

外噪声场对二元混合物相分离的驱动作用*

冯文强¹⁾ 诸跃进^{1) 2)}

¹⁾ 宁波大学物理系, 宁波 315211)

²⁾ 南京大学固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

(2004 年 1 月 14 日收到, 2004 年 3 月 12 日收到修改稿)

采用蒙特卡罗法研究了外高斯噪声场对二元混合物体系相分离的驱动作用. 研究发现, 高斯噪声场的引入可以加快体系畴的生长, 驱动体系形成沿着 [1, 1] 取向的条状畴结构. 在噪声强度一定、噪声作用的概率小于 0.015 时, 高斯噪声场消除了深度淬火引起的体系畴的冻结, 畴的生长因子随噪声作用概率线性增加. 对足够强的高斯噪声场, 存在一个最佳的作用概率区域, 其间体系能形成取向性好的条状畴结构.

关键词: 高斯噪声, 二元混合物, 相分离

PACC: 0540, 0565, 6140K

1. 引 言

近年来, 非线性体系中的噪声诱导现象受到人们极大关注. 这些现象包括噪声诱导相变^[1]、噪声诱导斑图^[2,3]、随机共振^[4-7]等等. 噪声诱导的体系斑图呈现出丰富的形貌, 包括条纹、方形、六角形和螺旋形等. 这些形状可在催化反应^[8]、海洋生物^[9]、反应混合体系^[10]和胶体化学^[11]中观察到. 二元混合物相分离体系是个典型的非线性体系, 噪声对体系相分离有着非常重要的作用. 研究发现, 噪声可以影响体系畴界面动力学^[12]、改变标度指数和层曲率^[13]、消除拓扑缺陷^[14]、产生有序畴结构^[15,16]. 然而, 这些研究工作主要考虑体系内部热噪声的影响, 即 Cook 项的作用, 而对外部输入噪声如何影响体系的相分离过程, 诱导体系产生新的畴结构的认识还很少. 本文研究了外高斯噪声场作用下二元混合物体系的相分离行为, 以及体系的形貌结构和畴的演化与外高斯噪声场的关系.

2. 模 型

采用蒙特卡罗法在二维正方格子 $L \times L = 256 \times 256$ 下, 运用周期性边界进行数值模拟研究. 初始时

刻两种分子 A 和 B 随机均匀分布在二维正方格子中, 分子间相互作用能为

$$E = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j,$$

其中 J 表示相互作用强度, $\sigma_i = 1/-1$ 分别表示分子 A 和 B , i, j 表示这种相互作用只是最近邻相互作用. 当突然把体系的温度降到临界温度 T_c ($T_c = 2.24J/k_B$) 以下, 这时体系将发生相分离. 我们采用 Kawasaki 交换机理^[17]来描述分子间自发的热扩散运动, 即分子 A 或 B 随机地与一个最近邻位置的分子以概率 $p_1 = 1/(1 + \exp(\Delta E/k_B T))$ 进行交换, 其中 ΔE 为交换前后系统能量的变化. 过去的研究表明^[18], 淬火温度越低, 畴的生长越慢, 形成的畴的尺寸越小. 在深度淬火下, 相分离后期体系将发生畴的冻结. 我们考虑外高斯噪声场以一定概率 p 作用在二元混合物体系上, 在高斯噪声场的作用下, 分子与其最近邻分子进行位置交换的概率取

$$p_2 = \min[1, \exp(-\Delta E/\Omega)],$$

其中 ΔE 为交换前后体系能量的变化, Ω 为噪声作用量, 取 $\Omega = h\gamma(t)$, h 为噪声作用强度量, $\gamma(t)$ 为高斯白噪声, 它满足 $\gamma(t) = 0$, $\gamma(t)\gamma(t') = 2\delta(t-t')$. 对应的实际例子可以认为有一随机产生的光场辐照在二元混合物体系上, 光场的强度随机变动^[19], 光场给体系输入了能量, 它对体系的相分离产生了扰动作用. 高斯噪声作用与体系的相分离动

* 国家自然科学基金(批准号:10347132)、浙江省自然科学基金(批准号:M103015)及宁波市青年基金(批准号:2003A62007)资助的课题.

