

01;05

Колебания концентрации в ограниченных бинарных смесях с учетом поверхностных эффектов

© И.Б. Краснюк, Л.И. Стефанович, В.М. Юрченко

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина,
83144 Донецк, Украина
e-mail: kras@host.dipt.donetsk.ua

(Поступило в Редакцию 8 сентября 2006 г.)

Рассматривается бинарная смесь, которая граничит с подложкой и вакуумом и образует пленку. Распределение одной из компонент смеси описывается уравнением Кана–Хилларда с несимметричными граничными условиями, учитывающим процессы (смачивания), происходящие на границе и приповерхностных слоях пленки, и, возможно, влияние внешнего постоянного магнитного поля. Параметры задачи характеризуют объемную корреляционную длину, силу парного взаимодействия в приближении ближайших соседей у границы пленки и величину перенормированного магнитного поля, которое действует на спины в поверхностных слоях системы. Определена область значений параметров, порождающая колебания концентрации по толщине пленки. Указаны подобласти параметров, порождающие заданное число колебаний по сечению пленки. Аналитические результаты качественно подтверждаются на численном эксперименте.

PACS: 83.50.Lh, 83.50.Xa

Введение

Исследование кинетики расслоения в бинарных смесях является одной из актуальных задач физики конденсированного состояния [1–3]. При спинодальном распаде можно наблюдать спонтанные коррелированные поверхностные и/или объемные структуры, состоящие из кластеров повышенной (пониженной) концентрации. Распределение концентрации моделируется уравнением Кана–Хилларда [4,5]. Изменение состава начинается в тонком поверхностном слое кристалла, порядка нескольких монослоев [6]: по этой причине актуальной является не обычная модель отсутствия потоков на поверхности пленки, когда задаются однородные краевые условия Неймана, а более сложные граничные условия, учитывающие влияние процессов, происходящих на границе пленки и ее приповерхностных слоях. Краевые условия должны быть несимметричными, поскольку в эксперименте пленка граничит с подложкой и вакуумом. Такая точка зрения находит экспериментальное подтверждение для сплава Cu_3Au [7] и приводит к необходимости исследовать процессы распределения концентрации в ограниченных системах (тонких пленках [8]) с соответствующими краевыми условиями, учитывающими поверхностные эффекты.

Распределение одной из компонент бинарной смеси в пленке описывается уравнением Кана–Хилларда [9]

$$u_t = \nabla(M\nabla(-\epsilon^2\Delta u - u - u^3)), \quad (x, t) \in \Omega \times R^+ \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\mathbf{n} \cdot \nabla u = \mathbf{n} \cdot \nabla \Delta u = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times R^+. \quad (2)$$

Параметр ϵ характеризует вклад поверхностной энергии в общую энергию системы [4,10]; \mathbf{n} — вектор внешней

нормали к $\partial\Omega \subset R^k$, $k = 1, 2, 3$; (\cdot) — скалярное произведение векторов; $\partial\Omega$ — граница области, занимаемой бинарной смесью; ∇ — оператор дифференцирования; Δ — оператор Лапласа. Функция u представляет собой параметр порядка, который сохраняется для однородных краевых условий Неймана и не сохраняется для условий Дирихле и смешанных граничных условий, которые будут рассматриваться в дальнейшем. Если u изменяется слабо на некотором характерном масштабе, который больше шага объемно-центрированной решетки, то в качестве параметра порядка можно принять концентрацию [11]. Краевая задача (1)–(2) является типичной моделью определения концентрации в пленке при изотермических условиях. Обобщением этой модели является задача Неймана для уравнения Кана–Хилларда с вязкостью [12].

Модель поверхностной диффузии предполагает, что коэффициент подвижности $M = 0$ вне некоторого слоя поверхности S и, следовательно, диффузия происходит только внутри поверхностного слоя [4]. В нулевом приближении в случае медленного обмена атомами на поверхности S коэффициент $M = \text{const}$ при $|u| \ll 1$ и $M = 0$ при $|u| = 1$. Такое приближение достаточно для описания малых колебаний параметра порядка в окрестности неупорядоченной фазы при возникновении так называемых неустойчивостей Крзановского [13].

Глобальная разрешимость задачи (1)–(2) и существование аттрактора, т.е. множества стационарных состояний, к которым притягиваются при $t \rightarrow \infty$ начальные распределения $u(x, 0)$, доказаны в статье [14]. Существование аттрактора означает, что в уравнении (1) можно выполнить предельный переход при $t \rightarrow \infty$ и ограничиться исследованием структуры стационарных решений, что и будет сделано в дальнейшем. Сценарий бифуркаций таких решений из пространственно-одно-

родного состояния зависит от параметров задачи и исследован в статье [15].

Граничные условия (2) не учитывают влияние стенок пленки: в частности, поверхностные эффекты и влияние внешних магнитных полей. По этой причине в данной статье рассматриваются более общие граничные условия [5]

$$u_\tau = h_1 + gu + \nu u_x - \left(\frac{\nu}{4}\right)^{2/3} u_{xx} - \frac{5}{6} \left(\frac{\nu}{4}\right)^{1/3} u_{xxx} \quad \text{при } x = 0 \quad (3)$$

и

$$u - u^3 + \frac{1}{2} u_{xx} = 0 \quad \text{при } x = 0 \quad (3')$$

на поверхности пленки, которая граничит с подложкой, и аналогичные условия на поверхности $x = d$, которая граничит с вакуумом. Параметры h_1 , ν и g определяют влияние поверхностных эффектов и магнитного поля [5].

