

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРИ ПЕРЕХОДЕ ПЕРВОГО РОДА В ТРЕХМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

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

Уединенные решения 3-мерного уравнения Эйлера для функционала свободной энергии, описывающего переход первого рода, исследованы для φ^4 - и φ^6 -моделей.

Нелинейные явления в окрестности фазового перехода первого рода интенсивно исследуются как аналитически, так и численно [1-7]. К настоящему времени большинство этих работ было посвящено исследованию локализованных возбуждений и доменных стенок в системах, претерпевающих фазовый переход. Эти уединенные возбуждения играют важную роль в кинетике параметра порядка и в процессах зародышеобразования в метастабильной фазе. Большинство работ, известных в этой области, ограничивается анализом одномерных возбуждений. В этом случае распределение однокомпонентного параметра порядка может быть найдено аналитически, поскольку при этом приходится фактически иметь дело с одномерным консервативным движением классической частицы. Однако, как правило, распределение параметра порядка вблизи точки перехода трехмерно.

Учитывая это, мы исследовали 3-мерный функционал Гинзбурга—Ландау со скалярным полем. Такая модель применима к структурным переходам, бинарным жидкостям, переходам жидкость—пар и т. п. Мы рассмотрели два типа разложений свободной энергии: а) модель φ^4 , включающая член 3-го порядка; б) разложение свободной энергии, содержащее четные степени вплоть до φ^6 . Оба этих разложения допускают описание переходов первого рода.

В этой заметке мы сконцентрировали свое внимание на статических свойствах локализованных решений, описывающих зародыш упорядоченной фазы внутри неупорядоченной. Эти решения можно рассматривать как крупномасштабные флуктуации параметра порядка, которые должны возникать как результат обычных термических флуктуаций в неупорядоченной фазе в окрестности точки перехода. Ниже мы получим решение для критического зародыша в численном виде при $d=3$ и обсудим некоторые интересные аспекты проблемы, относящиеся к изменению размерности пространства.

1. Модель

Произвольное распределение параметра порядка $\varphi(\mathbf{r})$ можно описать, используя неравновесный функционал свободной энергии Гинзбурга—Ландау [8]

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

где d — размерность пространства. Локальная плотность свободной энергии $\mathcal{F}(\varphi)$ может быть весьма произвольным разложением по инвариантам высокотемпературной фазы системы. В этой заметке мы ограничимся скалярным параметром φ и двумя простыми типами разложения

$$\text{а) } \mathcal{F}(\varphi) = \frac{1}{2} \tau \varphi^2 - \frac{2}{3} \kappa \varphi^3 + \frac{1}{2} u \varphi^4, \quad (2)$$

$$\text{б) } \mathcal{F}(\varphi) = \frac{1}{2} \tau \varphi^2 - \frac{1}{2} g \varphi^4 + \frac{1}{6} b \varphi^6. \quad (3)$$

Действительно, если все постоянные в уравнениях (2), (3) положительны и $g^2 > 4\tau b/3$, то функция $\mathcal{F}(\varphi)$ с необходимостью имеет метастабильный минимум при $\varphi = 0$ и выгодный энергетически при $\varphi = \varphi_0 \neq 0$

$$\text{а) } \varphi_0 = \kappa + [\kappa^2 - u\tau]^{1/2},$$

$$\text{б) } \varphi_0 = [g + (g^2 - \tau b)^{1/2}/b]^{1/2}.$$

Помимо простоты эти разложения имеют достаточно широкую применимость, поскольку для различных физических систем возле критической точки можно построить скалярную комбинацию из компонент параметра φ (которые собственно и упорядочиваются при переходе) и редуцировать задачу к исследованию стандартных катастроф, описываемых разложениями (2) или (3) [9].

