
ПІДТРИМУВАНІ ЗОВНІШНІМ ШУМОМ ПРОЦЕСИ ВІДБОРУ СТРУКТУР ПРИ СПІНОДАЛЬНОМУ РОЗПАДІ БІНАРНОЇ СИСТЕМИ

Д.О. ХАРЧЕНКО, І.О. ЛИСЕНКО, В.О. ХАРЧЕНКО

УДК 538.9
© 2010

Інститут прикладної фізики НАН України
(Вул. Петропавлівська, 58, Суми 40030)

Розглянуто процеси відбору структур у класі нерівноважних бінарних стохастичних систем, підданих зовнішньому впливові. Аналітично та чисельно показана можливість проходження процесу відбору структур на початкових стадіях спінодального розпаду. Встановлено, що регулярна та стохастична компоненти зовнішнього потоку відіграють протилежну роль при відборі структур та загалом при розпаді системи. Результати, одержані аналітично, підтверджено чисельним моделюванням.

1. Вступ

Розвиток сучасної теорії конденсованого стану вимагає всебічного дослідження процесів упорядкування в системах, значно віддалених від рівноваги [1]. Задача з'ясування стійкості фаз, особливостей їх утворення завдяки зовнішньому впливові на систему стає все більш актуальною, оскільки її розв'язання дозволяє виявити нові характеристики систем та відповідних процесів, що знаходять своє застосування не лише в матеріалознавстві [2], в електроніці [3, 4], а й, загалом, при прогнозуванні властивостей матеріалів, що піддані дії агресивного середовища, наприклад, опроміненню. Першорядним при цьому є питання про виявлення характеру та особливостей впливу зовнішніх чинників на процеси утворення когерентних станів, мікроструктурних перетворень та упорядкування в цілому.

Добре відомо, що системи, які можна вважати квазірівноважними, описано в межах гіпотези локальної рівноваги, де принципову роль відіграють процеси на дифузійних масштабах. В рамках цієї гіпотези вважають, що хоча система є нерівноважною, локальна термодинамічна рівновага встановлюється в без-

межно малих об'ємах [5]. Однак при значному відхиленні від рівноваги ця гіпотеза порушується, наприклад, при швидких процесах спінодального розпаду та швидкоплинних процесах переходу від нестійкого до метастабільного і стабільного станів [6]. Важливими тоді стають ефекти пам'яті, що описують зв'язок між рушійними силами та потоками в системі. Крім того, відомо, що нерівноважність може бути досягнута внеском флуктуацій зовнішнього середовища, які можуть приводити до некомпенсованих потоків речовини [5, 7]. У будь-якому випадку, розглядаючи систему в умовах, наближених до реальних, стохастичні складові еволюції мають бути враховані належним чином, оскільки вони моделюють вплив мікроскопічних процесів при описі системи на мезоскопічному рівні [8].

За останні роки було встановлено, що стохастичні сили здатні принципово змінювати поведінку фізичних систем, відіграючи при цьому конструктивну роль [8, 9]. У фізиці конденсованого стану до таких ефектів можна віднести індуковані шумом фазові переходи у системах зі збереженою та незбереженою динамікою [10–15], індуковані шумом процеси формування просторових структур [16], підтримуване шумом структуроутворення [17–21] тощо. Дослідження систем, що знаходяться в умовах зовнішнього стохастичного впливу, дозволяє виявити нові особливості їх поведінки з метою їх можливого використання. У колі прикладних досліджень таку задачу ставили під час дослідження стабільності фаз при розпаді бінарної системи в умовах опромінення високоенергетичними частинками [22, 23]. У теоретичному розгляді впливу опромінення на процес спінодального розпаду на вихідних етапах математичного моделювання при-

пускається стохастичність такого впливу. Опис особливостей структуроутворення на поверхні матеріалів, плівок при розпиленні також природно враховує стохастичні особливості потоку опромінення [24,25], у якому бомбардуючі частинки мають максвеллівський розподіл [26]. Таким чином, при теоретичному описі відповідних процесів статистичні характеристики потоку опромінення мають бути враховані.

Слід зазначити, що стійкість фаз при розпаді бінарних систем в умовах зовнішнього впливу (атермічного перемішування атомів, викликаного дією опромінення) добре досліджено як аналітично, так і шляхом чисельного моделювання в межах гіпотези локальної рівноваги (у дифузійній границі) [27, 28]. Однак перехідні процеси, які становлять не лише теоретичний інтерес, в суттєво нерівноважних системах, наприклад, за наявності пам'яті не було досліджено повністю. Важливо відзначити, що часова скорельованість може приводити до таких процесів, як відбір структур при спінодальному розпаді на характерних часових інтервалах, які опускаються при розгляді повільних (дифузійних процесів) внаслідок миттєвої релаксації дифузійних потоків [29]. Однак такі процеси здебільшого досліджені у так званих "безшумових" умовах, де флуктуації вважаються безмежно малими. Крім того, не вивченими залишаються процеси відбору структур, коли система піддана зовнішньому впливові, що має стохастичну природу, де інтенсивність зовнішніх флуктуацій може набувати великих значень.

Тому у даній роботі за мету поставлено дослідження процесів відбору структур у системах, для яких ефекти пам'яті відіграють визначальну роль за наявності зовнішнього фактора, який має як регулярну, так і флуктуаційну складові. У своєму розгляді ми обмежуємося моделлю бінарних систем, нехтуючи ефектами когерентних напружень, анізотропії, які можуть виникати при фазовому розшаруванні. Розглядаючи узагальнену модель фазового розшарування Кана-Хіллара-Кука з гіперболічним транспортом (внаслідок ефектів пам'яті) [30], стандартно вводиться потік атермічного перемішування атомів, індукованого дією опромінення. У припущенні наявності флуктуацій термічно стимульованого дифузійного потоку та атермічного потоку запропоновано загальну стохастичну модель. В її межах проведено опис процесів відбору структур на початкових стадіях розпаду в термінах середнього значення випадкового поля концентрації та структурного фактора. Аналітичні розрахунки підтверджено незалежним чисельним моделюванням. Крім того, проведено дослідження

поведінки системи в стаціонарному випадку, де встановлено вигляд динамічної фазової діаграми. Одержані результати ілюструють конкуруючу роль регулярної та стохастичної компонент атермічного потоку атомного перемішування при упорядкуванні системи.

Структура роботи є такою. У розділі 2 проведено постановку задачі та обґрунтовано вибір моделі бінарної системи зі збереженою динамікою. У розділі 3 в межах аналітичних обчислень досліджено стійкість станів системи, де обговорено особливості процесу відбору структур при спінодальному розпаді. Тут детально проаналізовано поведінку середнього та структурного фактора, групової та фазової швидкостей, нормованого фактора посилення. Для підтвердження аналітичних розрахунків у розділі 4 наведено результати чисельного моделювання. Основні висновки містяться у розділі 5.

2. Модель

Розглянемо клас бінарних систем $A_{\bar{c}}B_{1-\bar{c}}$, що описуються скалярним полем $x = x(\mathbf{r}, t)$, яке є збереженою величиною ($\int d\mathbf{r}x(\mathbf{r}, t) = \text{const}$), де $x = c - \bar{c}$ - відхилення від критичного значення концентрації $\bar{c} = 1/2$ однієї з компонент. Динаміка поля x задана рівнянням неперервності:

$$\partial_t x = -\nabla \mathbf{J}_{\text{tot}}. \quad (1)$$

Тут \mathbf{J}_{tot} - повний дифузійний потік, який складається з двох доданків $\mathbf{J}_{\text{tot}} = \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_e$, що задають звичайний термічно стимульований дифузійний потік \mathbf{J}_D та потік \mathbf{J}_e додаткового атермічного перемішування атомів системи, викликаний зовнішнім впливом, наприклад, опроміненням. Розглядаючи систему в умовах, наближених до реальних, далі припустимо, що кожна складова потоку має як регулярну, так і стохастичну складові. Основну увагу в роботі буде зосереджено на дослідженні процесів конкуренції названих потоків у процесах відбору структур при спінодальному розпаді.

Визначимо складові повного потоку \mathbf{J}_{tot} нерівноважної системи. Для широкого кола фізичних систем, віддалених від рівноваги, таких як не ньютонівські рідини, швидко охолоджені, кристалізовані сплави та системи, матеріали глибоко заморожені у спінодальній області або, загалом, системи з пам'яттю, гіпотеза локальної рівноваги не спрацьовує [31, 32]. У таких випадках дифузійний потік задано загальним виразом $\mathbf{J}_D = -M \int_0^t M_D(t-t') \nabla \delta \mathcal{F}[x(\mathbf{r}, t')] / \delta x(\mathbf{r}, t') dt'$, де $M = \text{const}$ - рухливість, \mathcal{F} - функціонал вільної

енергії бінарної системи, $M_D(t-t')$ – функція пам'яті, яка задає зв'язок між рушійною силою та потоком впродовж часу пам'яті τ_D . У випадку, коли дифузійний потік моментально реагує на збурення ($\tau_D \rightarrow 0$), функція пам'яті зводиться до $M_D(t-t') = \delta(t-t')$, що приводить до виразу для дифузійного потоку $\mathbf{J}_D = -M\nabla\delta\mathcal{F}/\delta x$, справедливого в умовах локальної рівноваги. Якщо ефекти пам'яті здатні відігравати принципову роль у динаміці відповідних фізичних процесів, наприклад, при відборі структур на початкових стадіях розпаду [29], то $\tau_D \neq 0$. Найпростішою моделлю, що враховує таку особливість реакції дифузійного потоку, є експоненціальна форма для $M(t-t')$ у вигляді $M_D(t-t') = (\tau_D)^{-1} \exp(-|t-t'|/\tau_D)$. Тоді зміну дифузійного потоку у часі буде задано релаксаційним рівнянням $\tau_D \partial_t \mathbf{J}_D = -\mathbf{J}_D - M\nabla\delta\mathcal{F}/\delta x$, де τ_D характеризує час релаксації потоку до свого стаціонарного значення. Припускаючи далі, що в реальних умовах завжди існують флуктуації потоку ξ , замість релаксаційного приходимо до стохастичного рівняння Ланжевена у вигляді

$$\tau_D \partial_t \mathbf{J}_D = -\mathbf{J}_D - M\nabla \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta x} + \xi(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

