

噪声对均质形核过程影响的晶体相场法研究*

郭耀麟 王锦程[†] 王志军 唐赛 周尧和

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2011年11月25日收到; 2011年12月23日收到修改稿)

采用晶体相场模型, 模拟了有色噪声诱发的均质形核过程. 结果表明, 噪声强度在一定范围内对系统平衡热力学参量、形核势垒、临界晶核尺寸影响甚微; 而对形核孕育时间影响较大, 形核孕育时间随噪声强度的增大呈指数减小趋势. 进一步分析表明, 噪声对形核孕育时间的影响主要是由于噪声的引入改变了原子动力学系数.

关键词: 晶体相场模型, 均质形核, 噪声

PACS: 64.60.qe, 64.70.-p, 05.40.-a, 31.70.-f

1 引言

形核是一级相变的起始, 对后续的相变过程以及微观组织的演化具有重要影响. 多年来人们对形核过程进行了广泛研究. 经典形核理论自 Volmer 和 Weber^[1] 在 20 世纪 20 年代提出以来, 得到广泛的应用、追随之及扩展^[2-4]. 然而, 由于形核发生在原子尺度, 且从原子扩散到晶核孕育跨越很大的时间尺度, 完全认识形核过程目前仍面临重大挑战. 除实验研究及理论研究外, 近年来随着计算技术的飞速发展, 越来越多的数值模型也被应用于形核过程的研究, 如分子动力学^[5-9]、蒙特卡罗^[10-12]、相场模型 (PFM)^[13,14]、密度泛函理论 (DFT)^[6,15] 等. 但传统的这些研究方法很难兼顾形核过程的空间尺度和时间尺度. 新近提出的晶体相场 (phase field crystal, PFC) 模型^[16-18] 是一种简化的经典密度泛函理论, 能够同时反映原子空间尺度和扩散时间尺度上的现象, 已成功模拟了晶界迁移^[19]、调幅分解^[20]、晶体生长^[21] 等现象. 不仅如此, 晶体相场模型在尺度上的优势也使它成为研究形核问题的新工具^[22-25].

均质形核的触发条件是亚稳液相中存在的各种起伏, 这对应于物理模型中的噪声, 噪声对

形核过程的影响始终吸引着科学家的注意. Valls 和 Mazenko^[26] 用含噪声的 Ginzburg-Landau 模型研究了以磁化率为序参量的形核过程, 发现形核激活能与噪声强度弱相关, 但他们对形核初期的孕育过程未给予关注. Castro^[13] 基于相场模拟发现随着外加噪声相关长度的增大, 形核机制会从均质形核转化为非均质形核, 但该研究未能反映原子层面的信息. Emmerich 等^[22] 基于在 PFC 模型中施加白噪声的方式, 研究发现二维系统中噪声强度的增加会改变晶粒分布、增加形核率, 但由于所施加的白噪声中含有波长小于原子间距的部分, 这与实际物理过程不相符. Gránásy 等^[23-25] 在滤掉白噪声中频率过高的部分后, 得到空间相关的有色噪声, 基于 PFC 模型研究了二维晶体的形核路径, 发现在足够大的驱动力下会先形成非晶进而发生晶化, 但他们只对演化形态进行了研究, 并未对形核过程中的孕育时间等进行关注.

均质形核过程有两个重要的时空特征: 孕育时间和临界晶核尺寸. 前者是扩散时间尺度上的, 后者是原子空间尺度上的. 临界晶核尺寸表征形核热力学方面的影响, 孕育时间则主要体现形核动力学方面的变化. 研究噪声对这两大特征的影响, 可很好地探讨噪声在均质形核过程中起到的作用, 进而更加深入地理解均质形核过程. 本文将采用含空间

* 国家自然科学基金 (批准号: 51071128, 51101124) 和国家重点基础研究计划 (批准号: 2011CB610401) 资助的课题.

[†] E-mail: jchwang@nwpu.edu.cn

相关噪声的晶体相场模型, 在二维系统中研究噪声对系统平衡热力学和均质形核初期的孕育时间产生的影响, 进而深入理解噪声是如何触发形核的.

