

ВОЗНИКНОВЕНИЕ "НИТЕВИДНЫХ" СТРУКТУР В ПРОЦЕССЕ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ

Ю.Е.Кузовлев, Т.К.Соболева, А.Э.Филиппов

Донецкий физико-технический институт АН Украины

340114 Донецк, Украина

Поступила в редакцию 29 апреля 1993 г.

После переработки 20 июля 1993 г.

На основе обобщенного уравнения Гинзбурга–Ландау, описывающего эволюцию поля параметра порядка, исследован процесс зародышеобразования при фазовых переходах первого рода. Установлено, что даже в системе с изотропной симметрией критическая конфигурация флуктуаций параметра порядка не является сферической, а демонстрирует тенденцию к формированию квазинизкоразмерных складок плотности. Показано, что сферические зародыши возникают преимущественно вблизи упомянутых выше складок плотности и формируют нитевидные структуры, повторяющие форму этих складок на закритическом этапе эволюции.

Введение. Одним из ключевых вопросов фазовых переходов первого рода (ФП1) является вопрос о возникновении и структуре критического зародыша – крупномасштабной флуктуации параметра порядка, инициирующей переход всей распределенной системы из метастабильного состояния в абсолютно устойчивое [1–3].

В рамках феноменологической теории эволюция параметра порядка в неравновесных системах описывается обобщенным уравнением Гинзбурга–Ландау [4–6]. Это нелинейное уравнение диффузионного типа, в общем случае имеющее вид

$$\psi_t = \gamma(\delta\mathcal{F}/\delta\psi), \quad (1)$$

где \mathcal{F} – функционал Гинзбурга–Ландау рассматриваемой системы: γ – положительный кинетический коэффициент, $\varphi(x, t)$ – поле параметра порядка, а ψ_t – его производная по времени.

В недавней работе [7] на основе модели (1) была рассмотрена кинетика зародышеобразования и последующего роста доменов новой фазы в двух- и трехмерных системах с функционалами Гинзбурга–Ландау

$$\mathcal{F}[\psi] = \int d^a r \left[\frac{1}{2} (\nabla\varphi)^2 + F(\varphi) \right] \quad (2)$$

двух типов:

$$F(\varphi) = \frac{1}{2}\tau\varphi^2 - \frac{2}{3}a\varphi^3 + \frac{1}{4}b\varphi^4, \quad (3)$$

$$F(\varphi) = \frac{1}{2}\tau\varphi^2 - \frac{1}{2}a\varphi^4 + \frac{1}{6}b\varphi^6. \quad (4)$$

Если все постоянные в выражениях (3), (4) положительны и $a^2 > \tau b$, то функция $F(\varphi)$ с необходимостью имеет метастабильный минимум при $\varphi = 0$ и энергетически выгодный при $\varphi = \varphi_0 \neq 0$,

$$\varphi_0 = \frac{1}{2b} [a + (a^2 - \tau b)^{1/2}], \quad \varphi_0^2 = \frac{1}{b} [a + (a^2 - \tau b)^{1/2}],$$

и описывает поведение системы между бинодалью и спинодалью переохлаждения.

Основное внимание в [7] было уделено структуре и эволюции уединенного критического зародыша энергетически выгодной фазы внутри метастабильной. Кроме того, в рамках численных экспериментов исследована кинетика образования стабильной фазы из произвольных мезоскопических неоднородностей флуктуирующего поля. Была также продемонстрирована особая роль стационарных состояний, которые проявляют себя как метастабильные аттракторы в процессе движения системы к абсолютно устойчивому состоянию.

При некоторой температуре, соответствующей метастабильности неупорядоченной фазы, амплитуда отдельных возбуждений $\varphi(\mathbf{r})$ становится достаточной, чтобы они оказались критическими зародышами. Наиболее существенным результатом работы [7] был вывод о том, что типичная критическая конфигурация поля параметра порядка не является сферической. Это обусловлено следующими двумя причинами.

1. В общем случае локальные максимумы случайно распределенной плотности $\varphi(\mathbf{r})$ по-разному спадают вдоль различных направлений \mathbf{r} , так что среди них всегда найдутся такие, скорость спадания которых вдоль одного (двух) направлений существенно меньше, чем вдоль остальных (так называемые "складки"). Такие анизотропные складки плотности можно интерпретировать как квазинизкоразмерные образования, эволюционирующие в соответствии с одно- или двухмерным уравнением (1).

