УДК 548.5.01 : 538.91

О ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССАХ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

А. Ф. Спивак, Т. А. Черепанова

(*Рига*)

Вопросам возможных механизмов неоднородности, в том числе полосчатой, распределения примеси в растущем кристалле посвящено значительное число исследований как теоретического, так и прикладного плана. В теоретических работах, как правило, рассматривалась зависимость коэффициентов распределения от колебаний температурного (или концентрационного) поля в маточной фазе вблизи межфазной границы. Неоднородность распределения примеси, имеющая место в результате потери морфологической устойчивости растущей грани и появления ячеистой структуры, изучена в многочисленных работах Секерки и сотрудников [1]. Однако при этом проводилось традиционное математическое изучение решения задачи Стефана на устойчивость. В то же время экспериментальные исследования [2] образцов, полученных эпитаксией GaAs из газовой фазы, указали на фундаментальный характер возможных пространственно-периодических нестационарных процессов на фронте кристаллизации при некоторых, по-видимому, экстремальных режимах роста кристаллов. В [3] предложен механизм потери морфологической устойчивости, обусловленный возрастающей ролью тепловых флуктуаций параметров состояния системы на межфазной границе. Цель настоящей работы — развитие подхода [3] для изучения возможного влияния процессов тепло- и массопереноса в маточной (жидкой или газовой) фазе на процессы кристаллизации.

1. Влияние конвекции на устойчивость плоского фронта кристаллизации. Рассмотрим устойчивость направленной кристаллизации бинарного сплава при естественной конвекции в условиях микрогравитации и на Земле. Результаты расчетов получены в соответствии с данными экспериментов [4] кристаллизации сплавов Al — Cu с малыми концентрациями ($\leqslant 0{,}1\%$) меди в жидкой фазе. В ходе экспериментов обеспечена хорошая смачиваемость стенок ампулы расплавом. Поэтому конвективными потоками, обусловленными зависимостью коэффициента поверхностного натяжения от температуры и концентрации меди в расплаве (конвекций Марангони), можно пренебречь. В соответствии с этим при исследовании морфологической устойчивости межфазной границы в настоящей работе рассмотрено влияние естественной конвекции на кинетику длинноволновой части спектра локально-равновесных тепловых флуктуаций плоского фронта кристаллизации. Учет этого влияния в общем случае определяется толщиной δ_D и δ_T диффузионного и температурного пограничных слоев. Они оцениваются из соотношений [5]

$$\delta_T = \frac{\delta_0}{\sqrt[3]{\mathrm{Pr}}}, \quad \delta_D = \frac{\delta_0}{\sqrt[3]{\mathrm{Pr}_D}}, \quad \delta_0 \simeq \frac{\sqrt[3]{3}}{2}\sqrt{\frac{\eta l}{\rho v_0}},$$

где η — динамическая вязкость; ρ — плотность расплава; D — коэффициент диффузии примеси; l и v_0 — характерные размер и скорость течения расплава вблизи фронта кристаллизации; $\mathrm{Pr}_D = \eta/\rho D$; $\mathrm{Pr} = \eta/\rho\chi_0$; χ_0 — температуропроводность расплава.

Вне диффузионного пограничного слоя задается условие полного перемешивания компонентов расплава, так что концентрация меди в этой области считается заданной. Внутри диффузионного слоя массоперенос к межфазной границе обусловлен молекулярной диффузией. Поскольку для металлов $\delta_T \gg \delta_D$, при проведении расчетов устремим толщину δ_T к бесконечности.

Процессы тепло- и массопереноса в системе (как регулярные, так и обусловленные тепловыми флуктуациями флуктуационные их составляющие) описываются феноменологическими уравнениями теплопроводности и диффузии, в правые части которых введены случайные сторонние силы:

$$\frac{\partial T_\nu}{\partial t} = V\frac{\partial T_\nu}{\partial z} + \chi_\nu \Delta T_\nu - \frac{1}{c_{p,\nu}\rho_\nu}\operatorname{div}\mathbf{q}^{\text{ст}}_{T_{\nu,i}} \; (\nu = 0,1); \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = V\frac{\partial c}{\partial z} + D\Delta c - \operatorname{div}\mathbf{q}_D^{\text{ст}}. \tag{1.2}$$

Здесь индексом ν обозначена принадлежность к жидкой ($\nu = 0$) и твердой ($\nu = 1$) фазам, так что T_0 и T_1 — температура в расплаве и кристалле; c — концентрация меди в расплаве; c_p, ρ, χ — удельная теплоемкость, плотность и коэффициент температуропроводности.

