1989 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 31, в. 3
1989 SOLID STATE PHYSICS Vol. 31, № 3

УДК 548.4 : 539.1.04

МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ВКЛЮЧЕНИЙ НОВОЙ ФАЗЫ В ПЕРЕСЫЩЕННОМ ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ

А. С. Абызов, В. В. Слезов, Л. В. Танатаров

Рассмотрена эволюция формы растущего включения новой фазы в пересыщенном твердом растворе атомов примеси (из которых состоит включение) при произвольном распределении их концентраций. Проведен линейный и нелинейный анализы морфологической устойчивости включений.

Впервые задача о морфологической устойчивости сферических включений новой фазы, растущих в пересыщенном твердом растворе, была поставлена и решена в работе [1]. Наиболее важным ее результатом оказался вывод о неустойчивости формы растущего включения по достижении им определенного предельного размера. Форма его описывалась набором размерных параметров, описывающих отклонение от сферичности; задача решалась в линейном приближении по этим параметрам. При этом не рассматривались ни поверхностная диффузия, ни граничная кинетика. Эти факторы были учены в работе [2], где была также показана связь задачи о морфологической устойчивости с задачей об определении скорости движения включения как целого. Данная работа является естественным продолжением работы [2].

1. Постановка задачи и вывод основных уравнений

Допустим, что концентрация примесных атомов в пересыщенном твердом растворе в изотропной матрице не является пространственно-однородной. В этом случае геометрия включений даже в изотропном материале должна отражать эту неоднородность. Если размеры включений малы по сравнению с масштабом указанной неоднородности, можно считать «внешнее» поле концентраций (т. е. то, которое было бы на месте включения в его отсутствие) зависящим только от одной переменной — координаты z, направленной в сторону градиента этого поля. Истинное поле концентрации вблизи включения, определяющее его рост и форму, должно обладать аксиальной симметрией относительно оси, параллельной этому градиенту. То же можно сказать и о форме включения, если его материал изотропен.

Пусть $\mathbf{r}_s$ — радиус-вектор некоторой точки поверхности включения (или поры, если идет речь о растворе вакансий), $\mathbf{r}_c$ — радиус-вектор его (ее) центра тяжести. Поскольку рост включения происходит по нормали $\mathbf{n}$ к его поверхности, можно записать $\mathbf{r}_s = v_s\mathbf{n}$. Как известно [3], направление движения центра тяжести включения совпадает с направлением градиента «внешней» концентрации. Пусть $\mathbf{k}$ — орт этого направления. Можно записать $\mathbf{r}_c = v_c\mathbf{k}$. Введем обозначения $r(\vartheta) = |\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_c|$, $\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_c = \mathbf{m}r(\vartheta)$, где ϑ — угол между ортами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{m} = (\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_c)/|\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_c|$. С одной стороны, $\dot{\mathbf{r}}_s - \dot{\mathbf{r}}_c = v_s\mathbf{n} - v_c\mathbf{k}$, с другой стороны, $\dot{r}_s - \dot{r}_c = \dot{r}(\vartheta)\mathbf{m} + r(\vartheta)\dot{\mathbf{m}}$, откуда

$\dot r(\vartheta)\,\mathbf{m}+r(\vartheta)\,\dot{\mathbf{m}}=v_s\mathbf{n}-v_c\mathbf{k}$. Умножая обе части на $\mathbf{m}$ и учитывая, что $\mathbf{m}\perp\dot{\mathbf{m}}$ и $\mathbf{km}=\cos\vartheta$, получаем $\dot r(\vartheta)=v_s(\mathbf{mn})-v_c\cos\vartheta$. По определению,

$$\mathbf{n}=[\partial(\mathbf{r}_s-\mathbf{r}_c)/\partial\vartheta;.\ \partial(\mathbf{r}_s-\mathbf{r}_c/\partial\varphi]/(|\partial(\mathbf{r}_s-\mathbf{r}_c)/\partial\vartheta|\cdot\ |\partial(\mathbf{r}_s-\mathbf{r}_c)/\partial\varphi|).$$

