

УДК 548.232.4

## Морфологические свойства линии роста двухмерного дендрита в переохлажденном расплаве

О. Н. Шабловский

*Рассмотрены теплофизические и кинематические аспекты проблемы роста кристалла в однокомпонентном переохлажденном расплаве. Дано аналитическое описание предвестников боковой ветви дендрита в конечной окрестности его вершины. Установлены нетривиальные закономерности поведения острых кромок и точек перегиба на двухмерной плоской линии роста. Изучены экстремальные свойства производства энтропии на фазовой границе кристаллизации в условиях локально-неравновесного теплопереноса.*

PACS: 64.70 Dv

*Ключевые слова:* рост кристалла, переохлажденный расплав, боковая ветвь, производство энтропии.

### Введение

Проблема формирования макроскопических структур при росте кристаллов из первичной жидкости (расплав, раствор) требует исследования морфологической устойчивости и теплопереноса на межфазной границе [1—3]. В настоящее время для изучения эволюции некоторых классов двухмерных фазовых границ кристаллизации (ФГК) применяются численные алгоритмы [4], основанные на кинематической теории роста. При таком подходе основное допущение состоит в том, что теплоперенос характеризуется высокой степенью нестационарности, и скорость роста зависит только от локальной формы ФГК. История этого вопроса, его современное состояние и библиография имеются в [4—6]. Колебания ФГК на вершине дендрита и в ее конечной окрестности, а также образование складок и их связь с боковым ветвлением наблюдались экспериментально при росте из пересыщенного раствора [7], в условиях микрогравитации [8], при росте льда в переохлажденной воде [9, 10].

В данной работе основным объектом нашего внимания являются нестационарные свойства скорости ФГК при росте кристалла из однокомпонентного переохлажденного расплава.

### Математическая модель и постановка задачи

По мере увеличения переохлаждения усиливается роль локально-неравновесного теплопереноса,

поэтому мы применяем здесь релаксационную модель Максвелла [11]:

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

где  $\mathbf{q}$  — вектор удельного теплового потока;  
 $T$  — температура;  
 $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  
 $\gamma$  — время релаксации теплового потока;  
 $t$  — время.

Учет эффекта диффузионной релаксации в задачах дендритной кристаллизации металлов выполнен в [12]. Важным аспектом проблемы роста является производство энтропии  $\sigma$  в локально-неравновесной системе "переохлажденный расплав—кристалл". Вопрос о применении принципов минимума/максимума производства энтропии в задачах кристаллизации изложен в [13]. Некоторые экстремальные свойства производства энтропии в однокомпонентных системах изучены в [14, 15]. В данной работе изучаются морфологические свойства линии роста, сопровождающие появление боковых ветвей двухмерного плоского дендрита. Экспериментальные и теоретические предпосылки выполненного исследования состоят в следующем.

*Стадия торможения.* Результаты опытов [10] показывают, что активный рост вершины первой боковой ветви начинается именно в фазе торможения вершины дендрита. При колебаниях во времени на ФГК происходит чередование стадий торможения и ускорения [7—10].

*Нестационарный режим движения вершины.* На вершине дендрита наблюдалась корреляция [10]: "Торможение / ускорение вершины — рост / убывание ее кривизны".

*Эволюция формы линии роста.* Причина образования складок в окрестности носика дендрита —

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

Статья поступила в редакцию 15 августа 2011 г.

© Шабловский О. Н., 2012

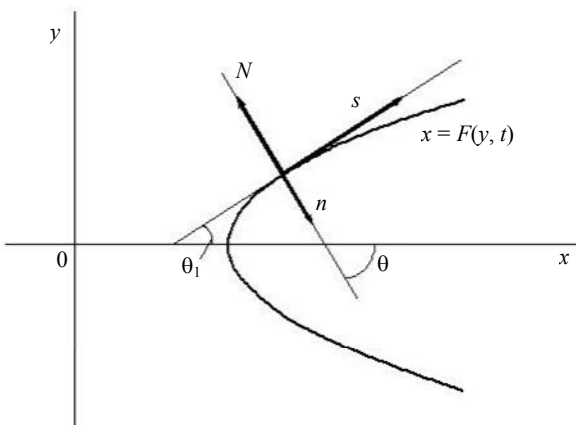
флуктуации формы линии роста на вершине и в окрестности вершины [8, 10].

*Параболическая и непараболическая формы линии роста.* Результаты численного моделирования [16] показывают: параболический дендрит ( $x \sim y^\alpha$ ,  $\alpha = 2$ ) растет медленнее, чем дендрит, форма которого определяется меньшим показателем степени  $\alpha \in (0, 2)$ . Здесь координата  $x$  направлена вдоль оси симметрии в сторону твердой фазы;  $y$  — поперечная декартова координата.

Цели исследования — дать аналитическое описание геометрических образов предвестников боковых ветвей: острой кромки (ОК) и точки перегиба (ТП) линии роста; изучить закономерности производства энтропии на нестационарной ФГК; установить свойства острых кромок на квазипараболической и игловидной линиях роста. Будет показано, что наши аналитические результаты находятся в качественном согласии с перечисленными выше четырьмя свойствами ФГК.

