Письма в ЖЭТФ, том 61, вып.4, стр.285 - 289 © 1995г 25 февраля

РОСТ ИГЛООБРАЗНОГО КРИСТАЛЛА ОКОЛО СТЕНКИ

Е.А.Бренер, Ю.Саито[+1)], *Х.Мюллер-Крумбхаар*[*1)], *Д.Е.Темкин*[∇]

Институт физики твердого тела РАН,
142432 Черноголовка, Россия

[+] *Department of Physics, Keio University,*
223 Yokohama, Japan

[*] *Institut für Festkörperforschung*
D-52425 Jülich, Germany

[∇] *Институт металловедения и физики металлов*
107005 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 января 1995 г.

Рассматривается рост двумерной иглы в переохлажденном расплаве вдоль теплоизолирующей стенки. Капиллярная длина d_0 считается изотропной. Предложена модель, в которой система разбивается на две части – "свободную", удаленную от стенки, и пристеночную. Первая описывается в модели пограничного слоя, а вторая – в приближении постоянства толщины зазора между стенкой и кристаллом. Сформулированы условия сшивания диффузионных полей и двух частей фронта кристаллизации. Эти условия определяют скорость роста v и толщину зазора δ в функции переохлаждения Δ: $v \simeq 0,4(D/d_0)\Delta^5$, $v\delta/D \simeq 0,8$.

Мы рассматриваем рост несимметричного дендрита, инициируемый влиянием теплоизолирующей стенки, вдоль которой он растет. Хорошо известно (см. обзоры [1, 2]), что при свободном росте симметричного дендрита отбор скорости и направления роста, а также характерного масштаба его острия определяются влиянием анизотропии поверхностного натяжения. В то же время при росте в канале такой отбор возможен за счет влияния стенок канала и в отсутствие указанной анизотропии [3]. Несимметричный дендрит (точнее "палец") был обнаружен при численном изучении роста двумерных кристаллов в канале [4]. При ширинах канала, превышающих некоторое критическое значение симметричный палец был неустойчив относительно расщепления острия. Это приводило вначале к образованию двух пальцев, а при последующем их конкурентном росте – к образованию несимметричного стационарно растущего пальца. В очень широких каналах существенно влияние только одной стенки. В этом случае численный анализ [5, 6] также выявил возможность стационарного роста несимметричного дендрита вдоль стенки при изотропном поверхностном натяжении. Скорость роста при этом не зависела от ширины канала.

Мы обсуждаем рост двумерного дендрита около стенки в переохлажденном однокомпонентном расплаве. Рост кристалла контролируется диффузией скрытой теплоты затвердевания. Обсуждается стационарный режим, при котором кристалл, находясь на некотором расстоянии от теплоизолирующей стенки, растет со скоростью v вдоль нее (см. рисунок). В системе координат, движущейся с этой скоростью вдоль оси z, стационарное диффузионное поле в расплаве подчиняется уравнению

$$\nabla^2 U + V\partial U/\partial z = 0. \tag{1}$$

[1)] Y.Saito, H.Müller-Krumbhaar.

Здесь U – разность температур, отсчитанная от температуры расплава вдали от кристалла и обезразмеренная величиной L/c, L – скрытая теплота кристаллизации, c – теплоемкость; $V = vd_0/D$ – безразмерная скорость роста, d_0 – капиллярная длина, предполагаемая изотропной, D – температуропроводность расплава; в уравнении (1) и в последующих уравнениях все длины измеряются в единицах d_0. На теплоизолирующей стенке выполняется условие

$$(\partial U/\partial x)_{x=0} = 0. \tag{2}$$

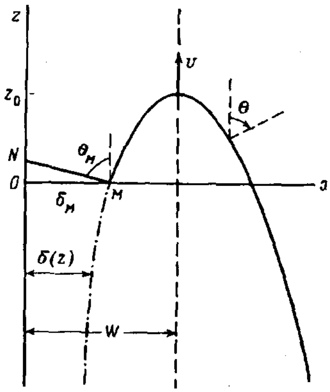
На межфазной границе поле U_i удовлетворяет условию равновесия Гиббса–Томсона:

$$U_i = \Delta - K \tag{3}$$

и выполняется условие теплового баланса

$$V\cos\theta = -\mathbf{n}\cdot\vec{\nabla}U. \tag{4}$$

Здесь K – кривизна, обезразмеренная капиллярной длиной d_0, Δ – безразмерное переохлаждение расплава, θ – угол между осью z и нормалью к границе $\mathbf{n}$. Для простоты здесь рассматривается так называемая односторонняя модель [7].