Здесь φ — азимутальный угол сферической системы координат с началом в точке $\mathbf{r}_c$. Если обозначить координатные орты этой системы через $\mathbf{I}_r$, $\mathbf{I}_\vartheta$, $\mathbf{I}_\varphi$, то можно записать $\partial(\mathbf{r}_s-\mathbf{r}_c)/\partial\vartheta=\mathbf{I}_r\partial r(\vartheta)/\partial\vartheta+\mathbf{I}_\vartheta r(\vartheta)$, $\partial(\mathbf{r}_s-\mathbf{r}_c)/\partial\varphi=$ $=\mathbf{I}_\varphi r(\vartheta)\sin\vartheta$. Для $\dot r(\vartheta)$ получаем

$$\dot r(\vartheta)=v_s\left[1+(1/r^2(\vartheta))\,(\partial r(\vartheta)/\partial\vartheta)^2\right]^{-1/2}-v_c\cos\vartheta. \tag{1}$$

Раскладывая функцию $r(\vartheta)$ в ряд по полиномам Лежандра

$$r(\vartheta)=R(t)+\sum_{n=2}^{\infty}\delta_nP_n(\cos\vartheta) \tag{2}$$

и подставляя в (1), находим

$$\dot\delta_n=\hat P_{P_n}v_s\left[1+r'^2(\vartheta)/r^2(\vartheta)\right]^{-1/2}-v_c\delta_{1n}. \tag{3}$$

Здесь $\hat P_{P_n}$ — оператор проектирования на функцию $P_n(\cos\vartheta)$. Система уравнений (3) позволяет, вообще говоря, определить величины δ_n, т. е. форму включения. Для этого предварительно должна быть решена диффузионная задача при заданной форме включения, с помощью которой определяем v_s. Считаем, что отклонение формы включения от сферической мало, $(\delta_n/R)\ll 1$. В этом случае $(1/r^2)(\partial r(\vartheta)/\partial\vartheta)^2\ll 1$, и в линейном по δ_n приближении $\dot r(\vartheta)=v_s-v_cP_1(\cos\vartheta)$. Пользуясь формулой (3), получаем

$$\dot\delta_n=v_{sn}\quad(n\geqslant 2),\quad \dot R=v_{s0}. \tag{4}$$

Здесь v_{sn} — коэффициенты разложения величины v_s по $P_n(\cos\vartheta)$.

Исследуя морфологическую устойчивость включений, необходимо в явной форме записать уравнение (4). Для этого нужно v_{sn} выразить через δ_n и поле «внешней» концентрации, т. е. решить соответствующую диффузионную задачу. Сформулируем ее [2]. Пусть $\tilde c(r)$ — «внешняя» концентрация атомов выпадающей фазы в точке r. Поле $\tilde c(r)$ считаем заданным. Наличие включения искажает поле, и при нахождении потока на включение нужно это искажение учесть. Допустим, что размеры включений много меньше расстояний между ними, а характерный масштаб L существенного изменения «внешнего» поля много больше среднего расстояния между включениями. Поскольку других включений в окрестности данного нет, истинная концентрация $c(r)$ — гармоническая функция (скорости изменения размеров включений малы по сравнению со скоростью диффузионной релаксации в силу малости концентраций). Пусть R_0 — расстояние, равное половине расстояния между центрами включений. Запишем граничное условие для концентрации c

$$c\,|_{r=R_0}=\tilde c(r)\,|_{r=R_0}. \tag{5}$$

Поскольку $R_0\ll L$, можно считать $\tilde c(r)$ на расстояниях порядка R_0 функцией одной координаты z, т. е. $\tilde c\simeq\tilde c(r\cos\vartheta)$. Выходя из раствора на поверхность включения, атомы новой фазы «адсорбируются» ею. Пусть u — поверхностная концентрация таких атомов. Условие их баланса можно записать так

$$D\,(\partial c/\partial n)\,|_s=\gamma\,(c-\eta u)\,|_s. \tag{6}$$

Первое слагаемое правой части — количество атомов, перешедших в адсорбированное состояние из раствора за единицу времени; $\gamma=\alpha D/a\bar z$, где α — коэффициент прилипания $(0\leqslant\alpha\leqslant 1)$, a — межатомное расстояние, $\bar z$ — координационное число решетки. Второе слагаемое — количество обратных переходов. Здесь $\eta=a^2\bar z/D\alpha\tau_s$, где τ_s — время пребывания атома в адсорбированном состоянии. Последние могут диффундировать по поверхности включения до тех пор, пока не будут поглощены ступенькой поверхности. Если ν/a — вероятность «усвоения» атома поверхностью включения, то в единицу времени усваивается νu атомов. Число их, вышедших из включения и превратившихся в адатомы, не зависит от поверхностной концентрации и может быть записано в виде νu_R. Отметим, что для рассматриваемой системы, состоящей из адатомов, атомов в растворе и включений, полное равновесие возможно только для поверхности постоянной кривизны (сфера, плоскость). Для поверхности произвольной формы можно говорить лишь о частичном равновесии по отношению к поверхностной диффузии и о частичном равновесии по отношению к «усвоению» и испарению адатомов включением. Этим частичным равновесиям соответствуют равновесные поверхностные концентрации u_R^* и u_R [4]. u_R определяется выражением