**Уравнение роста**

ФГК моделируем плоской линией сильного разрыва  $x - F(y, t) = 0$ . Средняя кривизна этой границы равна  $K = F_{yy}/G^3$ ,  $G = (1 + F_y^2)^{1/2}$ , где  $F_y = \partial F/\partial y$ ,  $F_{yy} = \partial^2 F/\partial y^2$ ; применение независимой переменной в роли нижнего индекса означает частное дифференцирование. Нормаль  $\mathbf{n}$  границы образует с осью  $x$  угол  $\theta$ :  $\cos \theta = 1/G$ . ФГК перемещается со скоростью  $\mathbf{N}$  справа налево ( $\mathbf{N} = N\mathbf{n}$ ,  $N < 0$ ), и на ее вершине  $F_y = 0$ ,  $\cos \theta = 1$ . Этот процесс отражен на представленном рисунке. По мере удаления от вершины  $\cos \theta \rightarrow 0$ ,  $\theta \rightarrow \pi/2$ . На ФГК имеем следующие три условия.



*Геометрические параметры линии роста дендрита*

- Баланс энергии

$$q_j = N(c_j T_j - c_* T_*) + N T_c (c_* - c_j) - Q, \tag{1}$$

$$Q = L \left( N + \gamma_j \frac{\partial N}{\partial t} \right),$$

который является следствием интегрального закона сохранения энергии. Подробный анализ условий динамической совместности на поверхности роста кристалла с позиций теории локально-неравновесного теплопереноса приведен в [17—19]. Здесь звездочкой отмечены параметры расплава перед ФГК; индекс  $j$  указывает, что значение функции определено на правой стороне сильного разрыва, в твердой фазе;  $c$  — объемная теплоемкость;  $L$  — теплота фазового перехода единицы объема вещества;  $T_c$  — равновесная температура кристаллизации;  $q_j$  — 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.

- Известная кинетическая связь

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

определяет нормальный механизм роста из расплава. Здесь  $\mu$  — кинетический коэффициент;  $T_e$  — температура равновесия между твердой и жидкой фазами;  $U$  — поверхностная энергия границы раздела фаз. Считается, что  $K > 0$ , если фазовая граница вогнута в сторону кристалла.

- Отклонение температуры кристалла  $T_j$  от равновесного значения  $T_c$  постулируем в следующей форме [15, 20]:

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

Величина  $B = T_c - T_j(y = 0)$  — это переохлаждение на вершине дендрита;  $\mu B$  — модуль характерной скорости роста на вершине. Параметр  $\delta$  определяет неоднородность переохлаждения  $T_c - T_j$  по угловой координате  $\theta$ . Чем больше  $\delta$ , тем резче переход температуры  $T_j$  к равновесному значению  $T_c$ . Таким образом, связь (3) означает, что проявления неравновесных свойств температуры  $T_j$  локализованы в окрестности вершины  $\theta = 0$ . Формула (3) содержит неявным образом информацию о кривизне ФГК, потому что в плоском двухмерном случае  $\partial \theta / \partial s = K$ , где  $s$  — дуговая координата, отсчитываемая от вершины вдоль линии роста. Дополнительные соображения по этому поводу изложены в [20]. Вариант  $\delta = 3$  является основным: он позволяет получить физически содержательные решения в обозримом виде. Роль параметра  $\delta > 3$  мы обсудим в заключительной части статьи.

Уравнение роста  $N \equiv F_t/G = -\mu(T_e - T_j)$  с учетом (2), (3) запишем в виде

$$(1/\varphi) F_{yy} = \mu B G^{3-\delta} + F_t (1 + F_y^2), \quad \delta \geq 3, \tag{4}$$

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

Производство энтропии подсчитываем по формуле [11]:  $\sigma_j = q_j^2 / (\lambda_j T_j^2)$ . Для размерных и безразмерных выражений применяем одинаковую запись. Масштабы величин, применяемые при обезразмеривании (они отмечены индексом  $b$ ), выбираем так:  $x = x'b$ ,  $y = y'b$ ,  $T = T'T_b$ ,  $q = q'q_b$ ,  $T_b = T_c$ ,  $x_b = y_b = |N_b|t_b$ ,  $(\mu B)' = \mu B / |N_b|$ ,  $\phi' = \phi y_b |N_b|$ , где штрих (далее его не пишем) относится к безразмерным величинам.

### Вырожденное уравнение роста

Линию роста  $x = F(y, t)$  рассматриваем в верхней полуплоскости при  $y \geq y_1 > 0$ , т. е. на конечном удалении от оси дендрита. В работе [8] первая измеренная боковая ветвь обнаружена на расстоянии  $45R$  от вершины дендрита, где  $R = 1/K$  — радиус кривизны носика дендрита. Учтем это обстоятельство и возьмем  $y_b \cong 40R$ . Будем изучать кристаллизацию веществ, для которых  $\varepsilon = 1/\phi$  — малый безразмерный параметр. Например, для серебра имеем (см. [16])  $\mu = 1,24$  м/(с·град);  $U = 0,12$  Дж/м<sup>2</sup>;  $R \cong 0,25 \cdot 10^{-6}$  м, и тогда  $\varepsilon \ll 1$ , если  $|N_b| \gg 1/60$  м/с. Для режимов кристаллизации из переохлажденного расплава, изучавшихся в [16], характерная скорость роста дендрита серебра  $|N_b| \sim 20$  м/с, поэтому  $\varepsilon$  — малый параметр задачи.

