

## Отбор устойчивого режима роста вершины параболического дендрита при кристаллизации многокомпонентных расплавов

© Д.В. Александров, Д.А. Пинигин

Уральский федеральный университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина,  
620083 Екатеринбург, Россия  
e-mail: Dmitri.Alexandrov@usu.ru

(Поступило в Редакцию 3 февраля 2012 г.)

Исследован свободный рост дендритного кристалла в неподвижном многокомпонентном расплаве. Развита математическая модель процесса и построено ее аналитическое решение. Получен критерий устойчивости двумерного параболического дендрита и определено отборное соотношение для скорости роста его вершины с учетом анизотропии поверхностного натяжения на границе раздела твердая фаза–расплав. Показано, что накопление примеси перед дендритом приводит к утоньшению его вершины и уменьшению скорости его движения. Теория содержит предельные переходы к ранее известным критериям дендритного роста в однокомпонентной и бинарной системах.

### Введение

Хорошо известно, что процессы затвердевания играют важную роль в металлургии и во многих случаях полностью определяют физические и механические свойства закристаллизовавшихся веществ. Математические модели таких процессов берут начало от классической постановки Стефана, описывающей кристаллизацию с плоским фронтом [1,2]. Однако такой режим затвердевания в практических условиях реализуется достаточно редко. Обычно плоский фронт разрушается благодаря возникновению термического или концентрационного переохлаждения [3–7]. Концентрационное переохлаждение, появляющееся перед фронтом кристаллизации в результате превышения градиентом концентрации своего температурного аналога, приводит к возникновению благоприятных условий для роста отдельных выступов твердой фазы, которые создают перед межфазной границей протяженную область дендритного роста [8].

Задача об отборе режима устойчивого роста дендрита в расплаве возникла из анализа решений Иванцова [9–11] и экспериментальных тестов для иглообразного кристалла параболической формы [12–18]. Проведенные сравнения и тесты привели к заключению, что непрерывное семейство изотропных решений Иванцова неустойчиво: иглообразный кристалл теряет свою исходную параболическую форму в стационарном режиме роста (см. для обзора работу [19]). Поэтому решение Иванцова используется в качестве нулевого приближения для анализа устойчивого роста, в котором роль малого параметра играет параметр анизотропии поверхностного натяжения или анизотропии кинетики роста [20]. После установления критерия устойчивого роста вершины дендрита в однокомпонентной неподвижной среде [19,20] задача была расширена на случай конвективного движения среды [21–23], на случай роста дендрита в бинарной системе без конвекции [24] и на случай дендритного роста в бинарной системе с конвек-

цией [25,26]. Во многих ситуациях, однако, необходимо проводить сравнительный анализ роста дендритов с учетом многокомпонентности системы [27].

В настоящей работе, являющейся продолжением и развитием упомянутых исследований, изучается влияние многокомпонентности расплава при учете нелинейности уравнения ликвидус [28,29] на отбор устойчивого режима движения вершины параболического дендрита.

### 1. Постановка задачи

Процесс роста кристалла с движущейся в глубь расплава границей фазового перехода описывается нелинейной термодиффузионной задачей типа Стефана. При этом температура  $T_{\text{int}}$  межфазной границы кристалл–жидкость для однокомпонентной системы зависит от ее локальной кривизны  $1/R$ , температуры кристаллизации вещества  $T_0$ , коэффициента поверхностного натяжения  $\sigma$  и скрытой теплоты кристаллизации  $Q$

$$T_{\text{int}} = T_0 - \frac{\sigma T_0}{QR}. \quad (1)$$

Температурное поле в твердой ( $T_s$ ) и жидкой ( $T_l$ ) фазах системы описывается классическими уравнениями теплопроводности

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = D_T \Delta T_s, \quad \frac{\partial T_l}{\partial t} = D_T \Delta T_l, \quad (2)$$

где  $D_T$  — коэффициент температуропроводности,  $t$  — время, а  $\Delta$  — оператор Лапласа. Для простоты демонстрации анализа задачи рассмотрим сначала случай трехкомпонентной системы, а затем выполним его обобщение на многокомпонентный расплав. Для концентраций примеси  $C_l$  и  $B_l$ , растворенных в жидкости, имеем уравнения диффузии [30–32]:

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = D_C \Delta C_l, \quad \frac{\partial B_l}{\partial t} = D_B \Delta B_l, \quad (3)$$

где  $D_C$  и  $D_B$  — коэффициенты диффузии примеси.

Специально отметим, что для более строгого описания диффузии в многокомпонентном расплаве уравнения Фика (3) нужно было бы, вообще говоря, заменить на уравнения Онзагера [32,33]. Использование же более простых выражений (3) справедливо, когда переохлаждение в системе невелико [32], а разница между концентрациями примесей в расплаве около межфазной границы и вдали от нее составляет порядка 20% [33]. При увеличении переохлаждения и соответствующей ему скорости роста дендрита необходимо также учитывать локальную неравновесность процесса кристаллизации, приводящую к гиперболическим уравнениям массопереноса [34]. Поэтому, учитывая вышесказанное, для упрощения развиваемой теории будем здесь использовать более простые выражения (3), часто применяемые для описания массопереноса в многокомпонентных системах (см., например, [30–32]).

