

01;05  
©1994 г.

## ДВИЖЕНИЕ КРИСТАЛЛИЗОВАННОЙ ВОЛНЫ В АМОРФНОЙ СРЕДЕ С ЗАРОДЫШЕВЫМИ КРИСТАЛЛАМИ

*В. П. Коверда*

Приведено решение задачи о скорости движения кристаллизованной автоволны в аморфной среде с замороженными центрами кристаллизации. Показано, что зависимость эффективной скорости распространения фронта кристаллизации от линейной скорости роста кристаллов имеет немонотонный характер. Обсуждаются устойчивость и мультистабильность взрывной кристаллизации в такой среде.

### Введение

Устойчивость аморфной среды по отношению к кристаллизации определяется частотой образования зародышевых кристаллов и скоростью их роста. Обе эти величины для аморфного состояния возрастают с повышением температуры, поэтому в процессе кристаллизации существует положительная обратная связь между скоростью кристаллизации и выделением кристаллизационного тепла. Благодаря такой обратной связи малые тепловые возмущения могут многократно усиливаться и приводить к развитию взрывной кристаллизации.

Тепловые возмущения могут возникать в аморфной среде спонтанно за счет локального разогрева в центральных областях случайных скоплений растущих центров кристаллизации. Такие скопления появляются в результате интенсивной нестационарной нуклеации в некоторых аморфных системах, например в слоях аморфного льда и ряда органических веществ, аморфное состояние которых получается конденсацией молекулярных пучков на сильно охлажденной подложке. Переход к взрывной кристаллизации в таких слоях при медленном нагревании или изотермической выдержки имеет пороговый характер, и его начало определяется интенсивностью нуклеации [1].

При малой интенсивности нуклеации в аморфной среде для возникновения взрывной кристаллизации требуется внешнее тепловое воздействие (локальный разогрев лазерным или электронным импульсом [2]) или искусственное внесение в аморфную среду большого количества мельчайших кристалликов. Последний случай имеет общие черты со спонтанной взрывной кристаллизацией и реализуется в опытах

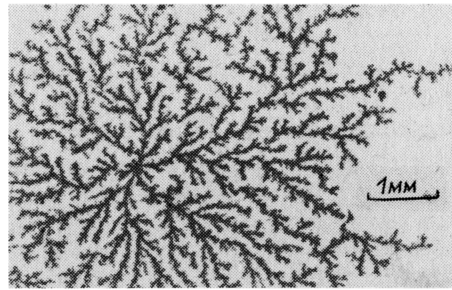


Рис. 1. Взрывная кристаллизация в слое аморфного порошка германия с зародышевыми кристаллами.

с аморфными ультрадисперсными порошками германия с небольшой примесью кристаллической фазы [3]. Для этого процесса характерна также сильная чувствительность скорости распространения кристаллизационной волны и морфологической устойчивости фронта взрывной кристаллизации к начальной концентрации затравочных кристаллов, распределенных в среде. Можно наблюдать возникновение и распространение взрывной кристаллизации из множества спонтанно возникших центров, образование фрактальной структуры фронта (рис. 1). Цель настоящей работы проанализировать движение кристаллизационной волны в аморфной среде с распределенными в ней зародышевыми кристаллами.

### Предварительные замечания, постановка задачи

Движение кристаллизационной волны в аморфной среде сопровождается повышением температуры на фронте кристаллизации. Если в среде нет кристаллических зародышей, то скорость распространения кристаллизационной волны определяется линейной скоростью роста кристалла  $V$ , соответствующей температуре фронта кристаллизации  $T_f$ . Перед фронтом кристаллизации формируется экспоненциальный температурный профиль. Характерная тепловая длина  $l_T$  профиля, определяющая ширину прогретой зоны, обратно пропорциональна скорости роста кристаллической фазы  $l_T \sim a/V(T_f)$ , где  $a$  — температуропроводность среды. Плоский фронт кристаллизации морфологически устойчив: любой случайный выступ на фронте попадает в зону с более низкой температурой и, следовательно, с меньшей скоростью роста [4].

Если в аморфной среде присутствуют замороженные центры кристаллизации, то их рост в прогретой зоне фронта приводит к интенсификации процесса и ускорению движения кристаллизационной волны по сравнению с линейной скоростью роста кристалла с той же температурой поверхности. Для величины результирующей скорости  $U$  распространения кристаллизационной волны существенными параметрами являются размер, до которого вырастают центры кристаллизации, их число в прогретой зоне кристаллизационной волны, характерная длина самой тепловой зоны и условия теплоотвода от фронта кристаллизации.