де $\xi(\mathbf{r}, t)$ – шум, що моделює термічні флуктуації. Він відповідає флуктуаційно-дисипаційній теоремі та має гаусові властивості: $\langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, $\langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\theta M \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$, де θ – інтенсивність, пропорційна температурі теплової бані T/T_c , T_c – критичне середньопольове значення. У випадку $M(t-t') = \delta(t-t')$, де $\tau_D \rightarrow 0$, приходимо до параболічної моделі Кана-Хіллара-Кука: $\partial_t x = \nabla \cdot M\nabla\delta\mathcal{F}/\delta x + \xi(\mathbf{r}, t)$, справедливої в умовах локальної рівноваги [33–37]. За відсутності зовнішнього впливу ($\mathbf{J}_e = 0$) при $\tau_D \neq 0$ рівняння (1),(2) описують стохастичну систему з гіперболічним транспортом (стохастичне рівняння Максвелла-Каттанео) [39] $\tau_D \partial_t^2 x + \partial_t x = \nabla M\nabla\delta\mathcal{F}/\delta x + \xi(\mathbf{r}, t)$. Слід зазначити, що наявність ефектів пам'яті у нерівноважних системах приводить до важливого висновку про обмеженість швидкості $v_D = l_D/\tau_D$ поширення збурень поля x , де l_D – дифузійна довжина. Для розмірної величини τ_D , наприклад, у системі $\text{SiO}_2 - 12\% \text{Na}_2\text{O}$ маємо оцінку $\tau_D \simeq 10^{-11}$ с при коефіцієнті дифузії $D \simeq 2,3 \cdot 10^{-14}$ см²/с [38]. Якщо за масштаб часу вибрати $\tau_x = \omega_D^{-1} e^{E_a/T}$ – час переходу атома з однієї позиції до іншої, де ω_D – частота Дебая, E_a – енергія активації, T – температура, то у випадку $\tau_D' \rightarrow 0$ де $\tau_D' = \tau_D/\tau_x$ приходимо до межі миттєвої релаксації дифузійного потоку з $v_D \gg 1$ (штрих далі опускаємо). Детальний опис процесів спінодального розшарування у бінарних си-

стемах з гіперболічним транспортом наведено у роботі [40].

Потік \mathbf{J}_e , що моделює додаткове атермічне перемішування атомів, викликане зовнішнім впливом, визначимо за формулою $\mathbf{J}_e = -D_e^0 \int_0^t M_e(t-t') \nabla x(\mathbf{r}, t') dt'$, де D_e^0 – ефективний коефіцієнт атермічного перемішування. Внаслідок припущення, що дія зовнішнього джерела, наприклад, опромінення приводить до миттєвого виникнення потоку атомів, покладемо далі $M_e(t-t') = \delta(t-t')$. Таке припущення є природним, оскільки час протікання каскаду при взаємодії високоенергетичної частинки з атомами середовища (перемішування) має порядок $\tau_e \simeq 10^{-13}$ с, тобто потік перемішування (формування структурного безладу, турбуленції тощо) виникає за час $\tau_e \ll \tau_D$. Це дозволяє описати даний потік законом Фіка: $\mathbf{J}_e = -D_e^0 \nabla x$. Вважаючи, що бомбардуючі високоенергетичні частинки мають стохастичну природу (характеризуються розкидом за швидкостями за Максвеллом [26]), очевидним є припущення про стохастичність такого перемішування. Це дозволяє покласти $D_e^0 = D_e + \zeta(\mathbf{r}, t)$, де D_e задає регулярну частину зовнішнього потоку \mathbf{J}_e , а $\zeta(\mathbf{r}, t)$ – його стохастичну складову, що моделює флуктуації, викликані формуванням структурних дефектів тощо [41]. За фізичним змістом величина D_e характеризує частоту індукованих зовнішнім впливом атомних стрибків, яка пов'язується із потоком опромінення ϕ , перетином розсіювання σ_r та середньою довжиною атомних стрибків $\langle R \rangle$: $D_e \simeq \phi \sigma_r \langle R \rangle^2$. Якщо існують флуктуації у енергетичних характеристиках бомбардуючих частинок, то очевидно, що виникає дисперсія довжин таких стрибків $\langle (\delta R)^2 \rangle$, яка характеризує інтенсивність зовнішнього шуму σ^2 . Розглядаючи загально-теоретичну задачу, визначимо стохастичну складову $\zeta(\mathbf{r}, t)$ з такими властивостями:

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0,$$

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D_e \sigma^2 C \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{r_c} \right) \delta(t - t'), \quad (3)$$

де $\sigma_e^2 = \langle (\delta R)^2 \rangle / \langle R \rangle^2$ – інтенсивність зовнішнього шуму; наявність величини D_e у кореляторі (3) свідчить про те, що стохастична компонента потоку \mathbf{J}_e виникає лише при дії зовнішнього джерела. У подальшому розглядають модель кореляційної функції $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ у вигляді

$$C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\sqrt{2\pi} r_c)^{-d} \exp(-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 / 2r_c^2), \quad (4)$$

де r_c – радіус кореляції, що визначає лінійний розмір перекриття збуджених атомних конфігурацій внаслідок взаємодії з високоенергетичними частинками; d – розмірність простору. У випадку $r_c \rightarrow 0$ маємо граничний випадок білого шуму у просторі та часі.

Таким чином, повна система рівнянь, що описує еволюцію випадкового поля має вигляд

$$\begin{cases} \partial_t x = -\nabla \mathbf{J}_D + D_e \Delta x + \nabla(\zeta \nabla x), \\ \tau_D \partial_t \mathbf{J}_D = -\mathbf{J}_D - M \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} + \xi. \end{cases} \quad (5)$$

У подальшому теоретичному розгляді буде проведено дослідження упорядкування в системах, що описуються функціоналом вільної енергії у загальному вигляді $\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} (f(x) + \frac{1}{2}(\mathcal{L}x)^2)$, де $f(x)$ – густина вільної енергії, \mathcal{L} – оператор просторової взаємодії. У випадку систем, що зазнають спінодального розпаду, де $x = c - 1/2$, маємо симетричну форму для густини вільної енергії $f(x) = f(-x)$, а \mathcal{L} визначається у стандартний спосіб розвиненням за найнижчим порядком просторової похідної від поля у вигляді $\mathcal{L} = \nabla$. Такий доданок у вільній енергії свідчить про те, що градієнт концентраційного поля є енергетично не вигідним і приводить до поверхневого натягу границь зерен, що розділяють області, збагачені на один чи інший компонент бінарного розчину. Важливим також є той факт, що відповідні просторові структури, які отримують мінімізацією вільної енергії, вперше втрачають стійкість при нульовому значенні хвильового числа. Таким чином, модель системи, яку буде розглянуто у роботі, задають функціоналом Гінзбурга–Ландау:

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} \left(f(x) + \frac{1}{2}(\nabla x)^2 \right) \quad f(x) = \frac{\varepsilon}{2}x^2 + \frac{x^4}{4}, \quad (6)$$

де $\varepsilon = \theta - 1$ – керуючий параметр, визначений через температуру T , відраховану від критичного середньопольового значення T_c , $\theta = T/T_c$.

3. Аналіз стійкості та відбору структур

Оскільки система, що розглядається, є стохастичною, то інформативними будуть не самі розв’язки системи рівнянь (5), а вимірювані характеристики, що зводяться до статистично усереднених величин: середнє значення випадкового поля (об’ємна доля певної компоненти) $\langle x(\mathbf{r}, t) \rangle$ та структурний фактор $S_{\mathbf{k}}(t)$. Для цього у даному розділі буде побудовано рівняння динаміки цих величин та проаналізовано відповідні розв’язки.

3.1. Рівняння еволюції середнього та структурного фактора

Рівняння динаміки середнього

Розглянемо спочатку поведінку першого статистичного моменту випадкового поля $\langle x \rangle$. Проводячи усереднення системи рівнянь (5) за флуктуаціями, приходимо до рівнянь для середніх:

$$\begin{aligned} \partial_t \langle x \rangle &= -\nabla \cdot \langle \mathbf{J}_D \rangle + D_e \Delta \langle x \rangle + \nabla \cdot \langle \zeta \nabla x \rangle, \\ \tau_D \partial_t \langle \mathbf{J}_D \rangle &= -\langle \mathbf{J}_D \rangle - \nabla M \left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} \right\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Корелятор зовнішнього шуму обчислюють за формулою Новікова [42]:

$$\langle \zeta \nabla x \rangle = D_e \bar{\sigma}^2 \int_{-\infty}^{\infty} C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla \left\langle \frac{\delta x(\mathbf{r}, t)}{\delta \zeta(\mathbf{r}', t)} \right\rangle d\mathbf{r}'. \quad (8)$$

Похідна за шумом виражається з формального розв’язку рівняння Ланжевена для поля x із системи (5):

$$\frac{\delta x(\mathbf{r}, t)}{\delta \zeta(\mathbf{r}', t)} = \nabla (\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla x(\mathbf{r}, t)). \quad (9)$$

Підставляючи (9) у (8), маємо [8, 41]:

$$\begin{aligned} \langle \zeta \nabla x \rangle &= D_e \sigma_e^2 [C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \nabla^3 \langle x \rangle + \\ &+ 2(\nabla C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \nabla^2 \langle x \rangle + (\nabla \langle x \rangle) \nabla^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}]. \end{aligned} \quad (10)$$