Основной результат данной работы состоит в определении множества параметров $\Sigma^+(h_1, g, \nu)$, таких, что при всех $h_1, g, \nu \in \Sigma^+$ соответствующая краевая задача имеет $2n + 1$ стационарных решений, где n — неотрицательное целое число.

Определим среднюю массу по формуле

$$m = \frac{1}{d} \int_0^d u(s) ds,$$

где d — толщина (квазиодномерной) пленки. Тогда при $0 < m < 1/\sqrt{3}$ существует две ветви стационарных решений с n критическими точками, которые являются бифуркациями тривиального решения при

$$d(n) = \frac{(n+1)\pi}{2\sqrt{1-3m^2}}.$$

Другими словами, существует ровно $2n + 1$ стационарных решений $u_0 = 0$ и u_k^+ ($k = 1, \dots, n$), где $(d/dx)u_k^+ > 0$ при $x = 0$, $(d/dx)u_k^- < 0$ при $x = 0$ и на интервале $0 < x < \pi$ функция u_k^+ обращается в нуль $k - 1$ раз [15].

Далее определяется бифуркационный параметр $\lambda = (\pi/d)^2$ и показано, что для уравнения (1) с граничными условиями (2) осциллирующие распределения представляют собой чисто размерный эффект. При $0 < \lambda \leq 1$ нулевое решение является глобально асимптотически устойчивым, а при $\lambda > 1$ нулевое решение неустойчиво, равно как и все прочие стационарные состояния, за исключением двух, обозначаемых u_1^+ , u_1^- и характеризующихся тем, что $u_1^+(x) > 0 > u_1^-(x)$ при всех $0 < x < d$.

При $T \rightarrow T_c$, где T_c — критическая температура, рассматриваются граничные условия вида [5]

$$\nu u_x + gu = -h_1, \quad u_{xxx} = 0 \quad \text{при } x = 0 \quad (4)$$

и

$$\nu u_x - gu = h_1, \quad u_{xxx} = 0 \quad \text{при } x = d, \quad (5)$$

где $\nu = 4\xi_b^3$, а ξ_b — объемная корреляционная длина.

При $\nu = 0$ получаются граничные условия Дирихле

$$u(0) = A, \quad u(d) = B,$$

где $A = -h_1/g_1$ и $B = -h_1/g_2$ в силу условий (4) и (5). По определению $g_s \propto J_s$, $s = 1, 2$, где J_s — есть сила парного взаимодействия приповерхностного слоя пленки в приближении ближайших соседей с границей пленки, причем $g_1 g_2 < 0$.

При $A > -1$ и $B > -1$ пленка при $d \rightarrow \infty$ переходит в устойчивое состояние $u_1(x) = 1$. При $A < -1$ и $B < -1$ исходная задача имеет решения $u_3(x) = -1$ относительно среднего значения концентрации $u_2(x) = 0$. При $A < -1$ и $B > 1$ график решения $u(x)$ резко переходит от прямой $u_3(x) = -1$ к прямой $u_1(x) = 1$ в окрестности точки $x = d/2$ при $d \rightarrow \infty$. Здесь имеет место явление концентрационного расслоения [16]. Сформулированные результаты находятся в точном соответствии с результатами численного эксперимента [5].

1. Постановка задачи

Рассмотрим уравнение Кана–Хилларда в следующей безразмерной форме [5]:

$$\phi_\tau = -(\phi - \phi^3 + \phi_{xx})_{xx}, \quad (6)$$

где $\phi \equiv \phi(r, x, \tau)$.

Бинарная смесь занимает объем между двумя параллельными стенками $x = 0$ и $x = d$. Вдоль любого направления r пленка является изотропной, поэтому для двумерной системы r имеет только одну компоненту s . Параметр порядка ϕ является безразмерной величиной в окрестности кривой сосуществования фаз. Время τ определяется в терминах соответствующих микроскопических параметров [17,18]. Коэффициент подвижности здесь отнесен в перенормированное время, поскольку мы ограничиваемся случаем, когда коэффициент M есть функция только координат (см., например, [19]). Следовательно, можно рассмотреть усредненную по некоторому характерному пространственному масштабу величину $\langle M \rangle$.

При $\xi_b \gg h$ (h — шаг решетки) и $T \rightarrow T_c$ (T_c — критическая температура) можно воспользоваться континуальным приближением (6) с граничными условиями [20]:

$$\nu \phi_x + g\phi = -h_1 \quad \text{при } x = 0 \quad (7)$$

и

$$\nu \phi_x - g\phi = h_1 \quad \text{при } x = d, \quad (8)$$

где ϕ — статический параметр порядка.

В соотношениях (7) и (8) параметры h_1 , g и ν определяются следующим образом:

1) на языке модели Изинга h_1 есть перенормированное магнитное поле, действующее на спины только в поверхностных слоях системы [21];

2) величина $\nu = 4\xi_b^3$ относится к объемной корреляционной длине;

3) параметр $g \propto J_s/J$, где J_s определяет силу парного взаимодействия (в приближении ближайших соседей) в окрестности плоскостей $x = 0$ и $x = d$, а J определяет аналогичную величину во всем объеме [22].