2 晶体相场模型

本文采用 Elder 和 Grant^[17] 提出的纯物质晶体相场模型, 密度泛函为 Swift-Hohenberg 型^[27]:

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{x} \left\{ \frac{\psi}{2} [-r + (\nabla^2 + q_0^2)^2] \psi + \psi^4 \right\}, \quad (1)$$

其中 \mathbf{x} 为无量纲的空间位置向量, ψ 代表原子数密度的相对变化, r 表征与温度相关的物理量, q_0 为与点阵常数 a 呈反比的波数, $q_0 = 2\pi/a$. 系统演化过程可由 ψ 的时间演化方程^[22] 所描述:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} = & \nabla^2((-r + 1)\psi + (2\nabla^2 + \nabla^4)\psi + \psi^3) \\ & + \left(\frac{\alpha}{\Delta x^d \Delta t} \right)^{1/2} \eta(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (2)$$

其中 d 为空间维数, Δx , Δt 分别为空间步长和时间步长. η 为离散化的保守有色噪声^[28], 其协方差满足^[29]:

$$\begin{aligned} \langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle \\ = -\alpha \nabla^2 g(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \lambda) \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (3)$$

其中 α 为噪声强度,

$$\begin{aligned} g(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \lambda) \\ = (\lambda \sqrt{2\pi})^{-d} \exp(-|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2 / (2\lambda^2)) \end{aligned} \quad (4)$$

是高斯分布的空间相关函数, λ 为相关函数的宽度, 可视为特征相关长度. 当两点距离大于 λ 时, 两点几乎不相关, 本文中取 $\lambda = a$. 这样构造噪声可滤掉白噪声中波长小于原子间距的非物理波, 使噪声的引入更为合理^[25].

本文采用算子分离半隐谱方法^[23] 求解晶体相场控制方程, 具体模拟参数为: $q_0 = 1$, $r = 0.3$, $\Delta x = \pi/4$, $\Delta t = 0.5$, 计算区域为 $512\Delta x \times 512\Delta x$, 液固相平衡密度分别为: $p_L^{\text{eq}} = 0.3759$, $p_S^{\text{eq}} = 0.3118$. 文中除特别说明外, 初始液相密度均设为 $p_0 = 0.315$. 考虑到噪声的随机性, 系统将在相同条件下演化 10—20 次以减小误差, 并获得相应的误差限.

3 结果与讨论

3.1 噪声对系统热力学参数的影响

噪声在形核过程中的作用主要是提供起伏, 相当于初始液相中的内在涨落, 因此, 噪声的引入不应该改变系统的热力学状态. 本文首先检验系统的平衡热力学参数与引入噪声之间的关系, 以确定模拟结果的合理性. 为模拟单一核心形核, 只在模拟区域中心很小的一个区域内施加噪声, 初始平均密度 $p_0 = 0.34$. 为表征系统平衡态并提取相关参数, 初始条件设置如下: 在计算区域中心对称放置固相, 其余为液相, 整体呈三明治状. 让系统弛豫足够长时间 (此处弛豫时间 $t = 1 \times 10^6 \Delta t$) 使得系统能量基本不变, 经过对局部平均化处理之后, 可得到平滑的固相/液相自由能图像. 为减小取值的随机性, 随机取至少 20 个点, 得到平均值和近似误差限, 进而求得相对于无噪声时的数值的相对误差, 其中, 固/液自由能密度可从自由能图像中直接取点得到, 而线自由能密度可由文献 [30] 中的公式 (50) 计算得到. 表 1 给出了不同噪声强度下系统固/液共存的平衡状态参数, 包括固/液自由能密度 $g_{S/L}^{\text{eq}}$, 线自由能密度 $\gamma_{S/L}^{\text{eq}}$ 和固/液自由能密度差, 以及它们在有噪声时相对于无噪声时的误差.

由表 1 可以看出, 在一定的噪声强度范围内, 噪声的引入对系统热力学参量影响很小. 即使在噪声强度为 1×10^{-3} 时, 固/液自由能密度差相对于无噪声情况下的相对误差也仅为 1.3%, 线自由能密度的相对误差为 4.8%. 这表明在噪声强度较小的情况下, 噪声对系统的热力学的影响很小, 这为后续研究中噪声强度的合理取值奠定了基础.