Воспользуемся наличием малого коэффициента  $\varepsilon$  при производной второго порядка в (4). Запишем (4) в виде системы уравнений  $F_y = H$ ,  $\varepsilon H_y = E$ ,  $E = \mu B G^{3-\delta} + F_t(1 + H^2)$ ,  $t \geq 0$ ,  $y \geq y_1 > 0$ , где, согласно принятым допущениям о направлении роста,  $F_t < 0$ ,  $F_y > 0$ . Имеем здесь  $\partial E / \partial H < 0$  при  $\delta \geq 3$ , поэтому при достаточно малом  $\varepsilon$  можно приближенно заменить решение  $F(y, t, \varepsilon)$  уравнения роста (4) решением вырожденного уравнения

$$\mu B G^{3-\delta} + F_t(1 + F_y^2) = 0, \quad \delta \geq 3, \quad y \geq y_1 > 0. \quad (5)$$

Из теории дифференциальных уравнений [21] известно, что такое решение — устойчивое. В дополнение к этому общему утверждению отметим, что для оценки возможности выбора координаты  $y_1$  был рассмотрен пример сопоставления уравнений (4) и (5). Сравнивались при  $\delta = 3$  две формулы для скорости ФГК, получаемые из точного решения уравнения роста (4) (см. [15]) и из точного решения вырожденного уравнения (5). Расчеты сделаны для двух вариантов: квазипараболического дендрита, имеющего конечный радиус  $R$  кривизны вершины и вытянутого вперед носика дендрита, обладающего весьма большой кривизной. Подробности расчета здесь не приводятся. В обо-

их случаях установлено, что существует конечное значение  $y_1$ , обеспечивающее заранее заданную точность решения приближенного уравнения. Характерные числовые значения параметра  $n_1 = y_1 / R$  такие: для гладкой вершины  $n_1 \geq 5$ ; для вытянутого носика  $n_1 \geq 10$ .

Полный интеграл уравнения (5) имеет вид:

$$\Phi \equiv F + (1 + a_1^2)^{(1-\delta)/2} \mu B t - a_1 y - a_2 = 0, \quad (6)$$

где  $a_1, a_2$  — const. Сформулируем начальную задачу:

$$y = y_1, \quad F = F_1(t), \quad (7)$$

где  $F_1(t)$  — заданная функция, являющаяся монотонной и ограниченной,  $|dF_1 / dt| < \mu B$ . Это означает, что на линии роста на конечном удалении от оси дендрита постулируем закон движения точки  $x = F_1$ ,  $y = y_1$ . Далее эту точку называем начальной. Функция  $F_1(t)$  несет информацию о свойствах движения в конечной окрестности вершины дендрита. Задача состоит в том, чтобы изучить нестационарное поведение линии роста для физически интересных зависимостей  $F_1(t)$ . Запишем в параметрической форме ( $\zeta$  — параметр) заданные условия (7):  $t = \zeta$ ,  $y = y_1$ ,  $F = F_1(\zeta)$ . Хорошо известный в теории дифференциальных уравнений первого порядка алгоритм построения решения приводит при  $\delta = 3$  к соотношениям:

$$\begin{aligned} dF_1(\zeta) / d\zeta &= -\mu B / (1 + a_1^2), \\ F_1(\zeta) &= [-\mu B \zeta / (1 + a_1^2)] + a_1 y_1 + a_2, \end{aligned}$$

которые позволяют найти  $\zeta = \zeta(a_1)$  и  $a_2(\zeta)$ . После подстановки этих выражений в полный интеграл (6) и построения огибающей однопараметрического семейства  $\Phi(t, y, F, a_1, a_2(a_1)) = 0$  получаем искомое решение

$$x = F(t, y, a_1, a_2(a_1)), \quad y - y_1 = Y(t, a_1). \quad (8)$$

Для него характерна связь  $\partial x / \partial a_1 = a_1 \partial y / \partial a_1$ , из которой следует, что на линии роста  $\partial x / \partial y = a_1$ , т. е.

$$\begin{aligned} \cos^2 \theta &= \sin^2 \theta_1 = 1 / (1 + a_1^2), \quad \theta \in (0, \pi / 2), \\ \theta_1 &= (\pi / 2) - \theta. \end{aligned} \quad (9)$$

Таким образом, параметр  $a_1$  является лагранжевой координатой, а именно, каждому фиксированному  $a_1$  соответствует фиксированный угол  $\theta_1$  заострения линии роста. Лагранжеву координату  $a_1 = a_1(y, t)$  для краткости называем  $a_1$ -точкой;

