнение (4) при $\delta = 1$ имеет точное решение:

$$F(y, t) = A_1 t + A_2(y), \quad A_1 \equiv \operatorname{const} < 0;$$

$$A \equiv \frac{dA_2}{dy} = \operatorname{tg}(y' + \pi n_0), \quad y' = y \varphi (\mu B + A_1);$$

$$A_2(y) = \left[\varphi (\mu B + A_1) \right]^{-1} \ln |\cos(y' + \pi n_0)|^{-1}; \quad n_0 = 0, 1, 2, \dots$$

$$0 < (-A_1) < \mu B; \quad N(\theta) = A_1 \cos \theta.$$

Это решение представляет собой семейство стационарных контуров, расположенных на интервалах вида: $n_0 = 0$, $y' \in (-\pi/2, \pi/2)$; $n_0 = 1$, $y' \in (\pi/2, 3\pi/2)$ и т. д. Вершины этих контуров ($A = 0$, $A_2 = 0$) находятся в точках $y' = \pi n_0$, а сами контуры смыкаются друг с другом при $x \rightarrow \infty$ (рис. 2). Каждая ячейка такой периодической структуры имеет конечные размеры по отношению к координате y . А именно: период y_c структуры равен

$$y_c = \pi / K(\theta = 0), \quad (7)$$

где $K(\theta = 0) = \varphi [\mu B + N(\theta = 0)]$ есть кривизна вершины отдельной ячейки.

Дальнейшее рассмотрение уравнения роста (5) – это построение и анализ его решений в конечных левой и правой окрестностях значения $\delta = 1$. Будут даны примеры бифуркативных ситуаций, относящихся к переходу через порог $\delta = 1$. Полученные аналитические результаты показывают, что по обе стороны этого порога вершина линии роста имеет клиновидную форму: $y = 0$, $\theta > 0$, $\partial \theta / \partial y > 0$. Вместе с тем заострение исходной клиновидной вершины ассоциируется с начальной стадией перехода к игольчатой форме дендрита; затупление означает переход к плоско-фронт.

Уравнение Бюргера. Продифференцировав обе части уравнения (5) по y , получаем дифференциальное следствие уравнения роста:

$$\varphi \frac{\partial \theta}{\partial t} = \cos^2 \theta \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \alpha B (\delta - 1) (\cos \theta)^\delta \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}. \quad (8)$$

Для достаточно малых углов θ , а именно: при $\theta \in [0, \theta_\varepsilon)$, где θ_ε – малая величина первого порядка малости, считаем приближенно $\cos^2 \theta \cong 1$, $\sin \theta \cong \theta$. Например, для углов $\theta = \pi/180$; $\pi/90$; $\pi/60$ имеем соответственно $1 - \cos^2 \theta \cong 0,3046 \cdot 10^{-3}$; $1,2179 \cdot 10^{-3}$; $2,7390 \cdot 10^{-3}$; $1 - (\sin \theta / \theta) \cong 0,5074 \cdot 10^{-4}$; $2,0306 \times 10^{-4}$; $4,5685 \times 10^{-4}$. Следовательно, в малой окрестности $\theta = 0$ уравнение (8) имеет вид уравнения Бюргера

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{\varphi} \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \beta \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}, \quad \beta = \mu B(\delta - 1). \quad (9)$$

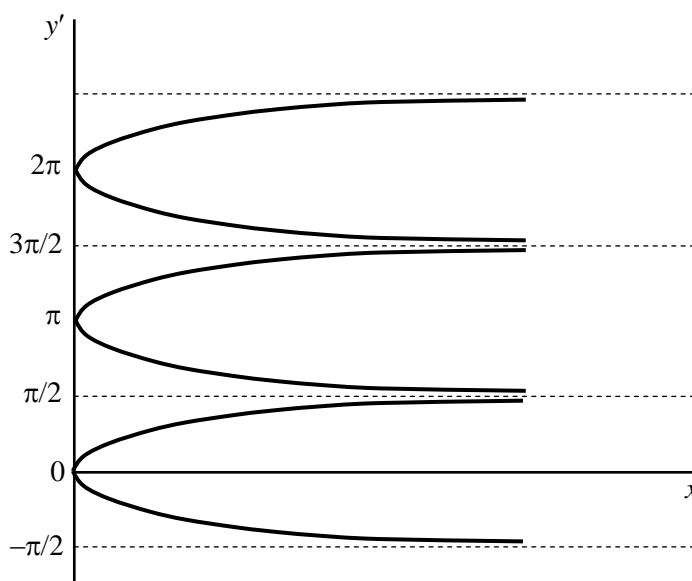


Рис. 2. Ячеистая ($\delta = 1$) периодическая структура фронта кристаллизации

Далее рассматриваем значения $\delta \in (0, 2]$. Интересный в физическом отношении случай $\delta = 3$ (изолированный дендрит игольчатой формы) был изучен в [11, 12] на основе уравнения (4). На рис. 3 показано влияние параметра δ на качественные свойства переохлаждения $T_c - T_j$. Если $\delta = 1$, то (9) выглядит как обычное уравнение теплопроводности. По обе стороны порогового значения $\delta = 1$, т. е. при $\beta < 0$ и $\beta > 0$ конвективный член уравнения Бюргера имеет разные знаки. Следовательно, если мы имеем решение $\theta = \theta(y, t)$ при $\beta > 0$, то формальная замена $\theta \rightarrow (-\theta)$ дает решение уравнения (9) при $\beta < 0$. Вопрос о физическом истолковании этих решений должен быть предметом отдельного анализа. Дело в том, что не для каждого точного решения существует нужное нам физическое содержание. В дальнейшем будем применять следующие варианты записи уравнения (9):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = h \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \theta \frac{\partial \theta}{\partial y}, \quad h = 1/(\beta \varphi), \quad t' = \beta t, \quad \beta \neq 0; \quad (10)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2} + \theta \frac{\partial \theta}{\partial \bar{y}}, \quad \bar{y} = \beta \varphi y, \quad \bar{t} = \beta^2 \varphi t, \quad \beta \neq 0. \quad (11)$$

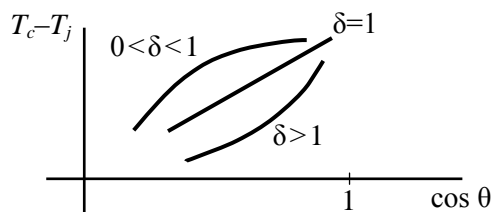


Рис. 3. Качественная зависимость переохлаждения $T_c - T_j$ от параметра неоднородности δ

Для $\beta < 0$ удобно записывать $\theta = -\Phi$ посредством решения уравнения

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{y}^2} + \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{y}}, \quad \bar{y} = -\beta \varphi y, \quad \bar{t} = \beta^2 \varphi t. \quad (12)$$

Согласно (6) имеют физический смысл ($N_m > 0, K > 0$) решения $\theta = \theta(y, t)$, удовлетворяющие неравенствам

$$0 \leq \theta < \theta_\varepsilon, \quad 0 < (\partial\theta/\partial y) < \alpha B (\cos\theta)^{\delta-1}.$$

Уравнение (9) можно рассматривать как следствие интегрального закона сохранения [13]

$$\int_C \theta dy + \left(\beta \frac{\theta^2}{2} + \frac{1}{\varphi} \frac{\partial\theta}{\partial y} \right) dt = 0, \quad (13)$$

где C – произвольный замкнутый контур, ограничивающий область переменных (y, t) . На основе (13) выводим динамическое условие совместности на сильном разрыве $y = y_j(t)$, который перемещается со скоростью $D = dy_j/dt$:

$$D\{\theta\} + \left\{ \frac{1}{\varphi} \frac{\partial\theta}{\partial y} + \beta \frac{\theta^2}{2} \right\} = 0. \quad (14)$$

Здесь фигурные скобки – символ скачка функции при переходе через разрыв. В условии (14) допускаются ненулевые скачки $\{\delta\} \neq 0$, $\{B\} \neq 0$, т. е. $\{\beta\} \neq 0$, а для упрощения формул естественно принять $\{\mu\} = 0$. Пример развернутой записи: $\{\theta\} = \theta_j^{(2)} - \theta_j^{(1)}$, $\theta_j = \theta(y_j, t)$; $\{\beta\} = \beta_2 - \beta_1$ и т. д., где индексы «1» и «2» относятся к состояниям линии роста перед и за скачком $y = y_j(t)$ соответственно. Ясно, что сильный разрыв $\{\theta\} \neq 0$ представляет собой излом линии роста. Если $\{\theta\} = 0$, то (14) дает непрерывную первую производную $\{\partial\theta/\partial y\} = 0$ при любом конечном D .