Сторонние случайные силы обеспечивают уровень белого шума локально-равновесных тепловых флуктуаций в системе. Их спектральные характеристики определяются флуктуационно-диссипативной теоремой [6]

$$\langle q_{T,i}^{\text{ст}}(\mathbf{r}, t)\, q_{T,j}^{\text{ст}}(\mathbf{r}', t')\rangle = 2k_{\text{Б}}\langle T\rangle^2 \varkappa\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta(t-t')\,\delta_{ij}; \tag{1.3}$$

$$\langle q_{D,i}^{\text{ст}}(\mathbf{r}, t)\, q_{D,j}^{\text{ст}}(\mathbf{r}', t')\rangle = \frac{2k_{\text{Б}}\langle T\rangle}{\rho_0^2}\gamma_D\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta(t-t')\,\delta_{ij}, \tag{1.4}$$

где $\varkappa$ — коэффициент теплопроводности; γ_D — кинетический коэффициент диффузии; $k_{\text{Б}}$ — постоянная Больцмана; $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ и $\delta(t-t')$ — дельта-функции Дирака; $\delta_{i,j}$ — символ Кронекера; $\langle\ldots\rangle$ означает осреднение по ансамблю. Уравнения (1.1), (1.2) записаны в системе координат, движущейся вдоль оси слитка со скоростью протяжки слитка V. Представим поле температур, концентрации, функцию рельефа границы раздела фаз $\varepsilon(x, y, t)$ в виде суммы регулярной и флуктуационной составляющих: $T = \langle T\rangle + \tilde{T}$, $c = \langle c\rangle + \tilde{c}$, $\varepsilon = \langle\varepsilon\rangle + \tilde{\varepsilon}$, так что $\langle\tilde{T}\rangle = \langle\tilde{c}\rangle = \langle\tilde{\varepsilon}\rangle = 0$. Скорость кристаллизации $V = d\langle\varepsilon\rangle/dt$. Условия на фронте кристаллизации:

$$T_0|_{z=\varepsilon} = T_1|_{z=\varepsilon}, \quad \varkappa_1\frac{\partial T_1}{\partial n}\bigg|_{z=\varepsilon} - \varkappa_0\frac{\partial T_0}{\partial n}\bigg|_{z=\varepsilon} = \rho_1 q\frac{\partial\varepsilon}{\partial t},$$

$$D\frac{\partial c}{\partial n}\bigg|_{z=\varepsilon} = -(1-m)\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}\,c\bigg|_{z=\varepsilon}.$$

Здесь $\partial/\partial n$ — производная по нормали к межфазной границе; q — удельная теплота плавления; m — коэффициент распределения примеси (для Al — Cu $m < 1$). Эксперименты [4] по исследованию морфологической устойчивости проведены для малых концентраций примеси $c \leqslant 0{,}1\%$. Поэтому уравнение ликвидуса равновесной фазовой диаграммы можно аппроксимировать линейной зависимостью:

$$T_0^{eq} = T_{eq} - nc|_{z=\varepsilon}.$$

Полагая, что имеет место нормальный механизм роста, локальную скорость движения границы раздела фаз представим как

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} = k(T_{eq} - nc|_{z=\varepsilon} - T_0|_{z=\varepsilon}) + \Gamma K(x, y, t),$$

где k — кинетический коэффициент роста; $\Gamma = k\sigma\langle T\rangle/\rho_1 q$; σ — коэффициент поверхностного натяжения; $K(x, y, t)$ — локальная кривизна фронта кристаллизации.

Теплообмен боковой поверхности образца с ампулой радиуса R определяется законом Ньютона

$$\varkappa_\nu\frac{\partial T_\nu}{\partial r}\bigg|_{r=R} = -\alpha(T_\nu - T_{\text{н}}).$$

Здесь $T_{\text{н}}$ — температура на нагревателе; α — коэффициент теплопередачи. На торцах образца в кристалле ($z = \langle\varepsilon\rangle - l_1$) и в расплаве ($z = \langle\varepsilon\rangle + l_0$) градиент температуры $\partial T_{\text{н}}/\partial z = G_{\text{н}}$ считается постоянным и заданным:

$$\frac{\partial T_1}{\partial z}\bigg|_{z=\langle\varepsilon\rangle - l_1} = \frac{\partial T_0}{\partial z}\bigg|_{z=\langle\varepsilon\rangle + l_0} = G_{\text{н}}.$$

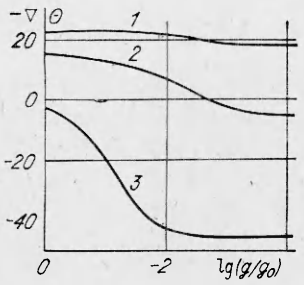

Рис. 1

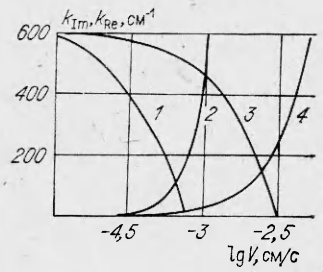

Рис. 2

На границе диффузионного пограничного слоя

$$c\,|_{z=\langle\varepsilon\rangle+\delta_D} = c_0$$

(c_0 — концентрация примеси в ядре расплава). Для осредненных по ансамблю полей температуры и концентрации решение одномерной задачи имеет вид

$$\langle c\rangle = \frac{\left\{m + (1-m)\exp\left[-\frac{V}{D}(z-\langle\varepsilon\rangle)\right]\right\} c_0}{\left[m + (1-m)\exp\left(-\frac{V}{D}\delta_D\right)\right]}; \tag{1.5}$$