$$u_R = c_R/\eta = (c_\infty/\eta)\exp(\sigma^* K), \tag{7}$$

где c_∞ — равновесная объемная концентрация атомов примеси у плоской поверхности, $\sigma^* = a^3\sigma/kT$, K — средняя кривизна поверхности в данной точке. Определим u_R^*. Химпотенциал адатома можно записать в виде $\mu = kT\ln u + \psi$. В отличие от поверхности постоянной кривизны в данном случае ψ зависит от кривизны. Раскладывая по малому параметру aK, получаем

$$\mu = kT\ln u + \psi_0 + \lambda\sigma a^3 K. \tag{8}$$

Здесь λ — безразмерная величина порядка единицы. Для ее определения необходимо использовать микроскопическую теорию. Качественная оценка показывает, что $\lambda \simeq 1/2 \div 1/3$.

Плотность поверхностного потока $\mathbf{j}_s = u\,(D_s/kT)\nabla\mu$. Подставляя в это выражение (8), получаем $\mathbf{j}_s = D_s\nabla\,(u - u_R^*)$, $u_R^* = (c_R^*/\eta) = (c_\infty/\eta)\exp(-\lambda\sigma^* K)$.

Как видим, нужно рассматривать две равновесные концентрации u_R и u_R^*. Выражения для них отличаются знаком при σ^* в экспоненте. Это приводит к тому, что u_R больше в местах с большей кривизной и меньше там, где она меньше. Для u_R^* ситуация обратная. Адатому легче испариться с острия и осесть в «ямке».

Уравнение диффузии адатомов по поверхности включения записывается как

$$l\partial u/\partial t = lD_s\Delta_s(u - u_R^*) + D\,(\partial c/\partial n)\big|_s - \nu(u - u_R), \quad l = a/\eta.$$

Поскольку скорости роста и перемещения включений считаются малыми, ограничимся рассмотрением стационарного уравнения

$$lD_s\Delta_s(u - u_R^*) + D\,(\partial c/\partial n)\,|_s = \nu\,(u - u_R). \tag{9}$$

Скорость перемещения поверхности в заданной точке направлена по нормали n и численно равна правой части уравнения (9), т. е. $v_s = n\nu\,(u - u_R)$. Ищем решение уравнения диффузии вне включения в виде

$$c = \sum_n [a_n\varepsilon^n (r/R)^n + b_n (R/r)^{n+1}]\,P_n(\cos\nu), \quad \varepsilon = (R/R_0) \ll 1. \tag{10}$$

Если кинетические коэффициенты ν и γ формально устремить к бесконечности, придем к равновесному граничному условию $c|_s = c_R \equiv \eta u_R$ для объемной концентрации на границе включения. Соотношение (9) при этом превращается в выражение для величины v_s, если в его левой части u заменить на u_R. В дальнейшем считаем γ и ν конечными.

Выражение для кривизны во втором порядке по δ_n таково

$$K = [2 - (\hat{\Lambda} r(\vartheta))/r(\vartheta)]/r(\vartheta). \tag{11}$$

Здесь

$$\hat{\Lambda} \equiv (1/\sin\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right).$$

В рассматриваемом случае $c_R = c_R^{(0)} + \sum_n c_R^{(n)} P_n(\cos\vartheta)$, $c_R^{(0)} \equiv c_\infty(1+2\sigma^*/R)$, $c_R^{(n)} = (n-1)(n+2)(\delta_n/R)(c_\infty \sigma^*/R)$. Оператор Δ_s, входящий в левую часть уравнения (9), имеет вид $\Delta_s \equiv (1/r^2(\vartheta))\hat{\Lambda}$, причем он действует не на сфере, а на поверхности, отличающейся от нее. Разложим «внешнюю» концентрацию по $P_n(\cos\vartheta)$ на сфере $r=R_0$

$$\tilde{c}\,|_{r=R_0} = \sum \tilde{c}_n P_n(\cos\vartheta),$$

где

$$\tilde{c}_n = (n+1/2)\int_{-1}^{1} \tilde{c}(R_0\xi)\,P_n(\xi)\,d\xi. \tag{12}$$

Интегрированием по частям выражение для $\tilde{c}_n$ можно представить в более наглядном виде $\tilde{c}_n \simeq R_0^n\sqrt{\pi}\,(d^n\tilde{c}/dz^n)/2^n\Gamma(n+1/2)$.