На подвижной границе раздела фаз выполняются условия равенства температуры поверхности температуре фазового перехода, непрерывности температуры, а также условия баланса тепла и массы

$$T_l = T_{\text{int}} + F(C_l, B_l), \quad T_s = T_l,$$

$$Q\mathbf{v}\mathbf{n} = D_T c_p (\nabla T_s - \nabla T_l) \mathbf{n}, \quad (4)$$

$$(1 - k_C) C_l \mathbf{v}\mathbf{n} + D_C \nabla C_l \mathbf{n} = 0,$$

$$(1 - k_B) B_l \mathbf{v}\mathbf{n} + D_B \nabla B_l \mathbf{n} = 0, \quad (5)$$

где  $\mathbf{v}\mathbf{n}$  — нормальная скорость движения поверхности,  $c_p$  — теплоемкость,  $k_C$  и  $k_B$  равновесные коэффициенты распределения примеси соответствующих компонент,  $F(C_l, B_l)$  выражает в общем случае произвольную зависимость температуры фазового перехода от концентраций примеси  $C_l$  и  $B_l$ . Отметим, что в случае линейной фазовой диаграммы системы эта функция выражается через постоянные коэффициенты наклона  $m$  и  $n$  плоскости ликвидус, т.е.  $F(C_l, B_l) = -mC_l - nB_l$  [30].

## 2. Аналитическое решение

Примем, что параболический дендрит растет с постоянной скоростью  $V$  вдоль пространственной оси  $z$

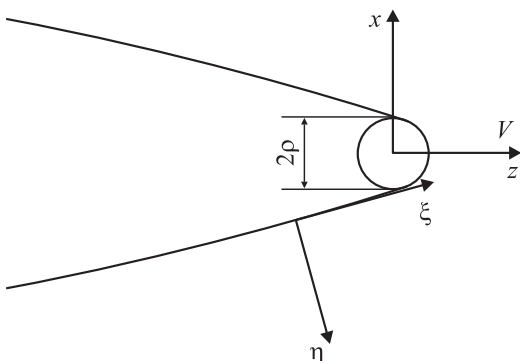


Рис. 1. Схематическое изображение роста дендрита.

(рис. 1). Введем параболические координаты  $\xi$  и  $\eta$ , связанные с декартовыми координатами  $x$  и  $z$  следующими соотношениями:

$$x = \frac{\rho}{2} \sqrt{\xi \eta}, \quad z = \frac{\rho}{2} (\eta - \xi), \quad (6)$$

где  $\rho$  — радиус кривизны вершины дендрита, а межфазная поверхность находится на уровне  $\eta = 1$ .

Определяя решение задачи, зависящее только от переменной  $\eta$ , запишем решения уравнений (2) и (3) в параболических координатах (6) в виде (см. также работы [25,26])

$$T_l(\eta) = T_i + (T_\infty - T_i) \frac{I(\eta)}{I(\infty)},$$

$$C_l(\eta) = C_i + (C_\infty - C_i) \frac{I_1(\eta)}{I_1(\infty)},$$

$$B_l(\eta) = B_i + (B_\infty - B_i) \frac{I_2(\eta)}{I_2(\infty)}, \quad (7)$$

где  $C_i, B_i$  и  $T_i$  — концентрации примесей и температура на межфазной границе. В выражениях (7) введены следующие обозначения:

$$T_i = T_\infty + \frac{Q}{c_p} P_g \exp(P_g) I(\infty),$$

$$I(\eta) = \int_1^\eta \exp[-P_g \eta'] \frac{d\eta'}{\sqrt{\eta'}}, \quad P_g = \frac{\rho V}{2D_T},$$

$$C_i = \frac{C_\infty}{1 - (1 - k_C) \exp[P_g D_T / D_C] I_1(\infty) P_g D_T / D_C},$$

$$I_1(\eta) = \int_1^\eta \exp\left[-P_g \frac{D_T}{D_C} \eta'\right] \frac{d\eta'}{\sqrt{\eta'}},$$

$$B_i = \frac{B_\infty}{1 - (1 - k_B) \exp[P_g D_T / D_B] I_2(\infty) P_g D_T / D_B},$$

$$I_2(\eta) = \int_1^\eta \exp\left[-P_g \frac{D_T}{D_B} \eta'\right] \frac{d\eta'}{\sqrt{\eta'}}.$$

Здесь  $P_g$  — ростовое число Пекле,  $T_\infty, C_\infty$  и  $B_\infty$  — температура и концентрации примесей в жидкости вдали от границы раздела фаз.