$$\langle T_0\rangle = T_{\text{н}}(z) + \frac{VR\rho_0 c_{p,0}}{2\alpha} G_{\text{н}} + \frac{A_0}{2\,\mathrm{sh}\,(a_0 l_0)}\times \tag{1.6}$$

$$\times\left\{\frac{\exp(-a_0 l_0)}{a_0 - b_0}\exp[(a_0 - b_0)(z-\langle\varepsilon\rangle)] + \frac{\exp(a_0 l_0)}{a_0 + b_0}\exp[-(a_0 + b_0)(z-\langle\varepsilon\rangle)]\right\};$$

$$\langle T_1\rangle = T_{\text{н}}(z) + \frac{VR\rho_1 c_{p,1}}{2\alpha} G_{\text{н}} + \frac{A_1}{2\,\mathrm{sh}\,(a_1 l_1)}\left\{\frac{\exp(a_1 l_1)}{(a_1 - b_1)}\times\right. \tag{1.7}$$

$$\left.\times\exp[(a_1 - b_1)(z-\langle\varepsilon\rangle)] + \frac{\exp(-a_1 l_1)}{a_1 + b_1}\exp[-(a_1 + b_1)(z-\langle\varepsilon\rangle)]\right\};$$

где $a_i = \sqrt{b_i^2 + \frac{2\alpha}{R\varkappa_i}}$; $b_i = \frac{V}{2\chi_i}$;

$$A_0 = \frac{V}{\varkappa_0}\,\frac{\rho_1 q\,[a_1\,\mathrm{cth}\,(a_1 l_1) + b_1] - G_{\text{н}}(\rho_0 c_{p,0} - \rho_1 c_{p,1})}{a_0\,\mathrm{cth}\,(a_0 l_0) - b_0 + a_1\,\mathrm{cth}\,(a_1 l_1) + b_1};$$

$$A_1 = \frac{V}{\varkappa_1}\,\frac{\rho_1 q\,[a_0\,\mathrm{cth}\,(a_0 l_0) - b_0] + G_{\text{н}}(\rho_0 c_{p,0} - \rho_1 c_{p,1})}{a_0\,\mathrm{cth}\,(a_0 l_0) - b_0 + a_1\,\mathrm{cth}\,(a_1 l_1) + b_1}.$$

Выражения (1.5)—(1.7) позволяют оценить величину концентрационного переохлаждения перед фронтом кристаллизации. На рис. 1 представлена зависимость $\nabla\Theta$ — градиента переохлаждения в расплаве на межфазной границе — от величины ускорения свободного падения g. Здесь $\nabla\Theta = \left.\frac{d\Theta}{dz}\right|_{z=\langle\varepsilon\rangle}$, $\Theta = T_0^{eq} - \langle T_0\rangle$ и $g_0 = 9{,}81$ м/с², кривые *1—3* получены для скоростей вытягивания слитка $V = 10^{-4}$; 10^{-3}; $3\cdot10^{-3}$ см/с. Концентрация меди в ядре расплава задавалась равной 0,1%, величина градиента температуры на поверхности образца 1300 град/м.

Решение задачи для флуктуационных составляющих температуры $\tilde{T}_i$, концентрации меди в расплаве $\tilde{c}$ и рельефа межфазной границы $\tilde{\varepsilon}(x, y, t)$ будем искать в ω — $\mathbf{k}$-фурье-представлении по времени и пространственным координатам x, y. Уравнения для этих составляющих получаем вычитанием уравнений для регулярных частей $\langle T_\nu\rangle$, $\langle c\rangle$ из (1.1), (1.2). В линейном приближении невзаимодействующих флуктуаций найдены выражения для $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)$ в виде функционалов случайных сторонних сил.

Использование флуктуационно-диссипативной теоремы (1.3), (1.4) позволяет найти спектральные плотности парных корреляционных функций рельефа фронта кристаллизации. В области значений волновых векторов, реализующихся в ходе эксперимента [4],

$$\langle\tilde{\varepsilon}^2\rangle_{k,\omega} \simeq \left[2\,|k|\,k_{\text{Б}}\langle T^2\rangle(\varkappa_1+\varkappa_0) + \frac{2n^2(\varkappa_1+\varkappa_0)^2\,|k|\,k_{\text{Б}}\langle T\rangle\gamma_D}{\rho_0^2}\,\mathrm{cth}^2(k\delta_D)\right]\times$$

$$\times\left\{\omega^2\left(\frac{(\varkappa_0+\varkappa_1)\,k}{k} + \frac{n(1-m)\langle c\rangle(\varkappa_1+\varkappa_0)\,\mathrm{th}(k\delta_D)}{D} + \rho_1 q\right)^2 + \right.$$

$$+\frac{(\varkappa_1+\varkappa_0)\,\Gamma k^3}{k} + (\varkappa_1 G_1 + \varkappa_0 G_0 + 2\varkappa n G_D)\,k +$$

$$\left. + \frac{\rho_1 q V^2}{2\chi_1} - \frac{nmV(\varkappa_1+\varkappa_0)\,G_D\,\mathrm{th}(k\delta_D)}{D}\right\}^{-1}.$$