Слід зауважити, що $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ набирає максимального значення при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, що дає

$$\nabla C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = 0; \quad \nabla^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} < 0. \quad (11)$$

Тоді, вводячи позначення $\varpi(\nabla^2) = \varepsilon - \mathcal{L}^2 + 3x_0^2$ ($M = 1$), приходимо до системи рівнянь

$$\begin{cases} \partial_t \langle x \rangle = -\nabla \cdot \langle \mathbf{J}_D \rangle + D_e \Delta \langle x \rangle + \\ D_e \sigma_e^2 (\nabla^2 C(|\mathbf{r}|)|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} \Delta \langle x \rangle + D_e \sigma_e^2 C(\mathbf{0}) \nabla^4 \langle x \rangle), \\ \tau_D \partial_t \langle \mathbf{J}_D \rangle = -\langle \mathbf{J}_D \rangle - \nabla \varpi(\nabla^2) \langle x \rangle. \end{cases} \quad (12)$$

Подальше розв’язання можливе у фур’є-просторі. Для цього використаємо фур’є-компоненти $\langle x_{\mathbf{k}}(t) \rangle =$

$\int d\mathbf{r} \langle x(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, $\langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}}(t) \rangle = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ та перепишемо (12) у вигляді

$$\begin{cases} \frac{d\langle x_{\mathbf{k}} \rangle}{dt} = -i\mathbf{k} \langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} \rangle - D_e |\mathbf{k}|^2 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle - \\ D_e \sigma^2 \nabla^2 C(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} k^2 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle + D_e \sigma^2 C(\mathbf{0}) k^4 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle, \\ \tau_D \frac{d\langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} \rangle}{dt} = -\langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} \rangle - i\mathbf{k} \varpi(k^2) \langle x_{\mathbf{k}} \rangle. \end{cases} \quad (13)$$

Система звичайних диференціальних рівнянь (13) має аналітичний розв'язок.

Аналіз стійкості однорідного стану x_0 може бути проведено безпосередньо для усередненої величини $\langle x_{\mathbf{k}} \rangle$, дослідження якої проводиться у найпростіший спосіб. Для цього, проводячи додаткове диференціювання першого рівняння з системи (13), використовуючи рівняння еволюції фур'є-образу дифузійного потоку та виражаючи потік $\mathbf{J}_{D\mathbf{k}}$ з першого рівняння системи (13), приходимо до одного диференціального рівняння другого порядку за часом у вигляді

$$\tau_D \frac{d^2 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle}{dt^2} = - (1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)) \frac{d\langle x_{\mathbf{k}} \rangle}{dt} - k^2 (D_e \Xi(k^2) + \varpi(k^2)) \langle x_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (14)$$

де введено позначення $\Xi(k^2) \equiv 1 + \sigma^2 (\nabla^2 C(|r|)_{r=0} - C(0)k^2)$. Розв'язок одержаного рівняння шукаємо у вигляді $\langle x_{|\mathbf{k}|}(t) \rangle = \langle x_{|\mathbf{k}|}(0) \rangle \exp(\phi(k)t)$. Підставляючи його у рівняння другого порядку, приходимо до виразу для фази у вигляді $\phi(k) = \Re\phi(k) + i\Im\phi(k)$, де

$$\begin{aligned} \phi(k)_{\pm} &= -\frac{1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)}{2\tau_D} \pm \\ &\pm \frac{1}{2\tau_D} [(1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2))^2 - \\ &- 4\tau_D k^2 (D_e \Xi(k^2) + \varpi(k^2))]^{1/2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Проаналізуємо характерні особливості виразу (15). Очевидно, що нестійкі моди виникають при $\Re\phi(k)_+ > 0$. Відомо, що для досліджуваної моделі перша нестійкість виникає при значенні хвильового числа $k = 0$, при цьому максимальне значення для k , яке обмежує область нестійкості k_c , визначається умовою $\Re\phi(k)_+ > 0$, при $k > 0$. Крім того, величина $\Re\phi(k)_+$ може мати один пік, положення якого задає найбільш нестійку моду з хвильовим числом k_m . Величина k_m обчислюється з розв'язків рівняння на

максимум $\Re\phi(k)_+$ в інтервалі нестійкості. Із виразу (15) випливає, що уявна частина фази існує за умови $(1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2))^2 < 4\tau_D k^2 (D_e \Xi(k^2) + \varpi(k^2))$. Таким чином, у загальному вигляді еволюція усередненої величини $\langle x_{|\mathbf{k}|}(t) \rangle$ може протікати у вигляді затухаючих коливань з частотою $\Im\phi(k)$ та декрементом $(1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2))/2\tau_D > 0$. Межа області загасання величини $\langle x_{|\mathbf{k}|}(t) \rangle$ обмежується хвильовим числом

$$k_d^2 = \frac{1}{2\sigma^2 C(0)} \left(1 + \sigma^2 \nabla^2 C(|r|)_{r=0} + \sqrt{(1 + \sigma^2 \nabla^2 C(|r|)_{r=0})^2 + \frac{4\sigma^2 C(0)}{\tau_D D_e}} \right). \quad (16)$$

Межа існування осциляційної поведінки $\langle x_{|\mathbf{k}|}(t) \rangle$ визначається розв'язками $k_0 = k_0(\theta, D_e, \sigma^2, r_c)$ рівняння $(\tau_D D_e k^2 \Xi(k^2))^2 < 2\tau_D k^2 (D_e \Xi(k^2) + 2\varpi(k^2)) - 1$. (17)

Таким чином, фаза $\phi(k)$ дозволяє встановити особливості поведінки розв'язків $\langle x_{|\mathbf{k}|}(t) \rangle$.

Рівняння динаміки структурного фактора

Повна інформація стосовно поведінки системи знаходиться з дослідження кореляційних функцій або їхніх фур'є-образів, а саме структурного фактора $S_{\mathbf{k}}(t)$. Встановимо вигляд динамічного рівняння для $S_{\mathbf{k}}(t)$. Для цього використаємо вихідну систему рівнянь (5), переписану у фур'є-просторі:

$$\begin{aligned} \frac{dx_{\mathbf{k}}}{dt} &= -i\mathbf{k} \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} - k^2 D_e x_{\mathbf{k}} - k^2 \zeta_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}}, \\ \tau_D \frac{d\mathbf{J}_{D\mathbf{k}}}{dt} &= -\mathbf{J}_{D\mathbf{k}} - i\mathbf{k} \varpi(k^2) x_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (18)$$

Тоді, рівняння на структурний фактор $S_{\mathbf{k}} = \langle x_{\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle$ набуває вигляду

$$\begin{aligned} \frac{dS_{\mathbf{k}}}{dt} &= -i\mathbf{k} \langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle + i\mathbf{k} \langle \mathbf{J}_{D-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle - \\ &- 2k^2 D_e S_{\mathbf{k}} - k^2 (\langle \zeta_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle + \langle \zeta_{-\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle). \end{aligned} \quad (19)$$

Відповідні корелятори потоку та поля обчислюються з рівняння

$$\tau_D \frac{d\langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle}{dt} = -\langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle -$$

$$-i\mathbf{k}\varpi(k^2)S_{\mathbf{k}} + \langle \xi_{\mathbf{k}}x_{-\mathbf{k}} \rangle. \quad (20)$$

Далі, беручи похідну за часом від рівняння (19) та виражаючи корелятор потоку з (19) під час застосування (20), отримуємо рівняння другого порядку для структурного фактора у вигляді

$$\begin{aligned} \tau_D \frac{d^2 S_{\mathbf{k}}}{dt^2} = & -(1 + 2k^2 \tau_D D_e) \frac{dS_{\mathbf{k}}}{dt} - 2k^2 (D_e + \varpi(k^2)) S_{\mathbf{k}} - \\ & - k^2 (\langle \zeta_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle + \langle \zeta_{-\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle) - \\ & - i\mathbf{k} (\langle \xi_{\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle + \langle \xi_{-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle) - \\ & - k^2 \tau_D \frac{d}{dt} (\langle \zeta_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle + \langle \zeta_{-\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle). \end{aligned} \quad (21)$$

Розкриваючи корелятори за теоремою Новікова, де

$$\begin{aligned} \langle \zeta_{-\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle &= D_e \sigma^2 (\nabla^2 C(|r|)_{r=0} - C(0)k^2) S_{\mathbf{k}}, \\ \langle \zeta_{-\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle &\equiv \langle \zeta_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle, \\ \langle \xi_{-\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} \rangle &\equiv \langle \xi_{\mathbf{k}} x_{-\mathbf{k}} \rangle = i\mathbf{k}\theta, \end{aligned} \quad (22)$$

приходимо до шуканого динамічного рівняння

$$\begin{aligned} \tau_D \frac{d^2 S_{\mathbf{k}}}{dt^2} = & -(1 + 2k^2 \tau_D D_e \Xi(k^2)) \frac{dS_{\mathbf{k}}}{dt} - \\ & - 2k^2 (D_e \Xi(k^2) + \varpi(k^2)) S_{\mathbf{k}} + 2\theta k^2 - \\ & - \frac{2k^2 D_e \sigma^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k}' C(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) S_{\mathbf{k}'}(t) - \\ & - \frac{2k^2 \tau_D D_e \sigma^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k}' C(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \frac{dS_{\mathbf{k}'}(t)}{dt}. \end{aligned} \quad (23)$$

Як видно зі структури рівняння (23), воно припускає розв'язок у вигляді $S - S_0 \propto e^{\varphi(k)t}$, де фаза

$$\begin{aligned} \varphi(k)_{\pm} &= -\frac{1 + 2\tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)}{2\tau_D} \pm \\ & \pm \frac{1}{2\tau_D} [(1 + 2\tau_D D_e k^2 \Xi(k^2))^2 - \\ & - 4\tau_D k^2 (2D_e \Xi(k^2) + \varpi(k^2))]^{1/2} \end{aligned} \quad (24)$$

також за певних умов може мати дійсну та уявну частини, тобто $\varphi = \Re\varphi(k) + \Im\varphi(k)$. У теорії спінодального розпаду дійсна частина $\Re\varphi(k)_+$ відома як коефіцієнт посилення $R(k) = -\Re\varphi(k)_+$, так що $S - S_0 \propto e^{-R(k)t}$, а уявна частина $\Im\varphi(k)$, що виникає лише при $\tau_D \neq 0$, відповідає за процес відбору структур.