На разрыве (14) должен быть выполнен закон возрастания энтропии $\{S\} > 0$, где

$$S = \int_0^T (c_p/T) dT, \quad \{c_p\} = 0.$$

Условие $\{S\} = c_p \ln(T_j^{(2)}/T_j^{(1)}) > 0$ дает неравенство $T_j^{(2)} > T_j^{(1)} > 0$, которое с учетом (3) приводит к оценке термодинамически допустимых значений параметров задачи:

$$0 < B_2 (\cos\theta_j^{(2)})^{\delta_2} < B_1 (\cos\theta_j^{(1)})^{\delta_1}. \quad (15)$$

Другой самостоятельный объект нашего исследования – волна возмущения $y = y_m(t)$, т. е. слабый разрыв функции $\theta(y, t)$. Здесь терпит разрыв первого рода первая производная по координате $\partial\theta/\partial y$, т. е. имеем разрыв кривизны линии роста, см. (6). Этот слабый разрыв не является следствием (14), его скорость распространения dy_m/dt определяется единственным образом для фиксированного фона $\theta = \theta_p(y)$ перед фронтом волны возмущения.

Во всех последующих задачах будем применять такие обозначения: $\theta_p^0 = \theta_p(y=0)$, $\theta_p^\infty = \theta_p(y \rightarrow \infty)$; $y=0$, $k_p = d\theta_p/dy$; $y=0$, $t=0$, $k_0 = \partial\theta/\partial y$.

Волны возмущения и разрушения. Подстановка Хопфа [14] $\theta = (2h/u)\partial u/\partial y$ сводит уравнение (10) к уравнению теплопроводности

$$\partial u/\partial t' = h(\partial^2 u/\partial y^2). \quad (16)$$

Решение $u = u(y, t')$ не зависит от перемены знака параметра β . Этот знак проявляет себя в итоговом выражении $\theta(y, t')$. Обсудим два примера, основанных на известных элементарных решениях уравнения теплопроводности.

Пусть $u = u_1 + u_2$, $u_i = a_i E_i$, $E_i = \exp(hc_i^2 t' - c_i y)$, $i = 1, 2$; a_i, c_i – произвольные постоянные.

Тогда

$$\theta = -2h(c_1 E_1 + a_{21} c_2 E_2)/(E_1 + a_{21} E_2), \quad a_{21} = a_2/a_1. \quad (17)$$

Примем $\beta > 0$ и получим $\theta > 0$, если $a_{21} > 0$, $c_1 < 0$, $c_2 < 0$. Волна возмущения $y_m = mt'$, $m \equiv \text{const} > 0$ распространяется по неоднородному фону

$$\theta_p(y) = -2h(c_1 E_{1p} + c_2 a_{21} E_{2p})/(E_{1p} + a_{21} E_{2p}),$$

$$E_{ip} = \exp\left[\left(\frac{hc_i^2}{m} - c_i\right)y\right], \quad i = 1, 2; \quad y \geq 0;$$

$$\theta_p^0 = \theta(y=0, t'=0), \theta_p^\infty = \theta(y=0, t' \rightarrow \infty) = \theta_\infty.$$

Здесь $\theta_p^\infty = -2hc_1 = \theta_\infty$, если $c_1 < c_2 < 0$ либо $\theta_p^\infty = -2hc_2 = \theta_\infty$, если $c_2 < c_1 < 0$. В обоих случаях $0 < \theta_p^0 < \theta_p^\infty = \theta_\infty$, а также $(d\theta_p/dy) \rightarrow 0$ при $y \rightarrow \infty$. На вершине, в точке $y = 0$, имеем в начальный момент времени:

$$y=0, t'=0, k_0 = 2ha_{21}(c_1 - c_2)^2 / (1 + a_{21})^2 ;$$

$$y=0, k_p = k_0 \left[1 - \frac{h}{m}(c_1 + c_2) \right] > k_0.$$

Следовательно, волна возмущения инициируется разрывом кривизны K линии роста. При $t' > 0$ происходит заострение ($\theta_\infty > \theta_p^0$) исходной клиновидной вершины, т. е. уменьшается угол θ_1 , рис. 1. Кривизна на вершине клина $y = +0$ с течением времени уменьшается и стремится к нулю.

Решение (17) содержит произвольные постоянные a_{21}, c_1, c_2, m . Приведем описание последовательности вычислений при $c_1 < c_2 < 0$. Задаем θ_p^0 и $\theta_p^\infty > \theta_p^0$, находим $c_1 = \theta_p^\infty / (-2h)$; применяем вспомогательный параметр $\delta_0 \in (0,1)$ и определяем $k_0 = \delta_0 \theta_p^0 (\theta_p^\infty - \theta_p^0) / (2h)$, а затем выбираем (независимо от $\theta_p^0, \theta_p^\infty$) дробь $(k_p/k_0) > 1$. Теперь подсчитываем $a_{21} = (\theta_p^\infty - \theta_p^0) / (\theta_p^0 \delta_0)$,

$$c_2 = \left[\theta_p^\infty - (1 + a_{21})\theta_p^0 \right] / (2ha_{21}), \quad 2m = \left[\theta_p^\infty + \theta_p^0(1 - \delta_0) \right] / \left[(k_p/k_0) - 1 \right].$$

Именно разрыв производной $\partial\theta/\partial y$ обеспечивает конечную скорость $m\beta$ волны возмущения. В предельном случае $k_p/k_0 = 1 + 0$ волна уходит на бесконечность $y \rightarrow \infty$ с неограниченно большой скоростью.

Теперь рассмотрим случай, когда в (16) $u = u_1 + u_2$,

$$u_1 = a_1 \exp(hc_1^2 t' + c_1 y) + b_1, \quad u_2 = a_2 \exp(-y\sqrt{\omega/2h}) \cos Y,$$

$$Y = -y\sqrt{\frac{\omega}{2h}} + \omega t' + \frac{\pi}{4}; \quad a_1, b_1, c_1, a_2, \omega - \text{const.}$$

Решение уравнения (10) имеет вид:

$$\theta = 2h \frac{c_{12}E + \sqrt{\frac{\omega}{2h}}(\sin Y - \cos Y)}{E + \cos Y + b_{12} \exp\left(y\sqrt{\frac{\omega}{2h}}\right)}, \quad (18)$$

$$E = \exp\left(hc_1^2 t' + c_1 y + y\sqrt{\frac{\omega}{2h}}\right), \quad a_{21} = a_2/a_1, \quad b_{12} = b_1/a_2, \quad c_{12} = c_1/a_{21}.$$

Волна возмущения $y_m = mt'$, $m = \sqrt{2h\omega} > 0$ распространяется по неоднородному фону

$$\theta_p(y) = 2hc_{12}E_p \left/ \left[E_p + \frac{1}{\sqrt{2}} + b_{12} \exp\left(y\sqrt{\frac{\omega}{2h}}\right) \right] \right., \quad E_p(y) = \exp(yh_{11}), \quad h_{11} = \frac{hc_1^2}{m} + c_1 + \sqrt{\frac{\omega}{2h}}.$$

Условия выполнения неравенств $\theta_p > 0, d\theta_p/dy > 0, y \geq 0$ указаны ниже. Обсудим два интересных варианта решения (18).