Определим усредненный профиль параметра порядка по формуле

$$\phi_{av}(x, \tau) = \frac{1}{l_s} \int_0^{l_s} \phi(s, x, \tau) ds,$$

где l_s — есть линейный размер системы в направлении s .

В дальнейшем удобно ввести обозначение: $u(x, \tau) = \phi_{av}(x, \tau)$ и рассмотреть для решений уравнения (6) краевые условия:

$$u_x(0, \tau) = u_x(d, \tau) = 0 \text{ и } u_{xxx}(0, \tau) = u_{xxx}(d, \tau), \quad \tau > 0, \quad (9)$$

тогда уравнение (1) можно записать в виде

$$u_\tau = -(u - u^3 + \epsilon u_{xx})_{xx}. \quad (10)$$

Параметр ϵ является коэффициентом при градиентной энергии в функционале Гинзбурга–Ландау и пропорционален величине поверхностной энергии на межфазной границе, возникающей при расслоении концентрации при $T \rightarrow T_c$, где T_c — критическая температура. Поскольку единственным механизмом переноса атомов является диффузионный механизм (см., например, [4]), то $\epsilon \propto D$, где D — коэффициент диффузии.

Краевая задача (9)–(10) допускает существование аттрактора: т.е. при $t \rightarrow \infty$ ее решения для достаточно малых начальных функций сходятся к решениям стационарной задачи

$$(u - u^3 + \epsilon u_{xx})_{xx} = 0, \quad x \in (0, d) \quad (11)$$

с граничными условиями (9). Это утверждение доказано в [14].

2. Структура стационарных распределений параметра порядка

Интегрирование уравнения (11) с учетом граничных условий (9) приводит к уравнению

$$u_{xx} - u^3 + u - a = 0, \quad (12)$$

где a — некоторый параметр, $x \rightarrow x/\epsilon$.

Уравнение (12) имеет нетривиальное решение, если выполняется условие [9,12]

$$a \in I_a = \left(-\frac{2}{3\sqrt{3}}, \frac{2}{3\sqrt{3}} \right).$$

Уравнение (12) имеет первый интеграл

$$p = \frac{1}{2} u_x^2 + G(u, a), \quad G(u, a) = -\frac{u^4}{4} + \frac{u^2}{2} - au, \quad (13)$$

где p — некоторая постоянная. При $a \in I_a$ функция G имеет минимум в точке $(\tilde{u}_0(a), a)$ и два максимума

$(\tilde{u}_1(a), a)$ и $(\tilde{u}_2(a), a)$. Определим

$$p_{\min}(a) = G(\tilde{u}_0(a), a) < p_{\max}(a) = \min_{i \in \{1,2\}} G(\tilde{u}_i(a), a). \quad (13')$$

Тогда уравнение (13) допускает монотонные решения при $p \in (p_{\min}(a), p_{\max}(a))$.

Определим область

$$\Sigma = (p, c) | a \in I_a, \quad p \in (p_{\min}(a), p_{\max}(a)).$$

Тогда для каждого $(p, a) \in \Sigma$ возможно определить „период“ (полупериод) колебаний стационарных решений $d = d(p, a)$ и среднюю массу

$$m(p, a) = \frac{1}{d} \int_0^d u(x; p, a) dx,$$

где $u(x; p, a)$ удовлетворяет уравнению (13).

Геометрия области Σ известна: в частности, допустимая область симметрична относительно оси p [12] и, следовательно, можно ограничиться семейством параметров $a \geq 0$ и определить множество $\Sigma^+ = \Sigma \cap \{a \geq 0\}$. Граница множества Σ^+ (параметризованная параметром p) определяется следующими кривыми [9,12]:

$$\sigma_0 = (p, 0), \quad 0 < p < \frac{1}{4},$$

$$\sigma_1 = (p, a_1(p))$$

$$= \left(p, \sqrt{\frac{1}{27} - \frac{4p}{3} + \frac{1}{27} (12p+1)^{3/2}} \right), \quad -\frac{1}{12} \leq p \leq \frac{1}{4}$$

и

$$\sigma_2 = (p, a_2(p))$$

$$= \left(p, \sqrt{\frac{1}{27} - \frac{4p}{3} - \frac{1}{27} (12p+1)^{3/2}} \right), \quad -\frac{1}{12} \leq p \leq \frac{1}{4}.$$

Это множество изображено на рис. 1.

Вдоль границы $\partial\Sigma$ $\Delta = 0$, а внутренность $\text{int } \Sigma^+$ определяется неравенством $\Delta < 0$, где по определению

$$\Delta = -64p^3 + 32p^2 + 4(18a^2 - 1)p + 27a^4 - 2a^2.$$

Это утверждение было доказано в статье [12].