## 3. Условие микроскопической разрешимости

В случае слабых эффектов поверхностного натяжения решения с постоянной скоростью роста дендрита могут быть найдены в окрестности классических решений параболического дендрита Иванцова, если выполняется условие микроскопической разрешимости. Оно позволяет отобрать устойчивый режим роста дендрита через

скорость  $V$  движения его вершины с радиусом кривизны  $\rho$  (т.е. при наложенной симметрии кристаллической решетки, учитывающей анизотропию преимущественного направления роста кристалла) [19,20]. Далее будем использовать условие микроскопической разрешимости, полученное в работе [35], которое можно представить в виде ( $i$  — мнимая единица)

$$\int_{-\infty}^{\infty} G[X_0(l)]Y_m(l)dl = 0, \quad Y_m(l) = \exp\left[i \int_0^l k_m(l_1)dl_1\right]. \quad (8)$$

Выражение (8) может быть использовано для анализа различного вида подвижных границ фронтального типа (например, „вязких пальцев“ Саффмана–Тэйлора [19,36]). Для этого нужно знать оператор кривизны  $G$  и решения  $X_0(l)$ , которые дают функции  $k_m(l)$  локальной ненулевой маргинальной моды сопряженного дисперсионного уравнения для возмущений (см., например, [36]). Выражение (8) выводится с помощью метода Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ-метода [37]), который был применен для нахождения режимов распространения фронтов пламени [38] и дендритной структуры [39]. Ниже определены элементы  $Y_m(l)$ , входящие в соотношение (9) для роста дендрита в трехкомпонентном расплаве.

#### 4. Линейный анализ устойчивости

Используем результаты линейного анализа устойчивости работ [23,25,26], где скорость роста возмущений имела длину волны, много меньшую по сравнению с характерным пространственным масштабом невозмущенного решения. Введем новые локальные декартовы координаты  $(x_c, y_c)$ , связанные с кристаллом. Здесь  $x_c$  и  $y_c$  соответственно обозначают тангенциальную и нормальные оси к межфазной границе в точке, где нормаль к поверхности имеет с осью роста угол  $\theta$ . Выражая теперь производные температуры и концентрации из уравнений (4) и (5)

$$\frac{\partial T_l}{\partial y_c} = \frac{Q\bar{v}}{D_T c_p}, \quad \frac{\partial C_l}{\partial y_c} = \frac{C_i(1-k_C)\bar{v}}{D_C},$$

$$\frac{\partial B_l}{\partial y_c} = \frac{B_i(1-k_B)\bar{v}}{D_B}, \quad y_c = 0, \quad (9)$$

находим разложение температуры и концентраций примеси в окрестности вершины дендрита

$$\bar{T}_l = T_0 - \frac{QV}{D_T c_p} \cos \theta y_c,$$

$$\bar{C}_l = C_i - \frac{C_i(1-k_C)V}{D_C} \cos \theta y_c, \quad (10)$$

$$\bar{B}_l = B_i - \frac{B_i(1-k_B)V}{D_B} \cos \theta y_c, \quad \bar{v} = -V \cos \theta.$$

Обозначим через  $\xi'$  и  $T_s'$  возмущения стационарной межфазной поверхности с длиной волны  $\lambda$  (которая много меньше, чем радиус  $\rho$  вершины дендрита) и температурного поля в твердой фазе, которые можно представить в виде [23,25,26]

$$\xi' = \Sigma \exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c),$$

$$T_s' = T_{s0} \exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c). \quad (11)$$

Здесь  $\Sigma$  и  $T_{s0}$  — амплитуды возмущений поверхности дендрита и температуры в твердой фазе,  $\omega$  и  $k$  — соответственно частота и волновое число возмущений, параметр  $\varepsilon$  имеет тот же знак, что и вещественная часть  $k$ , поскольку возмущения не могут неограниченно возрастать при  $y_c \rightarrow +\infty$ .

Рассмотрим теперь уравнение для температурных возмущений в расплаве. Удерживая лишь линейные слагаемые, из (2) будем иметь

$$\frac{\partial T_l'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial T_l'}{\partial x_c} + \bar{v} \frac{\partial T_l'}{\partial y_c} - \frac{\partial \xi'}{\partial t} \frac{d\bar{T}_l}{dy_c} = D_T \left( \frac{\partial^2 T_l'}{\partial x_c^2} + \frac{\partial^2 T_l'}{\partial y_c^2} \right),$$

$$\bar{u} = -V \sin \theta. \quad (12)$$

По аналогии с теорией, развитой в работах [23,25,26] для бинарных систем, решение уравнения (12) будем искать в виде

$$T_l' = g(y_c) \exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c). \quad (13)$$