При неизменных условиях теплоотвода скорость кристаллизационной волны  $U$  в неоднородной аморфной среде должна возрастать с увеличением числа зародышевых кристаллов, растущих в прогретой зоне.

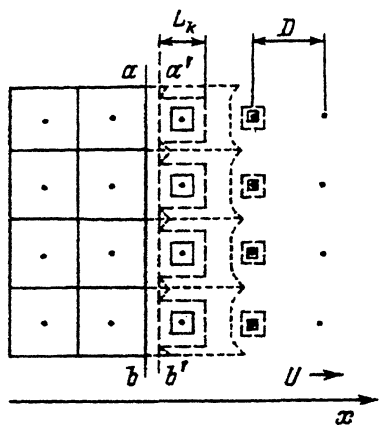


Рис. 2. Схема роста центров кристаллизации в аморфной среде.

С другой стороны, повышение скорости кристаллизационной волны ведет к уменьшению характерной тепловой длины  $l_T \sim a/U$ , на которую распространяется тепло перед фронтом кристаллизации, и уменьшению числа растущих в прогретой зоне зародышевых кристаллов. Таким образом, кинетический и тепловой факторы по-разному воздействуют на изменение результирующей скорости движения фронта кристаллизации, и это обуславливает многообразный и сложный характер развития взрывной кристаллизации в аморфной среде с замороженными зародышевыми кристаллами.

Для анализа особенностей движения кристаллизационной волны в аморфной среде с замороженными кристалликами рассмотрим упрощенную ситуацию. Пусть в аморфной среде регулярно распределены в узлах кубической решетки с периодом  $D$  малые зародышевые кристаллы, начальный размер которых много меньше  $D$ . В среде инициирован и распространяется фронт кристаллизации вдоль одной из осей кубической решетки (рис. 2). Линейные размеры среды примем значительно большими минимального расстояния между зародышами, так что теплоотводом из среды можно пренебречь и считать, что все выделяющееся кристаллизационное тепло идет на нагревание кристаллической фазы. Если пренебречь различиями в плотности  $\rho$ , теплоемкости  $c$  и температуропроводности  $a$  аморфной и кристаллической фаз, то за фронтом кристаллизации будем иметь повышение температуры на  $T_q = \Delta H/c$ , где  $\Delta H$  — теплота кристаллизации. Считаем также, что начальная температура аморфной фазы  $T_\infty$  настолько низка, что при этой температуре нет заметного роста зародышевых кристаллов, а конечная температура после кристаллизации  $T_\infty + T_q$  ниже температуры плавления.

Будем считать для простоты, что замороженные кристаллики растут в аморфной среде в форме одинаково ориентированных кубиков (чтобы в расчетах не возникло трудностей с заполнением пространства кристаллической фазой). Перенос тепла в твердой среде описывается уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \Delta T + \Sigma \dot{T}_i, \quad (1)$$

где  $\Sigma \dot{T}_i$  — обозначает скорость роста температуры, в результате действия источников тепла в среде.

Движение кристаллизационной волны в аморфной среде с замороженными зародышевыми кристаллами связано с одновременным действием двух факторов. Во-первых, с ростом кристаллических зародышей в прогретой зоне фронта кристаллизации. Рост центров кристаллизации определяет распределенный в пространстве источник тепла. Во-вторых, с движением плоского фронта кристаллизации при зарастании пространства между выросшими кристаллическими зародышами. Это движение определяет  $\delta$ -образный источник тепла, действующий при температуре  $T_\infty + T_q$  и движущийся со скоростью роста кристалла  $V_m = V(T_\infty + T_q)$ . Действие первого фактора понятно, а наличие второго можно пояснить с помощью рис. 2. Фронтальная поверхность (линия  $ab$  на рис. 2) сросшихся центров кристаллизации не будет оставаться на месте пока вырастает последующий слой кристаллов, а будет двигаться вправо до соединения с очередным слоем растущих зародышевых кристаллов (до положения, обозначенного линией  $a'b'$ ). Форма кристаллического зерна на один зародышевый кристалл будет не кубической, а такой, как показано штриховой линией на рис. 2. После присоединения очередного слоя зародышевых кристаллов процесс движения плоского фронта повторится на соответствующей грани очередного слоя подросших зародышевых кристаллов. При строго регулярном расположении зародышевых кристаллов перетечки тепла в зоне растущих зародышей в направлении, не совпадающем с направлением движения фронта кристаллизации, не влияют на его скорость, поэтому проанализируем одномерное уравнение теплопроводности.