ее уравнения движения на плоскости  $(x, y)$  определяются решением (8). Скорость перемещения и радиус кривизны линии роста равны, соответственно,

$$N = \left( \frac{\partial x}{\partial t} - a_1 \frac{\partial y}{\partial t} \right) / a^{1/3} = -\mu B / a, \quad (10)$$

$$R = 1 / K = a |\partial y / \partial a_1|, \quad a = (1 + a_1^2)^{3/2}. \quad (11)$$

Во всех  $a_1$ -точках скорости  $N(a_1)$  постоянны и различны. Локальное ускорение равно  $N_t \equiv \partial N(y, t) / \partial t = (\mu B / a^2) \partial a / \partial t$ . Согласно (9),  $\partial a / \partial t \sim (-\partial \theta_1 / \partial t)$ , поэтому при ускоренном движении ФГК [ $N < 0, N_t < 0$ ] происходит ее затупление,  $\partial \theta_1 / \partial t > 0$ ; при замедленном движении [ $N < 0, N_t > 0$ ] линия роста заостряется,  $\partial \theta_1 / \partial t < 0$ . В работах [19, 20] показано, что геометрическими и кинематическими образами предвестников боковой ветви в некоторой точке поверхности дендрита служат: остановка межфазной границы в этой точке; появление ТП ( $R \rightarrow \infty$ ) либо ОК ( $R \rightarrow 0$ ) на линии роста; наличие особенности вида  $(t_1 - t)^{3-\alpha_1}$ ,  $0 < \alpha_1 < 1$ ,  $0 \leq t < t_1 < \infty$  в законе движения ФГК; это означает, что высшее ускорение [например,  $\partial(N_t) / \partial t$ ] становится неограниченным при  $t \rightarrow t_1$ ; этот вид морфологической неустойчивости сопровождается неограниченно большой (при  $t = t_1$ ) скоростью изменения нормального к ФГК теплового потока. Изучим наиболее важные в физическом отношении примеры зависимостей  $F_1(t)$ . Для этих примеров развернутая запись формул (8) не приводится.

### Режим торможения/ускорения начальной точки

Возьмем  $N_1 = dF_1 / dt = A_1 - B_1 k \exp(-kt)$ ,  $k > 0$ ,  $A_1 < B_1 k$ . Если  $A_1 < 0, B_1 > 0$ , то происходит торможение начальной точки; если  $A_1 < 0, B_1 < 0$ , то имеем режим ускорения. Рассмотрим случай, когда момент остановки  $t = t_r$  существует:  $0 < A_1 < B_1 k$ ,  $kt_r = \ln(B_1 k / A_1) > 0$ . Острая кромка (ОК) ( $\partial y / \partial a_1 = 0$ ) определяется зависимостями  $t = t_e(a_1) \geq 0$ ,  $y_e - y_1 = \chi(a_1) > 0$  при  $B_1 > 0$ ,  $3a_1^2 > 1$ ,  $\psi > 0$ , где  $\psi = A_1 + [\mu B / (1 + a_1^2)]$ . Значит,  $0 < \theta_1 < \theta_1^* = \pi/3$ . При  $0 < \psi < B_1 k$  имеем  $\partial t_e / \partial (a_1^2) > 0$ . Начальное состояние ОК определяется временем  $t_e = 0$  и  $a_1$ -точкой, для которой априорно выбираем значение  $a_1^2 = a_{10}^2 > 1/3$ . Даль-

нейший расчет выполняется в сторону увеличения лагранжевой координаты,  $a_1^2 \geq a_{10}^2 > 1/3$ . Рост  $a_1^2$  означает, что идет заострение дендрита [ $\partial \theta_1 / \partial t < 0$ ], и это длится конечный промежуток времени  $[0, t_r)$ , на котором выполнено данное решение. Поперечная скорость ОК отрицательная:  $V_e = \partial(y_e - y_1) / \partial t_e < 0$ . С течением времени ОК движется вниз вдоль линии роста по направлению к вершине дендрита:  $a_1^2 \rightarrow \infty, y_e \rightarrow y_1, t_e \rightarrow t_r$ . Параметр  $1/k$  характеризует степень нестационарности процесса: чем больше  $k$ , тем больше начальное ускорение  $(dN_1 / dt)_{t=0} = B_1 k^2$ . По отношению к параметру  $k$  имеем корреляцию:  $t_e = 0, (y_e - y_1)^{-2} \sim (dN_1 / dt)$ , т. е. чем больше начальное ускорение, тем ближе ОК к оси дендрита. Чем острее дендрит в начальном состоянии, тем меньше  $|V_e|$ . Верхняя граница модуля поперечной скорости  $|V_e|$  равна  $\mu B (\sin \theta_1^*)^3$  и соответствует пороговому значению  $a_{11}^2 = (1/3) + 0$ , для которого  $\theta_1 = \theta_1^* - 0$ . Если начальное заострение  $\theta_1 > \theta_1^*$ , то ОК отсутствует.