† E-mail: zhuyuejin@nbu.edu.cn

力学之间的竞争最终决定了体系所形成的畴结构. 采用这个模型, 我们讨论高斯噪声作用概率、噪声强度以及淬火温度等对二元混合物体系相分离过程中畴的形貌以及生长动力学的影响.

3. 模拟结果与讨论

现在讨论不同淬火温度下, 高斯噪声场对二元混合物体系相分离动力学的影响. 取高斯噪声作用强度量 $h = 20$, 噪声作用在体系上的概率 $p = 0.008$, 淬火温度分别取 $T = 0.2, 1.0$ 和 $1.6J/k_B$ 时进行模拟. 图 1 示出取 200000 蒙特卡罗步 (MCS) 时各情况对应的形貌图. 在图 1(a) 中, 体系相分离畴的生长极为缓慢, 只形成尺寸很小的畴结构. 这是由于深度淬火将使界面间的能垒升高, 分子间的热扩散动力学作用被抑制, 分子随机向其上下左右 4 个最近邻方向扩散运动变得很困难, 从而抑制了体系畴的生长. 加入了高斯噪声场之后, 从图 1(b) 中可以看到, 体系畴的尺寸明显变大, 畴的形貌形成沿着 $[1, 1]$ 方向的条状结构. 这是因为高斯噪声场的加入加快了分子在界面之间的扩散运动, 使体系畴的生长加快, 而形成沿着 $[1, 1]$ 方向的畴结构是高斯噪声场与热

扩散动力学竞争的结果^[20]. 虽然形成这种沿着斜对角方向畴界面的能量并非最低, 但它却比垂直或者水平方向的界面更稳定, 因为分子交换只沿着近临的垂直或者水平方向, 形成沿着斜对角方向的界面可以抑制分子的扩散运动, 减弱外高斯噪声场的影响. 当淬火温度升高时, 分子间热扩散运动加快, 从图 1(c) 可以看到, 此时体系形成尺寸更大的条状畴结构. 这种条状畴结构取向性没有 $T = 0.2J/k_B$ 时好, 这是两种作用竞争平衡被较强的热扩散运动打破所致. 当继续升高体系的温度到 $T = 1.6J/k_B$ 时, 分子间的扩散运动很快, 在高斯噪声作用与体系的热扩散动力学作用之间的竞争中, 热扩散动力学作用完全处于主导地位, 斜对角向条状畴被扰乱, 体系又趋于双连续的畴结构. 同时, 其间还存在许多孤立的 A 相小块畴, 图 1(d) 示出这种畴的形貌. 由上述可知, 当体系淬火温度低时, 高斯噪声场在体系相分离过程中起主导作用, 体系能形成取向性好的条状畴结构.

在淬火温度 $T = 0.2J/k_B$ 的深度淬火情况下, 图 2 示出噪声作用概率 $p = 0.006$, $t = 200000$ MCS, 噪声作用强度量 $h = 1, 10, 30$ 和 100 时的畴形貌. 从图 2 可以看到, 无论高斯噪声作用强与弱, 体系都形成了沿着 $[1, 1]$ 方向的条状畴结构. 这说明深度淬火体系