Равновесное распределение параметра порядка $\varphi(r)$ дается экстремалью функционала $F[\varphi]$, вычисление которой приводит к хорошо известному уравнению Эйлера $\delta F/\delta \varphi = 0$ в форме нелинейного уравнения типа Шредингера

$$\Delta \varphi = d\mathcal{F}/d\varphi \equiv \mathcal{F}'_{\varphi}. \quad (4)$$

Ниже мы исследуем лишь изотропные распределения параметра порядка $\varphi(r) = \varphi(r)$, так что уравнение (4) будет редуцировано к форме

$$\varphi_{,rr} + \frac{(d-1)}{r} \varphi_{,r} - \mathcal{F}'_{\varphi} = 0. \quad (5)$$

Число и топология его решений существенно зависят от структуры локального потенциала $\mathcal{F}(\varphi)$. В этой заметке мы интересуемся локализованными возбуждениями в неупорядоченной фазе, так что разложения (2) и (3) будут выбраны таким образом, чтобы описывать поведение системы в области между бинадалью и спинадалью переохлаждения. В этой области локализованные возбуждения можно интерпретировать как зародыш упорядоченной стабильной фазы внутри метастабильной. Одномерные точные решения такого типа хорошо известны [2-5]. Можно надеяться, что такие локализованные решения имеют место и в физической 3-мерной системе. Кроме того, если учитывать упомянутый смысл решения как зародыша упорядоченной фазы, можно ожидать, что $\varphi(r)$ стремится к равновесному значению $\varphi = \varphi_0$ в центре зародыша.

В этом контексте возникает дополнительная проблема, связанная с тем, что уравнение Эйлера есть необходимое, но не достаточное условие минимума функционала (1). Как будет показано ниже, решение $\tilde{\varphi}(r)$, стремящееся к φ_0 , в центре является седловой точкой функционала (1) и именно этот результат соответствует концепции, согласно которой $\tilde{\varphi}(r)$ описывает критический зародыш новой фазы.

Для решения вопроса о том, обеспечивает ли данное распределение $\tilde{\varphi}(r)$ минимум функционала $F[\varphi]$, необходимо вычислить его вторую вариацию и исследовать знак разности $F - F[\tilde{\varphi}(r)] = \Delta F$. Простое вычисление дает

$$\Delta F = \int d^2r [(\nabla z)^2 + \mathcal{F}''_{\varphi\varphi}(\tilde{\varphi}(r)) z^2],$$