3.2. Вплив шуму на процес відбору структур

Стійкість стану $x_0 = 0$

Спочатку дослідимо стійкість неупорядкованого стану $x_0 = 0$, що відповідає максимуму густини вільної енергії $f(x)$. Для цього розглянемо дійсну та уявну частини фази $\varphi(k)$ залежно від зовнішніх умов, що подані на рис. 1. У найпростішому випадку відсутності зовнішнього потоку (суцільна лінія на рис. 1,а) при двоїмній формі вихідної густини вільної енергії ($\theta < 1$) маємо стандартну картину нестійкості, коли одна з гілок дійсної частини фази ($\Re\varphi(k)_+$) стає позитивною в інтервалі $0 \leq k \leq k_c$, де k_c обмежує область нестійких мод. Найбільш нестійка мода відповідає значенню $k = k_0$ дві гілки дійсної частини фази вироджуються, так що дійсна частина має єдине значення, не залежне від хвильового числа, і визначає декремент затухання розв'язків рівняння еволюції структурного фактора. При $k > k_0$ виникає уявна частина фази $\Im\varphi(k)$ – проявляється хвильова поведінка структурного фактора (рис. 1,б). При включенні детермінованого зовнішнього впливу з $D_e \neq 0$ при $\sigma^2 = 0$ (штрихова крива) область нестійкості зужується (зменшується значення k_c). При цьому також спостерігається зменшення значення хвильового числа k_0 , вище якого реалізується осциляційний режим. Важливим при цьому є втрата нестійкості, що індукується додатковим перемішуванням. Як видно із виразу для $\varphi(k)$, коефіцієнт D_e приводить до зростання ефективної температури системи на величину D_e [27]. Відзначимо, що зовнішні флуктуації ($\sigma^2 \neq 0$ при $D_e \neq 0$) (пунктирна крива) приводять до виникнення нестійкостей, розширення простору нестійких мод та підвищення значення k_0 .

Слід зазначити, що за наявності зовнішнього потоку уявна частина фази поводить себе аналогічно до випадку відсутності потоку (див. криві на рис. 1,б). Однак дійсна частина фази змінює свій характер при виникненні нестійких мод: коли реалізують лише стійкі моди (штрихова крива на рис. 1,а), маємо спадаючу криву дійсної частини фази при $k > k_0$, тоді як при виникненні нестійкостей на малих k величина $\Re\varphi(k)$ зростає. При цьому значення $\Re\varphi(k) = 0$ реалізується при $k = k_d$. Тому в аналітичному розгляді ми обмежуємося вибором значень параметрів системи, задовольняючи умову $k_d \leq \pi$.

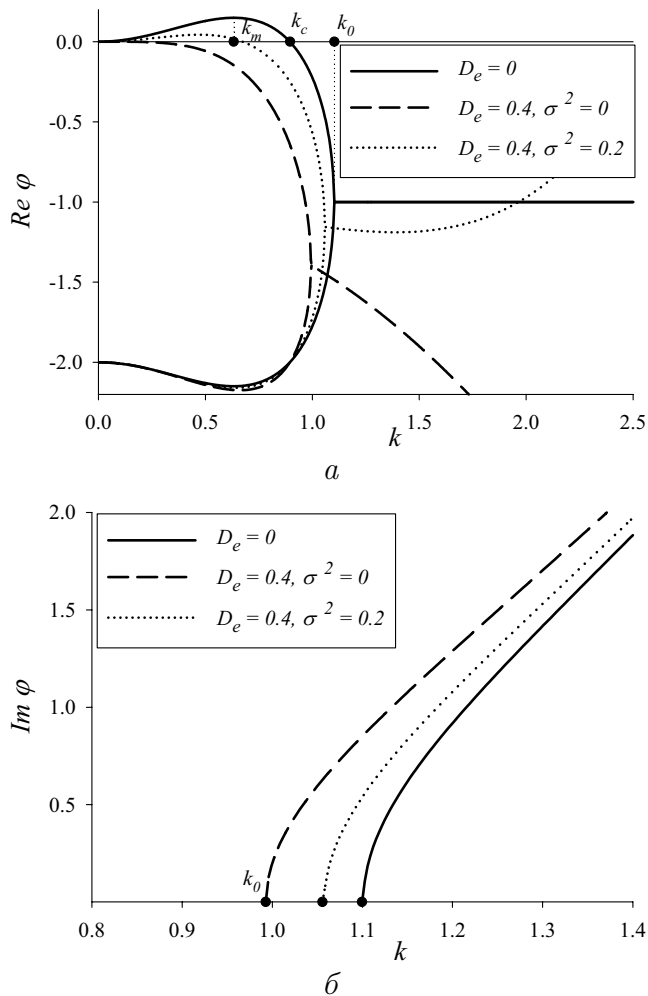


Рис. 1. Дійсна (а) та уявна (б) частини фази $\varphi(k)$ при зміні параметрів зовнішнього потоку D_e та σ^2 в околі стану $x_0 = 0$. Криві одержано при: $\theta = 0, 4$, $\tau_D = 0, 5$, $r_c = 0, 5$

Фазова та групова швидкості

Проаналізуємо характер поведінки фазової та групової швидкостей у даній моделі. Оскільки за визначенням фазова швидкість задається частотою $\omega(k)$ (закон дисперсії), то у подальшому перейдемо до зв'язку $\varphi(k) = i\omega(k)$. Тоді отримуємо визначення для дійсної та уявної компонент фазової швидкості у вигляді $\Re v_p = \Re \omega(k) / \Re k$ або $\Re v_p = \Im \varphi(k) / \Im k$ та $\Im v_p = \Im \omega(k) / \Im k$ або $\Im v_p = \Re \varphi(k) / \Re k$. Загалом швидкість v_p враховує рух однієї (виділеної) гармоніки. Дійсна частина фазової швидкості описує поширення збурень у прямому та зворотному просторових напрямках, уявна частина v_p визначає швидкість посилення даної гармоніки. Як впливає із проведених розрахунків у випадку $D_e = 0$, у височастотній області $\omega \rightarrow \infty$

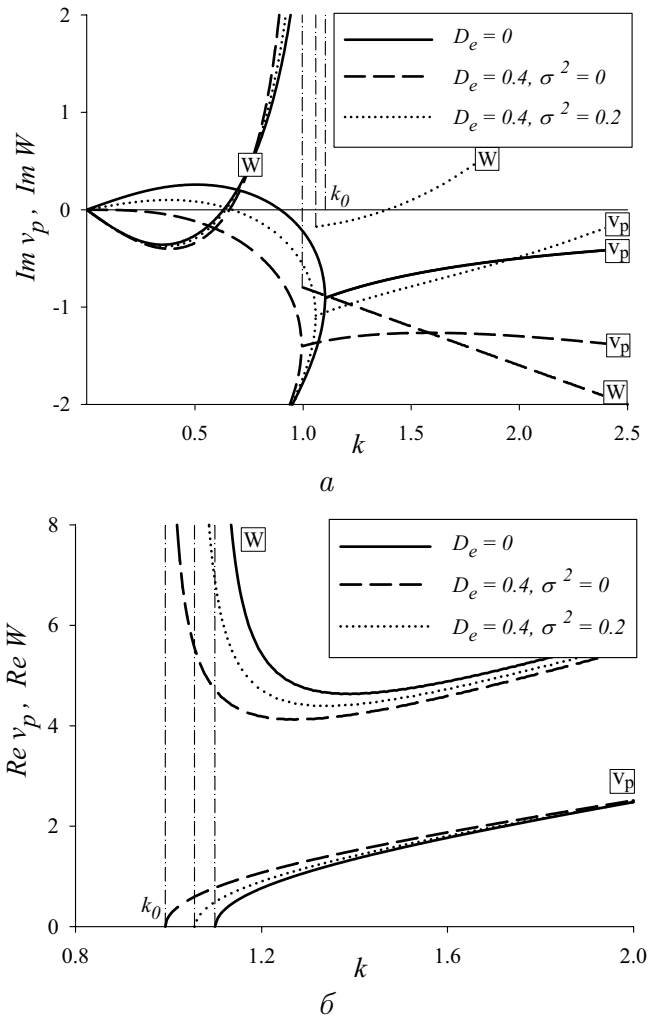


Рис. 2. Дійсна (а) та уявна (б) частини групової $W(k)$ та фазової $v_p(k)$ швидкостей при зміні параметрів зовнішнього потоку D_e та σ^2 в околі стану $x_0 = 0$. Криві одержано при: $\theta = 0, 4$, $\tau_D = 0, 5$, $r_c = 0, 5$

дійсна частина фазової швидкості зводиться до швидкості поширення, тобто $\Re v_p = v_D$. При $D_e = 0$ та $D_e \neq 0$ дійсна частина v_p існує лише при $k > k_0$, тоді як уявна – при всіх дозволених k (див. рис. 2, а, б). При $k < k_0$ гармоніки не рухаються при можливій зміні їх амплітуд, а при $k > k_0$ маємо рух гармонік зі зміною амплітуд.