Рассмотрим следующее граничное условие:

$$h_1 + gu(0) - vu_z(0) - \left(\frac{v}{4}\right)^{2/3} u_{zz}(0) = 0, \quad (14)$$

которое является обобщением граничного условия (7), и будем искать классические решения уравнения (12). Это означает, что решения удовлетворяют уравнению не только внутри области $0 < x < d$, но и на границе, т.е.

$$u_{xx}(0) - u^3(0) + u(0) - a = 0. \quad (15)$$

Из (14) и (15) следует соотношение

$$\left(\frac{4}{v}\right)^{2/3} [h_1 + gu(0) - vu_z(0)] - u^3(0) + u(0) = a. \quad (16)$$

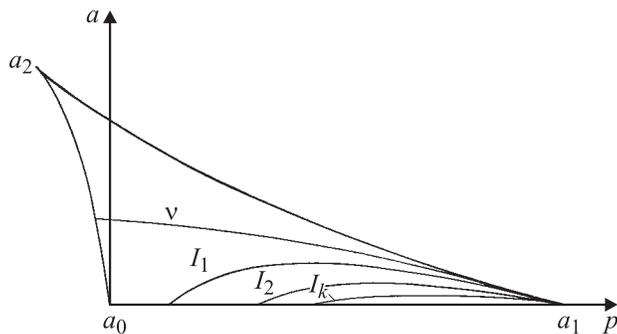


Рис. 1. Фазовая диаграмма в плоскости (p, a) , где $p = u_x$ определяет скорость движения, а параметр a определяется из начальных и граничных условий. В области $(p, a \leq v)$ существуют осциллирующие решения. В области $(p, I_1 \leq a \leq I_2)$ однородное распределение концентрации $u(x) \equiv m$ устойчиво. В области $(p, I_2 \leq a \leq I_3)$ имеет место одно колебание решения: это решение асимптотически устойчиво. В области $(p, I_k \leq a \leq I_{k+1})$ существуют k колебаний. Выше кривой v существуют лишь решения типа поверхности концентрационного расслоения и решения типа пограничного слоя. Точки $a_0 = (0, 0)$, $a_1 = (1/4, 0)$, $a_2 = (-1/12, 4/27)$.

В силу условия $u_z(0) = 0$ и, следовательно, из (16) вытекает равенство

$$a = u(0) - u^3(0) + \left(\frac{4}{v}\right)^{2/3} [h_1 + gu(0)]. \quad (17)$$

Тем самым параметр a определен при условии, что $u(0) = A$, где A — постоянная.

Аналогично из соотношения (13) в силу однородных граничных условий следует, что $p = G[u(0), a]$, где

$$G[u(0), a] = -\frac{A^4}{4} + \frac{A^2}{2} - aA. \quad (18)$$

Из [12] вытекает, что множество значений параметров, при которых существуют осциллирующие решения, определяется неравенством $\Delta(p, a) < 0$, последнее с учетом соотношений (17) и (18) можно записать в виде

$$\Delta[p(A, a), a] < 0,$$

где $a = a(h_1, g, v)$.

Более подробную информацию можно извлечь из следующего утверждения [9,12]:

i) для любого $0 < m < 1/\sqrt{3}$ и всех $n = 0, 1, 2, \dots$ существуют две ветви стационарных решений для уравнения Кана–Хилларда с n внутренними критическими точками, которые (решения) являются бифуркациями из тривиального решения при

$$d(n) = \frac{(n+1)\pi}{2\sqrt{1-3m^2}};$$

ii) для любого $1/\sqrt{3} < m < 1$ и всех $n = 0, 1, 2, \dots$ существуют две ветви стационарных решений для уравнения Кана–Хилларда с n критическими точками, которые (решения) не допускают бифуркацию из тривиального решения.

Результаты статьи [12], полученные для уравнения Кана–Хилларда с однородными граничными условиями, можно обобщить на достаточно сложные граничные условия, учитывающие процессы приповерхностного взаимодействия в пленке [5]. В работе [23] для уравнения (1) с краевыми условиями Неймана доказано существование предельных стационарных решений при $t \rightarrow \infty$. Следовательно, утверждение данного пункта имеет место для нестационарной краевой задачи. Выше мы свели исследование стационарного уравнения Кана–Хилларда к стационарному уравнению Аллена–Кана, т.е. к уравнению второго порядка. В [23] показано, что часто аттрактор для уравнения Кана–Хилларда идентичен аттрактору уравнения Аллена–Кана: это означает, что структура решений топологически одинакова. В следующем пункте приведем пример, который подтверждает результаты статьи [23]. Аналог утверждения (ii) в данной статье в приложении к тонким пленкам не рассматривается.

3. Краевая задача Чэфи–Инфанте

Для иллюстрации сформулированного утверждения рассмотрим пример, который моделирует сценарий образования колебаний концентрации из однородного состояния $u_2(x) \equiv 0$.

Рассмотрим уравнение (12) с граничными условиями Дирихле или Неймана. Напомним, что из (7) и (8) вытекает, что если выполняются неравенства $g \ll v$ и $h_1 \ll v$, то имеются краевые условия Неймана, если выполняются неравенства $v \ll 1$ и $h_1 \ll 1$, то — граничные условия Дирихле. Сформулированные ниже утверждения справедливы для любого из таких граничных условий: разница состоит лишь в том, что для однородного условия Неймана масса m сохраняется, а для условия Дирихле — нет.

Уравнение (12) имеет три стационарные точки $u = u_1(a)$, $u = u_2(a)$, $u = u_3(a)$, причем решения $u_1(a)$ и $u_3(a)$ устойчивы, а решение $u_2(a)$ — нет. При $a = 0$ в силу определения средней массы m $u_2(0) = 0$ и, следовательно, $m = 0$. При любом $a \in I_a$ средняя масса $m = u_2(a)$.