Точное решение сформулированной проблемы отсутствует. Можно предполагать различные варианты этого решения. Один вариант: нет отбора и имеется непрерывный спектр решений, характеризуемый, например, зависимостью $V = V(\delta, \Delta)$ (δ – толщина прослойки расплава вдали от вершины иглы). Другой вариант: за счет влияния стенки осуществляется отбор так, что при заданном переохлаждении Δ имеются определенные значения скорости роста, $V = V(\Delta)$, и толщины прослойки, $\delta = \delta(\Delta)$. Мы полагаем, что реализуется последний вариант. Однако и в этом случае имеются две возможности: отбор происходит при любых переохлаждениях $\Delta > 0$ или только при переохлаждениях, больших некоторого критического, как это имеет место, например, при росте симметричного пальца в канале [3]. Модельное описание, предлагаемое ниже вместо точных уравнений (1)–(4), имеет целью прозондировать сформулированную задачу. Граница раздела и область расплава делятся на две части – "свободную" (правее линии MN на рисунке), не учитывающ... яние стенки, и пристеночную (левее MN). Эти части описываются в рамках различных моделей и сшиваются.

Свободную часть границы раздела описываем на основе модели пограничного слоя [8] следующим уравнением [9]:

$$V(1-U_i)\cos\theta - \frac{KU_i^2}{\cos^2\theta} - 2\mathrm{tg}\theta\cdot KU_i\frac{dU_i}{d\theta} +$$

$$+\frac{K}{V}\frac{d}{d\theta}\left(\frac{KU_i}{\cos\theta}\frac{dU_i}{d\theta}\right) = 0, \qquad \theta_M < \theta < \pi/2. \tag{5}$$

Здесь U_i задается уравнением (3). Профиль этой части границы можно найти путем численного интегрирования уравнения (5) от точки $\theta = \pi/2$, около которой имеем следующее разложение для K по $\cos\theta$:

$$K = V\frac{1-\Delta}{\Delta^2}\cos^3\theta + V^2\frac{(1-\Delta)(5\Delta-4)}{\Delta^5}\cos^6\theta + \ldots \tag{6}$$

Граница считается свободной, пока расстояние до стенки, $-\delta(z)/\sin\theta$, больше эффективной ширины пограничного слоя, оцениваемой как $\Delta/V\cos\theta$. В точке окончания свободного участка, $\theta=\theta_M$, указанные величины равны. Поэтому

$$\mathrm{tg}\theta_M = -V\delta_M/\Delta. \tag{7}$$

Для приближенного описания *пристеночной области* воспользуемся тем, что граница раздела в этой области, $x = \delta(z)$, почти параллельна стенке, и сформулируем условия (3) и (4) не на фактической границе, а при $x = \delta_M$ (см. рисунок):

$$U(\delta_M, z) = \Delta, \qquad V\delta'(z) = (\partial U/\partial x)_{x=\delta_M}. \tag{8}$$

Здесь мы пренебрегли вкладом кривизны в уравнении (3). Начало пристеночной области, совпадающее с концом свободной области, находится на линии MN (см. рисунок). Однако "начальное" распределение зададим не на этой линии, а на линии $0M$ и примем его линейным:

$$U(x,0) = \Delta x/\delta_M. \tag{9}$$

Это условие качественно отражает непрерывность диффузионных полей, которое должно выполняться на линии их сшивания MN. Из уравнений (1), (2) и (8), (9) получаем профиль границы раздела в виде

$$x = \delta(z) = \delta + \frac{4\Delta}{\pi V\delta_M}\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{\exp(s_n z)}{(2n-1)s_n} \qquad (z \le 0), \tag{10}$$

где $\delta \equiv \delta(-\infty)$, $\delta_M \equiv \delta(0)$ и

$$s_n = -V/2 + [(V/2)^2 + \pi^2(2n-1)^2/4\delta_M^2]^{1/2}. \tag{11}$$

Из уравнения (10) следует, что в точке сшивания $\mathrm{tg}\theta \equiv -1/\delta'(0)$ совпадает с $\mathrm{tg}\theta_M$ из условия (7). Таким образом, профиль (10) автоматически удовлетворяет условию непрерывности углов в точке сшивания.