2. Линейная теория устойчивости

Граничное условие (5) позволяет исключить коэффициенты $a_n = \tilde{c}_n - \varepsilon^{n+1}b_n$. Выражаем u через $c|_s$ и $(\partial c/\partial n)_s$ по формуле (6) и подставляем полученное выражение в уравнение (9), которое приобретает следующий вид:

$$\nu\hat{l}\,[c - c_R - (D/\gamma)(\partial c/\partial n)] = lD_s\Delta_s c + D(\partial c/\partial n) - (laD_sD/\gamma)\,\Delta_s(\partial c/\partial n) - lD_s\Delta_s c_R^*. \tag{13}$$

Подставляя разложение (10), определяем коэффициенты b_n. Получаются довольно громоздкие выражения, приводить которые здесь нет возможности. После этого вычисляем v_s, равное левой (или правой) части уравнения (13). Отметим, что при этом $\tilde{c}_n$ входят в формулы только в виде комбинации $\varepsilon^n\tilde{c}_n$, не содержащей параметра R_0, фигурирующего в определении (12) величины $\tilde{c}_n$. При однородном на бесконечности распределении концентрации уравнение (4) приобретает вид

$$\dot{\delta}_n/\delta_n = D\Delta(n-1)R^{-2}A_n^{-1}(1+2BR_k(0)/R)^{-1}\{1-(R_k/R)[1+(1+2BR_k(0)/R)(1/2)\times$$
$$\times(n+1)(n+2)(1+(1+\lambda)(R_k(0)/R)(lD_sn/R_k(0)D)(1+D(n+1)/\gamma R))]\}. \tag{14}$$

Здесь $\Delta = c_0 - c_\infty$, $B = (D/2R_k(0))(1/\gamma + \eta/\nu)$, $R_k(0) - 2\sigma a^3 c_\infty/\Delta kT$. Значение R, при котором правая часть уравнения (14) обращается в нуль, — это критический радиус, соответствующий моде n. Обозначим его через $R_k(n)$. При $R > R_k(n)$ эта мода растет (неустойчивость), а при $R < R_k(n)$ уменьшается (устойчивость). Уравнение для $R_k(n)$ имеет лишь один положительный корень. Учет конечной величины коэффициентов ν и γ ведет к возрастанию $R_k(n)$.

Уравнение для $R_k(n)$ в общем случае оказывается четвертой степени. При $\nu\to\infty$ и $\gamma\to\infty$ его решение

$$2R_k(n)/R_k(0) = 1 + 2^{-1}(n+1)(n+2) + [(1+2^{-1}(n+1)(n+2))^2 +$$
$$+ 2(1+\lambda)\,lD_sn(n+1)(n+2)/DR_k(0)]^{1/2}. \tag{15}$$

Уравнение (14) для δ_n приобретает вид

$$\dot{\delta}_n/\delta_n = R^{-2}\Delta(n-1)[D(1-R_kR^{-1}(1+2^{-1}(n+1)(n+2))) -$$
$$-(1+\lambda)\,lD_sR_k^2n(n+1)(n+2)/2R_kR^2].$$

Из формул видно, что поверхностная диффузия существенным образом подавляет морфологическую неустойчивость включений, если пересыщенность достаточно высока, поскольку D_s обычно на несколько порядков выше D.

Исследуя устойчивость формы включения, нужно найти зависимость от времени безразмерных параметров $\delta_n/R(t)$. Исходя из формулы (14), получаем

$$\frac{d}{dt}(\delta_n/R) = (\delta_n/R)(D/R^2)\Delta(1+2BR_k/R)^{-1}\{A_n^{-1}(n-1)[1-(R_k/R)-$$
$$-(R_k/R)(1+2BR_k/R)\cdot 2^{-1}(n+1)(n+2)(1+(1+\lambda)lD_s/RD)\times$$
$$\times n(1+D(n+1)/\gamma R))]-(1-R_k/R)\}. \tag{16}$$