Тогда уравнению (12) можно поставить в соответствие нестационарное уравнение

$$u_t = u_{xx} - u^3 + u - a,$$

а последнее уравнение в свою очередь можно линеаризовать в точке $u = u_2(a)$ таким образом, что

$$u_t = \epsilon u_{xx} + (1 - 3u_2(a))u = 0, \quad 0 < x < d.$$

Выполним замену $x \rightarrow x/d$ и $x \rightarrow \pi x$ и запишем это уравнение в виде

$$u_t = \left(\frac{\epsilon\pi}{d}\right) u_{xx} + (1 - 3m^2)u = 0 \quad (19)$$

с граничными условиями

$$u_x(0, t) = 0, \quad u_x(\pi, t) = 0, \quad t > 0. \quad (20)$$

Из (15) вытекает, что при $t \rightarrow \infty$ решения задачи (19), (20) сходятся к решениям задачи

$$u_{xx} + lu = 0,$$

удовлетворяющим условиям (10), где

$$l = \left(\frac{d\pi}{\epsilon}\right)^2 (1 - 3m^2).$$

Если $0 < l \leq 1$, то нулевое решение последнего уравнения является глобально асимптотически устойчивым. Если $l > 1$, то нулевое решение неустойчиво (как и все прочие стационарные решения), за исключением двух решений u_1^+ и u_1^- , таких что $u_1^+(x) > 0 > u_1^-(x) > 0$ при всех $0 < x < \pi$. Эти решения асимптотически устойчивы. Если $n^2 < l \leq (n+1)^2$, то существует $2n+1$ стационарных состояний, которые удовлетворяют утверждению (i) предыдущего пункта.

Поскольку $d \propto l$, то здесь имеет место размерный эффект, что и наблюдалось при численном эксперименте ([5], рис. 2, a, c). Так, при $d = 30$ на рис. 2, a получено $n = 6$ колебаний параметра порядка, а на рис. 2, c — число колебаний равно $n = 12$. Тогда несложная оценка (по сформулированному выше критерию) показывает, что в первом случае $18 < d < 21$, а во втором — $36 < d < 39$. Полученная (заниженная при $\pi \approx 3$) оценка качественно совпадает с численными результатами [5]. Небольшое количественное расхождение можно объяснить тем, что в цитированной работе рассматривались нестационарные (зависящие от времени) граничные условия, что должно приводить к увеличению числа колебаний.

4. Несимметричные граничные условия

Если выполняется неравенство $v \ll 1$, то граничные условия (7), (8) можно приближенно записать в виде

$$\phi = -h_1 \quad \text{при} \quad x = 0$$

и

$$\phi = h_1 \quad \text{при} \quad x = d.$$

Такие граничные условия ближе к эксперименту [20–25], поскольку они отражают неэквивалентность двух поверхностей пленки: одна из поверхностей граничит с воздухом или вакуумом, а другая — с твердой подложкой.

По этой причине ниже рассмотрим следующую задачу, родственную предыдущей:

$$u_t = u_{xx} + \epsilon u_{xx} + u - u^3 + a, \quad 0 < x < 1, \quad (21)$$

но с несимметричными граничными условиями

$$u(0, \epsilon) = A, \quad u(1, \epsilon) = B, \quad (22)$$

где $\epsilon \rightarrow (\epsilon\pi/d)^2$. Положим для удобства изложения $a = 0$ (общий случай рассматривается аналогичным образом).

При $0 < \epsilon \ll 1$ имеет место сингулярно-возмущенная краевая задача (21), (22). При $\epsilon \rightarrow 0$ ее решения моделируют распределения концентрации в пленке. Методы, изложенные в [16], позволяют рассмотреть общую нелинейную задачу и показать, как происходит расслоение по концентрации относительно среднего значения $u(x) \equiv m$ для реальной пленки (в отличие от предыдущего результата, который моделирует только неустойчивости достаточно малой амплитуды относительно среднего значения m).

Решения вырожденного уравнения (21) при $\epsilon = 0$ суть $u_1(x) = 1$ и $u_3(x) = -1$ и являются устойчивыми, в то время как решение $u_2(x) = 0$ неустойчиво. В общем случае эти точки следует заменить стационарными решениями из соотношения (13'). Из ([16], с. 174) вытекает, что если $A > -1$ и $B > -1$, то рассматриваемая задача имеет решение $u = \phi_1(x, \epsilon)$ такое, что выполнено предельное соотношение

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi_1(x, \epsilon) = 1$$

при всех $x \in [\delta, 1 - \delta]$, где $\delta \in (0, 1/2)$.