Сформулируем еще два дополнительных условия сшивания. Сшивание диффузионных полей требует непрерывности этих полей и потоков (или первых производных от полей) на линии сшивания MN. Первое из этих условий уже выполнено. Вместо второго потребуем выполнения условия глобального баланса в полосе $0 < x < W$, параллельной теплоизолирующей стенке (на рисунке штриховая линия $x = W$ проходит через вершину иглы)

$$Q + V(W - \delta) = VW\Delta, \qquad Q = \int_{z_0}^{\infty} \left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{x=W} dz.$$

Здесь Q есть общий поток тепла в данную полосу из остальной области расплава. В модели пограничного слоя [8] этот поток оценивается как $Q = -[\Delta - K(0)]K(0)K'(0)/V$. Поэтому условие глобального баланса принимает вид

$$V\left\{\int_{\theta_M}^{0} \frac{\cos\theta d\theta}{K(\theta)} + \delta_M - \delta - \frac{\Delta\delta}{1-\Delta}\right\} - \frac{\Delta - K(0)}{V(1-\Delta)}K(0)K'(0) = 0. \tag{12}$$

Наконец, потребуем непрерывности кривизны профиля в точке сшивания

$$-\left[\frac{\delta''}{(1+(\delta')^2)^{3/2}}\right]_{z=0} = K(\theta_M).$$

Учитывая выражения (10), (11) для $\delta(z)$, находим при $V\delta_M \ll \pi$

$$2\Delta/\pi V\delta_M^2[1 + \Delta^2/(V\delta_M)^2]^{3/2} = K(\theta_M), \tag{13}$$

где

$$\delta_M = \delta + 8\Delta G/\pi^2 V, \tag{14}$$

$G = 0,916...$ – постоянная Каталана.

Уравнение (5) совместно с (7) и (12)–(14) определяет скорость роста иглы V и толщину зазора δ между ней и стенкой в функции переохлаждения Δ. Эти зависимости определялись численно. При фиксированном Δ задавались пробные значения V и δ. Из уравнений (7) и (14) находились величины θ_M и δ_M. Уравнение (5) интегрировалось с учетом разложения (6) от $\theta = \pi/2$ и находились величины $K(0)$, $K(\theta_M)$ и др., входящие в уравнения (12) и (13). Последние два уравнения использовались для определения V и δ при заданном Δ. Численные результаты при малых Δ описываются соотношениями

$$V \simeq 0,4\Delta^5, \qquad \delta \simeq 2\Delta^{-5} \qquad V\delta \simeq 0,8. \tag{15}$$

Удаленный от стенки хвост дендрита описывается при этом уравнением параболы $K(\theta) = (V/\Delta^2)\cos^3\theta$ с радиусом острия $\rho \equiv 1/K(0) \simeq 2,5\Delta^{-3}$.

Таким образом, рассмотренная модель дает для скорости роста дендрита вдоль стенки такую же зависимость от переохлаждения, $v \sim (D/d_0)\Delta^5$, какую модель пограничного слоя дает для свободного дендрита [9] (напомним, что в строгой теории скорость свободного дендрита пропорциональна Δ^4 [1, 2]). Имеется, однако, и принципиальное различие. Скорость свободного дендрита зависит от анизотропии поверхностного натяжения и обращается в нуль в изотропном случае [1, 2, 9], тогда как дендрит около стенки растет с конечной скоростью и при изотропном поверхностном натяжении. В заключение подчеркнем, что проблема роста несимметричного дендрита, рассмотренная здесь в рамках грубой модели, требует дальнейшего изучения более тонкими аналитическими методами.

Эта работа частично финансировалась фирмой "Volkswagen" (*I*/70027) и Российским фондом фундаментальных исследований (93-02-2113).

---

1. D.Kessler, J.Koplik, and H.Levine, Adv. Phys. **37**, 255 (1988).
2. E.A.Brener and V.I.Melnikov, Adv. Phys. **40**, 53 (1991).
3. Е.А.Бренер, М.Б.Гейликман, Д.Е.Темкин, ЖЭТФ **94**, 241 (1988).
4. E.Brener, H.Müller-Krumbhaar, Y.Saito, and D.Temkin, Phys. Rev. E **47**, 1151 (1993).
5. T.Ihle and H.Müller-Krumbhaar, Phys. Rev. Lett. **70**, 3083 (1993); T.Ihle and H.Müller-Krumbhaar, Phys. Rev. E **49**, 2972 (1994).
6. R.Kupferman, D.A.Kessler, and E.Ben-Jacob, to be published.
7. J.S.Langer, Rev. Mod. Phys. **52**, 1 (1980).
8. E.Ben-Jacob, N.Goldenfeld, J.S.Langer, and G.Shon, Phys. Rev. A **29**, 330 (1984).
9. J.S.Langer and D.C.Hong, Phys. Rev. A **34**, 1462 (1986).