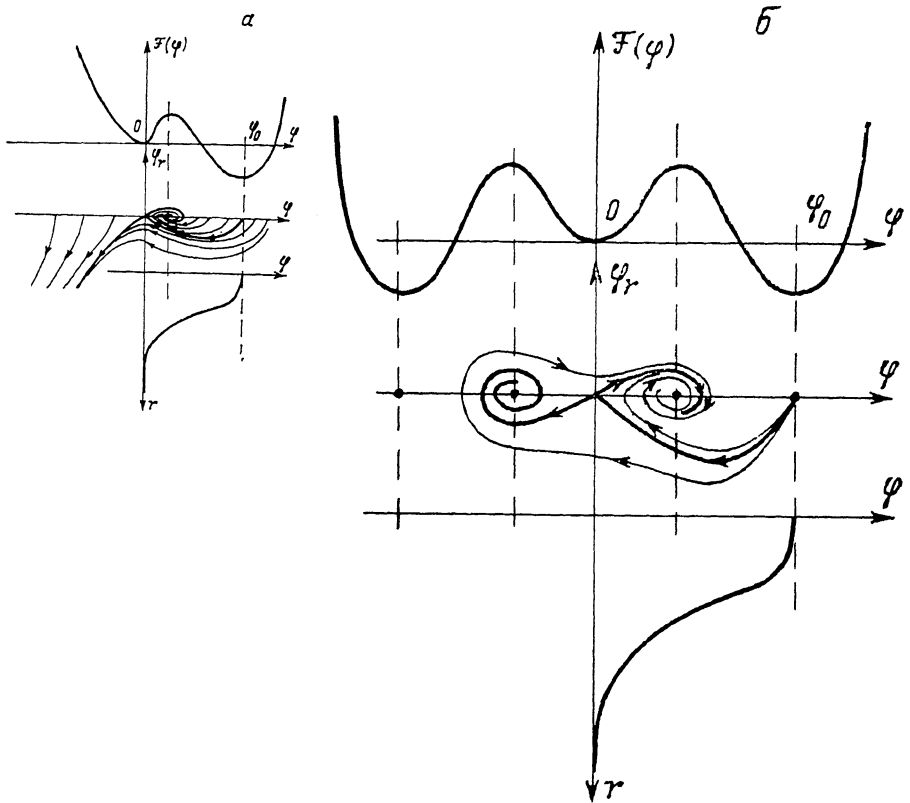


Рис. 1. Структуры потенциалов для φ^4 (а)- и φ^6 (б)-моделей.

Жирная линия — сепаратриса ($\varphi(r) = \tilde{\varphi}(r)$). Внизу — профиль $\tilde{\varphi}(r)$ как функция от r .

где

$$z = \varphi - \tilde{\varphi}(r).$$

Если $\tilde{\varphi} = 0$ или $\tilde{\varphi} = \varphi_0$ совпадает с минимумами $\mathcal{F}(\varphi)$, то положительность ΔF для произвольной вариации $z(r)$ очевидна. Если же $\varphi = \tilde{\varphi}(r)$ есть искомого локализованное решение, то функция $\mathcal{F}_{\varphi\varphi}$ не является знакоопределенной. Действительно, между точками $\tilde{\varphi} = \varphi_0$ и $\tilde{\varphi} = 0$ минимумов \mathcal{F} обязательно расположена точка максимума этой функции, в конечной окрестности которой $\mathcal{F}_{\varphi\varphi} < 0$. В результате $z(r)$ всегда можно выбрать таким образом, чтобы сделать $\Delta F < 0$. Например, можно взять $z(r) \simeq \text{const}$ в области, где $\mathcal{F}_{\varphi\varphi} < 0$, плавно спадающей к границам этой области, и, наконец, $z(r) = 0$ всюду, где $\mathcal{F}_{\varphi\varphi} > 0$. Вариация $z(r)$ такого типа имеет простой физический смысл как слабый сдвиг «границы» зародыша упорядоченной фазы относительно ее неустойчивого равновесия. Когда область $\varphi = \varphi_0$ расширяется, энергия ΔF понижается за счет отрицательности $\mathcal{F}(\varphi_0)$. В противном случае она понижается за счет уменьшения области неоднородности распределения $\varphi(r)$. Конкретная же структура «седла» $\varphi(r)$ задается, естественно, решением уравнения $\delta F / \delta \varphi = 0$, т. е. $\varphi = \tilde{\varphi}(r)$.

Учитывая опыт исследования одномерного уравнения [2, 3], можно ожидать, что при произвольном d искомым локализованным решением должен быть специальный («сепаратриса») интеграл, разделяющий два различных типа решений. Однако, поскольку на сегодня аналитическое решение уравнения (5) отсут-

ствуует, найти его можно лишь численно. Строго говоря, наличие члена $(d-1)\varphi_r/r$ в уравнении (5) не позволяет использовать метод фазового портрета для его анализа ввиду пересечения на нем различных фазовых траекторий. Однако в нашем конкретном случае можно ограничиться случаем $\varphi_r \rightarrow 0$ и

формально использовать фазовый портрет для получения решения, которое есть сепаратриса только при таких начальных условиях (иными словами, это есть фазовый портрет и сепаратриса для выделенного класса решений).