Здесь $G_{\text{v}} = \left.\dfrac{d\langle T_{\text{v}}\rangle}{dz}\right|_{z=\langle\varepsilon\rangle}$; $G_D = \left.\dfrac{d\langle c\rangle}{dz}\right|_{z=\langle\varepsilon\rangle}$; $\langle c\rangle = \langle c\rangle\,|_{z=\langle\varepsilon\rangle}$; $\langle T\rangle = \langle T_{\text{v}}\rangle|_{z=\langle\varepsilon\rangle}$; $\varkappa = (\varkappa_0+\varkappa_1)/2$

Характерные времена и масштабы флуктуационных образований рельефа межфазной границы определяются положением в комплексной полуплоскости корней дисперсионного уравнения для волновых векторов:

$$\frac{2\varkappa\Gamma k^3}{k} + (\varkappa_0 G_0 + \varkappa_1 G_1 + 2n\varkappa G_D)\,k + \frac{\rho_1 q V^2}{2\chi_1} - \frac{2\varkappa nmVG_D\,\mathrm{th}(k\delta_D)}{D} = 0.$$

Характерный масштаб экспоненциального обрезания корреляционной функции $\langle\tilde{\varepsilon}(\mathbf{r},t)\tilde{\varepsilon}(\mathbf{r}',t')\rangle$ задается мнимой частью корня k_{Im}, в то время как характерный масштаб пространственно-периодической части — его реальной частью $2\pi k_{\text{Re}}^{-1}$. Потеря морфологической устойчивости плоского фронта кристаллизации определяется условиями процесса, при которых $k_{\text{Re}} \sim 2\pi k_{\text{Im}}$. На рис. 2 приведены зависимости k_{Re}, k_{Im} от V для экспериментов в условиях микрогравитации (кривые *1*, *2*) и на Земле (кривые *3*, *4*). Из них следует, что с увеличением степени гравитации увеличиваются пороговые скорости роста, при которых имеет место потеря морфологической устойчивости границы раздела фаз. Эта качественная зависимость и численные значения пороговых скоростей $V \simeq 10^{-3}$ см/с находятся в согласии с данными экспериментов [4].

2. Генерация звуковых колебаний в градиенте температуры при газовой эпитаксии. Изучению термоакустических колебаний в трубах посвящен ряд исследований [7]. Они проведены без учета трения в газе для различных моделей теплопередачи либо с использованием приближения пограничного слоя при описании газодинамики и теплообмена. В [8] развитие автоколебаний газа в неравномерно нагретом канале изучено с точки зрения потери устойчивости стационарного течения газа при учете зависимости коэффициентов вязкости и теплопроводности от температуры.

Рассмотрим влияние белого шума локально-равновесных тепловых флуктуаций в газе на развитие длинноволновых автоколебаний в неравномерно нагретом эпитаксиальном реакторе. Предполагается, что диаметр реактора мал по сравнению с его длиной, и потому можно пренебречь конвективными течениями. Система нестационарных уравнений газодинамики и теплопроводности вязкого идеального газа в осесимметричном случае имеет вид

$$\rho\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + \rho(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\,\mathrm{grad}\,p + \eta\Delta\mathbf{v} + \left(\frac{1}{3}\eta + \xi\right)\mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\mathbf{v} + \nabla\sigma^{\text{ст}}; \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho\mathbf{v}) = 0; \tag{2.2}$$

$$\rho c_p\left(\frac{\partial T}{\partial t}+(\mathbf{v}\nabla)T\right)=\varkappa\Delta T+\frac{\partial p}{\partial t}+(\mathbf{v}\nabla)p+\operatorname{div}\mathbf{q}_T^{\text{ст}}; \tag{2.3}$$

$$p=\rho BT. \tag{2.4}$$

Здесь ξ — объемная вязкость газа; B — удельная газовая постоянная идеального газа. В дополнении к (1.3), согласно флуктуационно-диссипативной теореме, корреляционные функции стороннего тензора напряжений $\sigma_{ik}^{\text{ст}}$ запишем как

$$\langle\sigma_{ij}^{\text{ст}}(\mathbf{r},t)\sigma_{kl}^{\text{ст}}(\mathbf{r}',t')\rangle=2k_{\text{Б}}\langle T\rangle\left[\eta(\delta_{ik}\delta_{lj}+\delta_{il}\delta_{jk})+\right.$$
$$\left.+\left(\xi-\frac{2}{3}\eta\right)\delta_{ij}\delta_{kl}\right]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t'). \tag{2.5}$$

Уравнения (2.1)—(2.5), (1.3) дополним граничными условиями

$$\mathbf{v}|_{r=R}=0; \tag{2.6}$$

$$\left.\frac{\partial(\mathbf{v}\mathbf{n}_z)}{\partial\mathbf{r}}\right|_{r=0}=(\mathbf{v}\mathbf{n}_r)|_{r=0}=0; \tag{2.7}$$

$$-\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R}=\alpha(T|_{r=R}-T_{\text{н}}), \tag{2.8}$$

где $\mathbf{n}_{r'}$, $\mathbf{n}_z$ — ортонормированные векторы базиса цилиндрической системы координат.