3.2 噪声对形核过程的影响

虽然强度在一定范围内的噪声对形核体系的热力学特征无显著影响, 但是噪声在相变的起始 - 形核过程中却扮演着重要作用. 图 1 给出了不同噪声强度条件下形核过程中体系自由能随时间的变化情况. 图中的自由能曲线是通过不同演化时间下对计算区域内每个点的自由能进行求和得到. 由图 1 可见, 在初始阶段相当长的一段时间内, 液相自由能基本保持不变, 表明此时体系中还未产生有效亚稳核心. 经历相当长的一段演化时间后, 自由能曲线缓慢上升, 达到最高点后迅速降低. 图 1 中自由能从 A 点附近开始升高, 表明亚稳核心开始形

成, 这是持续噪声在体系中导致原子聚集的结果, 通过图 2(a) 的密度振幅图像可以发现这一点: 在自由能升高的起始点 A 或 a 附近, 高振幅的密度波集中出现, 且波峰间距与原子间距相当, 这可视为原子的聚集过程. 原子聚集成亚稳核心, 这为后来临界晶核的形成提供了结构基础. 自由能的下降则意味着生长过程的开始, 自由能的最

高位置对应于临界晶核的形成. 图 1 中两幅插图给出了不同噪声强度下的两种临界晶核形态, 图 2(b) 则给出了临界晶核的密度振幅. 容易发现, 两者的形态相近, 除了在界面处的原子稍有不同外, 尺寸变化较小, 这从一定程度上说明了噪声强度在一定范围内对临界晶核形态和大小影响很小.

表 1 不同噪声强度下系统平衡状态的变化情况

噪声强度	固相平衡自由能密度	液相平衡自由能密度	固液平衡自由能密度差	线自由能密度	固液自由能密度误差/%	线自由能密度误差/%
α	g_S^{eq}	g_L^{eq}	$g_L^{eq} - g_S^{eq}$	γ^{eq}		
0	0.03624±0.0000084	0.05505±0.000038	0.01881±0.000041	8.85×10^{-3}		
1×10^{-5}	0.03623±0.000016	0.05506±0.000029	0.01883±0.000042	0.008820±0.000022	0.55	-0.62
1×10^{-4}	0.03627±0.000016	0.05504±0.000028	0.01877±0.000034	0.008735±0.000035	0.19	-1.7
1×10^{-3}	0.03619±0.00014	0.05501±0.00018	0.01882±0.00019	0.008686±0.00026	1.3	-4.8

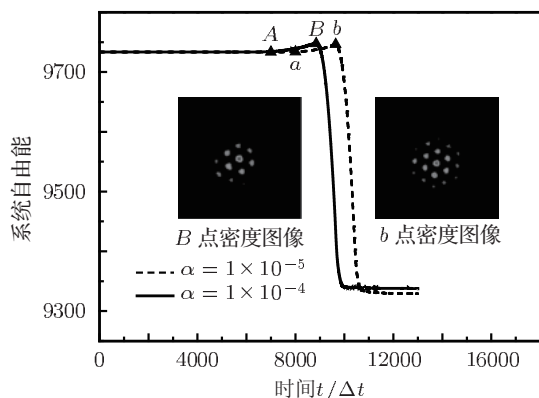


图 1 不同噪声强度下系统自由能的演化曲线

在晶体相场模型中, 固相和液相都是由一系列具有一定振幅和周期的密度波来表征 [24]. 在无噪声条件下, 固、液相的区别在于, 固相的平衡振幅是一个有限非零值, 而液相的平衡振幅则为零. 因此, 噪声的振幅相对于固相密度波的振幅来说是个很小的量, 噪声的引入对固相影响不明显; 而对振幅为零的初始液相来说则是个很大的量, 噪声的引入是给初始液相一定涨落, 噪声强度越大, 涨落越明显. 形核初始阶段系统内密度起伏的波长基本呈无规则分布, 且随着时间的推移, 密度波振幅越来越大. 图 2(a) 显示的是形成亚稳核心前的密度振幅图像, 可以看出, 此时体系内密度波波长已趋于

一致, 且波长接近稳定晶体结构的原子间距.