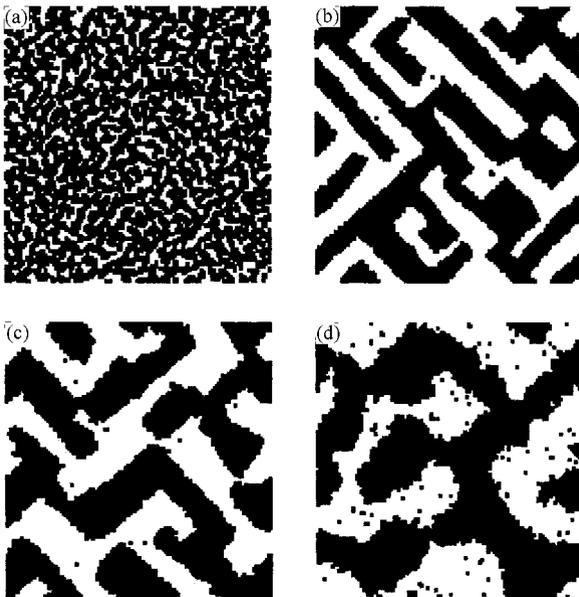


图 1 (a) 淬火温度 $T = 0.2J/k_B$, 没有高斯噪声作用 (b) (c) 和 (d) 分别对应淬火温度 $T = 0.2, 1.0$ 和 $1.6J/k_B$. 在高斯噪声作用概率 $p = 0.008$, 噪声作用强度量 $h = 20$, $t = 200000$ MCS 时对应的畴形貌图 (256 × 256 格子中 128 × 128 部分). 组分 A 由黑色表示, 组分 B 由白色表示.

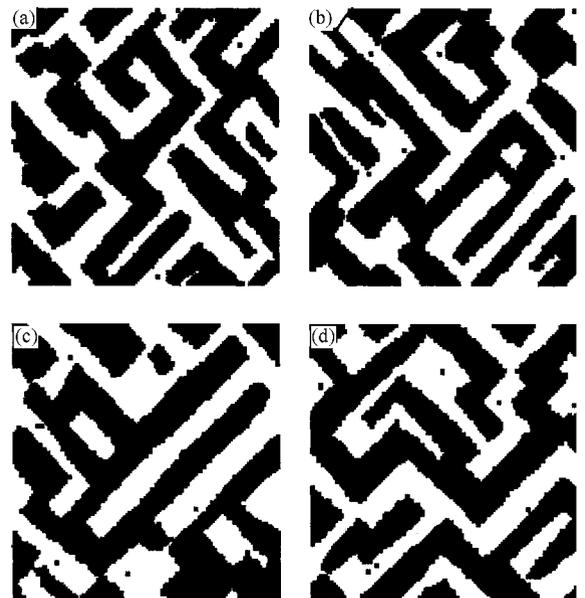


图 2 高斯噪声作用概率 $p = 0.006$, 噪声作用强度量分别为 $h = 1$ (a), 10 (b), 30 (c), 100 (d) 时, 相分离后期 ($t = 200000$ MCS) 体系形成的畴形貌图 (256 × 256 格子中 128 × 128 部分). 组分 A 和 B 说明同图 1.

容易受高斯噪声场的控制,在较大的高斯噪声强度范围内,体系都可以形成良好的条状畴结构.现在进一步考察体系畴的尺寸 $L(t)$ 随时间 t 的演化.畴的尺寸 $L(t) = 2\pi / k(t)$, 其中

$$k(t) = \sum_{k_n=0}^{k_c} k_n s(k_n, t) / \sum_{k_n=0}^{k_c} s(k_n, t), \quad k_c = \pi,$$

其中 $s(k_n, t)$ 为畴结构因子 $s(k, t)$ 的球平均, 而

$$s(k, t) = \phi(k, t) \phi(-k, t)^{[21]}.$$

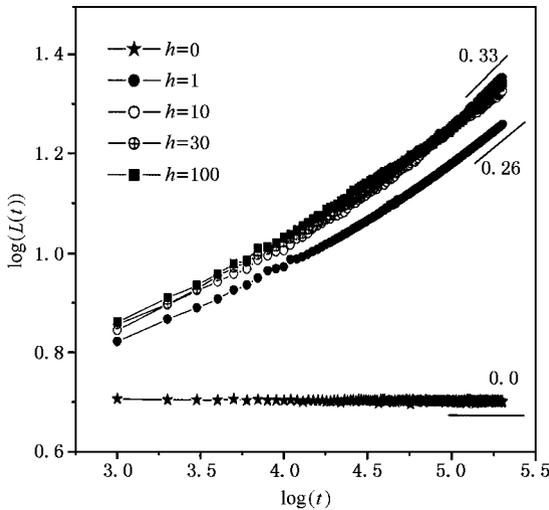


图3 高斯噪声作用概率 $p = 0.006$ 时,对于不同的噪声作用强度量畴的尺寸 $L(t)$ 随时间 t 演化的双 \log 图

图3示出畴的尺寸随时间的演化曲线.图中最下面的一条曲线为没有加入高斯噪声(即 $h = 0$)时畴的尺寸随时间的演化曲线.此时二元混合物在10000MCS以后就形成稳定的双连续迷宫状畴结构,畴的生长几乎停止,在后期畴被冻结.当加入高斯噪声作用之后,体系畴的生长明显加快,畴的尺寸也明显增大,相分离后期畴的生长不再冻结.对应于不同的噪声强度,可以看到畴的生长因子在弱噪声作用时($h = 1$)为0.26,而对于 $h \geq 10$ 的强噪声作用,畴的生长因子几乎相同,为 $n = 0.33$.应当指出,我们计算过更强的噪声,生长因子也未超过0.33.