Пусть  $L(T)$  — линейный размер растущего кристалла, а  $L_R$  — размер, до которого он дорастает к моменту присоединения к плоскому фронту кристаллизации (рис. 2). Если  $D$  — минимальное расстояние между замороженными зародышевыми кристаллами (рис. 2), а  $U$  — эффективная скорость распространения тепловой волны в среде, то доля пространства в направлении движения волны, равная  $(1 - L_R/D)$ , проходит волной со скоростью  $V_m$  под действием  $\delta$ -образного источника тепла. Одновременно с этим доля  $L_R/D$  проходит волной со скоростью  $U - V_m$  под действием распределенных в пространстве источников тепла, формируемых растущими центрами кристаллизации. Из геометрических соображений имеем  $L_R/D = (1 - V_m/U)$ , откуда  $L_R = (1 - V_m/U)D$ .

Будем считать тепловую волну в кристаллизующейся аморфной среде двухзонной. Зона движения плоского фронта кристаллизации завершает процесс, а источник тепла, задающий теплоперенос, определяется как обычно  $T_q V_m \delta(x - x_f)$ , где  $x_f$  — координата фронтальной поверхности сросшихся центров кристаллизации (линия  $ab$  на рис. 2). В отсутствие тепловых потерь на излучение и теплоотвод из среды на этой границе выполняется условие баланса тепла  $A(\partial T/\partial x)_{x=x_f} = -T_q T_m$ .

В зоне роста зародышевых кристаллов мощность источника тепловыделения определяется скоростью роста кристаллика, отнесенной к объему, который он займет к моменту присоединения к плос-

кому фронту кристаллизации (т.е. до перехода к режиму кристаллизации в другой зоне). Для кубической формы кристаллов скорость роста температуры в соответствующем объеме будет равна  $6T_q L^2(T)V(T)/(1 - V_m/U)^3 D^3$ .

Уравнение теплопроводности (1) для кристаллизационной волны, распространяющейся вдоль оси  $x$ , можно представить в виде

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + T_q V_m \delta(x - x_f) + \frac{6T_q L^2 V}{(1 - V_m/U)^3 D^3}. \quad (2)$$

Быстрое (экспоненциальное для кристаллов в аморфной среде) возрастание скорости роста кристаллов с температурой приводит к тому, что практически весь процесс кристаллизации протекает при высоких температурах вблизи  $T_\infty + T_q$ . Это позволяет для нахождения скорости тепловой волны при кристаллизации аморфной среды обратиться к аналогии с процессами горения. В частности, уравнение (2) лишь наличием второго слагаемого в правой части отличается от уравнения, рассмотренного в классической работе Зельдовича и Франк-Каменецкого [5]. Это позволяет воспользоваться логикой рассуждений [5] для вычисления скорости движения тепловой волны.

Если пренебречь, как и в [5], расходом тепла на разогрев среды в самой зоне кристаллизации за счет роста зародышевых кристаллов, то единственным источником разогрева среды в этой зоне останется движение плоского фронта кристаллизации. Поэтому для этой зоны можно считать  $\partial T/\partial t = U(dT/dx) \simeq U(sT/dx)_{x=x_f}$ . Обозначая  $dT/dx = W$ , получим уравнение

$$\frac{UW(x_f)}{a} + W \frac{dW}{dT} = -\frac{T_q V_m}{a} \delta(x - x_f) - \frac{6T_q L^2 V}{a(1 - V_m/U)^3 D^3}. \quad (3)$$

Поскольку  $2W dW/dT = dW^2/dT$ , то это уравнение можно проинтегрировать по температуре. В отличие от [5] граничное условие на градиент  $W$  при  $T_f = T_\infty + T_q$  не нулевое, а определяемое балансом тепла на плоском фронте кристаллизации  $W_{x_f} = W(T_f) = T_q V_m/a$ . Сама же температура  $T_f$  в область интегрирования не включается. В результате получим для градиента в зоне роста кристаллических зародышей уравнение

$$W(T) = - \left( \frac{2}{a} \int_T^{T_\infty + T_q} \frac{6T_q L^2 V dT}{(1 - V_m/U)^3 D^3} \right)^{1/2} - \frac{T_q V_m}{a}. \quad (4)$$