液相密度振幅从小变大, 密度波长变为原子间距大小, 这样一个过程可认为是原子亚稳核心逐渐形成并聚集的过程, 但是密度振幅还未达到稳态振幅的值, 所以此时的原子亚稳核心只是亚稳态的. 在某一区域内集中出现上述亚稳态原子 - 高振幅密度波, 也即液相中出现了短程有序, 正是这种短程有序成为形核的结构基础 - 结构起伏; 同时, 结构起伏会导致系统自由能出现能量起伏. 因此, 噪声为均质形核过程提供结构起伏和能量起伏, 噪声的存在是均质形核的前提.

随着液相中有序结构的聚集, 亚稳核心就会出现, 如图 2(a) 所示, 此时亚稳核心的有序结构已经很明显, 且已达到一定尺寸. 伴随着亚稳核心的出现, 晶粒和液相的界面开始形成. 虽周期相的形成会降低系统自由能, 但界面的产生会提高自由能, 且此时亚稳核心很小, 界面能相对较高, 周期相形成所导致的自由能降低不足以弥补界面能升高的部分, 故此时系统自由能会升高, 如图 1 中的 A 点和 a 点, 这一点与经典形核理论相一致. 亚稳核心的持续聚集和振幅的持续增大最终导致临界晶核的形成, 如图 2(b) 所示, 临界晶核一旦形成, 固液转变所导致的自由能降低将远大于界面能的增加, 因此临界晶核的进一步长大会使自由能急剧

下降.

上述分析表明, 噪声在形核中起到的作用主要体现在形核孕育期内, 当有稳定固相存在时, 噪声产生的影响不明显. 噪声强度越大, 初始液相的密度振幅就越大, 形成亚稳核心所需振幅的时间就越短, 这样就可缩短形成临界晶核的时间, 即形核孕育时间. 图 3(a) 给出了孕育时间随噪声的变化曲线, 可以看出, 随着噪声强度的减小, 孕育时间近似呈指数增加. 当噪声强度足够小时, 孕育时间无限长, 形核过程不可能发生.

临界晶核是形核过程中的另一个重要特征. 经典形核理论中, 临界晶核中原子数目 n^* 是界面能

和固/液自由能密度差的函数^[31]. 由于噪声对系统的热力学性质影响非常小, 噪声对临界晶核尺寸的影响也应十分有限. 图 1 中的插图给出不同噪声强度下临界晶核的密度场, 可以发现它们的尺寸相差不大, 这就说明噪声强度对临界晶核仅有微弱影响, 这与经典形核理论相符. 图 3(b) 给出形核势垒随噪声强度的变化 (形核势垒定义为单个原子形核过程中自由能最大值与未形核时的初始值之间的差值). 从图中可见, 形核势垒随噪声强度的增加仅有微弱的变化, 因此相对于噪声强度对孕育时间的影响, 噪声强度对临界晶核尺寸及形核势垒^[19] 的影响均较小.

