

小体积比两相分离早期过程的三维格子气模型研究*

郑晖^{1)†} 张崇宏²⁾ 孙博¹⁾ 杨义涛²⁾ 白彬³⁾ 宋银²⁾ 赖新春³⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2) (中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

3) (中国工程物理研究院表面物理与化学重点实验室, 绵阳 621907)

(2012年11月9日收到; 2013年4月12日收到修改稿)

采用 Monte Carlo 模拟方法研究了小体积比三维格子气模型中的相分离过程, 比较了 sc, fcc, bcc 等 3 种晶格类型和 $T/T_c = 0.45-0.85$ 等 5 个相对温度的系统演化行为, 计算了系统的结构因子函数, 发现结构因子在相分离早期不满足标度关系, 生长指数等于 $1/6$, 小于经典 Lifshitz-Slyozov 理论的值.

关键词: 格子气模型, 相分离过程, Monte Carlo 模拟, 生长律

PACS: 64.75.Gh, 64.60.qe, 64.75.Op

DOI: 10.7498/aps.62.156401

1 引言

两种不相溶的物质成分均匀混合在一起, 将处于热力学非平衡态, 并经历复杂的相分离过程. 当两相体积相差较大时, 相分离过程表现为少数相颗粒生长的形式. 相分离现象吸引了实验与理论研究者的广泛兴趣^[1-9].

由粒子扩散驱动的相分离过程的经典理论是 Lifshitz-Slyozov 理论^[1]. L-S 理论假设团簇生长满足标度律, 团簇尺寸分布经过尺度变换后具有不变的形式; 团簇平均尺寸随时间的变化满足幂函数关系, 即 $\langle R \rangle \propto t^\alpha$, 且生长指数 $\alpha = 1/3$. 该生长律已被大量实验与数值模拟证实^[9-15]. 不过人们也发现了其他生长指数, 如 $\alpha = 1/6$ ^[2,6], $1/5$ ^[16], $1/4$ ^[17,18] 等. 目前较统一的认识是, 由粒子扩散驱动的两相分离过程, 经过长时间演化, 最终会达到其最快生长律 -L-S 律 ($\alpha = 1/3$)^[19], 而相分离早期动力学可遵循其他生长律形式.

相分离早期动力学非常复杂, 尽管实验与理论工作都发现了不同系统在不同条件下的生长律形式, 但和形成系统、完整的理论认识还有不小的差

距, 进一步开展实验和理论研究很有必要. 在微观模型上开展数值模拟, 所需理论假设少, 更接近实际物理系统, 因而一直是研究相分离过程的重要方法^[4,9,20]. 对于粒子扩散驱动的相分离动力学研究而言, 基于 Ising 模型或其等价形式格子气模型的蒙特卡罗模拟又是常用的研究手段. 尽管人们对 Ising 模型和格子气模型已开展过大量研究, 但对其复杂的早期动力学的认识仍然是很有限的.

本文选择三维格子气模型开展研究, 关注少数相体积比很低的情况. 选取少数相体积比 $c = 0.01$. 低体积比的情况很有实际意义, 但以往数值模拟却很少涉及, 其原因主要有两点, 一是经典的 L-S 理论是在体积比 $c \rightarrow 0$ 的极限下得到的^[1], 因此人们倾向于认为 L-S 理论能很好描述小体积比情况; 二是三维模型小体积比相分离过程模拟给计算能力带来很大挑战, 因为一方面模拟很低粒子浓度的团簇成核与生长要求系统规模更大, 另一方面系统演化形成一定尺寸团簇所需的时间大大延长, 以前的计算能力难以承受. 现在, 随着计算机性能的增强, 为开展这样的研究提供了条件. 在本文中, 使用了自主研发的蒙特卡罗模拟程序^[21,22], 采用

* 国家自然科学基金 (批准号: 10575124)、国家磁约束聚变研究计划专项 (批准号: 2011GB108003)、中国工程物理研究院科技发展基金 (批准号: 2009A0301019, 9090902) 和中子物理学重点实验室基金 (批准号: 2012AB02) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zheng_hui@iapcm.ac.cn

MPI 方式并行, 在并行计算机上完成, 使用了 125 个处理器.