Чтобы найти значение градиента на условной низкотемпературной границе зоны кристаллизации  $T_0$ , в нижний предел интеграла в (4) можно вместо  $T_0$  подставить  $T_\infty$ . Вследствие быстрого падения  $V(T)$  и  $L^2(T)$  с температурой дополнительное интегрирование по температуре в пределах  $(T_0, T_\infty)$  дает пренебрежимо малую величину [5]. С другой стороны, на низкотемпературной границе зоны кристаллизации выполняется условие равенства полного теплового потока из зоны

кристаллизации в единицу времени, т.е.  $W(T_0) = -T_q U/a$ . Подставляя сюда  $W(T_0)$  из (4), получим

$$U - V_m = \left( \frac{2a}{T_q^2} \int_{T_\infty}^{T_\infty + T_q} \frac{6T_q L^2 V dT}{(1 - V_m/U)^3 D^3} \right)^{1/2}. \quad (5)$$

Разность  $U - V_m$  в левой части (5) имеет смысл скорости протекания тепла в зоне растущих центров кристаллизации, которую обозначим  $U_b$ . Пульсацией тепла мы пренебрегаем ( $U_b = \text{const}$ ).

Выражения (5) было бы достаточно для расчета эффективной скорости распространения тепловой волны, если бы мы имели явную зависимость мощности источника тепловыделения в зоне растущих центров кристаллизации от температуры. Но поскольку размер кристалла  $L(T)$  в зоне кристаллизации зависит от температурного профиля волны

$$L(T) = \int 2V dT = 2 \int_{T_\infty}^T V \frac{dt}{dx} \frac{dx}{dT} dT = \frac{2}{U_0} \int_{T_\infty}^T \frac{V}{W} dT, \quad (6)$$

то выражение (5) должно быть дополнительно выражением (4). Хотя (4) относится только к зоне роста центров кристаллизации, но для расчета  $U$  этого выражения вполне достаточно, так как сильная температурная зависимость  $V(T)$  приводит к тому, что вне зоны кристаллизации (при  $T < T_0$ ) размеры центров кристаллизации практически нулевые.

Система уравнений (4) и (5) формально эквивалентна автоволновому уравнению для переноса тепла

$$W \frac{dW}{dT} + \frac{U_0}{a} W + \frac{6T_q L^2 V}{a(1 - V_m/U)^3 D^3} = 0. \quad (7)$$

Это уравнение относится к фиктивной среде, в которой действуют только распределенные источники и отсутствует источник содержащий  $\delta$ -функцию, но дающее при расчете те же значения скорости и профиля температурной волны в зоне растущих центров кристаллизации. Его решения и будут использованы дальше в работе.

### Скорость тепловой волны кристаллизующихся зародышей

Для дальнейшего анализа требуется конкретизировать температурную зависимость линейной скорости роста кристалла в аморфной фазе. Обычно она аппроксимируется экспоненциальной зависимостью  $V(T) = V_0 \exp(-E/kT)$ , где  $E$  — энергия активации. Это выражение дает конечные, хотя и малые, значения скорости роста кристалла при любых низких температурах, отличных от нулевой. Поэтому его использование для анализа автоволновых решений уравнения теплопроводности создает известные трудности. Для удобства аналитических

расчетов в дальнейшем будет принята другая аппроксимация

$$V(T) = V_m \left( \frac{T - T_\infty}{T_q} \right)^n, \quad (8)$$

которая дает нулевую скорость роста при температуре  $T_\infty$  и, следовательно, позволяет анализировать автоволновые решения. Большая крутизна температурной зависимости скорости роста кристалла в аморфной среде, наблюдаемая экспериментально, делает существенными для расчетов лишь величины скоростей вблизи  $V(T) = V_m$ . Поэтому аппроксимация (8) в данном случае оправдана. Заметим, что экспериментальные данные по скорости роста кристаллов в аморфных пленках германия [3] в области реализации взрывных режимов кристаллизации можно описать выражением (8) при значениях  $V_m \simeq 10$  см/с и  $n \simeq 25$ .