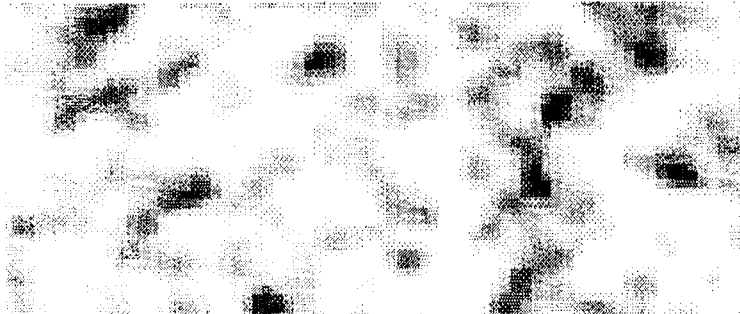


Рис.1. Развитая "нитевидная" структура для модели (3)

2. Главная специфика эволюции складок плотности состоит в том, что на первом этапе плотность параметра порядка внутри квазинизкоразмерного зародыша (первоначально существенно меньшая равновесной) нарастает к равновесному φ_0 . После этого зародыш расширяется, приближаясь по форме к сфере, будучи уже, однако, существенно закритическим. Этот механизм зародышеобразования "включается" при меньшей амплитуде флуктуаций $\varphi(\mathbf{r})$, чем необходимо для изначально сферических зародышей (для которых требу-

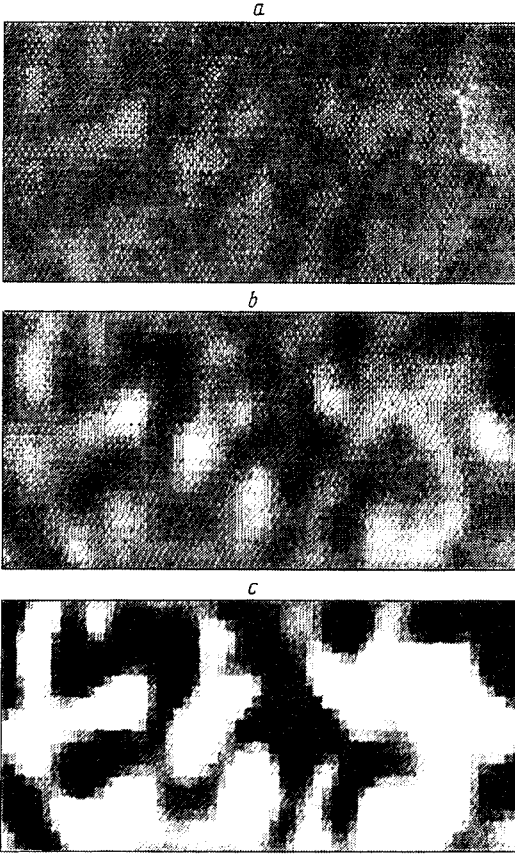


Рис.2. Последовательные этапы эволюции поля φ для модели (4); a - начало формирования "нитевидной" структуры, b - развитая "нитевидная" структура, c - начало завершающего этапа эволюции

емая амплитуда порядка φ_0), и, следовательно, должен быть типичным при движении системы из парафазы в область метастабильности.

Крупномасштабная "нитевидная" структура. Описанный ранее процесс релаксации усложняется наличием неустранимого при ненулевой температуре шума флуктуаций поля $\varphi(\mathbf{r};t)$. Соответствующий шум $f(t, \mathbf{r})$ должен быть добавлен в уравнение (1):

$$\varphi_t = -\gamma \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} + f(t, \mathbf{r}). \quad (5)$$

Он приводит к автоматическому возникновению зародышей без произвольного задания затравочного распределения $\varphi(\mathbf{r};0)$. В то же время, наличие шума приводит к существенному развитию упрощенной картины, основанной на исследовании релаксации заданной конфигурации поля φ .

Близкое к критическому низкоразмерное возбуждение релаксирует очень медленно (см. уравнение (1)) и практически не изменяется за то время, за которое уединенный закритический зародыш формируется окончательно. В свою очередь, крупный зародыш новой фазы взаимодействует с полем φ , "прикалывая" окружающую его область повышенной плотности (см. рис.1). С другой стороны, вытянутая в пространстве складка поля φ повышает вероят-