高斯噪声作用的概率对体系畴的形貌有很大的影响.图4示出在不同噪声作用概率情况下, $t = 200000$ MCS时畴的形貌,其中取 $h = 20, T = 0.2J/k_B$.当噪声作用概率 $p = 0.0001$ 时,虽然噪声的引入能加快分子间的扩散运动,避免深度淬火下体系在相分离后期发生的畴被冻结的现象,但是由于噪声的作用概率比较小,在噪声作用和体系热扩散作用相竞争中,由后者处于主导地位,因而体系还是形成

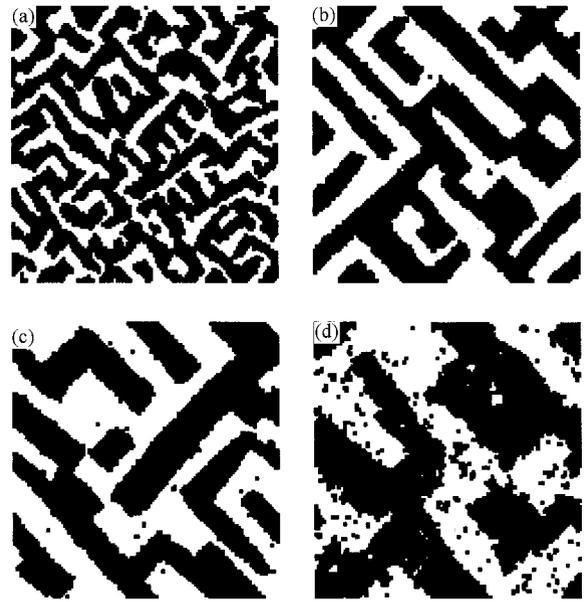


图4 高斯噪声作用强度量 $h = 20$ 时,噪声作用概率分别为 $p = 0.0001$ (a), 0.005 (b), 0.01 (c) 和 0.05 (d), $t = 200000$ MCS 时对应的畴形貌图(256 × 256 格子中 128 × 128 部分) 组分 A 和 B 说明同图1

双连续的畴结构,只是部分结构有沿着 $[1, 1]$ 方向生长的趋势.当增大噪声作用的概率,噪声在体系相分离中的作用越来越明显,噪声作用逐渐在竞争中处于主导地位,使得体系形成取向性很好的畴结构,正如图4(b)和(c)所示.但是当噪声作用概率过大,如图4(d)所示,这时噪声作用过于强烈,噪声作用不但消除了体系深度淬火造成的界面间能垒升高的影响,而且相应地升高了体系的温度,极大地加快分子间扩散运动,体系形成的条状结构虽然变得很大,但遭到明显的破坏,条状畴之间存在大量孤立的小畴块.图5示出相应情况下,体系畴的尺寸 $L(t)$ 随时间 t 的演化曲线.可以看到,畴的尺寸随噪声作用概率的增加而迅速增加,生长因子也变大.当 $p = 0.0001$ 时,畴的生长因子 $n = 0.15$,当 $p = 0.01$ 时,生长因子 $n = 0.26$.图6示出畴的生长因子随高斯噪声作用概率变化的关系曲线.图中表明生长因子随噪声作用概率增大而增大的趋势.在 $p \leq 0.015$ 区域,生长因子随噪声作用概率线性增大,可以由关系式 $n = 0.144 + 11.0p$ 表示.在这个区域,噪声作用与体系热扩散动力学竞争中,噪声作用由弱势变为主导作用,既促进了畴的生长,又产生了取向性良好的条状畴结构.在 $0.015 \leq p \leq 0.03$ 区域,生长因子变化很慢,最高达到0.33($p = 0.03$),其间噪声已基本

消除了深度淬火造成的界面能垒升高现象,生长因子接近浅淬火时的值,为 $n = 1/3^{[22]}$. 当噪声作用过大,噪声对条状畴结构起了破坏作用,如图 4(d)所示,这时生长因子不再增大,图中不再示出. 由此可见,合适的高斯噪声作用不但避免畴的冻结,而且能诱导体系形成良好的条状畴结构.