Вариант 1 включает в себе следующие связи: $c_1^2 = a_{21} \omega/h, c_0^2 = 2a_{21}$, где $c_1 = c_0 \sqrt{\omega/2h} > 0, a_{21} > 0$. В этом случае в области определения решения $y \in [0, y_m], t' \geq 0$ имеем $\theta(y, t) > 0, \partial\theta/\partial y > 0$ при $c_0 > 3$,

$$b_{12} = \delta_{12} \frac{(c_0/2) + E_0 \sqrt{2}[c_0 + 1 + (c_0^2/2)]}{c_0(E_0 - 1)}, \quad E_0 = \exp(c_0^2 \pi/8),$$

где $\delta_{12} > 1$ – вспомогательный параметр, определяющий выбор b_{12} . Параметры фона такие:

$$\theta_p^0 / \theta_p^\infty = [1 + (1/\sqrt{2}) + b_{12}]^{-1}, \quad \theta_p^\infty = 2m/c_0,$$

$$\frac{k_p}{k_0} = \frac{(1/\sqrt{2})[(c_0^2/2) + c_0 + 1] + b_{12}[(c_0^2/2) + c_0]}{c_0[b_{12} - (1/2) - (b_{12}/\sqrt{2})]} > 1. \quad (19)$$

Выражение k_p через c_0 , b_{12} здесь не приводится: его нетрудно воспроизвести. Порядок расчетов соответствует обратной задаче, а именно: находим k_0 и k_p , при которых существует априорно заданная скорость $m\beta$. Сначала задаем константу $c_0 > 3$ и угол θ_p^∞ , тем самым фиксируя величину $m = c_0\theta_p^\infty/2$. Находим $\omega = m^2/(2h)$; задаем $\delta_{12} > 1$ и вычисляем b_{12} , k_p , $\theta_p^0/\theta_p^\infty$, k_p/k_0 , а также θ_p^0 и k_0 .

В возмущенной области (и, в частности, на вершине $y = 0$) экспонента E быстро подавляет колебания. Вершина клина заостряется: $\theta(y=0, t=0) < \theta(y=0, t \rightarrow \infty)$, и при этом $K(y=0, t \rightarrow \infty) = 0$. Своеобразие данного решения в том, что для каждого фиксированного c_0 дробь k_p/k_0 зависит от $\theta_p^0/\theta_p^\infty$, а именно: $[\partial(k_p/k_0)/\partial(\theta_p^0/\theta_p^\infty)] > 0$. В этом его отличие от решения (17), в котором эти параметры независимы друг от друга и $[\partial(m\beta)/\partial(k_p/k_0)] < 0$. Отметим еще, что при больших $b_{12} \gg 1$ имеем $(k_p/k_0) \cong (c_0 + 2)/(2 - \sqrt{2})$, и тогда для рассматриваемого режима роста скорость $m\beta$ – монотонно возрастающая функция аргумента $(k_p/k_0) > 1$, характеризующего скачок кривизны за волной возмущения. Этот частный пример показывает, что корреляция $(k_p/k_0) \leftrightarrow (\theta_p^0/\theta_p^\infty)$ может влиять существенным образом на свойства скорости волны возмущения.

Вариант 2 решения (18): $c_1 = -m/h$, $a_{21} = -1$. Входные параметры: θ_p^0 , θ_p^∞ , $k_p > 0$. Последующие оценки и формулы расчета такие:

$$\begin{aligned} & \left[1 + (1/\sqrt{2})\right]^{-1} < (\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 1; \quad m = \sqrt{2h\omega}, \\ b_{12} = & \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\theta_p^0}{\theta_p^\infty} - 1 \right] \left[1 - \frac{\theta_p^0}{\theta_p^\infty}\right]^{-1}, \quad \omega = \frac{k_p}{2\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\theta_p^0}{\theta_p^\infty}\right)^{-2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Для дальнейшего важно, что при $b_{12} > 0$ за фронтом слабого разрыва $y_m = mt'$ получаем $\partial\theta/\partial y < 0$, т. е. кривизна K терпит разрыв первого рода, и еще при этом меняет знак «+» → «-». Таким образом, в начальном ($t = 0$) состоянии в точке $y = 0$ имеем предвестник расщепления клиновидной вершины: $k_p > 0$, $k_0 < 0$. В данном случае $|k_0| = k_p [b_{12}(4 - \sqrt{2}) + 1 + 3\sqrt{2}]/\sqrt{2}$. Волна $y_m = mt'$ представляет собой волну разрушения линии роста; ее скорость равна $\beta\sqrt{2h\omega}$. Величину $|k_0|$ можно назвать параметром разрушения. Действительно, если $k_p = 0$, то $|k_0| = 0$, и разрушение отсутствует. Другой предельный случай: если $(\theta_p^0/\theta_p^\infty) = 1 - \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ малое число, то $|k_0| \sim k_p\varepsilon^{-1}$, $m \sim \varepsilon^{-1}\sqrt{k_p}$. Следовательно, при $\varepsilon \rightarrow 0$ неограниченно большие значения $|k_0|$ и m характеризуют начальное ($t = 0$) состояние уже сформировавшегося расщепления клиновидной вершины.

Пример расчета. Для переохлажденного расплава чистого никеля имеем следующие значения теплофизических параметров: $T_c = 1728$ К; $L = 2,14 \cdot 10^9$ Дж/м³; $U = 0,38$ Дж/м². Возьмем $\Delta T = 166$ К; $|N_b| = 5,3$ м/с; $B = 1$ К; $\mu = 9,53$ м/(К с). Обоснование выбора этих числовых значений и необходимые библиографические ссылки приведены в [12]. Такие же входные данные будем применять в последующих иллюстративных расчетах.

Пусть $\delta = 1,5$; $\theta_p^0/\theta_p^\infty = 0,6$. В результате получаем $\varphi = 7,1795 \cdot 10^4$ с/м²; $h = 2,9231 \cdot 10^{-6}$ м; $\beta = 4,765$ м/с; $b_{12} = 0,0607$; $\omega = k_p \times 2,2097$ м⁻¹; $(dy_m/dt) = m\beta = \sqrt{k_p} \times 17,1261 \cdot 10^{-3}$ м/с. Отсюда видно, что если, например, $k_p \sim 10^6$ м⁻¹, то $(dy_m/dt) \sim 17$ м/с.