Теперь рассмотрим при  $y = y_1, t \geq 0, a_1^2 \in (0, \infty)$  поведение линии роста в отсутствие точки остановки. В режиме торможения идет заострение дендрита:  $\theta_1^-(t=0) > \theta_1^-(t \rightarrow \infty)$ ; в режиме ускорения наблюдается затупление дендрита:  $0 < \theta_1^+(t=0) < \theta_1^+(t \rightarrow \infty)$ . Здесь верхние индексы  $-/+$  относятся к стадиям заострения / затупления. В обоих случаях ширина диапазона углов заострения / затупления определяется дробью  $|B_1|k / (\mu B)$  и возрастает по мере увеличения параметра нестационарности  $k$ . При одной и той же скорости установившегося движения, т. е. при фиксированном  $A_1 < 0$ , имеем:  $\theta_1^-(t=0) > \theta_1^+(t=0)$ ; в ходе эволюции углы  $\theta_1^\mp(t)$  стремятся асимптотически с разных сторон к значению  $\theta_1^-(t \rightarrow \infty) = \theta_1^+(t \rightarrow \infty)$ , и при  $y = y_1$  в каждом из этих процессов формируется ТП,  $R \rightarrow \infty$ . Этот предвестник складки на линии роста типичен для асимптотического перехода скорости начальной точки от одного стационарного значения к другому, причем производство энтропии  $\sigma_j(A_1)$  в ТП имеет минимум. Свойства функции  $\sigma_j(a)$  при  $y = y_1, t = 0$  будут указаны в следующем пункте.

Изучим корреляцию "скорость роста — радиус кривизны" в начальной точке. Применяем безразмерные параметры:  $R^1 = kR / (\mu B)$ ,  $\beta_1 = \mu B / (-N)$ ,  $A_1^1 = \mu B / (-A_1)$ . Здесь  $\beta_1$  характеризует скорость

роста  $N = N(y = y_1, t)$  в начальной точке;  $A_1^1$  есть отношение модулей двух скоростей: характерной скорости  $\mu B$  вершины дендрита и установившейся во времени продольной скорости начальной точки. Анализ показал, что на стадии затупления, т. е. при ускорении ФГК, зависимость  $R^1(\beta_1)$  — монотонно убывающая:  $\partial R^1 / \partial \beta_1 < 0$ ,  $\partial \beta_1 / \partial t < 0$ . На стадии заострения, т. е. при торможении ФГК наблюдается нетривиальное поведение  $R^1(\beta_1)$ . А именно: несмотря на монотонное поведение  $\theta_1(t)$  при  $y = y_1$ , возможно немонотонное поведение радиуса кривизны. Функция  $R^1(\beta_1)$  имеет один локальный экстремум — минимум, если  $A_1^1 > 25$ , и при этом  $[(A_1^1/5) - 1] < \beta_2 < (A_1^1 - 1)$ . Функция  $R^1(\beta_1)$  имеет два локальных экстремума, минимум и максимум, если  $25 < A_1^1 < 26$ , и при этом  $6 < \beta_2 < 24$ . Здесь параметр  $\beta_2 = B_1 k / (-A_1)$  характеризует ширину интервала значений продольной скорости начальной точки в заданном переходном процессе. Следовательно, на этапе монотонных во времени торможения и заострения ФГК радиус кривизны совершает один цикл колебаний по аргументу  $\beta_1$ . Существенно, что немонотонное поведение  $R^1 = R^1(\beta_1)$  наблюдается только при резком вытягивании вперед носика дендрита:  $\mu B > (-25 A_1)$ .

### Полупериод колебаний скорости начальной точки

Будем изучать процесс роста на полупериоде колебаний скорости в начальной точке:  $N_1 = dF_1/dt = A_1 + 2B_1 k - 4B_1 k \sin^2(kt)$ ,  $k > 0$ ,  $A_1 < 0$ ,  $B_1 > 0$ ,  $A_1 + 2B_1 k < 0$ . Стадия ускорения:  $kt \in [0, \pi/2]$ ; стадия торможения:  $kt \in [\pi/2, \pi]$ . В отличие от предыдущего случая [торможение / ускорение,  $t \geq 0$ ], здесь монотонный переход от одного конечного значения скорости к другому длится конечное время; на обеих границах каждого из этих интервалов  $dN_1/dt = 0$ . Рассмотрим поведение линии роста при  $y = y_1$ . Точка перегиба (ТП) появляется на границах изучаемых интервалов времени, т. е. при достижении экстремумов скорости  $N_1(t)$ . При  $R \rightarrow \infty$  угол заострения  $\theta_{1f}$  определяется формулой  $\sin^2 \theta_{1f} = (-A_1 \pm 2B_1 k) / (\mu B) < 1$ . Чем больше угол заострения, тем производство энтропии больше,  $\partial \sigma_j / \partial \theta_{1f} > 0$ . Теперь следует учесть, что на плоскости  $(x, y)$  в каждый момент времени про-