Подставляя (13) в (12), получим следующее уравнение для амплитуды  $g(y_c)$ :

$$\frac{d^2 g}{dy_c^2} - 2\varepsilon k \frac{dg}{dy_c} = L(g(y_c), y_c),$$

$$L = [\omega + kV\varepsilon \exp(-i\varepsilon\theta)] \frac{g(y_c)}{D_T} + \frac{\omega QV \cos \theta}{c_p D_T^2} \Sigma. \quad (14)$$

Решение уравнения (14) будем искать в окрестности решения Маллинза–Секерки [15,35,36] с постоянной амплитудой  $g(y_c) - \bar{T}_{l0} = \text{const}$ . Подстановка  $T_{l0}$  в правую часть первого выражения (14) дает первое приближение для  $g(y_c)$

$$g(y_c) = T_{l0} - \left[ \left( \frac{\omega}{2\varepsilon k} + \frac{V}{2} \exp(-i\varepsilon\theta) \right) \times \frac{T_{l0}}{D_T} + \frac{\omega QV \cos \theta}{2c_p D_T^2 \varepsilon k} \Sigma \right] y_c. \quad (15)$$

В (15) учтено сильное неравенство  $V/D_T \ll k$  (здесь  $k$  оценивается по теории Маллинза–Секерки как  $10^7 \text{ м}^{-1}$  [15,35,36], а  $V/D_T$  как  $10^2 \text{ м}^{-1}$  для бинарных металлических систем).

Уравнения (3), записанные для возмущений концентраций примеси  $C_l'$  и  $B_l'$  в жидкости, решаются аналогичным образом:

$$C_l' = h_1(y_c) \exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c),$$

$$B_l' = h_2(y_c) \exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c), \quad (16)$$

$$h_1(y_c) = C_{i0} + \left\{ [\omega + k\varepsilon V \exp(-i\varepsilon\theta)] \frac{C_{i0}}{D_C} + \frac{\omega C_i(1 - k_C)V \cos \theta}{D_C^2} \Sigma \right\} \frac{y_c}{V \cos \theta / D_C - 2\varepsilon k},$$

$$h_2(y_c) = B_{i0} + \left\{ [\omega + k\varepsilon V \exp(-i\varepsilon\theta)] \frac{B_{i0}}{D_B} + \frac{\omega B_i(1 - k_B)V \cos \theta}{D_B^2} \Sigma \right\} \frac{y_c}{V \cos \theta / D_B - 2\varepsilon k}.$$

Возмущая теперь граничные условия (4) и (5), получаем следующие соотношения на межфазной границе  $y_c = 0$ :

$$T_l' = \frac{QV \cos \theta}{D_{TCp}} \xi' - mC_l' - nB_l' + \left( \frac{mC_i(1 - k_C)V \cos \theta}{D_C} + \frac{nB_i(1 - k_B)V \cos \theta}{D_B} \right) \xi' - \frac{Qd}{c_p} \frac{\partial^2 \xi'}{\partial y_c^2},$$

$$T_s' = mC_l' + nB_l' - \left( \frac{mC_i(1 - k_C)V \cos \theta}{D_C} + \frac{nB_i(1 - k_B)V \cos \theta}{D_B} \right) \xi' + \frac{Qd}{c_p} \frac{\partial^2 \xi'}{\partial y_c^2},$$

$$\frac{Q}{D_{TCp}} \frac{\partial \xi'}{\partial t} = \frac{\partial T_s'}{\partial y_c} - \frac{\partial T_l'}{\partial y_c} - \frac{QV^2 \cos^2 \theta}{D_{TCp}^2} \xi', \quad (17)$$

$$\frac{1 - k_C}{D_C} \left( C_i \frac{\partial \xi'}{\partial t} + V \cos \theta C_l' \right) + \frac{\partial C_l'}{\partial y_c} + \frac{C_i k_C(1 - k_C)V^2 \cos^2 \theta}{D_C^2} \xi' = 0,$$

$$\frac{1 - k_B}{D_B} \left( B_i \frac{\partial \xi'}{\partial t} + V \cos \theta B_l' \right) + \frac{\partial B_l'}{\partial y_c} + \frac{B_i k_B(1 - k_B)V^2 \cos^2 \theta}{D_B^2} \xi' = 0,$$

где  $d = \sigma c_p T_0 / Q^2$  обозначает капиллярную длину,  $m = -\partial F / \partial C_l$ ,  $n = -\partial F / \partial B_l$ , вычисленные на поверхности дендрита при  $C_l = C_i$  и  $B_l = B_i$ . Подставляя теперь возмущения (11), (13) и (16) в систему (17), получим пять уравнений для амплитуд  $\Sigma$ ,  $T_{l0}$ ,  $T_{s0}$ ,  $C_{l0}$  и  $B_{l0}$ . Равенство нулю определителя этой системы, составленного для коэффициентов при амплитудах возмущений, определяет уравнение для волнового числа  $k$ . В системе координат, чье начало движется в направлении нормали к межфазной границе со скоростью  $V \cos \theta$ , вследствие вращательной симметрии системы, возмущение с волновым числом  $k$  растет со скоростью  $\omega(k)$ . Если теперь начало координат движется в направлении оси  $z$  с постоянной скоростью  $V$ , то скорость роста возмущения будет  $\omega(k) + iVk \sin \theta$  благодаря тангенциальной скорости новой системы координат  $V \sin \theta$  [21]. Поэтому заменяя  $\omega(k)$  через  $-iVk \sin \theta$  получим следующее