Здесь предполагаются прилипание газа на стенках реактора (2.6), осевая симметрия течения (2.7) и закон Ньютона для теплообмена газа с реактором (2.8). Через $T_{\text{н}}$ обозначена температура на нагревателе, градиент которой считается постоянным и заданным. На входе ($z=0$) и выходе ($z=l$) реактора выполняются мягкие граничные условия

$$\frac{\partial(\mathbf{v}\mathbf{n}_z)}{\partial\mathbf{z}}=\frac{\partial T}{\partial z}=\frac{\partial\rho}{\partial z}=0. \tag{2.9}$$

Вновь представим T, ρ, p, $\mathbf{v}$ в виде суммы флуктуационной и регулярной составляющих. Полученную из (2.1)—(2.4) систему уравнений для $\tilde{T}$, $\tilde{\rho}$, $\tilde{p}$, $\tilde{\mathbf{v}}$, линеаризованную по флуктуациям, проинтегрируем по сечению реактора. В соответствии с этим введем новые искомые функции $\tilde{T}_s$, $\tilde{p}_s$, $\tilde{u}_s$, $\tilde{\rho}_s$ такие, что

$$\tilde{T}_s(z,t)=\frac{1}{\pi R^2}\int_0^R rdr\int_0^{2\pi}d\varphi\tilde{T}(r,z,\varphi,t),$$

$$\tilde{u}_s(z,t)=\frac{1}{\pi R^2}\int_0^R rdr\int_0^{2\pi}d\varphi\tilde{v}_z(r,z,\varphi,t)$$

($\tilde{v}_z$ — составляющая вдоль оси z скорости газа $\tilde{\mathbf{v}}$).

При интегрировании градиентов скоростей газовых потоков вблизи стенок реактора предполагается справедливым приближение пограничного слоя

$$\left.\frac{\partial v_z(r,z,t)}{\partial r}\right|_{r=R}\simeq-\frac{v_z(R-\delta_0,z,t)}{\delta_0}$$

(δ_0 — его толщина). Величину δ_0 можно оценить из решения задачи об осциллирующем с частотой ω течении несжимаемой вязкой жидкости в канале [5]:

$$\delta_0=R/\operatorname{Re}\left(\frac{yJ_1(y)}{J_2(y)}\right),\quad y=\sqrt{-i\omega\eta/\langle\rho\rangle}. \tag{2.10}$$

Здесь J_1, J_2 — функции Бесселя первого и второго порядков; $\langle\rho\rangle$ — ре-

гулярная составляющая плотности. В случае малой толщины пограничного слоя

$$\delta_0 \simeq \frac{3}{2}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} R\left(\sqrt{\frac{\omega\langle\rho\rangle}{2\eta}}\right)^{-1}$$

(Γ — гамма-функция). Окончательно имеем следующую систему уравнений для флуктуационных частей $\widetilde{T}_s(z, t)$, $\widetilde{u}_s(z, t)$, $\widetilde{p}_s(z, t)$ и $\widetilde{\rho}_s(z, t)$:

$$\langle p\rangle^{-1}\frac{\partial\widetilde{p}_s}{\partial t} - \langle T\rangle^{-1}\frac{\partial\widetilde{T}_s}{\partial t} + \frac{\partial\widetilde{u}_s}{\partial z} = 0; \tag{2.11}$$

$$\frac{\partial\widetilde{u}_s}{\partial t} - \frac{1}{\langle p\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta + \xi\right)\frac{\partial^2\widetilde{u}_s}{\partial z^2} + \delta_s\widetilde{u}_s = -\frac{c^2}{\gamma\langle p\rangle}\frac{\partial\widetilde{p}_s}{\partial z} + (\nabla\sigma^{\text{ст}})_s; \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial\widetilde{T}_s}{\partial t} - \chi\frac{\partial^2\widetilde{T}_s}{\partial z^2} + \alpha_s\widetilde{T}_s = -G_T\widetilde{u}_s + \frac{\gamma-1}{\gamma}\frac{\langle T\rangle}{\langle p\rangle}\frac{\partial\widetilde{p}_s}{\partial t} + (\operatorname{div}\mathbf{q}_T^{\text{ст}})_s, \tag{2.13}$$

где γ — адиабатическая постоянная; $G_T = \partial\langle T\rangle/\partial z$ — градиент регулярной составляющей поля температуры; $c = \sqrt{\gamma\frac{\langle p\rangle}{\langle\rho\rangle}}$ — скорость звука;

$$\delta_s \simeq \frac{4}{3R^2\langle\rho\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta + \xi\right)\frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}\sqrt{\frac{\omega\langle\rho\rangle}{2\eta}}; \quad \alpha_s = \frac{2\alpha\chi}{R}.$$