Для численного решения необходимо конкретизировать значения параметров в правой части уравнения (5). В контексте задачи, когда $\varphi=0$ является

метастабильным минимумом $\mathcal{F}(\varphi)$,

а $\varphi=\varphi_0$ соответственно стабильным, можно использовать следующие (типичные) значения параметров:

$$1) \tau = u = 1; \kappa = \sqrt{2},$$

$$2) \tau = b = 1; g = 1.5. \quad (6)$$

Эти условия задают положение неподвижных точек на фазовом портрете (три и четыре неподвижные точки для φ^4 - и φ^6 -моделей соответственно; рис. 1). Для обеих моделей неподвижная точка с наибольшим φ неустойчива. Сепаратриса соединяет эту точку с седловой точкой при $\varphi=0$ и определяет решение, ин-

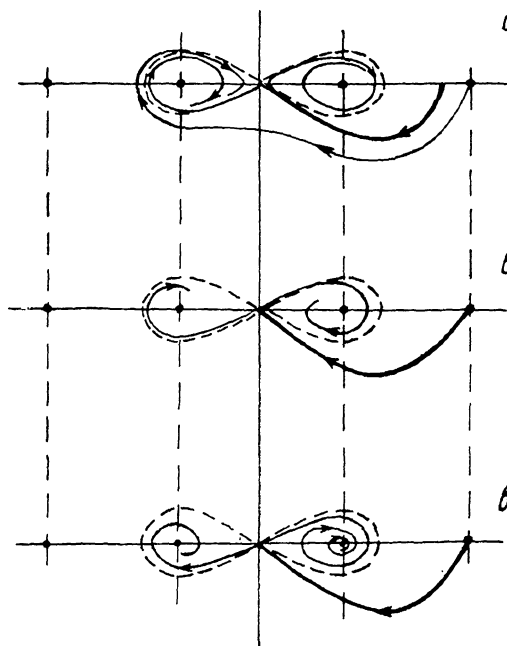


Рис. 2. Трансформации фазовых траекторий при изменении размерности для $d=2$ (а), 3 (б) и 4 (в).

Точное сепаратрисное решение для одномерного уравнения показано штриховой линией.

тересное с физической точки зрения, локализованное вокруг $r_0 \rightarrow 0$ и имеющее конечную энергию. Форма $\tilde{\varphi}(r)$, соответствующая этому решению, рассчитана и также показана на рис. 1.

Качественно форма $\tilde{\varphi}(r)$ при $d=3$ такая же, как и при $d=1$. Однако имеется существенное различие между этими размерностями. Если при $d=1$ величина $\tilde{\varphi}(0)$ совпадала со значением φ , при котором $\mathcal{F}(\varphi)$ обращается в нуль (т. е. физически никак не выделенным), то при $d=3$ численное решение дает предел $\tilde{\varphi}(0)$, совпадающий с равновесным φ_0 для однородного упорядочения, что действительно ожидается для реального зародыша.¹

Тенденция изменения затравочной точки сепаратрисы на фазовом портрете показана на рис. 2. Легко видеть, что максимум $\tilde{\varphi}(r)$ нарастает по мере нарастания размерности от $d=1$ (штриховые линии) до $d=3$. Дальнейшее нарастание d уже не меняет качественной картины $\tilde{\varphi}(r)$, максимум которого «залипает» возле φ_0 . Как нам кажется, этот факт должен быть связан с хорошо известным

¹ Строго говоря, точное равенство $\tilde{\varphi}(0)=\varphi_0$ недостижимо, так как φ_0 есть неподвижная точка уравнения (5). Однако численно найденное $\tilde{\varphi}(0)$ очень слабо отличается от φ_0 ($|\tilde{\varphi}-\varphi_0| \leq \varphi_0 \cdot 10^{-3}$, тогда как при $d=1$ эта разность порядка φ_0) и почти не меняется в области $3 \leq d \leq 4$. Во всяком случае указанное отличие очень мало и несущественно для физической картины.