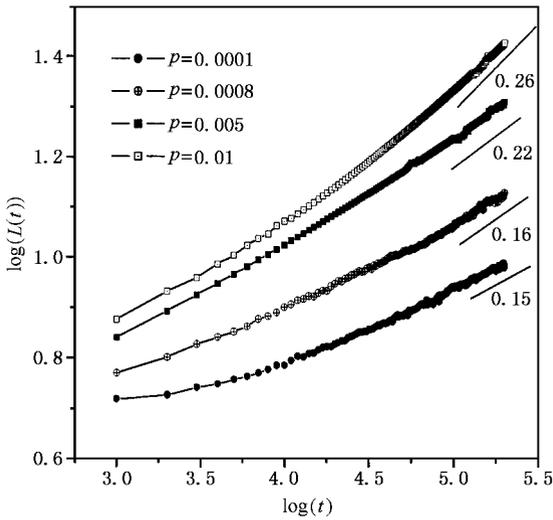


图 5 高斯噪声作用强度量 $h = 20$ 时,对于不同的噪声作用概率 p ,畴的尺寸 $L(t)$ 随时间 t 的双 \log 演化曲线图

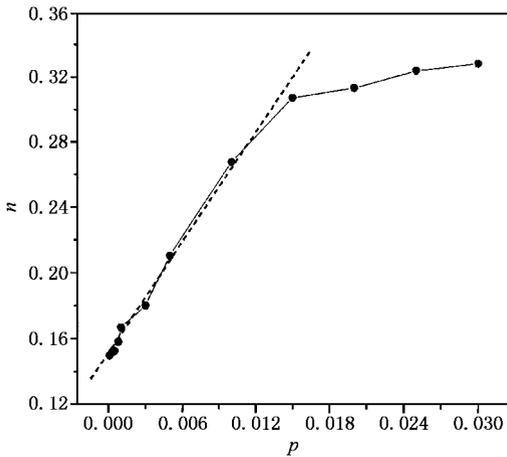


图 6 高斯噪声作用强度量 $h = 20$ 时,体系畴的生长因子 n 随噪声作用概率 p 变化的关系曲线,.....为线性拟合曲线

为了更精确地描述高斯噪声作用对体系相分离形成的条状畴结构的影响,采用畴的取向度这一概念^[23]. 取向度 $SO = (n_l - n_h) / (n_l + n_h)$, 其中 n_l 为分子 4 个次近邻中同种分子的个数,而 n_h 为分子 4 个次近邻中不同种分子的个数. SO 越大,说明体系形成取向性越好地沿着对角方向的条状结构. 图 7 示出高斯噪声场作用概率与体系畴结构取向度关系的曲线. 我们发现,随噪声作用概率的增加,畴的取向度增加很快,体系相分离形成畴取向性越来越好,当噪声作用概率 p 等于 0.008 时, $SO = 0.81$,以后直到 $p = 0.03$ 畴的取向度变化很小. 在这个区域,条状畴结构取向性最佳. 若 p 大于 0.03,则噪声作用太强,这时体系不会形成取向性很好的条状畴结构.