При ν и $\gamma \to \infty$ $A_n=1$, $B=0$ и из (16) находим

$$\frac{d}{dt}(\delta_n/R) = (\delta_n/R)D\Delta R^{-2}\{(n-2)(1-R_k/R)-(R_k/R)2^{-1}(n^2-1)\times$$
$$\times(n+2)(1+(1+\lambda)lD_s n/RD)\}. \tag{17}$$

При $n=2$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\delta_2}{R}\right) = -6\frac{\delta_2\Delta}{R^3}\frac{R_k}{R}\left(D+2(1+\lambda)\frac{lD_s}{R}\right).$$

Видим, что форма включения по отношению к возмущению второй моды устойчива при любых значениях R, в то время как само δ_2 начинает возрастать уже при $R > R_k$ (2). Для мод с $n \geqslant 3$ существуют критические размеры включений $R_k^*(n)$, при превышении которых отношение δ_n/R начинает возрастать, т. е. форма, соответствующая этой моде, становится неустойчивой. Отметим, что для всех n $R_k^*(n) > R_k(n)$. Так, например, в случае $\nu\to\infty$, $\gamma\to\infty$ и $lD_s=0$ $R_k^*(3)=21R_k$, $R_k(3)=11R_k$. Из формул (15) и (17) следует, что для оценки роли поверхностной и объемной диффузии нужно знать значение параметра (lD_s/DR_k). Выражая его через непосредственно измеряемые величины, получаем $lD_s/DR_k=D_s\tau_s\alpha\Delta kT/a^2\bar{z}c_\infty 2a^2\sigma$. Если этот параметр много больше единицы, то основную роль играет поверхностная диффузия; если меньше, — объемная.

3. Нелинейный анализ

Случай $\bar{c}_n \neq 0$ $(n \geqslant 1)$ проанализирован в линейном приближении в работе [2]. Такое приближение справедливо, когда основную роль играет поверхностное натяжение и поверхностная диффузия. С ростом размера включения их роль ослабевает, что в случае $\bar{c}_n \neq 0$ приводит к его существенной деформации, поэтому необходим нелинейный анализ. Считаем, что граничная кинетика несущественна, $\nu\to\infty$, $\gamma\to\infty$, и ограничимся учетом членов второго порядка по δ_n. Наибольшим из них является δ_2^2. Учитывая эти слагаемые в соотношениях (11) и (13), получаем следующее уравнение:

$$(d/dt)(\delta_n/R) = (D/R)\Big[(2n+1)\bar{c}_n^*\varepsilon^n+(n-1)\sum_{\substack{m,\,l\\ m\neq 0}}\varepsilon^m\bar{c}_m(2m+1)\begin{Bmatrix}0&0&0\\ l&m&n\end{Bmatrix}(\delta_l/R)+$$
$$+(n-2)\bar{c}_0^*\delta_n/R-(n^2-1)(n+2)(c_R^{(0)}\sigma^*/R)\delta_n/R\Big]+$$
$$+(D/R)(\delta_2/R)^2\Big\{2(23-n)\begin{Bmatrix}0&0&0\\ 2&2&n\end{Bmatrix}(c_R^{(0)}\sigma^*/R)-\bar{c}_0^*(8-n)\begin{Bmatrix}0&0&0\\ 2&2&n\end{Bmatrix}-$$
$$-4\begin{Bmatrix}1&1&0\\ 2&2&n\end{Bmatrix}(c_R^{(0)}\sigma^*/R)+(1+\lambda)[10n(n+1)+48]\begin{Bmatrix}0&0&0\\ 2&2&n\end{Bmatrix}(lD_s/DR)(c_R^0\sigma^*/R)\Big\}. \tag{18}$$

Здесь $\begin{Bmatrix}0&0&0\\ l&m&n\end{Bmatrix}$, $\begin{Bmatrix}1&1&0\\ l&m&n\end{Bmatrix}$ — коэффициенты разложений P_lP_m и $P_l'P_m'$ по P_n соответственно; $\bar{c}_n^* \equiv \bar{c}_n$ для $n \geqslant 1$ и $\bar{c}_0^*=\bar{c}_0-c_R^{(0)}$. Полученное уравнение имеет смысл для первых пяти мод, поскольку в уравнении для δ_6/R уже необходимо учитывать δ_2^3 и т. д. Приведем уравнения для мод с $n=0$, 2, 3, 4 в случае $lD_s=0$