Перемена знака β и неавтономность. Будем рассматривать процессы роста при $\beta < 0$. Известное точное решение [15, с. 15] уравнения (12) дает выражение

$$-\Phi \equiv \theta = (\bar{y} - a)/(\bar{t} + b)\beta^2 \varphi t, \quad a < 0, b > 0; a, b - \text{const}. \quad (21)$$

Волна возмущения $y_m = -m\beta t$, $m > 0$ распространяется по неоднородному фону

$$\begin{aligned} \theta_p(y) &= m(y - \hat{h}a) / (y + m\hat{h}b), \quad \hat{h} = 1/(-\beta\phi), \\ \theta_p^0 &= -a/b, \quad \theta_p^\infty = m, \quad 0 < (\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 1, \quad k_0 = 1/(b\hat{h}), \\ (k_p/k_0) &= 1 - (\theta_p^0/\theta_p^\infty) > 0. \end{aligned}$$

Порядок расчетов соответствует обратной задаче: фиксируем $m = \theta_p^\infty$, т. е. указываем скорость волны ($-m\beta$); задаем θ_p^0 и k_p . Подсчитываем k_p/k_0 и находим k_0 ; теперь определяем $b = 1/(\hat{h}k_0)$ и $a = -b\theta_p^0$. Отличия от режима роста $\beta > 0$, (18), (19) состоят в следующем: 1) $\theta_p^0 = \theta(y=0, t=0) > \theta(y=0, t \rightarrow \infty) = 0$; при $t > 0$ угол θ уменьшается, угол заострения θ_1 растет, т. е. происходит затупление клиновидной вершины дендрита, $K(y=+0, t \rightarrow \infty) = 0$; 2) теперь скачок кривизны подчиняется неравенству $0 < (k_p/k_0) < 1$, и знак производной $\partial(k_p/k_0)/\partial(\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 0$ меняется на противоположный.

Проанализируем неавтономное решение [15, с.16] уравнения (12):

$$-\Phi \equiv \theta = \frac{-m_1}{m_1^2 \bar{t} + a} \left[2 \operatorname{th} \left(\frac{m_1 \hat{y} + b}{m_1^2 \bar{t} + a} \right) - m_1 \hat{y} - b \right], \quad a, b, m_1 - \text{const.} \quad (22)$$

Волна возмущения $y_m = -m_1 m_2 \beta t$, $m_1 > 0$, $m_2 = b/a > 0$ распространяется по неоднородному фону

$$\begin{aligned} \theta_p(y) &= \left[m_1^2 y + m_1 \hat{h} (b - 2 \operatorname{th} m_2) \right] / \left[\hat{h} a + (y m_1 / m_2) \right] > 0, \quad d\theta_p(y)/dy > 0, \\ a &> [(b - 2 \operatorname{th} m_2)/m_2] > 0, \quad \theta_p^\infty = m_1 m_2, \\ \theta_p^0/\theta_p^\infty &= [(b - 2 \operatorname{th} m_2)/b] < 1, \\ k_p &= \frac{(\theta_p^\infty - \theta_p^0)^2}{2 \hat{h} m_2 \operatorname{th} m_2}, \quad k_p/k_0 = \left[\frac{\theta_p^\infty}{\theta_p^\infty - \theta_p^0} - m_2^1 \right]^{-1}, \\ 0 &< (k_p/k_0) < \infty, \quad m_2^1 = 2 m_2 / \operatorname{sh} m_2, \quad m_2^1 \in (0, 1). \end{aligned} \quad (23)$$

Для неавтономного решения (22) значение $\theta_p^0/\theta_p^\infty$ является пороговым при выборе m_2 или, что то же самое, при выборе k_p : если

$$(\theta_p^0/\theta_p^\infty) < [m_2^1 / (1 + m_2^1)] < 1,$$

то $k_p/k_0 > 1$; если

$$[m_2^1 / (1 + m_2^1)] < (\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 1,$$

то $0 < (k_p/k_0) < 1$. В обоих случаях $\partial(k_p/k_0)/\partial(\theta_p^0/\theta_p^\infty) < 0$. После формального перехода $m_2 \rightarrow \infty$, $m_2^1 \rightarrow 0$ [для конечных значений b и θ_p^0] дробь k_p/k_0 в (23) имеет вид, полученный при анализе автономного решения (21). Порядок расчета соответствует обратной задаче: фиксируем $m_1 m_2 = \theta_p^\infty$, т. е. указываем скорость волны ($-m_1 m_2 \beta$); задаем θ_p^0 и m_2 ; последовательно находим m_1 , b , a , k_p , k_p/k_0 , k_0 .

Дадим в дополнение к (18), (20) еще один пример волны разрушения. Для $\beta < 0$ уравнение (12) имеет точное решение [15, с. 16]:

$$-\Phi \equiv \theta = -m_1 - 2a \operatorname{th}[a(\hat{y} - m_1 \bar{t}) + b]; \quad a, b, m_1 - \text{const.} \quad (24)$$

Аналог этого решения при $\beta > 0$ описывает волну возмущения, имеющую такие же свойства, как в случае (17). Зависимости (24) соответствует волна $y_m = -m\beta t$, перед фронтом которой располагается неоднородный фон, имеющий положительную кривизну линии роста:

$$\theta_p(y) = m_1 - 2a \operatorname{th} \left[-a\beta \varphi y \left(1 - \frac{m_1}{m} \right) + b \right], \quad y \geq y_m,$$

$$d\theta_p/dy > 0; \quad m_1 > m > 0, \quad a < 0, \quad b > 0; \quad 0 < \operatorname{th} b < (\theta_p^0 / \theta_p^\infty) < 1;$$

$$\theta_p^0 = m_1 - 2a \operatorname{th} b, \quad \theta_p^\infty = m_1 - 2a.$$

Вместе с тем за фронтом волны имеем $\partial\theta/\partial y < 0$, что означает разрушение линии роста, предшествующее расщеплению клиновидной вершины. В начальном ($t = 0$) состоянии предвестник разрушения находится в точке $y = 0$: $k_p > 0$, $k_0 < 0$. Основные формулы:

$$\operatorname{th} b = (1 - b_1)/(1 + b_1),$$

$$b_1 = -\beta \varphi (\theta_p^\infty - \theta_p^0)^2 / (2|k_0|), \quad -2a(1 - \operatorname{th} b) = \theta_p^\infty - \theta_p^0,$$

$$2\varphi_1 = -\beta \varphi \left[(\theta_p^\infty)^2 - (\theta_p^0)^2 \right],$$

$$-\beta \varphi m = |k_0|(\varphi_1 - |k_0|) / \left[(|k_0| + k_p)(\theta_p^\infty - \theta_p^0) \right], \quad (25)$$

$$m_1 = \frac{1}{2}(\theta_p^0 + \theta_p^\infty) - \frac{|k_0|}{(\theta_p^\infty - \theta_p^0)(-\beta)\varphi}.$$

Отметим, что здесь выполнено равенство $k_p/|k_0| = (m_1/m) - 1$. Решение содержит четыре константы a , b , m_1 , m , которым соответствуют четыре входных параметра θ_p^0 , θ_p^∞ , $|k_0|$, k_p , и при этом оказывается, что значения $|k_0|$ располагаются в конечном интервале

$$\varphi_1 \delta_\theta < |k_0| < \varphi_1, \quad (26)$$

$$\delta_\theta = (\theta_p^\infty - \theta_p^0) / (\theta_p^\infty + \theta_p^0), \quad \delta_\theta \in (0,1).$$