уравнение для волнового числа на кривой нейтральной устойчивости при  $\omega = 0$ :

$$k = k_{TC} \sqrt{\frac{\exp(i\theta)}{1 - \beta \cos 4\theta}}, \quad k_{TC} = -\sqrt{\frac{VP}{2d_0 D_T}},$$

$$P = 1 + 2 \frac{mC_i(1 - k_C)D_{TCp}}{QD_C} + 2 \frac{nB_i(1 - k_B)D_{TCp}}{QD_B}. \quad (18)$$

В выражении (18) в соответствии с оценками  $k \sim 10^7 \text{ м}^{-1}$ ,  $V/D_T \sim 10^2 \text{ м}^{-1}$ ,  $V/D_C \sim 10^6 \text{ м}^{-1}$ ,  $V/D_B \sim 10^6 \text{ м}^{-1}$ ,  $d \sim 10^{-10} \text{ м}$ ,  $\rho \sim 10^{-5} \text{ м}$  учтены только слагаемые, соответствующие решению для однокомпонентной, бинарной и трехкомпонентной систем. При записи соотношения (18) также учтено выражение для капиллярной длины  $d(\theta) = d_0(1 - \beta \cos 4\theta)$  и малость угла  $\theta$ , где  $\beta = 15\varepsilon_c \ll 1$  — фактор анизотропии,  $\varepsilon_c$  — параметр анизотропии поверхностной энергии на межфазной границе,  $d_0$  — капиллярная константа [23,27].

Отметим, что волновое число (18) при  $C_i = 0$  ( $D_C \rightarrow \infty$ ) и  $B_i = 0$  ( $D_B \rightarrow \infty$ ) переходит в соответствующее выражение Маллинза–Секерки для однокомпонентной системы [15,35,36]. Выражение (18) также содержит корректный предельный переход к волновому числу для бинарной системы [24] при  $C_i = 0$  ( $D_C \rightarrow \infty$ ) или  $B_i = 0$  ( $D_B \rightarrow \infty$ ). При этом при увеличении концентрации примеси третьего компонента критическое волновое число увеличивается. Итак, соотношение (18) дает критическое волновое число для возмущений на вершине дендрита в рамках трехкомпонентной термоконцентрационной задачи. Очевидно, что в случае большего количества растворенных компонент, в выражение для параметра  $P$  необходимо добавить соответствующие слагаемые.

## 5. Критерий устойчивого роста вершины дендрита

Для определения критерия устойчивости воспользуемся условием микроскопической разрешимости (8). Учитывая, что

$$l = \frac{-\rho}{2} \left[ \frac{\tan \theta}{\cos \theta} + \ln \left( \frac{1}{\cos \theta} + \tan \theta \right) \right]$$

(см., например, [35]), условие разрешимости (8) по аналогии с работой [23] запишем в виде

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\chi) \exp[\sqrt{G}\psi(\chi)] d\chi = 0, \quad \chi = \tan \theta, \quad (19)$$

$$\psi(\chi) = \frac{i}{2} \int_0^\chi \sqrt{\frac{(1 + i\chi')(1 + \chi'^2)^{5/2}}{B(\chi')}} d\chi',$$

$$B(\chi) = (1 - \beta)(1 + \chi^2)^2 + 8\beta\chi^2,$$

где константа  $C$  нормирована на безразмерный множитель  $VP\rho^2/(2d_0 D_T)$ .

Далее оценим интеграл (19) в пределе малой анизотропии методом, развитым в работе [23]. Числитель подинтегральной функции обращается в ноль при  $\chi = i$  (стационарная фазовая точка), а знаменатель — при  $\chi = i(1 - \sqrt{2\beta})$  (точка сингулярности). Поскольку главный вклад в интеграл дается окрестностью точки  $\chi = i$  [23], функция  $\psi(\chi)$  может быть приближена следующим выражением:

$$\psi(\chi) = 2^{9/8} \beta^{7/8} \int_{1/\sqrt{2\beta}}^{\phi} \frac{\phi'^{7/4} d\phi'}{\sqrt{\phi'^2 - 1}},$$