Приняв нулевую точку отсчета температуры ( $T_\infty = 0$ ) и переходя к безразмерным температуре  $\tau = T/T_q$ , скорости  $v = VD/a$ , градиенту  $w = Wa/T_q U_b$ , координате  $\xi = xU_b/a$  и размеру кристаллика  $l = L/D$ , вместо (7) и (6) получим

$$w \frac{dw}{d\tau} + w + \frac{6l^2 \tau^n}{\nu_b^2 (1 - \sqrt{v_m/\nu})^3} = 0, \quad (9)$$

$$l = -\frac{2}{\nu_b^2} \int_0^\tau \frac{\tau^n d\tau}{w}, \quad (10)$$

где  $\nu_b^2 = u_b^2/v_m$ ,  $\nu^2 = u^2/v_m$ .

Заметим, что если  $U_b = U - V_m$ , то  $u_b = u - v_m$ , следовательно  $\nu_b = \nu - \sqrt{v_m}$  и  $l_k = (1 - \sqrt{v_m/\nu})$ . Из (10) имеем

$$\frac{dl}{d\tau} = -\frac{2\tau^n}{\nu_b^2 v}. \quad (11)$$

Подставив (11) в (9) и проинтегрировав по температуре, найдем

$$w + \tau = \frac{l^3}{(1 - \sqrt{v_m/\nu})^3}. \quad (12)$$

В зоне кристаллизации  $\tau \simeq 1$ . Приняв это приближение и подставив  $w$  из (11) в (12), получим уравнение для  $l(\tau)$

$$\frac{2\tau^n}{\nu_b^2} \frac{d\tau}{dl} \simeq 1 - \frac{l^3}{(1 - \sqrt{v_m/\nu})^3},$$

которое легко интегрируется, для  $n \gg 1$  будем иметь

$$\frac{2\tau^n}{n\nu_b^2} + C \simeq 1 - \frac{l^4}{4(1 - \sqrt{v_m/\nu})^3}.$$

Константа интегрирования  $C$  находится из условия  $l(\tau = 1) = l_k = (1 - \sqrt{v_m/\nu})$

$$\frac{3}{4}(1 - \sqrt{v_m/\nu}) - l - \frac{l^4}{4(1 - \sqrt{v_m/\nu})^3} \simeq \frac{2}{n\nu_b^2}(1 - \tau^n). \quad (13)$$

Наконец, подставив в (13) условие  $l(\tau = 0) = 0$ , найдем  $\nu_b^2$

$$\nu_b^2 \simeq \frac{8}{3m(1 - \sqrt{v_m/\nu})}. \quad (14)$$

В области малых  $v_m$  “внутренняя” скорость распространения тепловой волны принимается равной  $u_b = u - v_m$ , следовательно,  $\nu_b = \nu - \sqrt{v_m}$  и для нахождения эффективной скорости распространения тепловой волны имеем уравнение

$$(\nu - \sqrt{v_m})^2 \simeq \frac{8}{3n(1 - \sqrt{v_m/\nu})}. \quad (15)$$

которое позволяет рассчитать зависимость  $\nu(v_m)$ , а по ней эффективную скорость распространения тепловой волны  $u = \nu\sqrt{v_m}$ . Из (15) следует, что в предельном случае  $v_m \rightarrow 0$  эффективная скорость  $u \sim \sqrt{v_m}m$ . Это соответствует чисто тепловому режиму распространения автоволн, когда вклад в  $u$  за счет движения плоского фронта кристаллизации уменьшается настолько, что кинетика распространения автоволн определяется только самосогласованным ростом зародышей. В этом предельном случае выражение для скорости  $u$  совпадает с известной формулой Зельдовича–Франк–Каменецкого [5] для теплового распространения пламени, в которую следует подставить объемную скорость выделения тепла, равную кристаллизационному теплу, выделяемому растущими зародышами на единицу объема среды.

С ростом  $v_m$ , например, за счет увеличения начальной температуры аморфной среды  $T_\infty$  и соответствующего возрастания конечной температуры кристаллизации  $T_\infty + T_q$  будет расти и результирующая скорость  $u$ . Одновременно с этим тепловая длина кристаллизационной волны и соответственно ширина зоны роста центров кристаллизации будут уменьшаться. Начнет уменьшаться и разность  $u - v_m$ . Когда в зоне роста центров кристаллизации сможет находиться не более одного слоя растущих кристаллов, характерная тепловая длина, образуемая кристаллизующимися зародышами, станет меньше тепловой длины, формируемой зоной плоского фронта кристаллизации. Поэтому существует предельное значение разности  $u - v_m$ , начиная с которого при дальнейшем росте  $v_m$  тепловая длина и ширина кристаллизационной зоны будут определяться характеристиками движения плоского фронта кристаллизации, т.е. произойдет смена режима движения тепловой волны.