Неравенства (26) получены как следствия условий $m_1 > 0$, $0 < \operatorname{th} b < 1$. При фиксированном k_p функция $m = m(|k_0|)$ в (25) немонотонная, имеет максимум при

$$|k_0| = |k_0|_m = -k_p + \sqrt{k_p^2 + \varphi_1 k_p}. \quad (27)$$

Цепочка неравенств (26) будет выполнена для параметра разрушения (27), если $k_p > k_p^1$, $k_p^1 = \left[\varphi_1 \delta_\theta^2 / (1 - 2\delta_\theta) \right] > 0$. Отметим еще, что если $0 < k_p < (\varphi_1/3)$, то $k_p < |k_0|_m$; если $k_p > (\varphi_1/3)$, то $k_p > |k_0|_m$. Для дальнейшего анализа функции (25) и неравенств (26) учтем, что $k_p = |k_0|_m^2 / (\varphi_1 - 2|k_0|_m)$ и будем пользоваться аргументами ε_m , η вместо $|k_0|_m$, $|k_0|$:

$$m_1 = \frac{1}{2}(\theta_p^0 + \theta_p^\infty) \frac{\eta(2 - \eta\varepsilon_m)(1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m + 2\eta(1 - \varepsilon_m)}, \quad (28)$$

$$(2\delta_\theta/\varepsilon_m) < \eta < (2/\varepsilon_m), \quad \delta_\theta \in (0,1), \quad \varepsilon_m \in (0,1), \quad (29)$$

$$|k_0|_m = \varepsilon_m \varphi_1 / 2, \quad |k_0| = \eta |k_0|_m, \quad k_p = \varphi_1 \varepsilon_m^2 / [4(1 - \varepsilon_m)].$$

Здесь $\eta = 1$ соответствует точке максимума (27), а $\varepsilon_m = 1 - 0$ характеризует предельное исходное состояние $k_p \rightarrow \infty$, $|k_0|_m \rightarrow (\varphi_1/2)$, которое остается неподвижным, $m \rightarrow 0$. Если $2\delta_\theta/\varepsilon_m \geq 1$, то $\eta = 1$ не входит в физически содержательную область определения функции (28), т. е. имеем монотонное убывание: $\partial m/\partial \eta < 0$. Если $0 < (2\delta_\theta/\varepsilon_m) < 1$, то функция $m = m(\eta, \varepsilon_m)$ немонотонная по отношению к аргументу η , она имеет максимум $m(\eta = 1) = (\theta_p^0 + \theta_p^\infty)(1 - \varepsilon_m)/2$. Отметим еще, что $\partial m/\partial \varepsilon_m < 0$, т. е. $\partial m/\partial k_p < 0$. Такое поведение $m(\eta, \varepsilon_m)$ отличается от режима разрушения $\beta > 0$, (18), (20), для которого скорость волны пропорциональна $\sqrt{k_p}$ и зависит от $\theta_p^0/\theta_p^\infty$. Кроме того, решение (28) не содержит вырожденный случай $k_p = 0$, $|k_0| = 0$. Качественные различия между режимами разрушения при $\beta > 0$ и $\beta < 0$ дают количественные различия для скорости волны dy_m/dt . Порядок расчетов: задаем θ_p^0 , θ_p^∞ ; находим δ_θ , φ_1 ; задаем ε_m или, что то же самое, k_p ; находим

$|k_0|_m$ и границы интервала (29), в котором располагается η ; выбор η означает выбор параметра разрушения $|k_0|$ и влияет на величину m .

Пример расчета: $\delta = 0,5$; $\theta_p^0 = 1,8 \times 10^{-2}$, $\theta_p^\infty = 3 \times 10^{-2}$; $\delta_\theta = 0,25$; $\varphi_1 = 98,5260$ 1/м; $\varepsilon_m = 0,8$; $|k_0|_m = 39,4104$ 1/м; $k_p = 78,8208$ 1/м; $0,625 < \eta < 2,5$; если $\eta = 1$, то $dy_m/dt = (-m\beta) = 2,2872 \cdot 10^{-2}$ м/с. Для сравнения изменим только один входной параметр: пусть $\varepsilon_m = 0,1$. Тогда $|k_0|_m = 4,9263$ 1/м; $k_p = 0,2737$ 1/м; $5 < \eta < 20$; если $\eta = 6$, то $dy_m/dt = (-m\beta) = 7,9318 \cdot 10^{-2}$ м/с.

Излом линии роста. Уравнение (11) имеет точное решение [14]:

$$\theta = 2b / [1 + a \exp(-b^2 \bar{t} - b\bar{y})]; a, b - \text{const.} \quad (30)$$

Физическое истолкование этого решения при $\beta > 0$ дает такие же результаты, как в случае (17). Примем $\beta < 0$ и рассмотрим сильный разрыв (излом) вида (14), который распространяется по однородному фону $\theta^{(1)} \equiv \text{const}$: $y_j = Dt$, $D = -\beta_2 b_2$, $\beta_1 = \beta_2 = \beta < 0$. Решение $\theta^{(2)}(y, t)$, $y \in [0, y_j]$, $t \geq 0$ дается формулой (30), содержащей константы $b_2 > 0$, $a_2 \in (-1, 0)$. За фронтом излома имеем $\theta_j^{(2)} = 2b_2 / (1 + a_2) > 0$,

$$k_j^{(2)} = (\partial\theta^{(2)} / \partial y)_j = a_2 \beta_2 \varphi(\theta_j^{(2)})^2 / 2,$$

и тогда находим

$$D = -\beta_2 \theta_j^{(2)} \left[\left(\frac{\theta^{(1)}}{\theta_j^{(2)}} \right)^2 - \frac{\theta_\infty^{(2)}}{\theta_j^{(2)}} \right] / \left[2 \left(\frac{\theta^{(1)}}{\theta_j^{(2)}} - 1 \right) \right] > 0, \quad (31)$$

$$\theta_\infty^{(2)} = \theta^{(2)}(y = 0, t \rightarrow \infty) = 2b_2.$$

Соотношения между углами выглядят так: $0 < \theta_\infty^{(2)} < \theta_j^{(2)} < \theta^{(1)}$. На этих неравенствах основан порядок расчетов: задаем угол $\theta^{(1)} > 0$, характеризующий исходный клин перед изломом, а затем выбираем соответствующие этим неравенствам углы $\theta_j^{(2)}$ и $\theta_\infty^{(2)}$; подсчитываем D , см. (31). Теперь остается найти $b_2 = D / (-\beta_2)$ и вычислить $a_2 \in (-1, 0)$, априорно задавая $k_j^{(2)}$ с учетом оценки $0 < 2k_j^{(2)} < (\theta_j^{(2)})^2 (-\beta\varphi)$. Отметим еще, что выпуклость излома обращена вверх, рис. 4, а, и за этим сильным разрывом происходит затупление клиновидной вершины. Предельный случай: $\theta^{(1)} = \theta_j^{(2)} + 0$; излом вырождается в клин, удаляясь на бесконечность с неограниченно большой скоростью. Условие (15) возрастания энтропии будет выполнено при подходящем выборе $\theta_j^{(2)}$, если $B_2 / B_1 = [(\delta_1 - 1) / (\delta_2 - 1)] < 1$, т. е. $0 < \delta_2 < \delta_1 < 1$.

Пример расчета. Пусть $B_1 = 1$ К; $B_2 = 0,9$ К; $\delta_1 = 0,5$; $\delta_2 = 4/9$; $\theta^{(1)} = 3 \cdot 10^{-2}$; $\theta_j^{(2)} = 2 \times 10^{-2}$; $\theta_\infty^{(2)} = 1 \times 10^{-2}$. В результате получаем $D = 0,1906$ м/с.