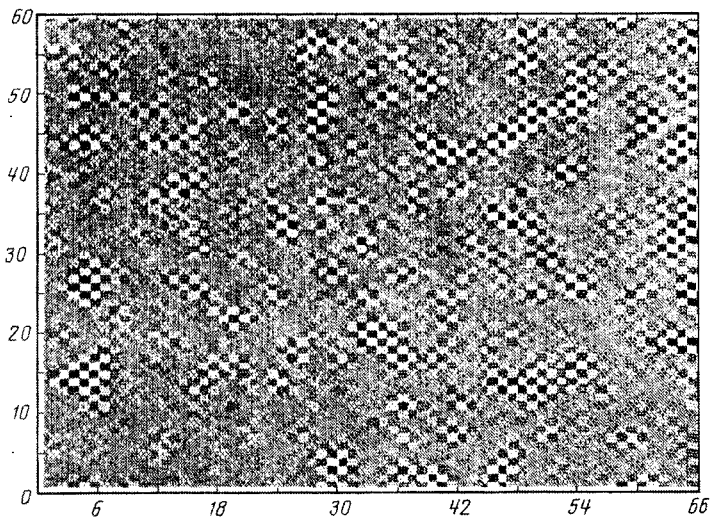


Рис.3. "Нитевидная структура" в случае "антиферромагнитного" взаимодействия

ность возникновения новых критических зародышей в ее окрестности, причем в направлении вытянутости исходного всплеска. На карте плотности параметра порядка возникает "нитевидная" структура, сформированная многочисленными зародышами, растущими вдоль складок плотности.

Нами было выполнено численное моделирование процесса зародышеобразования на основе уравнения (5) для обеих форм локального потенциала свободной энергии (3), (4) при различных значениях параметров уравнения: интенсивности шума, релаксационной постоянной и при различной структуре взаимодействия (нелокальной градиентной части функционала (2)). Во всех случаях обнаруживается универсальное свойство флуктуирующего поля φ формировать долгоживущие "нитевидные" структуры на промежуточном этапе релаксации системы к равновесному упорядоченному состоянию.

На рис.1 развитая структура такого типа, сформированная множеством (сферических) доменов новой фазы, представлена для модели (3), содержащей инвариант φ^3 и допускающей, следовательно, единственный знак для равновесного упорядочения поля φ . Локальная плотность параметра порядка изображена интенсивностью серого цвета так, что равновесной величине φ_0 соответствует максимальная интенсивность.

Качественно аналогичная структура имеется и для четной модели (4), допускающей равновесные домены обоих знаков. При этом на кинетическом этапе эволюции "стенки" между "нитеями", с фиксированным знаком параметра порядка формируются из зародышей другого знака. На рис.2 показано несколько типичных этапов развития такой структуры. Максимальному уровню серого соответствует плотность параметра порядка, равная $+\varphi_0$. На этапе, предшествующем рис.2а, движение всплесков плотности хаотическое. На рис.2а изображена стадия, на которой уже началось закрепление островков плотности (порядка 25% времени от момента "включения" метастабильного со-

стояния, для которого данная интенсивность шума является критической). На рис.2*b* изображен фрагмент развитой "нитевидной" структуры. Наконец, на рис.2*c* продемонстрировано начало процесса слипания зародышей в доменную структуру ($\approx 75\%$ времени). Последующая эволюция достаточно тривиальна и состоит в постепенном сглаживании границ и исчезновении малых анклавов одной фазы в другой.

Рис.3 иллюстрирует устойчивость процесса относительно изменения пространственной дисперсии взаимодействия. Упорядоченному состоянию в данном случае соответствует антиферромагнитная "шахматная" фаза. Яркость ее отражает амплитуду антиферромагнитного параметра порядка, задаваемого разностью величин φ в подрешетках. В этом случае также нетрудно проследить нитевидную структуру и отдельные зародыши.

Поскольку флуктуации поля φ продолжаются и после появления зародышей новой фазы, то описанный выше процесс сопровождается появлением все новых складок плотности и удлинением старых. Эти складки сливаются в перколяционный кластер, который постепенно заполняет все пространство. Принимая во внимание случайный характер процесса, можно ожидать, что на промежуточных этапах эволюции этот кластер является фрактальным. Ограниченные возможности численного эксперимента не позволяют нам, однако, однозначно подтвердить это предположение и вычислить размерность фрактальной структуры.

Авторы благодарят А.В.Радиевского за демонстрацию графических образов, стимулировавших размышления и постановку требуемых численных экспериментов. Настоящая работа поддержана частично Американским физическим обществом и фондом Сороса.

-
1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Статистическая физика, М.: Наука, 1976.
 2. Л.Д.Ландау, Л.П.Питаевский, Физическая кинетика, М.: Наука, 1979.
 3. А.Ю.Лоскутов, А.С.Михайлов, Введение в синергетику, М.: Наука, 1990.
 4. Л.Д.Ландау, И.М.Халатников, Сборник трудов Л.Д.Ландау, М.: Наука, 1969, **2**, с.218.
 5. H.Haken, Synergetics, An Introduction, Springer, Verlag, Berlin - Heidelberg, 1978.
 6. J.W.Cahn, Acta Metall **8**, 554 (1960).
 7. Ю.Е.Кузовлев, Т.К.Соболева, А.Э.Филиппов, ЖЭТФ **103**, 1742 (1993).