Досліджуючи групову швидкість $W(k) = \partial \omega(k) / \partial k$, що задає швидкість руху концентраційного пакета, слід очікувати відмінностей у поведінці $W(k)$ при $D_e = 0$ та $D_e \neq 0$, оскільки маємо зміну характеру поведінки фази при $k > k_0$ (див. рис. 1, а). У випадку $D_e = 0$ уявна частина групової швидкості існує лише при $k < k_0$, тоді як

дійсна частина $W(k)$ реалізується при $k > k_0$. Натомість при $D_e \neq 0$ дійсна частина групової швидкості набуває ненульових позитивних значень при $k > k_0$ (рис. 2, б), а уявна існує при всіх k , де при $k = k_0$ маємо характерну розривну особливість другого роду. При цьому у випадку $D_e \neq 0, \sigma^2 = 0$ при $k > k_0$ дійсна частина фази $\varphi(k)$ спадає, тому $\Im W(k)$ також спадає. Зовнішні флуктуації при $D_e \neq 0$ приводять до ускладненої поведінки фази $\Re\varphi(k)$ в інтервалі $k > k_0$ (див. рис. 1, а). Це приводить до зростаючого характеру поведінки $\Im W(k)$ при $k > k_0$. Зміна знака $\Im W(k)$ свідчить про те, що на залежності $\Re\varphi(k)$ реалізується мінімум: в області $k > k_0$ дійсна частина фази $\varphi(k)$ спочатку спадає внаслідок детермінованої дії зовнішнього потоку, а після досягання мінімуму функція $\Re\varphi(k)$ починає зростати завдяки зовнішнім флуктуаціям.

Нормований фактор посилення розпаду

На основі виразу для фази $\varphi(k)$ (або закону дисперсії $\omega(k) = i\varphi(k)$) можна встановити характер поведінки функції $\Re\omega(k)/k^2$, відомої в англійській літературі як нормований фактор посилення розпаду (amplification rate). Ця функція характеризує необернене зростання довжини хвилі декомпозиції. Відомо, що в теорії Кана така залежність є суттєво лінійною. Однак, при спінодальному розпаді у стеклах, наприклад, Na_2OSiO_2 , спостерігається відхилення від лінійного закону Кана [37, 38, 40]. Для пояснення таких нелінійних ефектів було запропоновано провести узагальнення моделі Кана–Хіллєрда–Кука введенням у розгляд додаткової релаксаційної змінної з незбереженою динамікою [43–45], роль якої може відігравати дифузійний потік [39]. У межах використання гіперболічної моделі таке відхилення пояснюється наявністю ефектів пам'яті, у межах гіпотези локальної нерівноважності: у разі наявності релаксації дифузійного потоку, відхилення від лінійного закону контролюється часом пам'яті τ_D [38, 40]. У даному параграфі встановимо, яким чином зовнішній потік може впливати на таке відхилення.

Для отримання нормованого фактора посилення необхідно провести порівняння дисперсійних співвідношень для параболічної моделі Кана–Хіллєрда–Кука та запропонованої моделі. У такому випадку у ролі нормуючої будемо використовувати величину $\omega_{\text{СНС}}(k_m)$, одержану з параболічної моделі при $D_e = 0$, де $k_m = k_c/\sqrt{2}$. Тоді нормований фактор посилення набуває вигляду $\omega^*(q)/q^2 = \omega(q)/\omega_{\text{СНС}}(k_m)/q^2$,

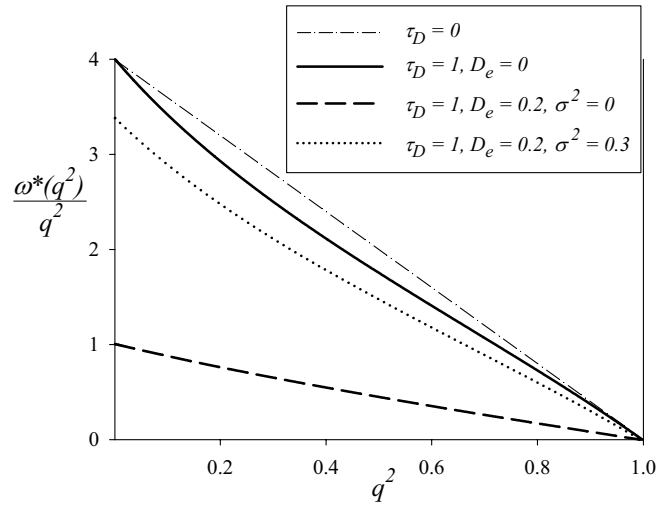
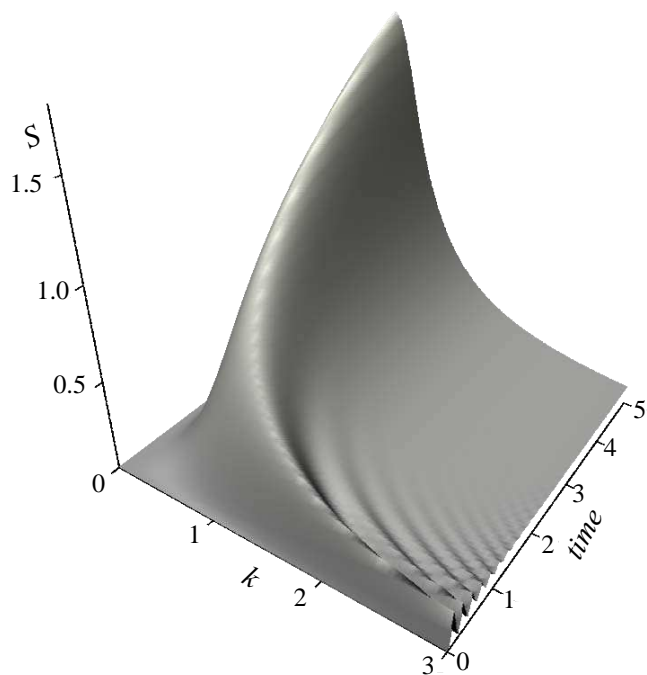


Рис. 3. Нормований фактор посилення на ранніх стадіях при $\tau_D = 1, 0, r_c = 0, 5, \theta = 0, 2$

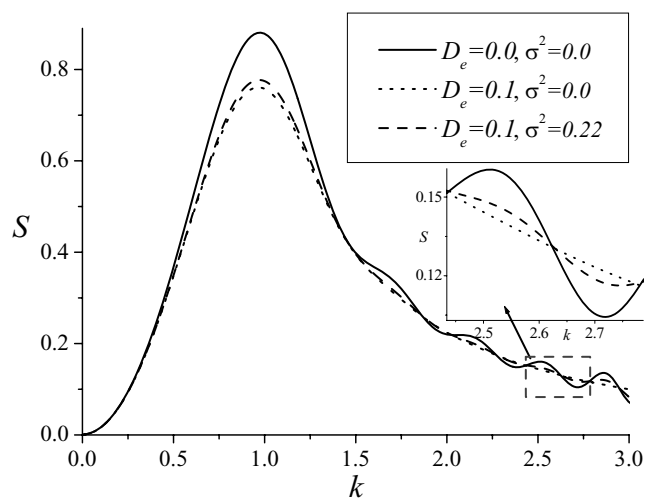
де $q = k/k_c$, дисперсійне співвідношення $\omega(q)$ обчислюється із зв'язку $\omega(q) = \Re\varphi(q)_+$. Таким чином, для нашої моделі маємо $\omega^*(q)/q^2 = 4/q^2 \Re\varphi_+(q)/\varepsilon^2$. Залежність нормованого фактора посилення на ранніх стадіях наведено на рис. 3. У випадку $D_e = 0$ для параболічної та гіперболічної моделей маємо такі граничні значення: $\omega^*(q)/q^2 = 0$ при $q = 1$ та $\omega^*(q)/q^2 = 4$ при $q = 0$. На границі $\tau_D \rightarrow 0$ (модель Кана–Хіллєрда–Кука) приходимо до лінійного закону $\omega^*(q)/q^2$ від q^2 (тонка штрих-пунктирна лінія). При $\tau_D = 1, 0$ прослідковуються відхилення від лінійного закону (суцільна лінія). У випадку $\tau_D = 1, 0, D_e \neq 0, \sigma^2 = 0$ атермічне перемішування приводить до лінеаризації залежності фактора посилення внаслідок перенормування ефективної температури (штрихова лінія). Однак за наявності стохастичного зовнішнього впливу, який приводить до ефектів дестабілізації, нелінійність на залежності фактора посилення відновлюється (пунктирна лінія). Таким чином, відхилення від лінійного закону Кана можуть бути пригнічені детермінованою компонентою атермічного перемішування, тоді як його стохастична складова відновлює нерівноважність.

Еволюція структурного фактора в околі $x_0 = 0$

Еволюцію структурного фактора в околі стану $x_0 = 0$ наведено на рис. 4. Як бачимо, осциляційна поведінка $S(k, t)$ спостерігається як з часом, так і при зміні хвильового числа. У той час як осциляційна поведінка у часі пояснюється виглядом рівняння для сере-



a



б

Рис. 4. Динаміка структурного фактора на ранніх стадіях при $\tau_D = 1, 0$, $r_c = 1, 0$, $\theta = 0, 9$. Параметри системи на графіку $S(k, t)$: $D_e = 0, 1$, $\sigma^2 = 0, 22$ (a); залежність $S(k)$ побудовано при $t = 2$ (б)

днього та структурного фактора, важливим при цьому є наявність коливань у просторі значень хвильового числа. Відомо, що у звичайній параболічній моделі Кана-Хіллєрда-Кука ($\tau_D = 0$) в системі на ранніх стадіях реалізуються нестійкі моди, що у подальшому дають поштовх розвитку концентраційних хвиль,

так що структурний фактор має лише один пік залежно від k , який відповідає найбільш нестійкій моді k_m . Однак у гіперболічній моделі ($\tau_D \neq 0$), що враховує релаксацію дифузійного потоку крім осциляційної поведінки з часом та головного піка на залежності структурного фактора від k можлива присутність супутніх піків, які відповідають за реалізацію структур із іншими значеннями хвильового числа. Оскільки амплітуда таких осциляцій за k спадає з часом, то це свідчить про відбір структур протягом еволюції фізичної системи, коли реалізуються структури з єдиним значенням $k = k_m$. Характерно, що в розглянутому випадку такі просторово-часові загасаючі осциляції спостерігаються при дослідженні системи як в термінах середнього значення стохастичного поля, так і структурного фактора. Загальна часова поведінка відповідного структурного фактора є стандартною: на ранніх стадіях основний пік структурного фактора зміщується в область малих k , тобто відбувається укрупнення зерен, його ширина звужується – міжфазні границі стають більш чіткими.