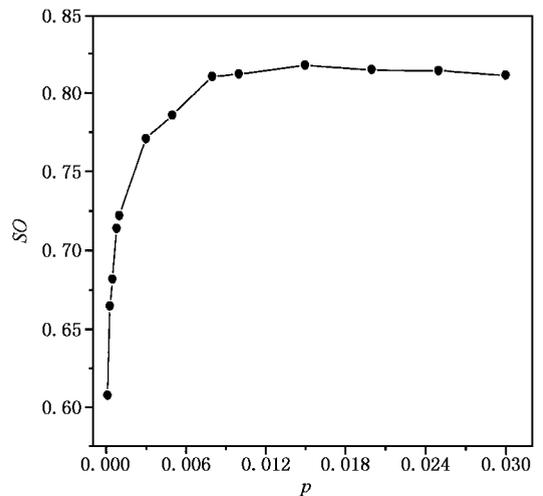


图 7 高斯噪声作用强度量 $h = 20$ 时,体系畴的取向度 SO 随噪声作用概率 p 的变化曲线

4. 结 论

外高斯噪声场的引入能够导致体系畴的快速生长,高斯噪声场与体系热扩散动力学之间的竞争促使体系形成条状的畴结构. 当噪声强度一定,噪声作用概率小于 $p = 0.015$ 时,体系畴的生长因子随噪声作用概率呈线性增大关系. 存在一个最佳的噪声作用概率区,其间体系能形成取向性好的条状畴结构.

[1] Hou Z, Yang L, Zuo X and Xin H 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2854
 [2] Becker A and Kramer L 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 955

[3] Shinbrot T and Muzzio F J 2001 *Nature* **410** 251
 [4] Vilar J M G and Rubi J M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2886

- [5] Xie C W and Mei D C 2003 *Chin. Phys.* **12** 1208
- [6] Zhu H J , Li R and Wen X D 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2404 (in Chinese) [祝恒江、李 蓉、温孝东 2003 *物理学报* **52** 2404]
- [7] Li J H , Huang Z Q and Wang C Y 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 382 (in Chinese) [李静辉、黄祖洽、王存玉 1998 *物理学报* **47** 382]
- [8] Graham M D 1994 *Science* **246** 80
- [9] Kondo S and Asal R A 1995 *Nature* **376** 765
- [10] Kadar S , Wang J and Showalter K 1998 *Nature* **391** 770
- [11] Adams M , Dogic Z , Keller S L and Fraden S 1998 *Nature* **393** 349
- [12] Komura S , Fukuda J I and Paquette G C 1996 *Phys. Rev. E* **53** 5588
- [13] Taneike T and Shiwa Y 1997 *J. Phys. : Condens. Matter* **9** L147
- [14] Ren S R and Hamley I W 2001 *Phys. Rev. E* **63** 41503-1
- [15] Ren S R and Hamley I W 2001 *Macromolecules* **34** 116
- [16] Zhu Y J and Ma Y Q 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 9023
- [17] Bubder K and Frish H L 1990 *Z. Phys. B* **84** 403
- [18] Hashimoto T , Takenaka M and Izumitani T 1992 *J. Chem. Phys.* **97** 679
- [19] Cong Q T and Harada A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 1162
- [20] Liu J W and Ma Y Q 2000 *Phys. Rev. B* **63** 24101
- [21] Roland C and Grant M 1989 *Phys. Rev. B* **39** 11971
- [22] Gaulin B D and Spooner S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **B 39** 668
- [23] Booth I , Macisaac A B and Whitehead J P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 950

The driven-effect of external fluctuation on phase separation of binary mixtures *

Feng Wen-Qiang¹⁾ Zhu Yue-Jin^{1,2)}

¹⁾(Department of Physics , Ningbo University , Ningbo 315211 , China)

²⁾(State Key Laboratory of Solid State Microstructures , Nanjing University , Nanjing 210093 , China)

(Received 14 January 2004 ; revised manuscript received 12 March 2004)

Abstract

Using the Monte Carlo method , we have investigated the effect of the external noise on the phase-separation dynamics in binary mixtures . It is found that the addition of the fluctuation has speeded up the pattern growth , and driven the system to form [1 , 1] oriented tilted strip formation . When the noise intensity is fixed and the noise acting probability is less than $p = 0.015$, the noise will erase the effect of the deep quench , and the system will avoid being frozen . With the increase of the noise acting probability , the structure factor will grow linearly . If the noise intensity is adequate , in an appropriate noise acting probability region , the system can form a high-oriented tilted strip pattern .

Keywords : Gauss noise , binary mixtures , phase separation

PACC : 0540 , 0565 , 6140K

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10347132) , the Natural Science Foundation of Zhejiang Province , China (Grant No. M103015) , and the Foundation for Young Researchers of Ningbo , China (Grant No. 2003A62007) .