Для нахождения “предельных” значений  $v_m$  и  $\nu_b$ , соответствующих смене режимов движения тепловой волны, найдем размер кристаллика, вырастающего в тепловом поле плоского фронта кристаллизации, движущегося со скоростью  $V_m$ . Такой фронт кристаллизации в аморфной



среде (без зародышевых кристаллов) имеет экспотенциальный температурный профиль  $T = T_q \exp(-V_m x/a)$  [4]. Тогда имеем

$$L_k = \int 2V dt = 2 \int_0^{T(L_k/2)} V \frac{dt}{dx} \frac{dx}{dT} dT = \frac{2a}{V_m^2} \int_0^{T(L_k/2)} \frac{V dt}{T} =$$

$$= \frac{2a}{nV_m} e^{-\frac{nV_m L_k}{2a}} \simeq \frac{2a}{nV_m} \left(1 - \frac{nV_m L_k}{2a}\right),$$

откуда

$$L_k = a/nV_m. \quad (16)^1$$

Переходя к безразмерным величинам и учитывая, что максимальный размер выросшего кристалла  $l_k = (1 - \sqrt{v_m}/\nu)$ , получим

$$1 - \sqrt{v_m}/\nu = 1/nv_m. \quad (17)$$

Подставив (17) в (14), найдем предельную величину  $\nu_b$ , отвечающую переходу к новому режиму движения тепловой волны,

$$\nu_b^2 = \frac{8}{3v_m}. \quad (18)$$

Таким образом, с ростом  $v_m$  величина  $\nu_b$  будет определяться выражением  $\nu_b = \nu - \sqrt{v_m}$  лишь до тех пор, пока не сравняется со значением, даваемым (18). Чтобы найти дальнейшую зависимость  $\nu(v_m)$ , нужно в левую часть (15) подставить (18). Тогда получим выражение

$$\nu \simeq \frac{\sqrt{v_m}}{1 - 1/nv_m}, \quad (19)$$

которое позволяет рассчитать эффективную скорость распространения тепловой волны  $u = \nu\sqrt{v_m}$  в аморфной среде с зародышевыми кристаллами при больших  $v_m$ . Из (19) следует, что при  $v_m \rightarrow \infty$  эффективная скорость  $u \rightarrow v_m$ , что ожидается из общих соображений. При больших  $v_m$  ширина тепловой зоны, создаваемой плоским фронтом кристаллизации, уменьшается настолько, что в ней не успевают вырасти зародышевые кристаллы и мы имеем взрывной рост кристалла.

На рис. 3 приведены зависимости  $\nu(v_m)$  и  $u(v_m)$  для  $n = 25$ . Правую ветвь  $u(v_m)$  можно рассчитать непосредственно, не используя выражений (4) и (5) или (7). Рассмотрим движение плоского фронта кристаллизации в аморфной среде с редко расположенными замороженными центрами кристаллизации и учтем, что при набегании со скоростью  $V_m$  на вырастающий кристаллик плоский фронт "перепрыгивает" расстояние, определяемое (16). Возможность такого перескока обусловлена сильной температурной зависимостью ливейной скорости роста:

<sup>1</sup> Равенство (16) точное, если в строгом расчете учесть саморазогрев кристаллика в процессе роста в аморфной среде.

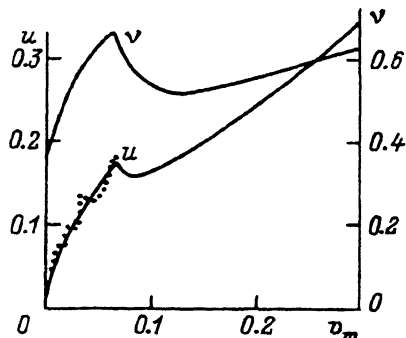


Рис. 3. Зависимость  $v(v_m)$  и  $u(v_m)$  при  $n = 25$ .

скорость саморазогрева кристаллика в момент присоединения к фронту кристаллизации в десятки раз превышает скорость переноса тепла фронтом, движущимся со скоростью  $V_m$ . Просуммировав расстояние за единицу времени и переходя к безразмерным величинам, получим (19).