Для уравнения (11) возьмем точное решение [15, с. 16]:

$$\theta^{(1)} \equiv \theta(\bar{y}, \bar{t}) = -D' + 2a \operatorname{th}[a(\bar{y} - D'\bar{t}) + b], \quad (32)$$

$$a, b, D' - \text{const},$$

и на его основе рассмотрим излом, для которого $\beta = \beta_1 = \beta_2 > 0$, $\theta^{(2)} = \theta_j^{(2)} \equiv \text{const}$, $\partial\theta^{(2)} / \partial y \equiv 0$. Решение (32) определяет состояние линии роста перед сильным разрывом $y_j = D't$, $D = \beta D'$, $y \geq y_j$, $t \geq 0$. Основные формулы:

$$\theta_j^{(1)} = -D' + 2a_1 \operatorname{th} b_1 > 0, \quad \theta_\infty^{(1)} = \theta^{(1)}[(y - y_j) \rightarrow \infty] = -D' + 2a_1 > 0,$$

$$k_j^{(1)} = (\partial\theta^{(1)} / \partial y)_j = a_1 (1 + \operatorname{th} b_1) (\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)}) / h, \quad h = 1 / (\beta\varphi),$$

$$a_1 = \frac{\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)}}{2(1 - \text{th}b)}, \quad \text{th}b = \frac{2k_j^{(1)}h - (\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)})^2}{2k_j^{(1)}h + (\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)})^2}, \quad D' = \frac{k_j^{(1)}h}{\theta^{(2)} - \theta_j^{(1)}} - \frac{1}{2}(\theta^{(2)} + \theta_j^{(1)}). \quad (33)$$

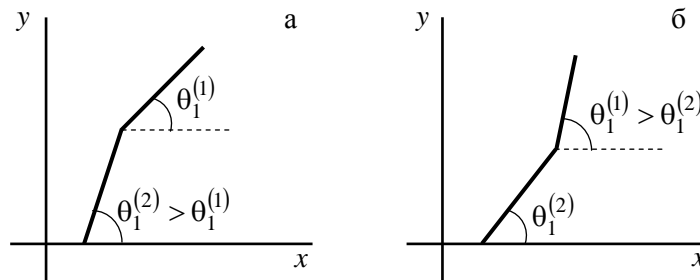


Рис. 4. Схематическое изображение углов заострения слева и справа от излома линии роста. Излом движется слева направо – от вершины на периферию

Входные параметры должны удовлетворять неравенствам: $\theta^{(2)} > \theta_j^{(1)} > 0$, $k_j^{(1)} > \left[(\theta^{(2)})^2 - (\theta_j^{(1)})^2 \right] / (2h)$, и тогда $a_1 > 0$, $0 < \text{th}b < 1$, $D' > 0$. Если $k_j^{(1)}$ не превышает указанное пороговое значение, то излом (33) не существует. Условие (15) возрастания энтропии будет выполнено, если $B_1 = B_2$, $\delta_1 = \delta_2$. Здесь, в отличие от решения $\beta < 0$, (30), (31), излом вогнутый, рис. 4б. С течением времени исходная линия роста трансформируется в клин $\theta = \theta^{(2)} = \theta_\infty^{(1)}$. Предельный случай $\theta^{(2)} = \theta_j^{(1)} + 0$ аналогичен тому, что наблюдался для (31).

Пример расчета. $B_1 = B_2 = 1$ К; $\delta_1 = \delta_2 = 1,5$; $\theta^{(2)} = 3 \cdot 10^{-2}$; $\theta_j^{(1)} = 2 \cdot 10^{-2}$; $D = k_j^{(1)} \times 1,3928 \cdot 10^{-3} - 0,1191$ м/с; $k_j^{(1)} \geq 86$ 1/м.

Теперь рассмотрим излом $y_j = Dt \geq 0$, для которого $\beta_1 > 0$, $\beta_2 < 0$. Состояние линии роста перед сильным разрывом определяется решением (32), $y \geq y_j$ – всем константам, входящим в эту формулу, присваиваем индекс «1». За разрывом применяем точное решение уравнения (12) вида [15, с. 15]:

$$\theta^{(2)} = -b_2 - \frac{2}{\hat{y} + b_2 \bar{t} + a_2}, \quad y \in [0, y_j]. \quad (34)$$

Сюда входят произвольные константы $a_2 < 0$, $b_2 < 0$. Стыковка решений (32) и (34) на линии $y_j = Dt$ выполняется с помощью условия (14). Основные формулы: $D = D'_1 \beta_1 = b_2 \beta_2$;

$$k_j^{(1)} = \left(\frac{\partial \theta^{(1)}}{\partial y} \right)_j = \frac{2a_1^2}{h_1 \text{ch}^2 b_1}, \quad k_j^{(2)} = \left(\frac{\partial \theta^{(2)}}{\partial y} \right)_j = \frac{2}{h_2 a_2^2}, \quad (35)$$

$$h_1 = 1/(\beta_1 \varphi), \quad h_2 = 1/(-\beta_2 \varphi), \quad \theta_\infty^{(1)} = \theta^{(1)}(y \rightarrow \infty, t = 0) = 2a_1 - D'_1, \quad \theta_\infty^{(2)} = \theta^{(2)}(y = 0, t \rightarrow \infty) = -b_2.$$

Порядок расчетов основан на цепочке неравенств: $0 < \theta_j^{(1)} < \theta_\infty^{(1)} < \theta_\infty^{(2)} < \theta_j^{(2)}$. Сначала задаем углы $\theta_j^{(1)}$ и $\theta_\infty^{(1)}$, характеризующие начальное состояние правой части излома. Подсчитываем

$$\theta_\infty^{(2)} = \theta_\infty^{(1)} \left[1 - \left(\sqrt{\beta_2^2 - \beta_1 \beta_2} / \beta_2 \right) \right],$$

определяя тем самым b_2 и скорость $D = b_2 \beta_2$. Тогда $D'_1 = D/\beta_1$,

$2a_1 = D'_1 + \theta_\infty^{(1)}$. Задаем $\theta_j^{(2)}$ и находим a_2, b_1 :

$$2/a_2 = \theta_\infty^{(2)} - \theta_j^{(2)} < 0, \quad 1 - \text{th}b_1 = (\theta_\infty^{(1)} - \theta_j^{(1)}) / (2a_1).$$

Здесь выполнено ограничение $0 < \text{th}b_1 < 1$. Выпуклость излома обращена вниз (рис. 4, б); с течением времени происходит затупление вершины клина. Условие (15) возрастания энтропии выполняется для всех $B_2 \leq B_1$ при подходящем выборе $\theta_j^{(1)}, \theta_\infty^{(1)}$. На основе формул (35) получаем

$$D = \frac{k_j^{(1)}}{\varphi(\theta_\infty^{(1)} - \theta_j^{(1)})} - \frac{\beta_1}{2}(\theta_\infty^{(1)} + \theta_j^{(1)}), \quad k_j^{(2)} = (\theta_j^{(2)} - \theta_\infty^{(2)})^2 / (2h_2).$$

Излом существует ($D > 0$), если $2k_j^{(1)}h_1 > [(\theta_\infty^{(1)})^2 - (\theta_j^{(1)})^2]$.

Приведем два примера. Пусть $B_1 = 1$ К; $B_2 = 0,9$ К. Если $\theta_j^{(1)} = 0,01$; $\theta_\infty^{(1)} = 0,012$; $\delta_1 = 1,5$; $\delta_2 = 0,5$, то допускается излом, для которого $\theta_\infty^{(2)} = 0,0294$; $\theta_j^{(2)} = 0,03$; $D = k_j^{(1)} \times 6,9643 \cdot 10^{-3} - 0,0524$ м/с; $k_j^{(1)} \geq 8$ 1/м; $k_j^{(2)} = 4,904 \cdot 10^{-2}$ 1/м. Если $\theta_j^{(1)} = 0,005$; $\theta_\infty^{(1)} = 0,01$; $\delta_1 = 1,01$; $\delta_2 = 0,9$, то допускается излом $\theta_\infty^{(2)} = 0,0205$; $\theta_j^{(2)} = 0,024$; $D = k_j^{(1)} \times 2,7857 \cdot 10^{-3} - 0,0357$ м/с; $k_j^{(1)} \geq 13$ 1/м; $k_j^{(2)} = 1,8420 \cdot 10^{-4}$ 1/м.