Із залежностей структурного фактора від хвильового числа (вставки праворуч на рис. 4, б) видно, що на характер відбору структур принципово впливає зовнішня дія. При цьому характерно, що регулярна компонента атермічного потоку ($D_e \neq 0$, $\sigma^2 = 0$) пригнічує процес відбору структур, тоді як стохастична складова $\sigma^2 \neq 0$ приводить до посилення значень структурного фактора на супутніх піках, сприяючи процесам відбору. Слід зазначити, що конкуренція регулярної та стохастичної складових зовнішнього (атермічного) потоку приводить до того, що при великих D_e основний пік $S(k)$ зменшується, а його ширина збільшується. Це свідчить про те, що міжфазні границі стають більш дифузними, що є очевидним, оскільки регулярна компонента зовнішнього потоку приводить до додаткової дифузії, наслідком якої є розмивання міжфазних границь. Однак стохастична складова потоку \mathbf{J}_e діє протилежно детерміністичній. Слід також зазначити, що з пониженням θ головний пік структурного фактора зміщується в область великих k , тобто відбувається подрібнення зерен при низьких температурах.

Стійкість стану $x_0 = \sqrt{1-\theta}$

Проаналізуємо стійкість розв'язків рівняння еволюції структурного фактора в околі стану, що відповідає мінімуму густини вільної енергії $f(x)$. Як впливає

навіть з найпростіших фізичних уявлень про такий процес, фізична система потрапляє в мінімум вільної енергії, де її стан має бути стійким. Тому дійсна частина фази в околі $x_0 = \sqrt{1-\theta}$ є від'ємною. Чисельні розрахунки також показують результат $\Re\phi(k)_\pm < 0$ при всіх k в допустимій області параметрів системи.

Натомість уявна частина фази не зникає і існує при $k > k_0$. Характер залежності $\Im\phi(k)$ топологічно аналогічний характеру кривих на рис. 1,б. При цьому зростання інтенсивності зовнішнього шуму приводить до збільшення k_0 зі зменшенням частоти осциляцій за k .

Структурний фактор в околі стану $x_0 = \sqrt{1-\theta}$ наведено на рис. 5, з якого видно, що на відповідних залежностях прослідковується осциляційна поведінка. Порівнюючи залежності $S(k, t)$ в околі розглянутих двох станів, можна бачити, що положення головного піка зміщується в область $k \rightarrow 0$, а його величина зростає. Аналогічно попередньому дослідженню (в околі максимуму вільної енергії) в околі мінімуму $f(x)$ в системі відбувається відбір структур. Зростання детермінованого внеску у зовнішній потік приводить до зменшення висоти основного піка структурного фактора та послаблення амплітуди його осциляцій. З іншого боку, стохастична складова зовнішнього потоку приводить до посилення амплітуд осциляцій залежності $S(k)$ та зростання висоти головного піка. Таким чином, завдяки дії зовнішнього флуктуаційного джерела, просторові структури стають явно вираженими з чіткими міжфазними границями. Зі збільшенням часу t супутні піки структурного фактора зменшуються, а положення основного піка прямує до нуля.

4. Моделювання

Аналітичні розрахунки щодо осциляційної поведінки першого статистичного моменту та структурного фактора можуть бути підтверджені незалежним чисельним моделюванням системи на двовимірній ґратці $N \times N$ з періодичними граничними умовами. Відповідна система диференціальних рівнянь у дискретному просторі з лінійним розміром $L = \ell N$ має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= -(\nabla_R)_{ij} J_j + D_e \Delta_{ij} x_j + (\nabla_R)_{ik} \zeta_k (\nabla_L)_{kl} x_l, \\ \tau_D \frac{dJ_i}{dt} &= -J_i - M(\nabla_L)_{ij} \frac{\partial F}{\partial x_j} + \xi_i, \\ \tau_\zeta \frac{d\zeta_i}{dt} &= -(\delta_{ij} - r_c^2 \Delta_{ij}) \zeta_j + \tilde{\xi}_i, \end{aligned} \quad (25)$$

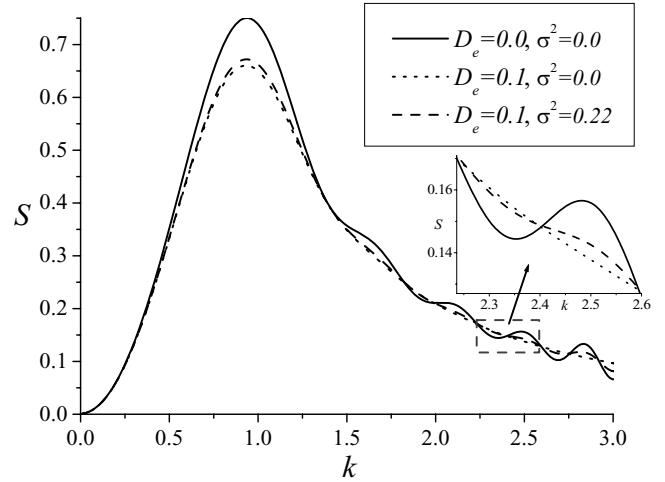


Рис. 5. Структурний фактор в околі стану $x_0 = \sqrt{1-\theta}$ при $\tau_D = 1, 0$, $r_c = 0, 65$, $\theta = 0, 9$

де ℓ – розмір елементарної комірки, а ліво- та правосторонні градієнтні оператори мають вигляд

$$(\nabla_L)_{ij} = \frac{1}{\ell} (\delta_{i,j} - \delta_{i-1,j}),$$

$$(\nabla_R)_{ij} = \frac{1}{\ell} (\delta_{i+1,j} - \delta_{i,j}),$$

$$(\nabla_L)_{ij} = -(\nabla_R)_{ji},$$

$$(\nabla_L)_{ij} (\nabla_R)_{jl} \equiv \Delta_{il} = \frac{1}{\ell^2} (\delta_{i,l+1} - 2\delta_{i,l} + \delta_{i,l-1}), \quad (26)$$

δ_{ij} – дельта-символ Кронекера. Для моделювання випадку квазібілого зовнішнього шуму приймали $\tau_\zeta \ll 1$; $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t-t')$. У такому разі приходимо до граничного випадку стохастичного процесу з властивостями (3) та просторовою кореляційною функцією (4).

Моделювання проводили з кроком інтегрування $\delta = 10^{-3}$ при $\ell = 1, 0$ на ґратці розміром 128×128 . Типову картину еволюції стохастичної системи при початкових умовах $\langle x(\mathbf{r}, t=0) \rangle = 0$, $\langle (\delta x)^2 \rangle = 0, 3$ подано на рис. 6. Як видно з рисунка, з часом система розпадається на дві еквівалентні за густиною частини за механізмом спінодального розпаду.

Для підтвердження осциляційної поведінки першого статистичного моменту та структурного фактора з часом нами було обчислено еволюцію усереднених величин. Оскільки розглянута система відноситься до класу систем зі збереженою динамікою ($\int d\mathbf{r} x(\mathbf{r}, t) =$

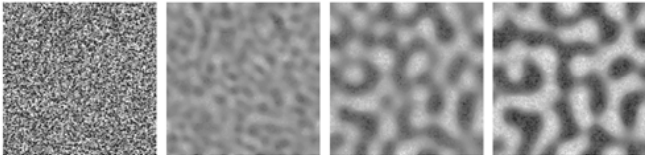


Рис. 6. Типова картина еволюції системи при $\theta = 0,4$, $D_e = 0,5$, $\sigma^2 = 1,0$, $\tau_D = 0,5$, $r_c = 1,0$. Часові зрізи відповідають моментам $t = 0, 50, 500, 1000$

const, де в нашому випадку const = 0), то вимірюваними в чисельному експерименті були вибрані середні, що відповідають окремо позитивним та негативним значенням поля x , тобто $\langle x \rangle_+ = \langle N^{-2} \sum_i x_i^> \rangle$, де $x_i^>$ відповідає i -му вузлу ґратки з $x_i > 0$, та $\langle x \rangle_- = \langle N^{-2} \sum_i x_i^< \rangle$, де $x_i^<$ відповідає $x_i < 0$, $\langle \dots \rangle$ означає усереднення за реалізаціями. Очевидно, що протягом еволюції середні $\langle x \rangle_+$, $\langle x \rangle_-$ мають зростати, забезпечуючи умову збереження $\langle x \rangle \equiv \langle x \rangle_+ + \langle x \rangle_- = 0$. Якщо в системі виникають осциляції першого моменту при відхиленні від певного стаціонарного значення, то вони мають бути зображені на залежностях $\langle x(t) \rangle_{\pm}$. Відомо, що в системах зі збереженою динамікою параметром порядку виступає другий статистичний момент $J = \langle N^{-2} \sum_i x_i^2 \rangle$, зростання якого свідчить про процес упорядкування. Оскільки за визначенням $J(t) = \sum_k S(k, t)$, де $S(k, t)$ – сферично усереднений структурний фактор, то $J(t)$ дає площу під функцією $S(k, t)$ в момент часу t . Таким чином, осциляції параметра порядку $J(t)$ свідчать про осциляції структурного фактора за часом. Для підтвердження процесу відбору структур нами було обчислено сферично усереднений структурний фактор $S(k, t)$ за формулою $S(k, t) = (N_k)^{-1} \sum_{k \leq \mathbf{k} \leq k+\Delta k} S_{\mathbf{k}}(t)$.