Рассматривается неравномерно нагретый реактор. Поэтому плотность газа $\langle\rho\rangle$, температура $\langle T\rangle$, а следовательно, коэффициенты при искомых функциях в (2.11)—(2.13) зависят от z. С целью упрощения оценок заменим их на средние эффективные значения, полагая, что это не повлияет на качественный характер поведения полученных таким образом функций. Кроме того, градиент температуры G_T зададим постоянным. Тогда решение (2.11)—(2.13) можно искать в виде

$$\widetilde{u}_s = \sum_{n=0}^{\infty}\left[u_n\exp(ik_nz) + u_n^*\exp(-ik_nz)\right]$$

и т. д. Здесь $k_n = \pi n/l$ — собственное значение гармонического уравнения с однородными граничными условиями второго рода на границе области ($n = 0, 1, 2, \ldots$). Производя фурье-преобразование уравнений (2.11)—(2.13) по времени, можно определить спектральные плотности искомых функций $p_n(\omega)$, $u_n(\omega)$, $T_n(\omega)$ через функционалы спектральных плотностей случайных сторонних сил. Используя флуктуационно-диссипативную теорему (1.3), (2.5), для спектральной плотности корреляционной функции давления получаем

$$\begin{aligned}\langle\widetilde{p}_n^2\rangle_{k_n,\omega} = \Bigg\{&\frac{2k_{\text{Б}}\varkappa}{\pi}\left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2\omega^2\left[\omega^2 + \left(\frac{k_n^2}{\langle p\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta + \xi\right) + \delta_s^n\right)^2\right] - \\ &- k_n^2\frac{k_{\text{Б}}\langle T\rangle}{\pi}\left(\frac{4}{3}\eta + \xi\right)\frac{c^2}{\gamma}\left[\omega^2 + \left(k_n^2\chi + \alpha_s + \frac{G_T}{\langle T\rangle}\frac{\omega}{k_n}\right)^2\right]\Bigg\}\times \\ &\times\Bigg\{\frac{\omega}{k_n^2\gamma^2}\left[-\omega^2 + k_n^2c^2 + \gamma\left(\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta + \xi\right) + \delta_s^n\right)(\chi k_n^2 + \alpha_s)\right]^2 + \\ &+ \Bigg[\frac{1}{k_n}\Bigg(k_n^2c^2(k_n^2\chi + \alpha_s) - \omega^2\Bigg(\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta + \xi\right) + \\ &+ \chi k_n^2 + \alpha_s + \delta_s\Bigg)\Bigg) + \omega\frac{G_T}{\langle T\rangle}c^2\Bigg]^2\Bigg\}^{-1}.\end{aligned} \tag{2.14}$$

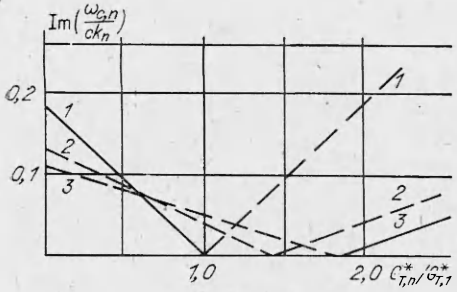

Рис. 3

Характерные флуктуационные времена гармоник с волновым вектором k_n определяются корнями дисперсионного уравнения

(2.15)

$$\frac{\omega}{\gamma k_n}\left\{-\omega^2+k_n^2c^2+\gamma\left[\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\delta_s^n\right](\chi k_n^2+\alpha_s)\right\}-\frac{1}{ik_n}\times$$

$$\times\left\{k_n^2(k_n^2\chi+\alpha_s)c^2-\omega^2\left[\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)+\chi k_n^2+\alpha_s+\delta_s^n\right]\right\}+i\omega\frac{G_Tc^2}{\langle T\rangle}=0$$

в комплексной плоскости частот ω. Здесь $\delta_s^n=\delta_s|_{\omega=ck_n}$. В общем случае все корни (2.15) комплексны. Однако есть критические величины градиента температуры G_T^*, при которых существуют действительные корни дисперсионного уравнения. На рис. 3 приведена зависимость мнимой $\mathrm{Im}\,\omega_{c,n}$ части корня (2.15), нормированной на скорость звука в газе c и волновое число k_n, от градиента температуры в газе, отнесенного к величине критического градиента $G_{T,1}^*$ первой гармоники.

Результаты получены для первой, второй и третьей гармоник кварцевого реактора (кривые *1—3*) с аргоном в качестве газа-носителя. Действительная часть корня $\mathrm{Re}(\omega_{c,n})\simeq ck_n$ с хорошей точностью. Длина реактора 50 см, диаметр 5 см. При температуре на нагревателе $\simeq$ 870 К и давлении в реакторе $\sim 10^5$ Па критическая величина градиента температуры для первой гармоники $G_{T,1}^*\sim 3000-4000$ град/м. Таким образом, когда $G_T=G_{T,n}^*$, где

$$G_{T,n}^*=\frac{\langle T\rangle}{c}\left[\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)+\delta_s^n+(\gamma-1)(\chi k_n^2+\alpha_s)\right],$$