фактом разрушающего влияния флуктуаций на фазовый переход при $d=1$ и $d=2$ [10]. Для завершения обсуждения рис. 2 отметим еще корреляцию, которая имеет место между линиями тока при $d \neq 1$ и $d=1$. А именно, если затравка на

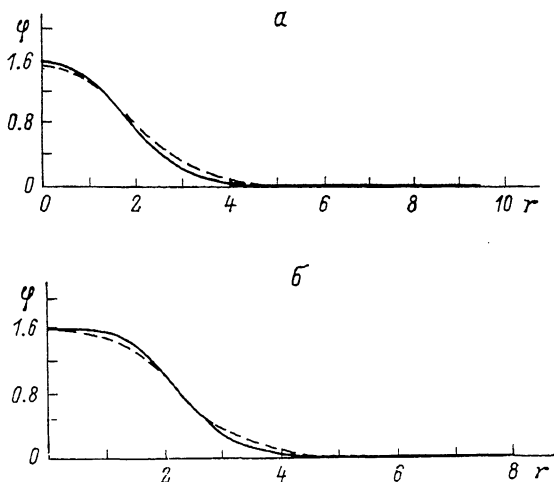


Рис. 3. Сравнение численных $\bar{\varphi}(r)$ решений с аналитическими аппроксимациями (штриховые линии) для φ^4 (а)- и φ^8 (б)-моделей.

плоскости (φ, φ_r) бесконечно мало отличается от сепаратрисы, то фазовая траектория претерпевает кроссовер (возле точки $\varphi=0$) к поведению, которое практически совпадает с сепаратрисой при $d=1$. Этот кроссовер имеет место при очень больших r , когда решение $\bar{\varphi}(r)$ можно интерпретировать как квазиодномерное, так что данное поведение вполне естественно.

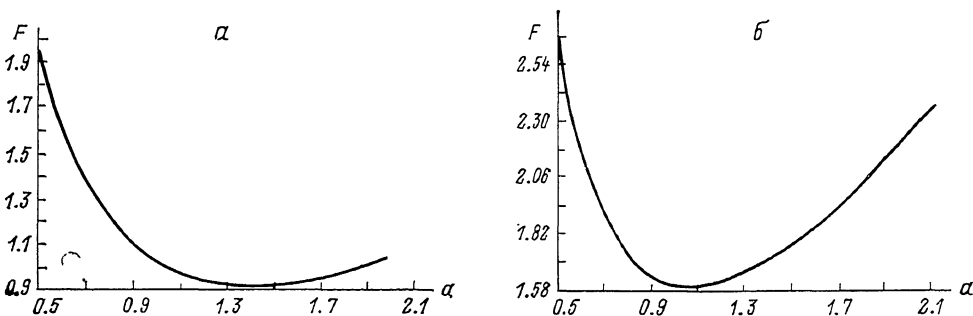


Рис. 4. Зависимость F от эффективной толщины стенки a при $R=R_c$ для φ^4 (а)- и φ^8 (б)-моделей.

Если зародыш достаточно велик, то его границу можно считать квазиплоской, а в уравнении (5) заменить приближенно член с φ_r/r на φ_r/R , где R — эффективный радиус зародыша. Уравнение

$$\varphi_{rr} + (d-1)\varphi_r/R - \mathcal{F}\varphi = 0 \quad (7)$$

можно интерпретировать как уравнение движения ньютоновской частицы с трением $(d-1)\varphi_r/R$. Его фазовый портрет [11] качественно аналогичен полученному выше (рис. 1) для точного уравнения и позволяет осмыслить причину различия в величинах $\varphi(r \rightarrow 0)$ для различных размерностей. Действительно,

«трение» тем больше, чем больше разность $(d-1)$, и, следовательно, с тем большего значения $|\mathcal{F}'(\varphi)|$ должно начинаться движение «частицы», чтобы избежать падения в «яму» в точке $\min \mathcal{F}$. Иными словами, затравочная точка сепаратрисы должна нарастать с ростом размерности d . С другой стороны, она не может превысить φ_0 . Последнее и обуславливает ее «залипание» вблизи φ_0 при $d \geq 3$.