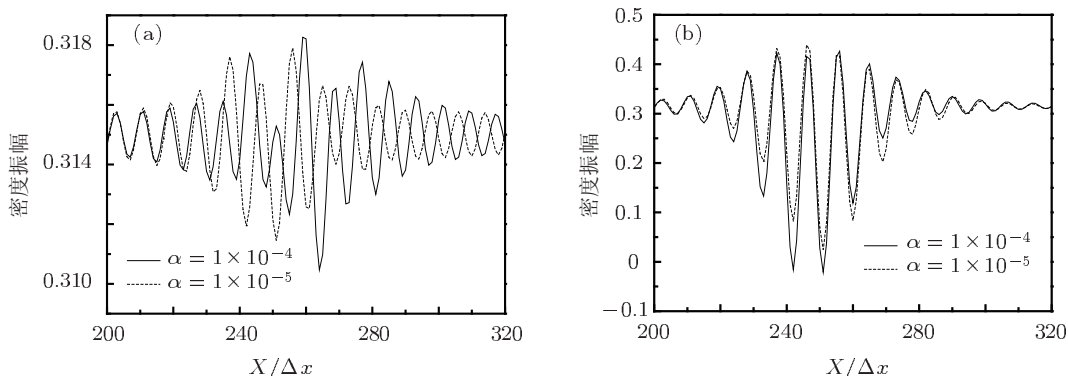


图 2 不同噪声强度下系统局部的密度振幅变化曲线 (a) 图 1 中亚稳核心开始形成时 A 点和 a 点处的密度振幅; (b) 临界晶核形成时 B 和 b 点处的密度振幅

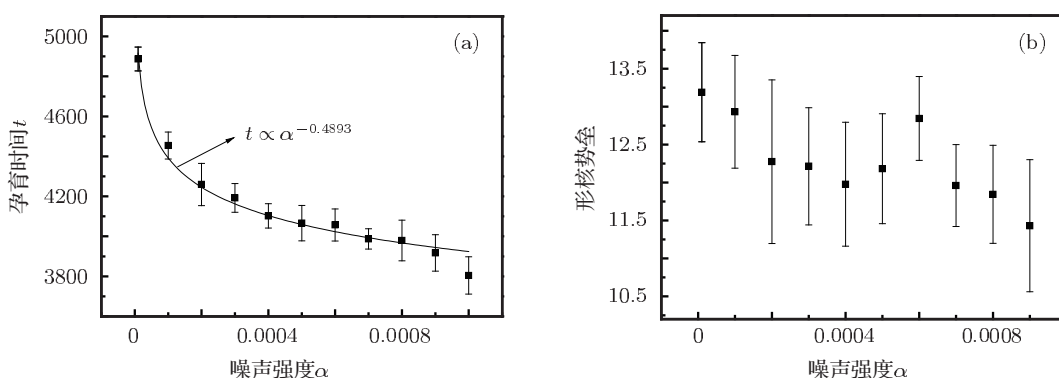


图 3 (a) 孕育时间随着噪声强度的变化及拟合结果; (b) 形核势垒与噪声强度的关系

3.3 噪声强度与形核动力学的关联

噪声对形核过程的影响表明, 噪声与形核的热力学状态关系较小, 但噪声明显改变形核孕育时间, 后者与形核动力学关系紧密. 下面将进一步考察噪声与形核动力学的关系. 在经典含时形核理论中, 原子在亚稳核心上的吸附与脱落是形核动力学过

程的集中体现, 这个过程可用如下公式表示^[31]:

$$\begin{aligned}
 E_{n-1} + E_1 &\xrightleftharpoons[k^-(n)]{k^+(n-1)} E_n, \\
 E_n + E_1 &\xrightleftharpoons[k^-(n-1)]{k^+(n)} E_{n+1},
 \end{aligned} \tag{5}$$

其中 E_n 表示原子数目为 n 的亚稳核心, E_1 表示单

个原子; $k^{+/-}(n)$ 是亚稳核心 E_n 上吸附/脱落原子的速率. 公式 (5) 的右箭头表示亚稳核心 E_{n-1} 以速率 $k^+(n-1)$ 吸附单个原子变为 E_n 的过程; 左箭头则相反, 表示 E_n 以速率 $k^-(n-1)$ 脱落单个原子的过程. 原子聚集就是吸附速率大于脱落速率时发生的现象. 当形核功不变以及脱落速率较小时, 吸附速率越高, 孕育时间越短. 这一点和噪声起到的作用相同, 所以下面将讨论噪声与吸附速率 $k^+(n)$ 的关系.

$k^+(n)$ 是单位时间内自由原子和亚稳核心之间的碰撞次数与原子附着到亚稳核心上的概率(附着系数)的乘积, 称为原子运动的动力学系数. 根据经典含时形核理论, 形核孕育时间与动力学系数存在如下关系 [32]:

$$t = -\frac{24k_B T n^*}{\pi^2 k^+(n^*) \Delta\mu}, \quad (6)$$

其中 t 为孕育时间, $\Delta\mu$ 是驱动力, T 为绝对温度, k_B 为玻尔兹曼常数. 前文所述, 上式中临界晶核原子数目 n^* 变化较小, T 和 k_B 都为常数, 故可近似认为孕育时间 t 与驱动力 $\Delta\mu$ 和动力学系数 $k^+(n^*)$ 的乘积呈反比关系.