При чисельному моделюванні встановлено, що компоненти $\langle x(t) \rangle_{\pm}$ повного середнього дійсно зростають до свого стаціонарного значення та мають осциляційну поведінку (див. рис. 7,а). При цьому коливання $\langle x \rangle_+$ та $\langle x \rangle_-$ відбуваються у протифазі, що приводить до виконання закону збереження. Зображена на рис. 7,а зростаюча часова залежність параметра порядку $J(t)$ свідчить про проходження упорядкування в системі, а відповідні осциляції на ній є віддзеркаленням відповідної поведінки структурного фактора у часі. Залежності структурного фактора від хвильового числа наведено на рис. 7,б.

З нього видно, що у випадку відсутності додаткового атермічного перемішування атомів ($D_e = 0$), яке викликане зовнішнім впливом, залежність $S(k)$ характеризується чітко вираженим основним піком, який відповідає найбільш нестійкій моді ($k = k_m$), та коли-

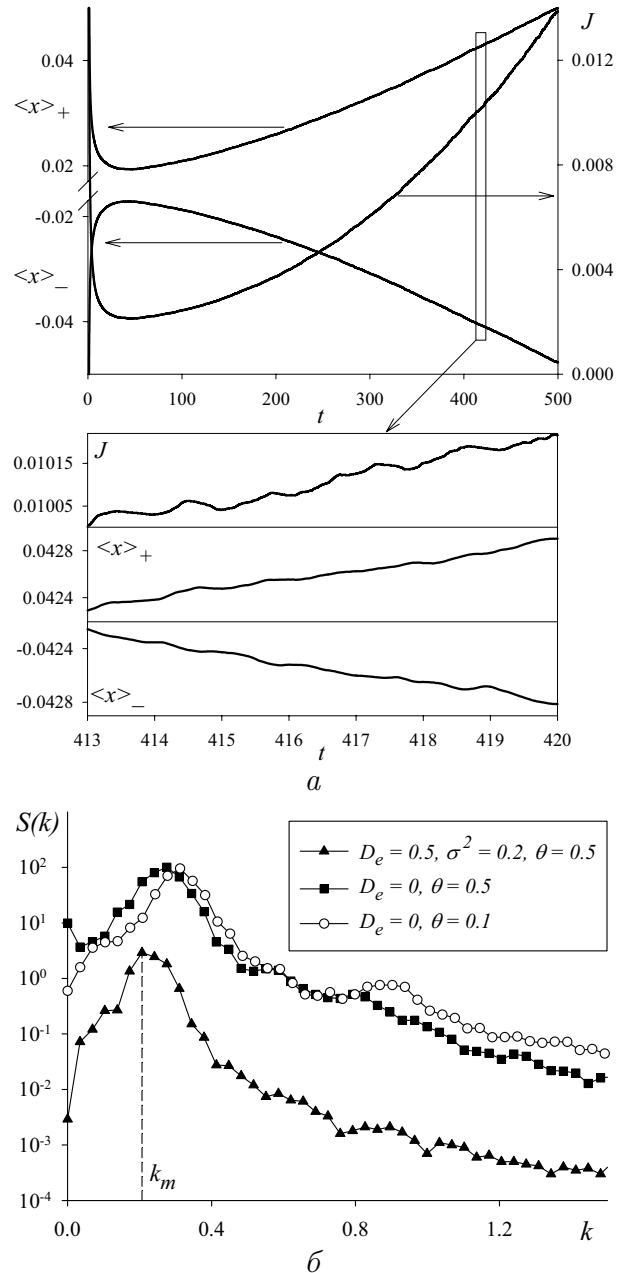


Рис. 7. Еволюція середніх значень поля $\langle x \rangle_+$, $\langle x \rangle_-$ та другого статистичного моменту (параметра порядку) $J = \langle x^2 \rangle$ при $\tau_D = 0,5$, $r_c = 1,0$, $\theta = 0,5$, $D_e = 0,5$, $\sigma^2 = 1,0$ (а) та залежності структурного фактора від хвильового числа при $\tau_D = 1,0$, $r_c = 1,0$ (б)

вальним характером спадання при $k > k_m$, що свідчить про те, що в системі відбувається процес відбору структур. У випадку існування зовнішнього потоку ($D_e \neq 0$) стохастичного характеру ($\sigma^2 \neq 0$) основний пік структурного фактора зменшується, що гово-

рять про дифузність міжфазних границь, а додаткові коливання структурного відбуваються з меншою амплітудою – процеси відбору структур пригнічуються. Характерно, що з пониженням температури відбувається подрібнення зерен (зміщення положення основного піка $S(k)$ в область великих k). Отримані при комп'ютерному моделюванні залежності структурного фактора якісно підтверджують отримані залежності в аналізі на стійкість.

Для встановлення характеру зміни критичних значень основних параметрів системи при зовнішньому впливові у межах загально відомих положень розглядають поведінку вимірюваних статистичних величин у стаціонарному випадку $t \rightarrow \infty$. При цьому інформативними будуть величини $m_+ \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \langle x(t) \rangle_+$ та $\eta \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \langle J \rangle$, додатково усереднені за великим часовим інтервалом (позначка $\overline{\quad}$) при $t \rightarrow \infty$, коли релаксаційні процеси вже закінчилися. Оскільки η є параметром порядку, усередненим за часом (у припущенні виконання ергодичної гіпотези), то доцільно визначити узагальнену сприйнятливість χ стандартним способом $\chi = N^{-2}(\langle J^2 \rangle - \langle J \rangle^2) / \langle J \rangle^2$. При цьому в неупорядкованій фазі маємо $\eta = 0$, а в упорядкованій $\eta \neq 0$. В околі точки переходу (наприклад, при $\theta \simeq \tilde{\theta}_c$) зростання флуктуацій має приводити до зростання узагальненої сприйнятливості $\chi \propto \langle \delta J^2 \rangle$, де $\tilde{\theta}_c$ – критична температура переходу індукованого дією зовнішнього шуму. На рис. 8,а подано діаграму температурної залежності середніх m_- , m_+ у границі $t \rightarrow \infty$. Із неї видно, що при фіксованому значенні інтенсивності шуму σ^2 зростання детермінованої частини потоку приводить до пониження критичного значення температури $\tilde{\theta}_c$. На вставках на рис. 8,а проілюстровано типові картини упорядкування при різних значеннях температури. На рис. 8,б наведено температурні залежності величини m_+ , параметра порядку η та сприйнятливості χ при $D_e = 0,5$ та $\sigma^2 = 0,1$. Із них випливає, що зі зростанням температури до критичного значення $\tilde{\theta}_c$ величина m_+ та параметр порядку η спадають до нуля, де при $\theta \simeq \tilde{\theta}_c$ узагальнена сприйнятливість суттєво зростає.

Крім того, видно, що при фіксованому D_e зі зростанням інтенсивності шуму σ^2 значення $\tilde{\theta}_c$ наближається до свого середньопольового $\theta_c = 1$, що визначає зміну модальності густини вільної енергії $f(x)$. Фазову діаграму, що ілюструє характер впливу двох складових зовнішнього потоку на картину упорядкування, наведено на рис. 8,в. З неї видно, що зростання D_e приводить до пониження критичного значення $\tilde{\theta}_c$, яке лежить на відповідних лініях, а зростання σ^2 при-

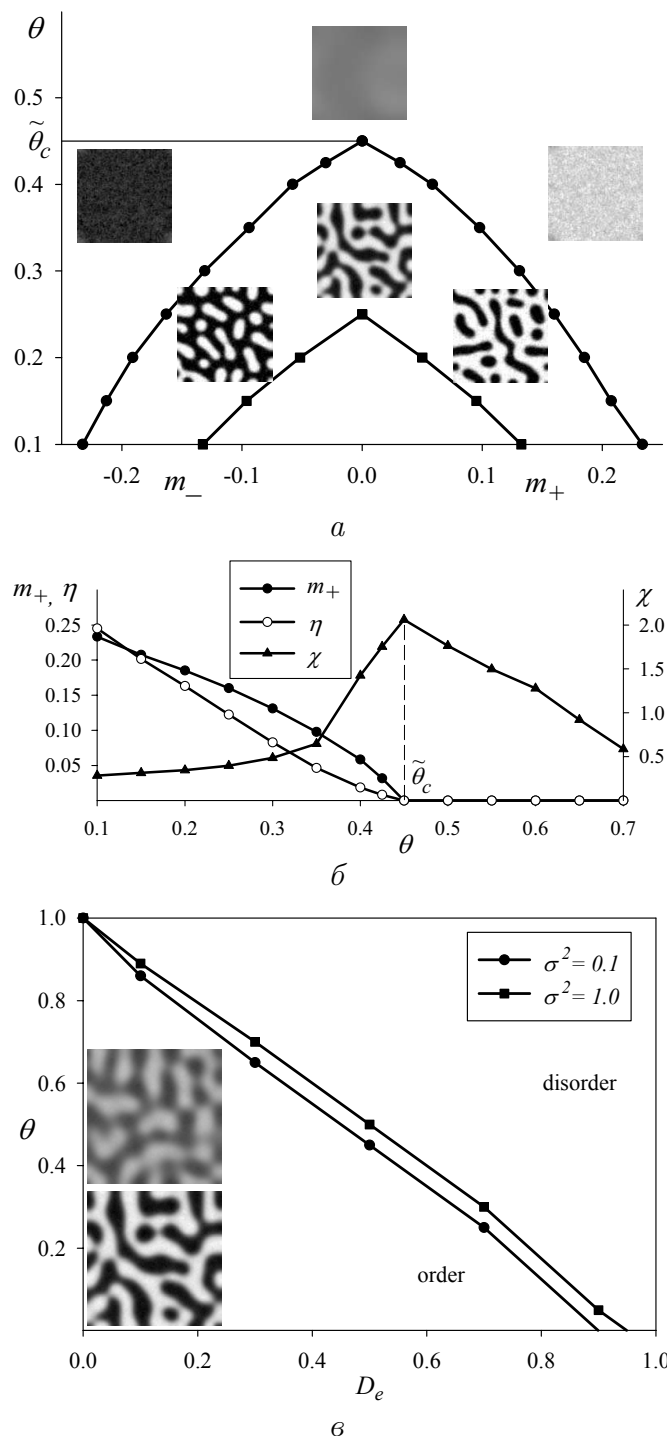


Рис. 8. Типові залежності середнього m_- , m_+ від температури θ при $D_e = 0,5, 0,7$ (кружки та квадрати) (а), величини m_+ , параметра порядку η та узагальненої сприйнятливості χ при $D_e = 0,5$ $\sigma^2 = 0,1$ (б), та діаграма упорядкування (в) (вставки наведено при $D_e = 0,5$ $\sigma^2 = 0,1$ та $\theta = 0,3, 0,4$); решта параметрів: $\tau_D = 0,5$, $r_c = 1,0$