существует действительный корень (2.15), соответствующий частоте акустической волны гармоники k_n реактора: $\omega_{c,n}^*\simeq ck_n$. В области градиентов температур, близких к критическим, корреляционная функция флуктуаций давления

$$\langle\tilde{p}_s(z,t),\tilde{p}_s(z',t')\rangle\simeq\frac{\exp\left(-\frac{t-t'}{\psi^n}\right)}{|G_T-G_{T,n}^*|}\times \tag{2.16}$$

$$\times\mathrm{Re}\left[p_{G,n}^2\exp(ik_n|z-z'|+i\omega_{c,n}|t-t'|)\right],$$

где $\psi^n=\dfrac{\psi_0^n}{|G_T-G_{T,n}^*|}$; $\psi_0^n=(\varepsilon_0^n\sin(\varphi_n))^{-1}$;

$$p_{G,n}^2=\left[\frac{2k_Б\varkappa}{\pi}\left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2(k_n^2c^2+2k_nc\varepsilon^*|G_T-G_{T,n}^*|)^2\times\right.$$

$$\times\left(k_n^2c^2+2ck_n\varepsilon^*|G_T-G_{T,n}^*|+\left(\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}+\delta_s^n\right)^2\right)-$$

$$-\frac{k_Б\langle T\rangle k_n^2c}{\pi\gamma}\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)\left(k_n^2c^2+2ck_n\varepsilon^*|G_T-G_{T,n}^*|+\right.$$

$$\left.\left.+\frac{G_T}{\langle T\rangle c}+\left(\frac{1}{c}-\frac{G_T\varepsilon^*}{\langle T\rangle k_n}\right)|G_T-G_{T,n}^*|+k_n^2\chi+\alpha_s^n\right)^2\right)\Bigg]\times$$

$$\times\left\{\frac{-2k_n c^4\langle T\rangle}{\gamma^2}\left((\gamma+1)(k_n^2\chi+\alpha_s)+\gamma\left(\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}+\delta_s^n\right)\right)+\right.$$

$$\left.+2\varepsilon^*\left(4k_n^2c^4\gamma^2+c^2\left(\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}+\delta_s^n+\chi k_n^2+\alpha_s\right)+\sqrt{\gamma}\,(\chi k_n^2+\alpha_s)\right)^2\right\}^{-1};$$

$$\varepsilon^*=\varepsilon_0^n\exp(i\varphi_n);\ \varepsilon_0^n=2k_n^2c^6\left\{4k_n^2c^4\gamma^2+c^2\left(\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\delta_s^n+\chi k_n^2+\alpha_s\right)+\sqrt{\gamma}\,(\chi k_n^2+\alpha_s)\right)^2\Bigg\}^{-1};$$

$$\varphi_n=\operatorname{arctg}\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_0^n-g_n^2}}{g_n}\right);\quad g_n=-\frac{2k_nc^4\langle T\rangle}{\gamma^2}\left((\gamma+1)(k_n^2\chi+\alpha_s)+\right.$$

$$\left.+\gamma\left(\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}+\delta_s^n\right)\right)\left\{4k_n^2c^4\gamma^2+c^2\left(\left(\frac{4}{3}\eta+\xi\right)\frac{k_n^2}{\langle\rho\rangle}+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\delta_s^n+\chi k_n^2+\alpha_s\right)+\sqrt{\gamma}\,(\chi k_n^2+\alpha_s)\right)^2\Bigg\}^{-1}.$$

В (2.16) ψ^n определяет характерное время корреляции, а $\omega_{c,n}$ — характерную частоту длинноволновой части флуктуаций давления:

$$\omega_{c,n}=ck_n+\varepsilon_0^n\cos(\varphi_n)\,(G_T-G_{T,n}^*). \tag{2.17}$$

Как видно из (2.16), амплитуда флуктуаций давления растет обратно пропорционально $|G_T-G_{T,n}^*|$. Аналогичную особенность обнаруживает и время корреляций ψ^n. При этом происходит выделение n-й гармоники реактора и генерируется акустическая волна с частотой $\omega_{c,n}^*$. Отметим, что оценки (2.16), (2.17) справедливы в окрестности значений G_T, близких к $G_{T,n}^*$, где еще несущественны нелинейные эффекты взаимодействия флуктуаций.

На рис. 4 приведена зависимость величины критического градиента $G_{T,1}^*$ для первой гармоники от давления и температуры. Результаты получены для двух предельных значений коэффициента теплопередачи: $\alpha=\infty$ и 0 (кривые *1* и *2*) для тех же параметров газа в реакторе, что и на рис. 3. Из них следует, что уменьшение α приводит к уменьшению $G_{T,n}^*$. На рис. 5 показана зависимость $G_{T,n}^*$ от давления при $\alpha=0$ для различных гармоник ($n=1,\ldots,6$ — линии *6—1*); видно, что $G_{T,n}^*$ с увеличением n растет. Полученные выводы качественно согласуются с данными газодинамических экспериментов по изучению механизмов термоакустических колебаний в приложении к объяснению эффектов вибрационного горения [7, 8].