首先考察孕育时间与驱动力之间的关系. 在晶体相场模型中, 相变驱动力由过饱和度 s 表征, $s = (p_L^{eq} - p_0)/(p_L^{eq} - p_S^{eq})$, 故 p_0 的增大对应着驱动力的减小. 为综合考虑噪声强度和驱动力对孕育时间的影响, 图 4 给出了不同噪声强度下孕育时间随初始液相密度 p_0 的变化曲线. 通过测试各种函数发现函数 $t = 1/(B^*(A - p_0))$ (A, B 为拟合参数) 可获得最佳拟合效果. 拟合结果显示, 不同噪声强度下的参数 A 值是恒定的, $A = 0.3163 \pm 0.00006$. 结合 (6) 式及图 4, 有 $(A - p_0) \propto s \propto \Delta\mu$, 所以 $A - p_0$ 代表了驱动力的变化. 因此, A 值并不随噪声强度的变化而变化, 是因为噪声的加入并不改变驱动力的大小, 这与前文相符, 即噪声强度的变化仅改变了系数 B 的大小, 而不改变系数 A 的大小. 图 5 给出了系数 B 随噪声强度的变化曲线, 可以看出噪声的增强会增大系数 B , 拟合结果为 $B \propto \alpha^{0.05139 \pm 0.00265}$. 根据标度律, 可很自然地得到 $t \propto 1/B$. 将这个结果与 (6) 式相比较, 并把 (6) 式中的其他项 (T 和 n^*) 近似视为常数, 不难发现, $A - p_0$ 对应于驱动力 $\Delta\mu$ 的变化, 而 B 则对应了动力学系数 $k^+(n^*)$ 的影响. 换句话说, 噪声之所以改变孕育时间是因为影响了原子的动力学系数.

动力学系数与界面附着率相关, 因此, 噪声的引入可能改变了界面附着条件. 为证实这一推

断, 图 6(a) 给出了平界面前沿的推进距离在不同噪声强度下的演化曲线. 由于此时驱动力小, 界面的生长是扩散控制的 [33], 因此界面推进距离 y 与时间 t 的关系可用 $y = C^* t^{1/2}$ 来表征, 其中 C 是速度系数 [33], 其与界面附着率相关 [34]. 图 6(a) 给出了 $\alpha = 1 \times 10^{-3}$ 的界面迁移情况及 $\alpha = 0, 1 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-3}$ 时的拟合曲线, 可以看出拟合结果符合良好, 且不同噪声强度下的界面推进过程区别较小. 图 6(b) 给出了系数 C 随噪声强度的变化曲线, 可以看出, 噪声强度在一定范围内时, 系数 C 随噪声强度的增大而增大, 这说明噪声强度的增大改变了界面的附着条件. 值得指出的是, 尽管噪声会对生长过程产生一定的影响, 但从图 6(a) 可以看出不同噪声强度下的界面迁移过程相差较小, 这说明噪声在生长阶段产生的影响不明显. 从另一个角度分析, 在形核阶段, 形核势垒很高, 原子不易越过势垒, 经过长时间的演化, 噪声的作用得以累加, 故噪声在形核初期的影响显著; 而在晶核稳定生长时, 生长势垒很小, 原子很容易越过势垒, 噪声在生长阶段产生的影响相对于形核期比较不明显.