$$\chi = i(1 - \sqrt{2\beta}\phi). \quad (20)$$

Интеграл (20) может быть рассчитан с помощью приближенных методов, развитых в работе [23] при анализе задачи для роста дендрита в однокомпонентной системе с конвективным течением. Следуя этой методике, отметим, что существуют два главных вклада в интеграл (20): вклад интегрирования по петле и вклад от стационарных фазовых точек. Первый из них рассчитывается на расстоянии  $\phi' \sim 0$ , что дает осциллирующий фактор к экспоненциально малой величине интеграла  $\cos(A_1\sqrt{C}\beta^{7/8})$ . Каждая стационарная фазовая точка дает вклад с осциллирующей частью вида  $\cos(A_2\sqrt{C}\beta^{7/8})$ , где  $A_1$  и  $A_2$  — постоянные. Нейтрализация суммы этих вкладов определяет величину  $C = q^2/\beta^{7/4}$ , где  $q$  — целое число. Теперь учет нормировки в соотношении (20) приводит к выражению для масштабного фактора  $\sigma^*$  в виде

$$\sigma^* \equiv \frac{2d_0D_T}{\rho^2V} = \sigma_0\beta^{7/4} \left( 1 + 2 \frac{D_Tc_p m C_i (1 - k_C)}{QD_C} + 2 \frac{D_Tc_p n B_i (1 - k_B)}{QD_B} \right), \quad (21)$$

где  $\sigma_0$  — численная постоянная, определяемая с помощью асимптотических методов [20] или с помощью совмещения модельных предсказаний и экспериментальных значений [40,41].

### Заключение

Выражение (21) является центральным результатом развиваемой теории. Оно определяет критерий для устойчивой моды роста вершины дендрита в трехкомпонентном расплаве с учетом анизотропии поверхностной энергии (параметр  $\beta$ ) и неизотермичности жидкости. Критерий (21) является обобщением ранее полученных результатов для однокомпонентного [15,35,36] и бинарного расплавов [24] в отсутствии конвекции.

На рис. 2 и 3 показана зависимость обеих частей выражения (21) от ростового числа Пекле. Легко заметить, что увеличение концентрации примеси  $B_\infty$  третьего компонента, а также уменьшение его коэффициента

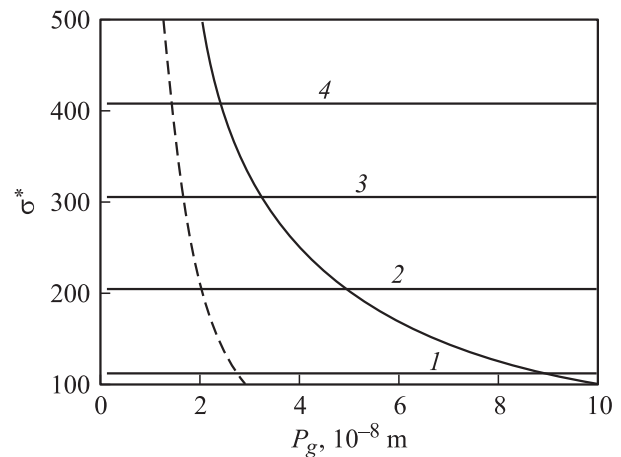


Рис. 2. Масштабный фактор как функция от числа Пекле  $P_g = \rho V/2D_T$  в соответствии с выражением (21) при фиксированном радиусе кривизны вершины дендрита  $\rho$  (сплошная линия,  $d_0/\rho = 10^{-5}$ ) и фиксированной скорости  $V$  (штриховая линия,  $Vd_0/D_T = 1.7 \cdot 10^{-13}$ ) в зависимости от концентрации примеси  $B_\infty = 0.1$  (1), 1 (2), 2 (3), 3 at.% (4) и  $k_B = 0.5$ . Значения расчетных параметров системы [23,25,26]:  $D_T/D_C = D_T/D_B = 5 \cdot 10^3$ ,  $k_C = 0.5$ ,  $C_\infty = 1$  at.%,  $m = n = 10^\circ\text{C/at.}\%$ ,  $Q/c_p = 300^\circ\text{C}$ ,  $\beta = 0.75$ ,  $\sigma_0 = 1$ .

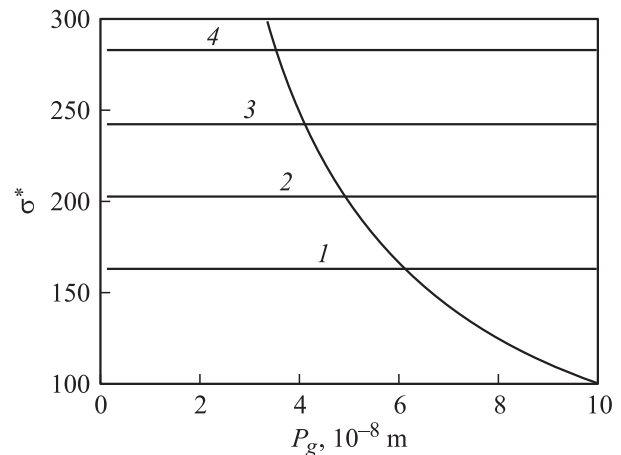


Рис. 3. Масштабный фактор как функция от числа Пекле  $P_g = \rho V/2D_T$  в соответствии с выражением (21) при фиксированном радиусе кривизны вершины дендрита в зависимости от коэффициента распределения примеси  $k_B = 0.7$  (1), 0.5 (2), 0.3 (3), 0.1 (4) и  $B_\infty = 1$  at.%. Значения расчетных параметров системы соответствуют рис. 2.