Реальная ситуация, конечно, сложнее, чем описываемая уравнением (7). Тем не менее можно убедиться (рис. 3, а, б), что профили $\tilde{\varphi}(r)$ достаточно близко моделируются «плоскими стенками», описываемыми функцией типа $\varphi_0(1 - \tanh((r-R)/a))/2$, где a — эффективная толщина стенок. Величины a и R_c были использованы для наилучшей аппроксимации формы $\tilde{\varphi}(r)$. Однако эти же значения a и R_c дают неплохую аппроксимацию и для седловой точки функции $F(a; R) = F[\varphi(r; a; R)]$ (рис. 3).

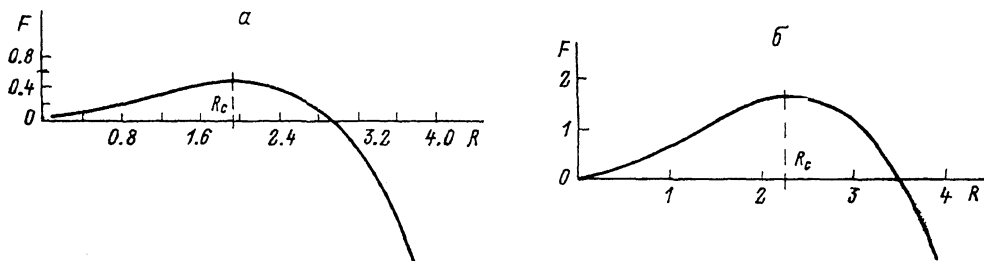


Рис. 5. Зависимость F от эффективного радиуса R при толщине a , зафиксированной по аппроксимации профиля $\tilde{\varphi}(r)$, для φ^k (а)- и φ^6 (б)-моделей.

В заключение отметим, что физическая картина, получаемая для решения $\tilde{\varphi}(r)$, вполне аналогична таковой для феноменологического критического зародыша. Поскольку решение $\tilde{\varphi}(r)$ седловое для функционала \tilde{F} , то при $R < R_c$ зародыш схлопывается, а при $R > R_c$ неограниченно нарастает вплоть до изменения знака энергии [12]. Необходимо подчеркнуть лишь, что истинный критический зародыш с необходимостью определяется решением уравнения Эйлера для седловой точки энергии. В результате ширина его стенки оказывается порядка радиуса ($a \simeq R_c/2$) и простая феноменологическая картина, основанная на представлении о поверхностной энергии, строго говоря, неприемлема.

Авторы благодарят А. С. Зельцера, А. Л. Сукстанского и Е. П. Стефановского за полезное обсуждение.

Список литературы

- [1] Gordon A. // Phys. Lett. 1983. V. 99A. N 7. P. 329—331.
- [2] Tusynski J. A., Paul R., Chatterjee R. // Phys. Rev. 1984. V. 29B. N 1. P. 380—386.
- [3] Tusynski J. A. et al. // Phys. Rev. 1987. V. 36B. N 4. P. 2190—2203.
- [4] Mazenko G. F., Valls O. T. // Phys. Rev. 1984. V. 30B. N 11. P. 6732—6748.
- [5] Mazenko G. F., Zanetti M. // Phys. Rev. 1985. V. 32B. N 7. P. 4565—4575.
- [6] Mazor A., Bishop A. R. // Physica. 1989. V. 39D. N 1. P. 22—37.
- [7] Gonzales J. A., Estrada-Sarlabous J. // Phys. Lett. 1989. V. 140 A. N 4. P. 189—192.
- [8] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. 3-е изд. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [9] Poston T., Stewart I. Catastrophe Theory and its Applications. Pitman, London, 1978.
- [10] Mermin N. D. // Phys. Rev. 1968. V. 176. P. 250—254.
- [11] Ландау Л. Д., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. 3-е изд. М.: Наука, 1979. Ч. XII.
- [12] Лоскутов А. Ю., Михайлов А. С. Введение в синергетику. М.: Наука, 1990. 272 с.