водить до нестійкості неупорядкованого стану на підвищених температурах (збільшення $\tilde{\theta}_c$). Цей висновок добре узгоджується з аналізом системи на ранніх стадіях. Також слід зазначити, що в області, близькій до критичної, флуктуації поля x стають великими, а тому структури є розмитими, тоді як при відхиленні від $\tilde{\theta}_c$ просторові структури стають чітко вираженими (див. вставки на фазовій діаграмі при $D_e = 0, 5$, $\theta = 0, 3, 0, 4$).

5. Висновки

У межах гіперболічної моделі спінодального розпаду проведено дослідження процесів відбору структур на початкових стадіях розпаду бінарної системи за наявності зовнішнього потоку, наділеного стохастичними властивостями. У межах лінійного аналізу на стійкість показано, що у моделі з гіперболічним транспортом процес відбору структур може бути контрольований регулярною та стохастичною компонентами зовнішнього потоку. Встановлено конкуруючий вплив таких компонент на процеси відбору структур, де зовнішні флуктуації підтримують селективні процеси. Показано, що завдяки зовнішньому шумові в системі зберігається нелінійність залежності фактора посилення від квадрата хвильового числа при зростанні інтенсивності атермічного перемішування. Аналітичні результати, отримані при аналізі на стійкість станів системи на ранніх стадіях, узгоджуються з результатами незалежного чисельного моделювання. Досліджуючи систему на пізніх стадіях, отримано динамічні фазові діаграми, які доводять конкуренцію регулярної та стохастичної складових зовнішнього потоку. Чисельні розрахунки узгоджуються з відомими аналітичними даними про підвищення ефективної температури бінарної системи за рахунок впливу атермічного потоку перемішування.

1. A. Onuki, *Phase Transition Dynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
2. В.Н. Воеводин, И.М. Неклюдов, *Эволюция структурнофазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов* (Наукова думка, Киев, 2006).
3. W.J. MoberlyChan, D.P. Adams, M.J. Aziz, T. Schenkel, and G. Hobler, *MRS Bulletin*, **32**, 424 (2007).
4. G. Stegemann, A.G. Balanov, and E. Schöll, *Phys. Rev. E* **71**, 016221 (2005).
5. Дж. Николис, И. Пригожин, *Самоорганизация в неравновесных системах* (Мир, Москва, 1979).
6. P. Galenko and D. Jou, *Phys. Rev. E* **71**, 046125 (2005).
7. В. Хорстхемке, Р. Лефевр, *Индукцированные шумом переходы* (Мир, Москва, 1987).
8. J. Garcia-Ojalvo and J.M. Sancho, *Noise in Spatially Extended Systems* (Springer, New York, 1999).
9. А.И. Олемской, Д.О. Харченко, *Самоорганизация самоподобных стохастических систем* (НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Институт компьютерных исследований, Москва-Ижевск, 2007).
10. C. Van der Broeck, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3395 (1994).
11. J. Garcia-Ojalvo, J.M.R. Parrondo, J.M. Sancho, and C. Van der Broeck, *Phys. Rev. E* **54**, 6918 (1996).
12. C. Van der Broeck, J.M.R. Parrondo, and R. Toral, R. Kawai, *Phys. Rev. E* **55**, 4084 (1997).
13. D.O. Kharchenko and A.V. Dvornichenko, *Eur. Phys. J. B* **61**, 95 (2008).
14. Д.О. Харченко, А.В. Дворниченко, І.О. Лисенко, *УФЖ* **53**, 917 (2008).
15. D.O. Kharchenko and A.V. Dvornichenko, *Physica A* **387**, 5342 (2008).
16. J. Buceta, M. Ibanes, J.M. Sancho, and K. Lindenberg, *Phys. Rev. E* **67**, 021113 (2003).
17. S.E. Mangioni and H.S. Wio, *Phys. Rev. E* **71**, 056203 (2005).
18. Д.О. Харченко, С.В. Кохан, А.В. Дворниченко, *Металлофизика и новейшие технологии*, **31**, 23 (2009).
19. D. Kharchenko, S.V. Kokhan, A.V. Dvornichenko, *Phys. D* **238**, 2251 (2009).
20. V. Kharchenko, *Physica A* **388**, 268 (2009).
21. S.E. Mangioni, *Physica A* **389**, 1799 (2010).
22. R.A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. B* **63**, 134111 (2001).
23. J. Ye and P. Bellon, *Phys. Rev. B* **70**, 094104 (2004).
24. R. Cuerno and A.-L. Barabasi, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4746 (1995).
25. R. Kree, T. Yasseri, and A.K. Hartmann, *Nucl. Ins. Meth. B* **267**, 1407 (2009).
26. A.A. Ponomarev, V.I. Miroshnichenko, and A.G. Ponomarev, *Nucl. Ins. Meth. B* **267**, 2041 (2009).
27. G. Martin, *Phys. Rev. B* **30**, 1424 (1984).
28. G. Martin, P. Bellon, *Solid State Phys.* **50**, 189 (1997).

29. N. Lecoq, H. Zapolsky and P. Galenko, *Eur. Phys. J. ST* **177**, 165 (2009).
30. P. Galenko and D. Jou, *Physica A* **388**, 3113 (2009).
31. D. Jou, J. Casas-Vazquez, and G. Lebon, *Rep. Prog. Phys.* **51**, 1005 (1988).
32. D. Joseph and L. Preziosi, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 41 (1989).
33. J.W. Cahn and J.E. Hilliard, *J. Chem. Phys.* **28**, 258 (1958).
34. J.W. Cahn, *Acta Metall.* **9**, 795 (1961).
35. H.E. Cook, *Acta Metall.* **18**, 297 (1970).
36. A.G. Khachaturyan, *Theory of structural transformations in solids* (Wiley, New York, 1983).
37. В.П. Скрипов, А.В. Скрипов, *УФН* **128**, 193 (1979).
38. P. Galenko, V. Lebedev, *Phys. Let. A* **372**, 985 (2008).
39. D. Jou, J. Casas Vazquez, and G. Lebon, *Extended Irreversible Thermodynamics, 3rd edition* (Springer-Verlag, Berlin, 2001).
40. D. Kharchenko, P. Galenko, and V. Lebedev, *Usp. Fiz. Met.* **10**, 27 (2009).
41. V.I. Dubinko, A.V. Tur, and V.V. Yanovsky, *Rad. Eff.* **112**, 233 (1990).
42. E.A. Novikov, *ЖЕТП* **20**, 1290 (1965).
43. K. Binder and P. Fratzl, *In: Phase transformations in materials, ed. by G.Kostorz* (Wiley-VCH, Weinheim, New York, Chichester, Brisbane, Singapore, Tokio, 2001).
44. Y. Yackle and M. Piesoth, *Z. Phys. B* **72**, 25 (1988).
45. K. Binder, *Festkörperprobleme – Advances in solid state physics*, ed. by P. Grosse, **26** (Braunschweig, Vieweg, 1986).

Одержано 15.03.10

ПОДДЕРЖИВАЕМЫЕ ВНЕШНИМ ШУМОМ ПРОЦЕССЫ ОТБОРА СТРУКТУР ПРИ СПИНОДАЛЬНОМ РАСПАДЕ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ

Д.О. Харченко, И.О. Лысенко, В.О. Харченко

Резюме

Рассмотрены процессы отбора структур в классе неравновесных бинарных стохастических систем, подверженных внешнему воздействию. Аналитически и численно показана возможность прохождения процесса отбора структур на начальных стадиях спиnodального распада. Установлено, что регулярная и стохастическая компоненты внешнего потока играют противоположную роль при отборе структур, и в целом при распаде системы. Результаты, полученные аналитически, подтверждены численным моделированием.

EXTERNAL-NOISE-SUSTAINED PROCESSES OF PATTERN SELECTION OF STRUCTURES AT THE SPINODAL DECOMPOSITION OF A BINARY SYSTEM

D.O. Kharchenko, I.O. Lysenko, V.O. Kharchenko

Institute of Applied Physics,
Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
(58, Petropavliv'ska Str., Sumy 40030, Ukraine)

Summary

We consider the processes of pattern selection of structures in a class of nonequilibrium binary stochastic systems subjected to an external influence. A possibility for the process of selection of structures to run on the initial stages of the spinodal decomposition is demonstrated analytically and numerically. It is established that the regular and stochastic components of an external flow play opposite roles at the selection of structures and, in the general case, at the decay of systems. The analytical results are confirmed by a numerical modeling.