филь ФГК монотонный, а координата  $y = y_1$  зафиксирована. Значит, чем больше угол  $\theta_{1f}$ , тем ближе к вершине дендрита расположена ТП и тем больше в этой точке производство энтропии. Ускорение  $dN_1/dt$  имеет экстремумы при  $kt_1 = \pi/4$  (стадия затупления) и при  $kt_2 = 3\pi/4$  (стадия заострения). Для  $t = t_2$  имеем  $\partial \sigma_j / \partial \theta_1 > 0$ ,  $\partial \theta_1 / \partial t < 0$ . Момент  $t = t_1$  имеет отличительные черты поведения функции  $\sigma_j(\theta_1)$ , а именно: существует максимум этой функции при  $a = a_m$ :

$$\Gamma \equiv \frac{\gamma_j B_1 k^2}{\mu B} = \frac{(L_* / L) a_m^2 + 2a_m (c_j B / L) - [c_j B^2 / (L T_c)]}{2[11 a_m^{8/3} - 8 a_m^{5/3} (B / T_c)]},$$

где  $L_* = L - c_*(T_c - T_*)$ ;  $\Gamma$  — параметр неравновесности, который можно рассматривать как произведение безразмерного времени релаксации  $\gamma_j k$  на безразмерную скорость  $B_1 k / (\mu B)$ . Этой формулой удобно пользоваться, задавая  $a_m$  и подсчитывая соответствующее значение  $\Gamma$ . При  $0 < a < a_m$  имеем  $\partial \sigma_j / \partial \theta_1 < 0$ ; при  $a > a_m$  получаем  $\partial \sigma_j / \partial \theta_1 > 0$ . Значение  $\Gamma$  линейно зависит от переохлаждения расплава  $T_c - T_* = \Delta T$ , причем  $\partial \Gamma / \partial (\Delta T) < 0$ : чем больше переохлаждение, тем ниже порог параметра неравновесности, разделяющий два режима  $\partial \sigma_j / \partial \theta_1 > 0$  и  $\partial \sigma_j / \partial \theta_1 < 0$ . Вместе с тем  $\partial (\sigma_j)_{\max} / \partial (\Delta T) < 0$ , поэтому  $\partial (\sigma_j)_{\max} / \partial \Gamma > 0$ , где  $(\sigma_j)_{\max} = \sigma_j(a_m)$ . Расчеты показали, что такие же в качественном отношении свойства имеет производство энтропии  $\sigma_j(\theta_1)$  в задаче "торможение / ускорение,  $t \geq 0$ " при  $y = y_1$ ,  $t = 0$ , когда  $dN_1/dt$  имеет наибольшее по модулю значение.

### Особенность в ускорении высшего порядка

Закон движения начальной точки имеет вид:  $y = y_1$ ,  $x = F_1(t) \equiv A_1 t + B_1 (t_1 - t)^{\alpha_3 - \alpha_1}$ ,  $A_1 < 0$ ,  $B_1 > 0$ ,  $0 \leq t \leq t_1 < \infty$ . Допускаем здесь существование особенности:  $0 < \alpha_1 < 1$ ,  $\alpha_3 \geq 3$ ,  $\alpha_3$  — целое число. Например, если  $\alpha_3 = 3$ , то при  $t = t_1$  имеем  $d^2 F_1 / dt^2 = 0$ ,  $d^3 F_1 / dt^3 \rightarrow \infty$ . ТП существует для линий роста, у которых  $\sin^2 \theta_1 \geq (-A_1) / (\mu B)$ . Нижняя граница углов заострения равна углу  $\theta_{1f}$  в ТП. По мере движения линии роста влево ТП  $[x_f(t), y_f(t)]$  перемещается с периферии дендрита  $[y_f(t=0) > y_1]$  по направлению к вершине, и при  $t = t_1$  она достигает значения  $y_f = y_1$ . Функция

$t_1$  аргумента  $(-A_1) \in (0, \mu B)$  является немонотонной: при  $(-A_1^*) / (\mu B) = 3/4$ , т. е. при  $\theta_1 = \theta_1^* = \pi/3$  она имеет минимум. ТП перемещается по прямой линии, имеющей наклон  $dy/dx = (-2a_{1f}A_1) / (2A_1 + 3\mu B) > 0$ . Модуль скорости ее движения на плоскости  $(x, y)$  равен  $|V_f| = |A_1| [9 + (8A_1 / (\mu B))]^{1/2}$ . В своем исходном состоянии ТП находится в малой окрестности начальной точки  $[y_f(t=0) \rightarrow y_1]$  в двух предельных случаях: игловидное заострение в ТП,  $\theta_{1f} \rightarrow 0$ ,  $(-A_1) \rightarrow 0$ ,  $V_f \rightarrow 0$ ; сильное затупление в ТП,  $\theta_{1f} \rightarrow \pi/2$ ,  $V_f \rightarrow (-A_1) \rightarrow \mu B$ . Свойства ТП не зависят от параметра  $B_1$ , характеризующего начальное ( $t = 0$ ) ускорение. Данное решение описывает заострение линии роста на участке между начальной точкой и ТП. В каждый момент времени на периферии дендрита (слева от ТП) производство энтропии меньше, чем в конечной окрестности вершины:  $\partial \sigma_j / \partial \theta_1 > 0$ ,  $\partial \sigma_j / \partial \gamma_j > 0$ .