распределения  $k_B$  (увеличение доли вытесняемой перед дендритом примеси) приводят к уменьшению отбираемых значений числа Пекле, скорости затвердевания  $V$  и радиуса кривизны вершины дендрита  $\rho$ , которые определяются точками пересечения гипербол и соответствующих линий на графиках. Другими словами, накопление примеси перед дендритом приводит к утоньшению его вершины и замедлению скорости его роста.

Критерий (21) легко обобщить на случай многокомпонентной системы

$$\sigma^* \equiv \frac{2d_0 D_T}{\rho^2 V} = \sigma_0 \beta^{7/4} \left( 1 + 2 \frac{D_T c_p}{Q} \sum_{j=1}^N \frac{m_j C_j (1 - k_j)}{D_j} \right), \quad (22)$$

где  $N$  — количество компонент примеси,  $m_j = -\partial F / \partial C_j$ ,  $F = F(C_1, C_2, \dots)$ , а  $C_j$ ,  $k_j$  и  $D_j$  — концентрации примеси, коэффициенты ее распределения и диффузии для  $j$ -ой компоненты. Отметим также ряд важных особенностей развиваемой теории.

Найденные критерии (21) и (22) устойчивого роста дендрита в многокомпонентной системе могут быть проверены методами компьютерного моделирования, например, методом фазового поля, который ранее применялся для изучения свободного роста дендрита с конвекцией в однокомпонентной системе [42,43]. Найденные критерии устойчивости также могут быть проверены экспериментально, как это сделано для дендритного роста с вынужденным течением прозрачной жидкости [44].

Развиваемая в настоящей работе теория, а также теория предшествующих исследований [23–26,35,36] ограничены анализом относительно малых значений ростового числа Пекле  $P_g = \rho V / 2D_T$ . Иными словами, теория справедлива лишь для значений малых градиентов или переохлаждений жидкости, обеспечивающих малые скорости роста дендрита. Для расширенного анализа повышенных скоростей роста и произвольных чисел Пекле требуется специально рассмотреть устойчивость высокоскоростных режимов дендритного затвердевания. Получение и анализ условия микроскопической разрешимости для высокоскоростного локально-неравновесного режима роста могут, например, быть выполнены в соответствии с теорией работ [45–47].

Полученные в настоящей работе критерии (18), (21) и (22) для двухмерного дендрита будут справедливы также и в трехмерном случае, поскольку они не зависят от пространственной размерности задачи. Для трехмерного дендрита вместо выражений (7) необходимо использовать соответствующие решения термодиффузионной задачи, найденные в работе [48]. При этом в соотношения (18), (21) и (22) необходимо просто подставлять другие граничные значения концентраций примеси на поверхности дендрита, определяемые решением трехмерной задачи [48].

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 11–01–00137 и 10–01–96045 — Урал) и ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 гг.