$$\dot\rho = \rho^{-1}[1-1/\rho-(\zeta_2^2/5)(1-12/\rho)](1+12\zeta_2^2/5)^{-1}, \tag{19}$$
$$\dot\zeta_2 = 5\beta_2-6\zeta_2\rho^{-3}-(12/7)\zeta_2^2\rho^{-2}[1-7/2\rho]+(9/7)\beta_1\zeta_3\rho^{-1}+(10/7)\beta_2\zeta_2, \tag{20}$$
$$\dot\zeta_3 = 7\beta_3\rho-\zeta_3\rho^{-2}(21/\rho-1)+(18/5)\beta_1\zeta_2\rho^{-1}+(8/3)\beta_1\zeta_4\rho^{-1}, \tag{21}$$
$$\dot\zeta_4 = 9\beta_4\rho^2+\beta_2\zeta_2(54/7)+(36/7)\beta_1\zeta_3\rho^{-1}-\zeta_4\rho^{-2}(47/\rho-2)+(18/7)\zeta_2^2\rho^{-2}(1+22/5\rho), \tag{22}$$
$$\zeta_n=\delta_n/R,\ \rho=R/R_k,\ \dot\zeta_n=d\zeta_n/d\tau,$$

где $\tau = D\Delta t/R_k^2$, $\beta_n = \tilde{c}_n \varepsilon^n/(\rho^n \Delta)$ (из определения $\tilde{c}_n$ (12) видно, что β_n не зависят от ρ). В уравнении (21) опущено слагаемое, пропорциональное $\beta_1 \zeta_2^2$, так как оно более высокого порядка малости, чем нелинейные члены в уравнениях (20) и (22). В уравнении (20) второе слагаемое правой части убывает с ростом ρ как ρ^{-3}, а третье (содержащее ζ_2^2) — p^2, поэтому с ростом ρ нелинейное слагаемое становится существенным даже при малых ζ_2. В уравнениях для более высоких мод это не так: линейные слагаемые пропорциональны ρ^{-2}. Уравнение для второй моды в этом смысле является исключением, поскольку в нем линейное по ζ_2 слагаемое порождено поверхностным натяжением, роль которого ослабевает с ростом ρ.

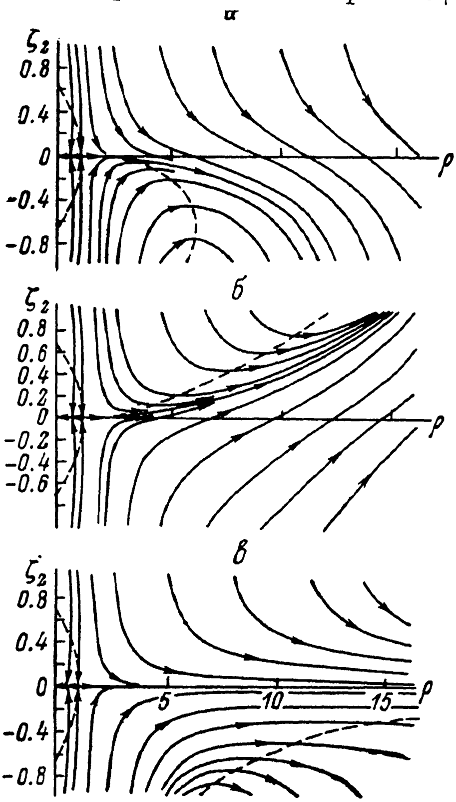
Отметим, что при $\beta_n \neq 0$ квазистационарная форма включения не является сферической, кроме того, происходит генерация высших мод низшими. Учет нелинейных слагаемых приводит к генерации четвертой моды второй даже при однородном распределении «внешней» концентрации ($\beta_n = 0$ для $n \neq 0$).

Наличие нелинейного слагаемого в уравнении (20) может привести к неустойчивости второй моды. Чтобы в этом убедиться, проведем качественный анализ системы уравнений (19) и (20) для случая $\beta_1 = \beta_3 = \beta_4 = 0$, $\beta_2 \neq 0$. Уравнение (20) представим в виде

$$\dot{\zeta}_2 = -\rho^{-2}(2 - 7/\rho)(\zeta_2 - \zeta_2^-)(\zeta_2 - \zeta_2^+)(6/7). \quad (23)$$

где

$$\zeta_2^{\pm} = (\rho - 7/2)^{-1}\{-1 \pm [1 + \beta_2 \rho^3 (20/21)(\rho - 7/2)]^{1/2}\}(7/4) \quad (24)$$



Фазовый портрет системы уравнений (19), (20) для $\beta_2 = -2 \cdot 10^{-3}$ (*а*), $2 \cdot 10^{-3}$ (*б*), 0 (*в*).