Теперь обсудим свойства ОК. Возможны два варианта. Вариант 1: ОК возникает при  $t = t_1$ , в момент появления особенности в ускорении высшего порядка. Это происходит, если  $\theta_1 < \theta_1^* = \pi/3$ . Вариант 2: подвижная ОК, которая существует в начальный момент  $t = 0$ , предшествующий моменту  $t_1 > 0$ . В этом случае имеем сверхкритическое ( $\theta_1 > \theta_1^*$ ) затупление линии роста, что отличается от условия существования ОК в решении с остановкой ФГК при  $t = t_r$ . Причина отличия именно в том, что здесь отсутствует остановка начальной точки. Анализ показал, что существует пороговое значение  $a_1 = a_{11}$ ,  $1/(1+a_{11}^2) = \sin^2 \theta_1^1$ , разделяющее два режима движения ОК. При  $\mu B / (-A_1) < 1 + a_{11}^2 < 1 + a_{11}^2$  ОК движется вниз, к вершине дендрита, и при этом идет заострение линии роста. Если  $1 + a_{11}^2 < 1 + a_{11}^2 < (\sin \theta_1^*)^{-2}$ , то ОК движется вверх, на периферию дендрита, и при этом идет затупление линии роста.

### Эволюция во времени начального профиля ФГК

Для вырожденного уравнения роста (5) при  $\delta = 3$  поставим начальную задачу по отношению к аргументу  $t$ :

$$t = 0, F = F_2(y), y \in [y_1, y_2], 0 < y_1 < y_2 < \infty,$$

где  $F_2(y)$  — заданная монотонная функция. Алгоритм построения решения — прежний. Форму-

лы (9)—(11) сохраняют свой смысл. Рассмотрим случай, когда в исходном состоянии ФГК имеет вид  $F_2(y) = D_2 y^\alpha$ ,  $D_2 = D y_1^{1-\alpha}$ ,  $y \geq y_1 > 0$ ,  $D > 0$ ,  $\alpha > 1$ , где  $\alpha, D = \text{const}$ . Решение этой задачи описывает эволюцию исходного профиля от начала его движения до момента появления ОК. Анализ показал, что ОК существует, если  $\alpha > 2(1 - a_1^2) / (1 - 3a_1^2) > 2$  или, что то же самое, если  $a_1^2 < (\alpha - 2) / (3\alpha - 2) < 1/3$ , т. е.  $\theta_1 > \theta_1^* = \pi/3$ . Данный результат содержит в себе два предельных случая: игловидный начальный профиль дендрита,  $\alpha \gg 1$ ; квазипараболический начальный профиль,  $\alpha \rightarrow 2 + 0$ . Для начальных профилей, имеющих  $1 < \alpha \leq 2$ , ОК не появляется. Решение, не содержащее ОК, существует при  $0 < \theta_1 < \theta_1^*$ . Граничное значение угла  $\theta_1 = \theta_1^1$  соответствует моменту появления ОК и определяется формулами:  $\sin^2 \theta_1^1 = 1 / (1 + a_{11}^2)$ ,  $a_{11}^2 = (\alpha + 3 - \sqrt{4\alpha^2 + 9}) / [3(2 - \alpha)]$ ,  $\alpha_1 = (\alpha - 2) / [2(\alpha - 1)]$ ,  $\alpha > 2$ . На стадии заострения дендрита имеем  $a_1^2 \in (0, a_{11}^2]$ ;  $\theta_1 \geq \theta_1^1$ , в этом случае  $\theta_1^1$  — наименьший угол заострения. На стадии затупления имеем  $a_1^2 \in [a_{11}^2, a_{12}^2)$ ,  $\theta_1 \leq \theta_1^1$ ; в этом случае  $\theta_1^1$  — наибольший угол заострения;  $a_{12}^2 = (\alpha - 2) / (3\alpha - 2) < 1/3$ . Интервал, в котором изменяется лагранжева координата  $a_1$  (а значит, и угол  $\theta_1$ ), определяется зависимостью  $a_1 = (y/y_1)^{\alpha-1} \alpha D$ ,  $y \geq y_1 > 0$ . Отсюда ясна роль параметров формы  $\alpha, D$  начального профиля. Если, например, зафиксировать  $\alpha > 2$ , то подходящий выбор  $D$  позволяет выполнить условие существования ОК. Скорость ФГК обладает сильной чувствительностью к параметру формы  $\alpha$ . Для  $\alpha > 2$  режим роста сопровождается появлением ОК, и при этом в конечной окрестности  $t = 0$  имеем  $\partial |N| / \partial \alpha < 0$ . Для начальных профилей ФГК, имеющих  $\alpha \in (1, 2]$ , ОК не появляется и при  $t \geq 0$  имеем  $\partial |N| / \partial \alpha > 0$ . Этот результат качественно согласуется с работой [16], где изучались именно такие режимы роста.