Левую ветвь  $u(v_m)$  на рис. 3 можно также проанализировать иначе, не привлекая уравнение теплопроводности, если считать, что в кристаллизационную зону с уменьшением  $v_m$  последовательно попадает 2, 3, 4 и т.д. растущих центров кристаллизации, а скорость движения тепловой волны совпадает с суммарной скоростью движения всех фазовых границ. Тогда получим “зубчатую” линию  $u(v_m)$ , схематически показанную на рис. 3 пунктиром. Сглаженный характер при тепловом рассмотрении получился в результате пренебрежения дискретным характером распределения центров кристаллизации в аморфной среде и пульсацией тепла в кристаллизационной зоне при малых  $v_m$ .

### Обсуждение результатов

Основной вывод работы состоит в том, что эффективная скорость распространения кристаллизационной волны в аморфной среде с замороженными кристаллами немонотонно изменяется с увеличением линейной скорости роста кристалла при постоянной концентрации зародышевых кристаллов (или с увеличением концентрации зародышей при постоянной линейной скорости). Участок с отрицательной производной  $du/dv_m$  неустойчив и не может быть реализован в эксперименте. Фронт кристаллизации, соответствующий таким параметрам

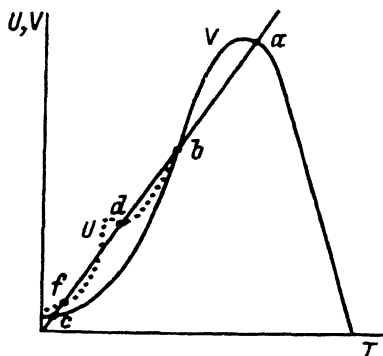


Рис. 4. Стационарные тепловые режимы взрывной кристаллизации.

$v_m$ , будет дробиться на отдельные веточки, что находится в соответствии с экспериментальными наблюдениями [3] (рис. 1). Поведение  $u$  в предельных случаях  $v_m \rightarrow 0$  и  $v_m \rightarrow \infty$  согласуется соответственно с известным решением [5] и общими физическими соображениями.

Можно надеяться, что характер зависимостей  $u(v_m)$  не должен принципиально изменяться при небольшом теплоотводе от среды. Действительно, согласно [6], понижение максимальной температуры в зоне реакции за счет теплоотвода от среды обратно пропорционально квадрату скорости автоволны. Поэтому немонотонный характер зависимости  $u(v_m)$  в среде с теплоотводом должен усилиться, а взрывная кристаллизация аморфной среды с зародышевыми кристаллами будет мультистабильной. На рис. 4 схематически представлена температурная зависимость линейной скорости кристалла  $V$  (сплошная линия) и эффективная скорость распространения кристаллизационной волны при некоторой постоянной концентрации замороженных кристаллов  $U$  (пунктиром). Тепловыделение в зоне кристаллизации пропорционально этим значениям при реализации соответствующего режима движения автоволн. Прямая линия на рис. 4 — теплоотвод. Из рисунка видно, что к устойчивым стационарным значениям скорости движения кристаллизационной волны (точки  $a$  и  $c$ ) в среде без зародышей добавятся устойчивые значения (точки  $d$  и  $f$ ) для эффективной скорости кристаллизации в неоднородной среде (точки  $b$  и  $e$  отвечают неустойчивым значениям скоростей). Заметим, что для неоднородной аморфной среды взрывная кристаллизация реализуется при более низких температурах, чем в среде без зародышевых кристаллов, в соответствии с экспериментальными наблюдениями [3]. Это происходит благодаря тому, что эффективная скорость распространения кристаллизационной волны в аморфной среде с зародышевыми кристаллами может значительно превышать линейную скорость роста кристалла при той же температуре фронта.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 93-02-16880).

### Список литературы

- [1] Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. М.: Наука, 1984. 230 с.
- [2] Александров Л.Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок. Новосибирск: Наука, 1985. 224 с.
- [3] Коверда В.П., Скрипов В.П. // Расплавы. 1987. Т. 1. № 4. С. 3-27.
- [4] Gilmer G.H., Lally H.J. // Laser and Electron Beam Processing of Materials. 1980. P. 227-233.
- [5] Зельдович Я.Б., Франк-Каменецкий Д.А. // ЖФХ. 1938. Т. 12. № 1. С. 100-105.
- [6] Зельдович Я.Б. // ЖЭТФ. 1941. Т. 11. Вып. 1. С. 159-169.

Институт теплофизики  
Екатеринбург

Поступило в Редакцию  
28 июля 1993 г.