— изоклина уравнения (20), соответствующая $\dot{\zeta}_2 = 0$. Пусть $\beta_2 < 0$. В этом случае ветви изоклины ζ_2^- и ζ_2^+ на плоскости (ρ, ζ_2) плавно смыкаются в точке $\rho = \rho_{max}$, определяемой нулем подкоренного выражения в формуле (24). Оценки показывают, что $|\beta_2| \ll 1$, поэтому $\rho_{max} \approx (20|\beta_2|/21)^{-1/4}$, $\zeta_{max} = -(7/4)(20|\beta_2|/21)^{1/4}$. На рисунке, *а* построен фазовый портрет системы (19), (20) для случая $\beta_2 = -2 \cdot 10^{-3}$. Штриховыми линиями изображены изоклина $\zeta_2^{\pm}$ и изоклина $\zeta_2^2 = 5(\rho - 1)/(\rho - 12)$, соответствующая $\dot{\rho} = 0$. Видны сепаратрисы, разделяющие фазовую плоскость (ρ, ζ_2), исходящие из неподвижной точки с координатами $\rho \simeq 1 - (55/9)\beta_2^2$, $\zeta_2 \approx 5/(3\beta_2)$. Вертикальные сепаратрисы разграничивают область, где линии тока приходят в начало координат (устойчивый узел), — область слева от сепаратрисы — и область неограниченного роста ρ справа от них. Эти сепаратрисы являются геометрическим местом точек, для которых ρ — критический радиус, соответствующий отличному от нуля значению ζ_2. Как видим, зависимость критического радиуса от ζ_2 слабая. Наклонная сепаратриса разграничивает области монотонного и немонотонного поведения линий тока. Выше ее линии тока идут сверху вниз монотонно, ниже — проходят через максимум в точках пересечения с изоклинами $\zeta_2^{\pm}$. Можно сказать, что при $\beta_2 < 0$ включение стремится сплющиться. Анализ уравнений (21) и (22) показывает, что учет третьей и четвертой мод лишь усиливает эту тенденцию. Учет кубической нелинейности не меняет заметным образом поведение включения.

Рассмотрим теперь случай $\beta_2 > 0$, $\beta_1=\beta_3=\beta_4=0$. Минимум функции, стоящей под знаком корня в (24), достигается при $\rho=\rho_{\min}=21/8$; значение подкоренного выражения при этом равно $1-\beta_2\,(7/8)^3 45/2$. Пусть $\beta_2 < (8/7)^3\cdot 2/45$, тогда оно положительно при всех ρ. Функция, представляющая собой ветвь изоклины $\zeta_2^+ > 0$, и при $\rho \gg 1$ имеет асимптоту

$$\zeta_2^+ \simeq (1/2)\,\rho\,(35\beta_2/3)^{1/2}. \tag{25}$$

Ветвь ζ_2^- при $0 < \rho < 7/2$ больше единицы, следовательно, она нефизична, так как в нашем приближении нельзя рассматривать значения $|\zeta_2| \geqslant 1$. При $\rho > 7/2$ $\zeta_2^- < 0$ и при $\rho \gg 1$ имеет асимптоту $\zeta_2^- \simeq -(1/2)\rho(35\beta_2/3)^{1/2}$. При $\rho \to 7/2\,\zeta_2^- \to \infty$, следовательно, ζ_2^- имеет максимум. Соответствующая координата $\rho=\rho_0$ определяется уравнением

$$1+[1+(20/21)\,\beta_2\rho_0^3\,(\rho_0-7/2)]^{1/2}=5\beta_2\rho_0^2\,[(4/21)\,\rho_0^2-(5/3)\,\rho_0+7/2]. \tag{26}$$

Для $\beta_2 \ll 1$ $\rho_0 \simeq (20\beta_2/63)^{-1/4}$, $\zeta_2^-(\rho_0) \simeq -(21/4)(20\beta_2/63)^{1/4}$. Фазовый портрет для случая $\beta_2=2\cdot 10^{-3}$ изображен на рисунке, *б*. Отметим, что при больших ρ и $\rho \lesssim 1$ фазовый портрет для $\beta_2 > 0$ в целом аналогичен портрету для $\beta_2 < 0$ (следует только заменить ζ_2 на $-\zeta_2$), однако в отличие от последнего линии тока в верхней полуплоскости «прижимаются» к сепаратрисе, которая проходит ниже асимптоты (25).