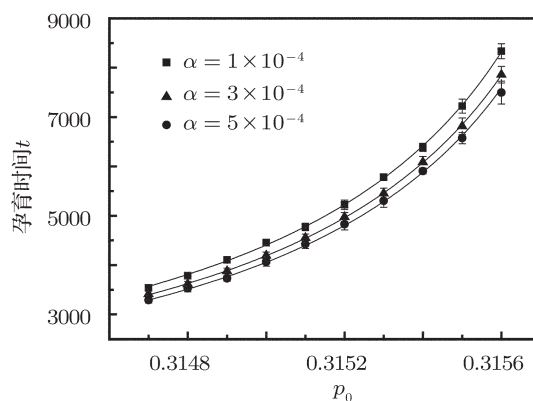


图 4 不同噪声强度下孕育时间随初始液相密度 p_0 的变化

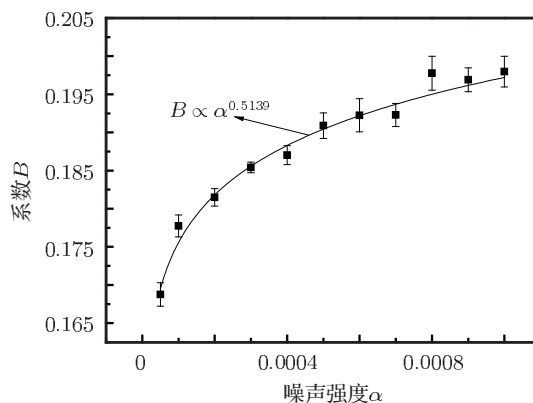
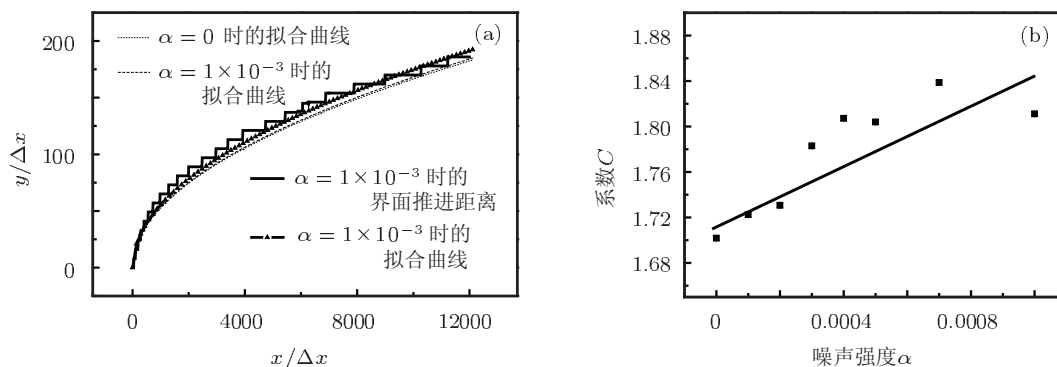


图 5 不同噪声强度下系数 B 的变化

图6 (a) 平界面前沿的移动距离与时间的关系; (b) 不同噪声强度下的 C 值

综上所述,形核孕育时间随噪声强度的增大而减小,是因为噪声的引入改变了界面的附着率,这个系数与形核过程中的原子动力学系数密切相关,所以噪声将对形核动力学产生影响.模拟中发现孕育时间与原子的动力学系数呈反比关系,这一点与经典含时形核理论相符.

4 结论

采用含噪声的晶体相场模型,模拟了噪声诱

发的均质形核过程.结果表明,噪声强度在一定范围内对系统平衡热力学性质(固/液自由能密度、固/液线自由能密度等)影响较小.噪声强度越大,孕育时间越短;驱动力越大,孕育时间也越短.将模拟结果与经典形核理论对比,发现噪声强度实际上对动力学系数影响较大,而对驱动力影响相对较小,这也从侧面说明了界面速度系数 C 与动力学系数之间可能存在关联.