По соображениям симметрии результат справедлив и для решения $u = \phi_3(x) = -1$ вырожденного уравнения. Точнее, если граничные значения удовлетворяют условиям $A < 1$ и $B < 1$, то исходная задача имеет (другое) решение $u > \phi_3(x, \epsilon)$, такое что выполнено предельное соотношение

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi_3(x, \epsilon) = -1$$

при всех $x \in [\delta, 1 - \delta]$, где $\delta \in (0, 1/2)$. В частности, при $A = B = 0$ задача имеет по крайней мере три решения

$$u = \phi_1(x, \epsilon), \quad u = \phi_3(x, \epsilon), \quad u = \phi_2(x, \epsilon).$$

При $d \rightarrow \infty$ ($\epsilon \rightarrow 0$) аналогичный результат получен в ([5], с. 149): так, в плоскости параметров h_1/v и g/v определена бифуркационная кривая, разделяющая режим неполного смачивания стенок от режима полного смачивания. Например, неравенство $A < 1$ можно записать в виде $-h_1/g < 1$, откуда вытекает, что

$$\frac{g}{v} > -\frac{h_1}{v} > -2 \quad (23)$$

при выполнении неравенства $h_1/v < 2$. Неравенство $g/v > -2$ получено в [25,26] и описывает так называемое (неполное) смачивание первого порядка. Таким образом, в слабых магнитных полях при $h_1/v < 2$ из полученного неравенства $-h_1/g < 1$ вытекает неравенство (23).

Заметим, что при численном моделировании ([5], рис. 1) принимались значения $g = -4$ и $h_1 = 4$, $\nu = 4$. Следовательно, условие $h_1/\nu = 1 < 2$ выполняется, а полученная оценка $4 - h_1/d = 1$ является предельной (с точностью до погрешностей численного счета). Напомним, что неравенство (23) описывает эффект неполного смачивания в статическом равновесии (см. рис. 1 из [5]). Неравенство $A > -1$ или $h_1/g < 1$ описывает эффект полного смачивания и имеет, согласно определению g , простой физический смысл, поскольку $g \propto J_s$ — сила „смачивания“ вблизи стенки.

В заключение необходимо также отметить, что данная задача кроме указанных решений имеет и решения типа внутреннего ударного слоя. Например, рассмотрим случай, когда $A < -1$ и $B > 1$. Тогда, как вытекает из [16], исходная задача имеет решение $\phi = \phi(x, \epsilon)$, которое удовлетворяет предельному соотношению

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi(x, \epsilon) = \begin{cases} -1 & x \in [\delta, 1/2 - \delta], \\ 1 & x \in [1/2 + \delta, 1 - \delta], \end{cases} \quad (24)$$

где $\delta \in (0, 1/4)$. При этом график решения $\phi = \phi(x, \epsilon)$ резко переходит от прямой $\phi_3(x) = -1$ к прямой $\phi_1(x) = 1$ в окрестности точки $x = 1/2$, причем эта окрестность стягивается к точке $x = 1/2$ при $\epsilon \rightarrow 0$ ($d \rightarrow \infty$). Решения типа (24) также получены численно в ([5], рис. 2, b).

При симметричных граничных условиях эти решения имеют место при $|h_1/g| > 1$, что также имеет простой физический смысл, поскольку эффект „неравномерного смачивания“ может иметь место лишь при не очень больших значениях g на каждой из границ. В несимметричном случае на каждой из стенок условия существования внутреннего ударного слоя можно записать в виде

$$\frac{h_1}{g_1} > 1 \quad \text{при} \quad \frac{h_1}{g_2} < -1.$$

При этом, очевидно, направления сил приповерхностного смачивания различны, т.е. должно выполняться неравенство $g_1 g_2 < 0$.

Заключение

Таким образом, в данной работе получены следующие результаты:

- установлена допустимая область параметров $\Sigma^+(h_1, g, \nu)$ такая, что при $h_1, g, \nu \in \Sigma^+$ существуют осциллирующие стационарные распределения концентрации бинарной смеси;

- при изменении толщины пленки имеет место размерный эффект: существует последовательность значений $d_n \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$ такая, что при каждом $n = 0, 1, 2, \dots$ задача допускает $2n + 1$ стационарных распределений сохраняющегося параметра порядка (концентрации);

— результаты качественно совпадают с численными результатами статей [5,17,23,24] и, следовательно, могут быть использованы при расчетах параметров конкретных пленок.

Выражаем благодарность А.Е. Шишкову и Р.М. Таранцу за ряд консультаций.

Приложение 1

В данном приложении подробно рассмотрим структуру возможных решений краевой задачи, которая схематически изображена на рис. 1. Так, вдоль кривой σ_1 имеем

$$L = \infty, \quad m = \frac{1}{\sqrt{3}} (1 + \sqrt{1 + 12p})^{1/2},$$

а вдоль кривой σ_2

$$L = \pi(1 + 12p)^{-1/4}, \quad m = \frac{1}{\sqrt{3}} (1 - \sqrt{1 + 12p})^{1/2}.$$

Такие значения L и m отвечают точкам бифуркаций монотонных решений из стационарных состояний. Для любого $m \in [0, 1]$ существует решение $u(x) = m$, которое обозначим $M_h(m)$. Таким решениям отвечают точки (p, a) , которые принадлежат границе области $\sigma_1 \cup \sigma_2$.

Ограничимся исследованием неустойчивого случая, который отвечает неустойчивостям Крзановского [13]. Оказывается, что для $L_{\min}(m) > \pi/\sqrt{1 - 3m}$ существует единственное монотонно возрастающее решение для любого L из интервала $(L_{\min}(m), \infty)$. Отметим, что каждой кривой C_m на рис. 1 отвечает некоторое решение исходной краевой задачи. Тогда $L_{\min}(m) = L_{\sigma_2}(m)$, т.е. значение L определяется в точке пересечения кривой C_m с кривой σ_2 (на кривой C_m лежит некоторое решение с массой m). Следовательно, все решения могут быть параметризованы параметром L . Большие значения L отвечают точкам кривой C_m , принадлежащим окрестности точки $(1/4, 0)$. Такой окрестности отвечают межфазные решения: они не имеют пограничных слоев и содержат только переходные слои ширины $O(1/L)$.