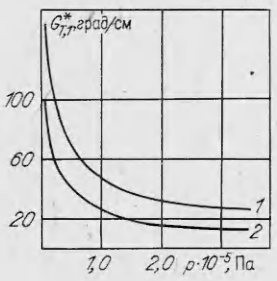

Рис. 4

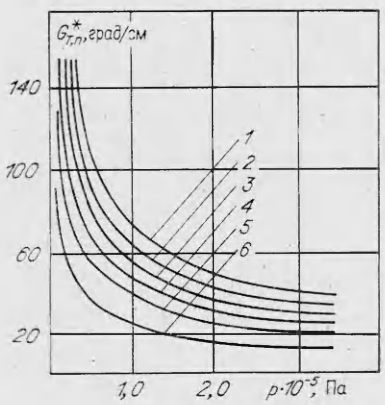

Рис. 5

Таким образом, развитый подход, основанный на определении влияния белого шума тепловых флуктуаций, представляется эффективным для изучения кинетики пороговых процессов для широкого класса явлений в открытых статистических системах. Показано, что флуктуации могут приводить к образованию стационарных и нестационарных периодических структур. Применимо к процессам кристаллизации они могут быть причиной появления периодических неоднородностей распределения примесей, дефектов в формирующейся твердой фазе при значениях технологических параметров процесса, близких к критическим.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Mullins W. W., Sekerka R. F.** Stability of a planar interface during solidification of dilute binary alloy.— J. Appl. Phys., 1964, v. 35, p. 444.
2. **Максимов С. К., Нагдаев Е. Н.** Явление автомодуляции состава эпитаксиальных пленок Ga As.— ДАН СССР, 1979, т. 245, № 6.
3. **Черепанова Т. А.** Флуктуационный механизм неустойчивости растущих граней кристаллов.— ДАН СССР, 1976, т. 226, № 5.
4. **Favier J. J.** Instabilite de l'interface solidel liquide: limits et aspect morphologiques en conditions de microgravite.— Compte-Rendu D. M. G. N 35/82, Grenoble, 1982.
5. **Шлихтинг Г.** Теория пограничного слоя.— М.: Наука, 1974.
6. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Статистическая физика.— М.: Наука, 1976.
7. **Галлиуллин Р. Г., Ревва И. П., Халимов Г. Г.** Теория термических автоколебаний.— Казань: Казан. ун-т, 1982.
8. **Фомичев В. М., Горшунов О. Л.** К вопросу о возбуждении термоакустических колебаний.— ТВТ, 1981, т. 19, № 3.

Поступила 22/XI 1985 г.

УДК 534.222.1 + 534.222.2

КОЛЕБАНИЯ В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ И ПРИРОДА СПИНОВОЙ ГАЗОПЛЕНОЧНОЙ ДЕТОНАЦИИ

А. В. Пинаев

(*Новосибирск*)

1. Анализ акустических резонансных колебаний в продуктах детонации гомогенных газовых смесей впервые проделан в [1—4], где отмечено близкое совпадение экспериментально измеренной частоты вращения «головы» спина ω_{es} и частоты первой гармоники ω_{11} поперечных колебаний цилиндрического столба газа с постоянными параметрами, соответствующими состоянию в плоскости Жуге. Возмущения течения в [1—4] исследованы без учета наличия зоны реакции. Поскольку возмущения распространяются из зоны реакции вниз по потоку и не проникают из сверхзвуковой области через поверхность Чепмена — Жуге к фронту, то в этих работах нет ответа на вопросы: почему неустойчив сам фронт детонации и почему $\omega_{es} \simeq \omega_{11}$?

Качественное изучение устойчивости плоской детонационной волны при случайном искривлении фронта сгорания для модели детонации с периодом индукции и последующей мгновенной реакцией проведено в [5, 6].

В более строгой математической постановке решалась задача об устойчивости фронта детонации с примыкающей к нему одномерной зоной реакции для газовых смесей [7—9]. Указано на устойчивость пересжатой детонационной волны при стремлении к нулю тепловыделения за ее фронтом [7, 9]. Устойчивость основного решения уравнений гидродинамики и химической кинетики для детонации Чепмена — Жуге по отношению к малым возмущениям исследована в [8], где найдены некоторые из собственных чисел и получено, что частоты растущих во времени цилиндрических гармоник зависят от отношения ширины зоны реакции к радиусу трубы.

В [10] предложена акустическая модель, представляющая критерий для развития спонтанно возникающих поперечных волн, и показано, что при любой разумной кинетике происходит усиление бесконечно малых высокочастотных поперечных возмущений в зоне экзотермических реакций детонации Чепмена — Жуге. Теория [11] описывает механизм раннего поведения волнового фронта в течение возникновения поперечных волн и показывает, что волны конечной амплитуды не будут возникать в пламенах или ударных волнах, сопровождаемых зоной эндотермических реакций.

В [12—15] экспериментально обнаружены и изучены стационарные спиновые детонационные режимы в гетерогенной системе газообразный окислитель в объеме трубы — пленка жидкого горючего на ее стенках. Появившаяся позднее модель спиновой газопленочной детонации [16, 17] содержит следующие предположения: горе-