Если $\beta_2 > (8/7)^3 2/45$, то подкоренное выражение (26) оказывается отрицательным в интервале $\rho_1 < \rho < \rho_2$, где ρ_1, ρ_2 — корни уравнения $21/(20\beta_2)=\rho^3(7/2-\rho)$. Они оба находятся внутри интервала $(0,\ 7/2)$. В точках $\rho=\rho_1$ и $\rho=\rho_2$ обе ветви кривой $\zeta_2^\pm$ плавно смыкаются, имея вертикальную касательную. На глобальных свойствах линий тока эти особенности не сказываются, однако могут привести к их локальной немонотонности в окрестностях точек ρ_1 и ρ_2. Отметим, что эта ситуация соответствует весьма большим значениям β_2, при которых исходные предположения могут оказаться на грани применимости.

При $\beta_2=0$ ветвь изоклины ζ_2^+ совпадает с осью абсцисс и является одновременно сепаратрисой. ζ_2^- имеет при $\rho \geqslant 7/2$ две асимптоты: $\rho=7/2$ и $\rho=0$. Точки выше оси абсцисс находятся в области устойчивости ($\dot\zeta_2 < 0$ при $\rho > 1$), ниже — в области неустойчивости. Если $\zeta_2 < 0$ и точка находится левее ветви кривой ζ_2^-, то линия тока, проходящая через нее сначала, приближаетсся к оси абсцисс, но после пересечения ветви изоклины ζ_2^- уходит вниз. Соответствующий фазовый портрет изображен на рисунке, *в*.

Анализ уравнений (20)—(22) в случае неустойчивости третьей и четвертой мод ($\rho > 23.5$) и $\beta_1 \neq 0$, $\beta_2=\beta_3=\beta_4=0$ показывает, что заметная деформация наступает при очень больших размерах включения. Так, при $\beta_1=10^{-3}$ и начальных значениях $\zeta_3=-0.1$, $\zeta_2=\zeta_4=0$ значения $\zeta_2=-0.063$, $\zeta_3=-0.53$, $\zeta_4=-0.70$ достигаются при $\rho=200$. Фактически это означает, что размер включения в этом случае сравним с характерной длиной неоднородности «внешнего» поля концентрации.

Коротко сформулируем основные результаты. С учетом граничной кинетики использовано уравнение диффузии адатомов по поверхности произвольной кривизны; предложен алгоритм нахождения закона изменения формы растущего включения, с помощью которого построена линейная теория морфологической устойчивости включений в изотропной матрице. Для однородного распределения «внешней» концентрации учет граничной кинетики и поверхностной диффузии приводит к большей стабильности сферической формы включения. Для неоднородного случая квазиравновесная форма включения отличается от сферической, отклонение от сферичности пропорционально высшим производным поля «внешне» концентрации и растет с ростом ρ.

Исследована нелинейная стадия эволюции формы растущего включения для первых четырех мод. Показано, что вторая мода, устойчивая в линейном приближении, становится неустойчивой. Если вторая производная «внешнего» поля отрицательна ($\beta_2 < 0$), то включение, имеющее в начальный момент сферическую форму, со временем сплющивается, образуя эллипсоид вращения вокруг малой оси. Учет третьей и четвертой мод усиливает эту тенденцию. При однородном поле «внешней» концентрации сферическая форма включения находится в неустойчивом равновесии по отношению к сжатию и устойчивом по отношению к растяжению. При $\beta_2 > 0$ поведение включения такое же, как и в линейной теории: оно вытягивается, образуя эллипсоид вращения вокруг большой оси.

Литература

[1] Mullins W. W., Sekerka R. F. // J. Appl. Phys. 1963. V. 34. N 2. P. 323—329.
[2] Слезов В. В., Танатаров Л. В. // ФММ. 1987. Т. 64. № 4. С. 692—703.
[3] Гегузин Я. Е., Кривоглаз М. А. Движение макроскопических включений в твердых телах. М., 1971. 343 с.
[4] Дубинко В. И., Слезов В. В. // ФММ. 1982. Т. 53. № 3. С. 456—464.

Харьковский
физико-технический институт АН УССР
Харьков

Поступило в Редакцию
5 сентября 1988 г.