Обозначим эти решения через $M_i^{+}(L, m)$, где индекс i означает, что решения являются межфазными, т.е. отвечают концентрационному расслоению. Индекс „+“ означает, что они пересекают однородное решение с массой m в одной точке, индекс „+“ означает, что такие решения возрастают. Для аналогичных убывающих решений введем обозначение $M_i^{-}(L, m)$. Нетрудно проверить, что если $u = u(x)$ есть монотонно возрастающее решение, параметризованное кривой $M_i^{+}(L, m)$, то $u = u(-x)$ есть монотонно убывающее решение, параметризованное кривой $M_i^{-}(L, m)$.

Очевидно, что, если существует стационарное решение уравнения Кана–Хилларда с числом пересечений k с постоянным решением $u(x) = m$ на интервале $[0, L]$, то существует монотонное решение со средней массой m на интервале $[0, L/k)$. Отсюда вытекает, что

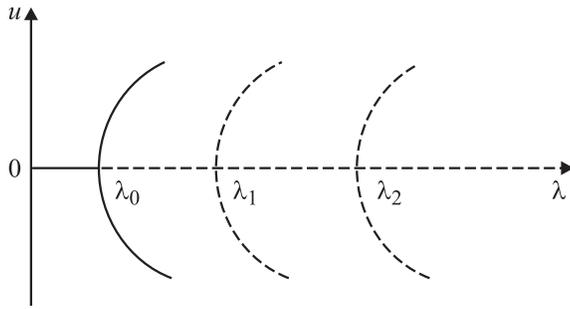


Рис. 2. Бифуркационная диаграмма возникновения колебаний концентрации в бинарной системе в точках $\lambda_k = (kd/\pi\epsilon)^2(1 - 3m^2)$, $k = 0, 1, \dots$. При $\lambda_0 < \lambda < \lambda_0$ возникает расслоение по концентрации; при $0 < \lambda_{k-1} < \lambda < \lambda_k$ возникает k колебаний концентрации.

для $0 < m < 1/\sqrt{3}$ (в неустойчивой области) при всех $L > L_{\min}(m)$ существуют k ветвей решений таких, что

$$k = \max_{j \geq 1} \left\{ \frac{L}{h} > L_{\min}(m) \right\}.$$

Для таких ветвей мы используем обозначение $M_i^{j+}(L, m)$, $1 \leq j \leq k$. Из таких ветвей в силу симметрии задачи относительно отображения $x \rightarrow -x$ можно „считать“ осциллирующие решения.

Из [12] вытекает, что число кривых в области Σ^+ , которое отвечает решениям с постоянной массой m и числом колебаний k ($k = 1, 2, \dots$), является дискретным. Множество значений L , которым отвечают точки возврата (рис. 2) или точки бифуркации из однородного решения, также является дискретным и не имеет предельных точек.

Аналогично определению кривой C_m с фиксированной массой m можно определить кривую с фиксированным параметром L , которая соединяет точки на σ_2 с точками на σ_0 . Кривые C_L и C_m пересекаются трансверсально везде, исключая кривую, которую мы обозначим через ν и которая соединяет точки $(\frac{7}{100}, \frac{4}{5\sqrt{2}})$ и $(1/4, 0)$. Вдоль ν функция

$$W(p, a) = \frac{\Delta}{L} (L_a m_p - L_p m_a)$$

обращается в нуль, где $m_p(p, a) > 0$, $(p, a) \in \Sigma^+$. Кривая ν может быть параметризована таким образом, что $a = a^\nu(p)$, причем $a^\nu(p) < 0$. Ниже кривой ν имеет место неравенство $W > 0$, и все решения, отвечающие точкам (p, a) , которые на рис. 1 лежат ниже кривой ν , являются либо межфазными (в смысле расслоения по концентрации) с одним колебанием, либо осциллирующими с k колебаниями. Такие решения отвечают известным неустойчивостям Крзановского, которые наблюдаются экспериментально [13]. Точки бифуркации из стационарного решения осциллирующего решения с произвольным числом колебаний k принадлежат кривой σ_2 (более подробно см. [12]).

В данной статье рассматривался пример краевой задачи для уравнения Кана–Хилларда, которая при $t \rightarrow \infty$ сводится к исследованию краевой задачи для уравнения Аллена–Кана

$$u_t = u_{xx} + \lambda^2(u - u^3)$$

с граничными условиями

$$u_x(0, t) = u_x(\pi, t) = 0.$$

Условия, при выполнении которых аттракторы соответствующих краевых задач совпадают, установлены в статье [12].

В данном случае при

$$L \in \left(k\pi/\sqrt{1 - 3m^2}, (k + 1)\pi/\sqrt{1 - 3m^2} \right)$$

аттрактор задачи состоит из множества

$$\{M_i^{1+}, \dots, M_i^{k+}, M_h\}.$$

Напомним, что N_h — однородное решение $u(x) = m$, а M_i^{k+} определяют монотонно возрастающее на интервале $(0, k\pi/\sqrt{1 - 3m^2})$ решение, имеющее k колебаний на интервале $(0, L)$. Определение монотонно убывающего на интервале $(0, k\pi/\sqrt{1 - 3m^2})$ решения M_i^{k-} аналогично.