## Список литературы

- [1] Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 180 с.
- [2] Kurz W., Fisher D.J. Fundamentals of Solidification. Aedermannsdorf: Trans. Tech., 1992. 305 p.
- [3] Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization. New York–Wallingford: Begell House Inc., 2001. 183 p.
- [4] Herlach D.M., Galenko P., Holland-Moritz D. Metastable Solids from Undercooled Melts. Amsterdam: Elsevier, 2007. 448 p.
- [5] Asta M., Beckermann C., Karma A., Kurz W., Napolitano R., Plapp M., Purdy G., Rappaz M., Trivedi R. // Acta Mater. 2009. Vol. 57. P. 941–971.
- [6] Galenko P.K., Funke O., Wang J., Herlach D.M. // Mater. Sci. Eng. A. 2004. Vol. 375–377. P. 488–492.
- [7] Funke O., Phanikumar G., Galenko P.K., Chernova L., Reutzl S., Kolbe M., Herlach D.M. // J. Crust. Growth. 2006. Vol. 297. P. 211–222.
- [8] Galenko P.K., Zhuravlev V.A. Physics of Dendrites. Singapore: World Scientific, 1994. 199 p.
- [9] Иванцов Г.П. // ДАН СССР. 1947. Т. 58. № 4. С. 567–570.
- [10] Иванцов Г.П. // ДАН СССР. 1952. Т. 83. № 4. С. 573–576.
- [11] Иванцов Г.П. Рост Кристаллов. Т. 3 / Под ред. А.В. Шубникова и П.П. Шефталы. М.: Академия наук. 1961. С. 75–84.
- [12] Темкин Д.Е. // ДАН СССР. 1960. Т.132. № 6. С. 1307–1310.
- [13] Темкин Д.Е. // Кристаллография. 1962. Т. 7. № 3. С. 446–450.
- [14] Horvay G., Cahn J.W. // Acta Metall. 1961. Vol. 9. P. 695–705.
- [15] Mullins W.W., Sekerka R.F. // J. Appl. Phys. 1964. Vol. 35. P. 444–451.
- [16] Nash G.E., Glicksman M.E. // Acta Metall. 1974. Vol. 22. P. 1283–1290.
- [17] Langer J.S., Muller-Krumbhaar H. // Acta Metall. 1978. Vol. 26. P. 1681–1687.
- [18] Willnecker R., Herlach D., Feuerbacher B. // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 62. P. 2707–2710.
- [19] Kessler D.A., Koplik J., Levine H. // Adv. Phys. 1988. Vol. 37. P. 255–339.
- [20] Brener E., Melnikov V.I. // Adv. Phys. 1991. Vol. 40. P. 53–97.
- [21] Dash S.K., Gill W.N. // Int. J. Heat Mass Transf. 1984. Vol. 27. P. 1345–1356.
- [22] Ben-Amar M., Bouisou Ph., Pelce P. // J. Cryst. Growth. 1988. Vol. 92. P. 97–100.
- [23] Bouisou Ph., Pelce P. // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 40. P. 6673–6680.
- [24] Ben Amar M., Pelce P. // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 39. P. 4263–4269.
- [25] Alexandrov D.V., Galenko P.K., Herlach D.M. // J. Cryst. Growth. 2010. Vol. 312. P. 2122–2127.
- [26] Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М. // Вестн. Удмурт. ун-та. 2010. Вып. 1. С. 3–16.
- [27] Galenko P.K., Herlach D.M. In: Phase Transformations in Multicomponent Systems / Ed. By D.M. Herlach. Weinheim: Wiley-VCH. 2008. P. 353–373.
- [28] Александров Д.В., Иванов А.А. // ЖЭТФ. 2009. Т. 135. С. 942–950.
- [29] Александров Д.В., Рахматуллина И.В., Малыгин А.П. // Расплавы. 2010. № 4. С. 88–96.
- [30] Anderson D.M. // J. Fluid Mech. 2003. Vol. 483. P. 165–197.
- [31] Bourne J.P., Atkinson C., Reed R.C. // Metall. Mater. Trans. A. 1994. Vol. 25A. P. 2683–2694.
- [32] Hunziker O. // Acta Mater. 2001. Vol. 49. P. 4191–4203.
- [33] Kirkaldy J.S., Young D.J. Diffusion in the Condensed State. London: The Institute of Metals, 1987. 527 p.
- [34] Galenko P., Jou D. // Phys. Rev. E. 2005. Vol. 71. P. 046125–1–046125–13.

- [35] *Pelce P., Bensimon D.* // Nucl. Phys. B. 1987. Vol. 2. P. 259–270.
- [36] *Pelce P.* Dynamics of curved fronts. Boston. Academic Press, 1988. 514 p.
- [37] *Фрёман Н., Фрёман П.У.* ВКБ-приближение. М.: Мир, 1967. 167 с.
- [38] *Zel'dovich Ya., Istratov A.G., Kidin N.I., Librovich V.B.* // Comb. Sci. Tech. 1980. Vol. 24. P. 1–13.
- [39] *Caroli B., Caroli C., Roulet B., Langer J.S.* // Phys. Rev. A. 1986. Vol. 33. P. 442–452.
- [40] *Galenko P., Reutzel S., Herlach D., Danilov D., Nestler B.* // Acta Mater. 2007. Vol. 55. P. 6834–6842.
- [41] *Galenko P., Reutzel S., Herlach D., Fries S., Steinbach I., Apel M.* // Acta Mater. 2009. Vol. 57. P. 6166–6175.
- [42] *Tong X., Beckermann C., Karma A., Li Q.* // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 63. P. 061601–1–061601–16.
- [43] *Jeong J.-H., Goldenfeld N., Dantzig J.A.* // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64. P. 041602–1–041602–14.
- [44] *Emsellem V., Tabeling P.* // J. Cryst. Growth. 1995. Vol. 156. P. 285–295.
- [45] *Aleksandrov D.V., Mansurov V.V., Galenko P.K.* // Physics Doklady. 1996. Vol. 41. P. 511–513.
- [46] *Trivedi R., Kurz W.* // Acta Metall. 1986. Vol. 34. P. 1663–1670.
- [47] *Galenko P.K., Danilov D.A.* // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 69. P. 051608–1–051608–14.
- [48] *Alexandrov D.V., Malygin A.P., Galenko P.K.* // Proc. of the 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Heat Trans., Fluid. and Thermodyn., HEFAT–2011. Pointe Aux Piments. Mauritius, 2011. P. 299–304.