Остается отметить роль параметра неоднородности  $\delta$  в структуре решений уравнения (5). При  $\delta \geq 3$  основные формулы (9)—(11) сохраняют свой вид. Было показано, что для  $\delta = 3$  критический угол заострения линии роста равен  $\theta_1^* = \pi/3$ . Обобщение этого результата представляется формулой  $(\sin \theta_1^*)^2 = \delta / (\delta + 1)$ ,  $\delta \geq 3$ . Следовательно, увеличение  $\delta$ , т. е. увеличение градиента переох-

лаждения  $[\partial(T_c - T_j)/\partial(\cos \theta)]_{\theta=0} = B\delta$  на вершине дендрита, означает возрастание критического угла: по мере роста  $\delta > 3$  имеем  $\theta_1^* \rightarrow (\pi/2) - 0$ . В остальном, все представленные выше результаты сохраняют свой физический смысл.

### Заключение

В работе изложен аналитический способ качественного описания закономерностей распространения ФГК в однокомпонентном переохлажденном расплаве. Полученные результаты относятся к трем ситуациям, в которых появляются предвестники боковой ветви дендрита: режим "торможение/ускорение" ФГК; колебания скорости линии роста; возникновение особенности в ускорении высшего порядка. В рамках теории локально-неравновесного теплопереноса установлены экстремальные свойства производства энтропии вблизи вершины дендрита и на его периферии. Обнаружены важные закономерности поведения острых кромок на квазипараболической и иглоподобной линиях роста. Представленные результаты на качественном уровне согласуются с описанными в литературе экспериментальными наблюдениями и данными вычислительного моделирования. Предметом дальнейших исследований являются нелинейные колебания и волны на поверхности роста кристалла в переохлажденном расплаве.

### Литература

1. Багдасаров Х. С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.

2. Chernov A. A., Rashkovich L. N., Vekilov P. G. // J. Cryst. Growth. 2005. V. 275. P. 1.
3. Herlach D. M., Galenko P., Holland-Moritz D. Metastable Solids from Undercooled Melts. — Germany, Elsevier, 2007.
4. van Veenendaal E., Nijdam A. J., van Suchtelen J. // J. Cryst. Growth. 2002. V. 235. P. 603.
5. Чернов А. А. // Кристаллография. 1971. Т. 16. С. 842.
6. Gurtin M. E., Jabbour M. E. // Arch. Rational Mech. Anal. 2002. V. 163. P. 171.
7. Honjo H., Ohta S., Sawada Y. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. No. 8. P. 841.
8. La Combe J. C., Koss M. B., Frei J. E. et al. // Phys. Rev. E. 2002. V. 65. No. 3. P. 031604-1.
9. Shibkov A. A., Golovin Yu. I., Zheltov M. A. et al. // Physica A. 2003. V. 319. P. 65.
10. Казаков А. А., Леонов А. А., Столбеников С. С., Шибков А. А. // Сб. тр. 6-й Межд. конф. "Рост монокристаллов и теплоперенос". — Обнинск: ГНЦ РФ—ФЭИ, 2005. Т. 4. С. 908.
11. Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика. — М. — Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2006.
12. Galenko P. K., Zhuravlev V. A. Physics of dendrites. — Singapore. World Scientific Publishing, 1994.
13. Мартюшев Л. М., Селезнев В. Д., Кузнецова И. Е. // ЖЭТФ. 2000. Т. 118. Вып. 1. С. 149.
14. Шабловский О. Н., Кроль Д. Г. // Расплавы. 2005. № 4. С. 69.
15. Шабловский О. Н. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2010. № 12. С. 81.
16. Уманцев А. Р., Виноградов В. В., Борисов В. Т. // Кристаллография. 1985. Т. 30. Вып. 3. С. 455.
17. Шабловский О. Н. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2002. № 2. С. 49.
18. Шабловский О. Н. Релаксационный теплоперенос в нелинейных средах. — Гомель: Изд-во ГГТУ, 2003.
19. Шабловский О. Н. // Прикладная физика. 2007. № 3. С. 29.
20. Шабловский О. Н. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2008. № 11. С. 106.
21. Васильева А. Б., Бутузов В. Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. — М.: Наука, 1973.

## Morphological properties of the growth line of a two-dimensional dendrite in a supercooled melt

O. N. Shablovsky

Sukhoi Gomel State Technical University  
48 October av., Gomel, 246746, Republic of Belarus  
E-mail: shablovsky-on@yandex.ru

*Thermophysical and kinematic aspects of crystal growth in an unicomponent supercooled melt are considered. The analytical description of the dendrite side-branch fore runners in the finite neighbourhood of the dendrite tip is given. Nontrivial behavior of sharp edges and inflexion points on the planar two-dimensional growth line is established. Extreme properties of entropy production on the crystallization boundary at locally non-equilibrium heat transfer are studied.*

PACS: 64.70 Dv

*Keywords:* crystal growth, supercooled melt, side branch, entropy production.

Bibliography — 21 references.

Received August 15, 2011