Для любого $\lambda > 0$ уравнение Чэфи–Инфанте (Алле–Кана) имеет $2k (= 2[\lambda])$, где $[\cdot]$ — целая часть числа нетривиальных нестационарных решений M_i^{j+} . При этом решения M_i^{j+} являются асимптотически устойчивыми. Таким образом, решение M_h , отвечающее возникновению зародыша малой амплитуды относительно среднего решения $u(x) = m$, является асимптотически устойчивым. Решения M_i^{1+} , отвечающие тривиальному расслоению по концентрации, являются асимптотически устойчивыми. Осциллирующие решения M_i^{1+} при всех $k \geq 2$ асимптотически неустойчивы при $0 < m < 1/\sqrt{3}$.

Случай $1/\sqrt{3} < m < 1$ приводит к существованию так называемых метастабильных состояний. Напомним, что, по определению [26,27], метастабильными называются состояния, которые устойчивы к сколь угодно малым возмущениям и неустойчивы к конечным возмущениям.

Представим более подробную интерпретацию решений на рис. 1. Рассмотрим множество

$$I_k = \{(a, p) \in \Sigma^+ | 2k\},$$

которое определяет максимальное число колебаний k для осциллирующего решения. Тогда следующее утверждение дает информацию о структуре областей I_k [12]. Область Σ_ν^+ , состоящая из всех точек, которые лежат ниже кривой ν , допускает разбиение на I_k , ($k = 1, 2, \dots$) связанных областей таким образом, что любая точка $(a, p) \in \Sigma_\nu^+$ может быть соединена с точкой $(0, p) \in \Sigma_\nu^+ \cup I_k$ непрерывной кривой, лежащей строго внутри области I_k .

Список литературы

- [1] *Roland C. and Desai R.C.* // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. N 10. P. 6658.
- [2] *Lin F. and Metiu H.* // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48. N 9. P. 5808.
- [3] Phase Transitions and Critical Phenomena / Ed. by C. Domb and J.L. Lebowitz. London: Academic, 1988. P. 10.
- [4] *Taylor J.E. and Cahn J.W.* // J. Stat. Phys. 1994. Vol. 77. N 1/2. P. 183.
- [5] *Puri S. and Binder K.* // J. Stat. Phys. 1994. Vol. 77. N 1/2. P. 145.
- [6] *Robinson I.K. and Tweet D.J.* // Rep. Prog. Phys. 1992. Vol. 55. P. 599.
- [7] *McRae E.G. and Malic R.A.* // Phys. Rev. Lett. 1990. Vol. 65. N 6. P. 737.
- [8] *Candia J. and Albano E.V.* // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 88. N 1. P. 016 104–1–4.
- [9] *Novick-Cohen A.* // Adv. Math. Sci. and Appl. 1998. Vol. 8. N 2. P. 965.
- [10] *Fife P.C. and Lacey A.A.* // J. Stat. Phys. 1994. Vol. 77. N 1/2. P. 173.
- [11] *Cahn J.W. and Novick-Cohen A.* // J. Stat. Phys. 1994. Vol. 76. N 3/4. P. 877.
- [12] *Grinfeld M. and Novick-Cohen A.* // Trans. American Math. Society. 1999. Vol. 351. N 6. P. 2375.
- [13] *Passo R.D., Giacomelli L., Novick-Cohen A.* // Interfaces and Free Boundary. 1999. Vol. 1. P. 199.
- [14] *Chafee N., Infante E.* // J. Appl. Anal. 1974. Vol. 4. P. 17–37.
- [15] *Чанг К., Хаус Ф.* Нелинейные сингулярно возмущенные краевые задачи. Теория и приложения / Под ред. Н.Х. Розова. М.: Мир, 1988. 242 с.
- [16] *Binder K., Frisch K.L.* // Z. Phys. B. 1991. Vol. 84. P. 403.
- [17] *Puri S., Binder K.* // Phys. Rev. E. 1994. Vol. 49. P. 5359.
- [18] *de Mello E.V.L., da S. Filho O.T.* // arXiv: cond-mat/0410772v1 29 Oct. 2004.
- [19] *Puri S., Binder K.* // Z. Phys. B. 1987. Vol. 67. P. 369.
- [20] *Nicolaidis D., Evens R.* // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 39. P. 263.
- [21] *Jones R.A.L., Norton L.J., Kramer E.J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 66. P. 1326.
- [22] *Wiltzins P., Cumming A.* // Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 66. P. 3000.
- [23] *Bruder F., Brenn A.* // Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 69. P. 624.
- [24] *Dietrich S.* // In Phase Transitions and Critical Phenomena / Ed. by C. Domb and J.L. Lebowitz. N.Y.: Academic Press, 1988. P. 1.
- [25] *de Gennes P.G.* // Rev. Mod. Phys. 1985. Vol. 57. P. 827.
- [26] *Eilbeck J.C., Furter J.E., Grinfeld M.* // Phys. Lett. A. 1989. Vol. 135. N 4, 5. P. 272.
- [27] *Eilbeck J.C., Fife P.C., Furter J.E., Grinfeld M., Mimura M.* // Phys. Lett. A. 1989. Vol. 139. N 1/2. P. 42.