Опрокидывание линии роста. Продолжим работу с решением (32), выполнив инверсию: теперь, в отличие от излома (35), берем $\beta_1 < 0$, $\beta_2 > 0$. Фон перед сильным разрывом $y_j = Dt \geq 0$ однородный: $\theta^{(1)} = \theta_j^{(1)} \equiv \text{const} > 0$, $\partial\theta^{(1)}/\partial y \equiv 0$. Левая часть излома $\theta^{(2)} = \theta^{(2)}(y,t)$, $y \in [0, y_j]$ определяется решением (32): здесь константам a , b , D' присваиваем индекс «2». Основные формулы: $0 < \theta_j^{(2)} < \theta^{(1)}$,

$$\theta^{(2)}(y=0,t) = -D'_2 + 2a_2 \text{th}(b_2 - a_2 \beta_2^2 \varphi D'_2 t), \quad \theta_j^{(2)} = \theta^{(2)}(y=0,t=0) = -D'_2 + 2a_2 \text{th} b_2 > 0; \quad a_2 > 0, \quad b_2 > 0;$$

$$k_j^{(2)} = \left(\frac{\partial\theta^{(2)}}{\partial y} \right)_j = \frac{2a_2^2}{h_2 \text{ch}^2 b_2}, \quad h_2 = 1/(\beta_2 \varphi), \quad D = D'_2 \beta_2,$$

$$D(\theta^{(1)} - \theta_j^{(2)}) = \frac{k_j^{(2)}}{\varphi} + \frac{\beta_2}{2}(\theta_j^{(2)})^2 - \frac{\beta_1}{2}(\theta^{(1)})^2. \quad (36)$$

Своеобразие ситуации в том, что в конечный момент времени $t = t_0 > 0$ имеем $\theta^{(2)}(y=0, t=t_0) = 0$, а при $t > t_0$ начинается опрокидывание линии роста, $\theta^{(2)}(y=0, t > t_0) < 0$. Значит, при $t = t_0$ появляется предвестник втягивания внутрь носика клиновидной вершины:

$$\text{th}(a_2^1 t_0) = \theta_j^{(2)} / (2a_2 - D'_2 \text{th} b_2), \quad a_2^1 = a_2 \beta_2^2 \varphi D'_2.$$

Такой физический смысл данного решения обусловлен двумя обстоятельствами: 1) $\theta^{(1)} > \theta_j^{(2)} > 0$, т. е. в начальном состоянии выпуклость излома обращена вверх; 2) $\beta_2 > 0$, что обеспечивает условие $k_j^{(2)} > 0$. Обращаем внимание на то, что опрокидывание происходит в левой части излома, где угол заострения $\theta_1^{(2)} = (\pi/2) - \theta_j^{(2)}$ больше, чем в правой части, (рис. 4, а). Порядок расчетов: задаем $\theta^{(1)}$, $\theta_j^{(2)}$ и $k_j^{(2)} > 0$; определяем D из (36); находим $D'_2 = D/\beta_2$; для вычисления $a_2 > 0$ и $\text{th} b_2 \in (0,1)$ применяем формулы

$$2a_2^2 = k_j^{(2)} h_2 + [(D'_2 + \theta_j^{(2)})^2 / 2], \quad \text{th} b_2 = (D'_2 + \theta_j^{(2)}) / (2a_2)$$

и подсчитываем $\text{th}(a_2^1 t_0) \in (0,1)$. Чем больше параметр кривизны $k_j^{(2)}$, тем быстрее происходит опрокидывание: $\partial t_0 / \partial(k_j^{(2)}) < 0$. Для фиксированных $\theta^{(1)}$, $\theta_j^{(2)}$, δ_1 , δ_2 всегда существует такое $0 < B_2 < B_1$, что (15) выполнено при $t \in [0, t_0)$. Отметим, что здесь нет порога при выборе $k_j^{(2)} > 0$. Данное решение, содержащее предвестник опрокидывания, можно рассматривать и при $\beta_1 > 0$, $\beta_2 > 0$, но тогда, согласно (36), условие $D > 0$ указывает оценку нижней границы положительных значений $k_j^{(2)}$ – запись не приводится.

Пример расчета: $\theta^{(1)} = 0,03$; $\theta_j^{(2)} = 0,02$; $\delta_1 = 0,9$; $\delta_2 = 1,01$; $B_1 = 1$ К; $B_2 = 0,9$ К; $\beta_1 = -0,953$ м/с; $\beta_2 = 8,537 \cdot 10^{-2}$ м/с; $k_j^{(2)} = 2 \cdot 10^3$ 1/м; $D = 2,83028$ м/с; $a_2 = 16,5142$; $\text{th} b_2 = 0,9997$; $t_0 = 1,928 \cdot 10^{-6}$ с.

Заключение. Для ячеистого ($\beta = 0$) фронта кристаллизации получена корреляция (7) между периодом структуры и радиусом кривизны вершины отдельной ячейки. Значение $\beta = 0$ является пороговым: по обе его стороны наблюдаются различия качественных свойств роста. Волны разрушения различаются характером зависимости скорости волны от кривизны фона: [решение (18), (20); $\beta > 0$, $\partial m / \partial k_p > 0$] \leftrightarrow [решение (24)–(29); $\beta < 0$, $\partial m / \partial k_p < 0$]. Другие различия соотносятся с режимами заострения и затупления вершины. Волна возмущения: [решения (17) и (18), (19); $\beta > 0$, заострение] \leftrightarrow [решение (21); $\beta < 0$, затупление]. Устойчивый излом: [решение (30), (31); $\beta_1 = \beta_2 < 0$, затупление вершины за изломом, (см. рис. 4, а)]; [решение (32); $\beta_1 = \beta_2 > 0$, заострение вершины за изломом, (см. рис. 4, б)]; [решение (32), (34); $\beta_1 > 0$, $\beta_2 < 0$, затупление вершины за изломом]. Таким образом, для устойчивых ситуаций (возмущение, излом) положительно-му/отрицательному значению β соответствует заострение/затупление клиновидной вершины. Неустойчивый излом – режим опрокидывания: [решение (32), (36); $\beta_1 < 0$, $\beta_2 > 0$, опрокидывание за линией излома]. Этот пример в сравнении с устойчивым изломом показывает, что важную роль играет направление перехода, которое характеризуется знаками β перед и за изломом.