- [1] Volmer M, Weber A 1926 *Z. Physik. Chem.* **119** 277
- [2] Farkas L 1927 *Z. Physik. Chem.* **125** 236
- [3] Becker R, Döring W 1935 *Ann. Phys.* **416** 719
- [4] Turnbull D, Fisher J C 1949 *J. Chem. Phys.* **17** 71
- [5] Kalikmanov V I, Dongen M E H 1993 *Europhys. Lett.* **21** 645
- [6] Ruckenstein E, Djikaev Y S 2005 *Adv. Colloid Interface Sci.* **118** 51
- [7] Liu J, Zhao J Z, Hu Z Q 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 031903
- [8] Liu H R, Liu R S, Zhang A L, Hou Z Y, Wang X, Tian Z A 2007 *Chin. Phys.* **16** 3747
- [9] Wu Z M, Wang X Q, Yang Y Y 2007 *Chin. Phys.* **16** 405
- [10] Wilson W D, Baskes M I, Bisson C L 1976 *Phys. Rev. B* **13** 2470
- [11] DeVita J P, Sander L M, Smereka P 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205421
- [12] Hurtado P I, Marro J, Garrido P L 2006 *Phys. Rev. E* **74** 050101
- [13] Castro M 2003 *Phys. Rev. B* **67** 035412
- [14] Iwamatsu M 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 084504
- [15] Oxtoby D W 1992 *J. Phys.: Condens. Matter* **4** 7627
- [16] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
- [17] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051605
- [18] Elder K R, Provatas N, Berry J, Stefanovic P, Grant M 2007 *Phys. Rev. B* **75** 064107
- [19] Ren X, Wang J C, Yang Y J, Yang G C 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3595 (in Chinese) [任秀, 王锦程, 杨玉娟, 杨根仓 2010 物理学报 **59** 3595]
- [20] Zhang Q, Wang J C, Zhang Y C, Yang G C 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 088104 (in Chinese) [张琪, 王锦程, 张亚丛, 杨根仓 2010 物理学报 **60** 088104]
- [21] Tang S, Backofen R, Wang J C, Zhou Y H, Voigt A, Yu Y M 2011 *J. Crystal Growth* **334** 146
- [22] Hubert J, Cheng M, Emmerich H 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 464108
- [23] Tegze G, Bansel G, Tóth G I, Pusztai T, Fan Z Y, Gránásy L 2009 *J. Comput. Phys.* **228** 1612
- [24] Tóth G I, Tegze G, Pusztai T, Tóth G, Gránásy L 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 364101
- [25] Gránásy L, Tegze G, Tóth G I, Pusztai T 2010 *Phil. Mag.* **91** 123
- [26] Valls O T, Mazenko G F 1990 *Phys. Rev. B* **42** 6614
- [27] Swift J, Hohenberg P C 1977 *Phys. Rev. A* **15** 319
- [28] Karma A, Rappel W J 1999 *Phys. Rev. E* **60** 3614
- [29] Tegze G, Toth G I, Granasy L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 195502
- [30] Wu K A, Karma A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 184107
- [31] Kelton K F, Greer A L 2010 *Nucleation in Condensed Matter: Applications in Materials and Biology* (1st Ed.) (Amsterdam: Pergamon) pp19–83
- [32] Kashchiev D 1969 *Sur. Sci.* **14** 209
- [33] Tegze G, Gránásy L, Tóth G I, Podmaniczky F, Jaatinen A, Ala T, Pusztai T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 035702
- [34] Löwen H, Bechhoefer J, Tuckerman L S 1992 *Phys. Rev. A* **45** 2399

Phase field crystal model for the effect of colored noise on homogeneous nucleation*

Guo Yao-Lin Wang Jin-Cheng[†] Wang Zhi-Jun Tang Sai Zhou Yao-He

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 25 November 2011; revised manuscript received 23 December 2011)

Abstract

Homogeneous nucleation process induced by the colored noise is simulated by the phase field crystal method. The results indicate that the noise strength within a certain range almost has no influence on the parameters of equilibrium thermodynamics of the nucleation system, such as nucleation energy barrier and size of critical nucleus; however, it will strongly affect the dynamics of the system. The incubation time of nucleation decreases exponentially with the increase of the noise strength. Further analysis shows that this is attributed to the fact that the colored noise can affect the atom mobility in the nucleation process.

Keywords: phase field crystal model, homogeneous nucleation, colored noise

PACS: 64.60.qe, 64.70.-p, 05.40.-a, 31.70.-f

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51071128, 51101124) and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610401).

[†] E-mail: jchwang@nwpu.edu.cn