Литература

1. Brener, E.A. Pattern Selection in Two-Dimensional Dendritic Growth / E.A. Brener, V.I. Mel'nikov // *Advances in Physics*. – 1991. – Vol. 40, Iss. 1. – P. 53–97.
2. Kurz, W. Progress in Modeling Solidification Microstructures in Metals and Alloys. Part II: Dendrites from 2001 to 2018 / W. Kurz, M. Rappaz, R. Trivedi // *International Materials Reviews*. – 2021. – Vol. 66, Iss. 1. – P. 30–76.
3. Strickland, J. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing – A Review / J. Strickland, B. Nenechev // *Crystals*. – 2020. – Vol. 10, Iss. 7. – P. 627–656.
4. Gurtin, M.E. Interface Evolution in three Dimensions with Curvature-Dependent Energy and Surface Diffusion: Interface-Controlled Evolution, Phase Transitions, Epitaxial Growth of Elastic Films / M.E. Gurtin, M.E. Jabbour // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. – 2002. – Vol. 163. – P. 171–208.
5. Шибков, А.А. Морфологический отбор евклидовых и фрактальных форм неравновесного роста льда в переохлажденной воде / А.А. Шибков, М.А. Желтов, А.Е. Золотов // *Кристаллография*. – 2011. – Т. 56, № 2. – С. 362–366.
6. Glicksman, M.E. Capillary-Mediated Interface Perturbations: Deterministic Pattern Formation / M.E. Glicksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
7. Herlach, D.M. Metastable Solids from Undercooled Melts / D.M. Herlach, P. Galenko, D. Holland-Moritz – Oxford: Pergamon, 2007. – 448 p.
8. Математическая модель образования кристаллических зародышей в переохлажденном расплаве эвтектического сплава / А.Д. Дрозин, М.В. Дудоров, В.Е. Рощин и др. // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2012. – № 11(270), Вып. 6. – С. 66–77.
9. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х Касас-Баскес, Дж. Лебон – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 528 с.
10. Седов, Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. / Л.И. Седов. – М.: Наука, 1973. – 492 с.
11. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двухмерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – № 4. – С. 40–46.
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. Рождественский, Б.Л. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике / Б.Л. Рождественский, Н.Н. Яненко. – М.: Наука, 1968. – 592 с.
14. Уизем, Дж. Линейные и нелинейные волны / Дж. Уизем. – Москва: Мир, 1977. – 622 с.
15. Полянин, А.Д. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики: точные решения / А.Д. Полянин, В.Ф. Зайцев. – М.: Физматлит, 2002. – 431 с.

Поступила в редакцию 17 апреля 2024 г.

Сведения об авторе

Шабловский Олег Никифорович – доктор физико-математических наук, профессор, Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого, г. Гомель, Республика Беларусь, e-mail: shablovsky-on@yandex.by

EVOLUTION AND DESTRUCTION OF THE CRYSTAL GROWTH LINE IN A SUPERCOOLED MELT

O.N. Shablovskii

Pavel Sukhoi State Technical University of Gomel, Republic of Belarus

E-mail: shablovsky-on@yandex.by

Abstract. The paper studies the macroscopic shape of the crystal growth line in a supercooled melt of a pure substance. The analysis focuses on the spatial heterogeneity of supercooling at the crystallization phase boundary. The paper shows that there is a threshold value of the heterogeneity parameter, and this threshold corresponds to the cellular structure of the crystallization front which is periodic along the coordinate transverse to the growth direction. The ratio of the structure period to the curvature radius of an individual cell is equal to π . The tip of the growth line is wedge-shaped on both sides of the threshold. When crossing the threshold, bifurcated situations are observed, since the cells are an intermediate structure between the flat front and the dendrites. The paper analyses the case when the small value of the first order of smallness is the angle between the normal and the symmetry axis of the growth line. Under this approximation, the growth equation has the form of the Burgers equation. A new physical interpretation is given to the exact solutions of this equation known in the literature, which allows considering the following processes: a disturbance wave caused by the curvature rupture; a destruction wave is a precursor of tip splitting; a rupture is a strong discontinuity of the sharpness angle; overturning of the growth line is a precursor to the tip neck introvolution. The paper comprehensively analyses stable and unstable ruptures of the growth line. It reveals that the differences between the blunting of the tip behind the rupture and overturning are explained by the direction of the transition through the threshold value of the heterogeneity parameter. The paper gives calculation examples illustrating the properties of the velocity of disturbance and destruction waves.

Keywords: *rapid solidification; regular cellular array; dendrite shape; dendrite tip splitting; morphological instability.*

References

1. Brener E.A., Mel'nikov V.I. Pattern Selection in Two-Dimensional Dendritic Growth. *Advances in Physics*, 1991, Vol. 40, Iss. 1, pp 53–97. DOI: 10.1080/00018739100101472.
2. Kurz W., Rappaz M., Trivedi R. Progress in Modeling Solidification Microstructures in Metals and Alloys. Part II: Dendrites from 2001 to 2018. *Int. Mater. Rev.*, 2021, Vol. 66, no. 1, pp 30–76. DOI: 10.1080/09506608.2020.1757894.
3. Strickland J., Nenchev B. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing. *A Review. Crystals*, 2020, Vol. 10, Iss. 7, pp 627–656. DOI: 10.3390/cryst10070627.
4. Gurtin, M.E., Jabbour M.E. Interface Evolution in Three Dimensions with Curvature-Dependent Energy and Surface Diffusion: Interface-Controlled Evolution, Phase Transitions, Epitaxial Growth of Elastic Films. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 2002, Vol. 163, pp. 171–208. DOI: 10.1007/s002050200193.
5. Shibkov A.A., Zheltov M.A., Zolotov A.E. Morphological Selection of Euclidean and Fractal Patterns of Nonequilibrium Growth of Ice in Supercooled Water. *Crystallogr. Rep.*, 2011, Vol. 56, pp. 335–338. DOI: 10.1134/S1063774510061161
6. Glicksman M.E. Capillary-Mediated Interface Perturbations: Deterministic Pattern Formation. *J. of Crystal Growth*, 2016, Vol. 450, pp. 119–139. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.03.031
7. Herlach D.M., Galenko P., Holland-Moritz D. *Metastable Solids from Undercooled Melts*. Oxford: Pergamon, 2007, 448 p. DOI: 10.1016/S1470-1804(07)80023-X
8. Drozin A.D., Dudorov M.V., Roshchin V.E., Gamov P.A., Meniches L.D. Mathematical Model of the Formation of Crystalline Nuclei in a Supercooled Melt of a Eutectic Alloy. *Bulletin of SUSU. The series «Mathematics. Mechanics. Physics»*. 2012, no. 11(270), Iss.6, pp. 66–77. (in Russ.)

9. Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G. *Extended Irreversible Thermodynamics*. N.Y.: Springer Science+Business Media Publ., 2001, 463 p. (Russ. ed.: Jou, D., Casas-Vazquez, J., Lebon, G. *Rasshirennaya neobratimaya termodinamika*. Moscow-Izhevsk: Institute for Computer Science; Regular and Chaotic Dynamics Center Publ., 2006. 528 p.).

10. Sedov L.I. *Mekhanika sploshnoy sredy. T. 1.* (Continuum Mechanics. Vol. 1). Moscow, Nauka Publ., 1973. 492 p. (in Russ.).

11. Shablovsky O.N. Morphological Properties of the Growth Line of a Two-Dimensional Dendrite in a Supercooled Melt. *Prikladnaya fizika* (Applied Physics). 2012. no. 4. pp. 40–46. (in Russ.).

12. Shablovsky O.N., Kroll D.G. Dynamics of Instable Wave Perturbations and Lateral Dendrite Branching in an Undercooled Melt. *Advances in Applied Physics*, 2022, no. 2. pp. 189–202. (in Russ.). DOI: 10.51368/2307-4469-2022-10-2-189-202

13. Rozhdestvensky B.L., Yanenko N.N. *Sistemy kvazilineynykh uravneniy i ikh prilozheniya k gazovoy dinamike* (Systems of Quasilinear Equations and Their Applications to Gas Dynamics). Moscow, Nauka Publ., 1968, 592 p. (in Russ.).

14. Whitham G.B. *Linear and Nonlinear Waves*. John Wiley & Sons, London, 1974, 636 p.

15. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. *Spravochnik po nelineynym uravneniyam matematicheskoy fiziki: tochnye resheniya* (Handbook of Nonlinear Equations of Mathematical Physics: Exact Solutions). Moscow, Fizmatlit Publ., 2002, 431 p. (in Russ.).

Received April 17, 2024

Information about the author

Shablovskii Oleg Nikiforovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Pavel Sukhoi State Technical University of Gomel, Republic of Belarus, e-mail: shablovsky-on@yandex.by.