温度和晶格类型是影响相分离动力学的 2 个重要因素. 以往的研究对温度的影响关注较多, 而对晶格类型的影响关注很少, 一般仅考虑简单立方 (sc) 晶格. 然而在团簇尺寸只有几个晶格常数的相分离早期, 晶格类型的影响不可忽视, 因此在研究中重点关注了晶格类型对相分离的影响, 分别在简单立方 (sc), 面心立方 (fcc), 体心立方 (bcc) 等 3 种晶格上开展了模拟计算. 由于相分离仅在凝聚相变温度 T_c 以下发生, 针对每种晶格类型在 $T/T_c = 0.45—0.85$ 等 5 个相对温度下开展了模拟计算.

主要通过计算系统结构因子随时间的变化来表征系统结构的演化. 标度理论假设相分离动力学满足标度关系, 反映在结构因子上, 可表示为^[8]

$$S(k, t) = \tilde{S}(k/k_c(t))k_c^{-d}(t), \quad (1)$$

式中 S 为结构因子函数, \tilde{S} 为标度函数, k 为波矢, t 为时间, k_c 为特征波矢, d 为空间维数. 本文对系统是否满足这一标度性质也进行了考察.

2 模型与方法

2.1 格子气模型

模型的哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} n_i n_j, \quad (2)$$

其中 J 为近邻粒子间的结合能, n_i 为格点 i 上的粒子占据数, 取值 0 或 1. 晶格上总粒子数守恒, 即满足

$$\sum_i n_i = cN_{\text{latt}}, \quad (3)$$

c 为少数相体积比 (即模型中的粒子浓度), N_{latt} 为格点数. 初始粒子位置随机分布, 构型演化通过粒子向相邻格点的扩散迁移来实现, 演化规则用 Metropolis 算法描述, 从旧构型 Ω 到新构型 Ω' 的转移概率等于 1 和 $\exp(-\Delta E/k_B T)$ 中的较小值, 即

$$p(\Omega \rightarrow \Omega') = \min\{1, \exp(-\Delta E/k_B T)\}, \quad (4)$$

式中 ΔE 为新、旧构型的能量差, T 为温度, k_B 为玻尔兹曼常数. 模拟时间单位为蒙特卡罗模拟步 (MCS).

2.2 数值方法

采用蒙特卡罗模拟方法. 系统晶格类型考虑 sc, fcc, bcc 等 3 种. 模型采用周期性边界条件. 由于相分离仅在凝聚相变温度 T_c 以下发生, 针对每种晶格类型在相对温度 $T/T_c = 0.45, 0.55, 0.65, 0.75, 0.85$ 等 5 种情况开展了模拟计算. 晶格格点数 $N_{\text{latt}} \approx 10^6$, 系统中粒子总数 $N_p \approx 10^4$. 对每种情况的最长模拟时间为 5×10^8 MCS.

2.3 物理量

2.3.1 临界温度

系统温度的高低是相对于临界温度 T_c 而言的. 当温度 $T < T_c$ 时, 系统能够从粒子随机分布的初态演化形成大团簇; 而当温度 $T > T_c$ 时, 系统将保持粒子随机分布的初始状态, 不能凝聚形成团簇. 据此来计算临界温度 T_c . 临界温度和系统尺寸 L 有关, 而本文在有限尺寸的系统上开展模拟研究, 因此如不加说明, 将用 T_c^L 代替 T_c 来使用.

由于 T_c^L 的计算不是本文的重点内容, 因此仅列出计算结果与对应的系统尺寸. 模拟系统尺寸: sc 晶格, $L = 100$, 粒子数 $N_p = 10000$; fcc 晶格, $L = 130$, 粒子数 $N_p = 10985$; bcc 晶格, $L = 170$, 粒子数 $N_p = 12283$. 最终确定 $T_{c, \text{sc}}^{N_p=10000} = 0.540 J/k_B$, $T_{c, \text{fcc}}^{N_p=10985} = 1.072 J/k_B$, $T_{c, \text{bcc}}^{N_p=12283} = 0.762 J/k_B$. 近似地有, $T_c^{N_p \approx 10000} \approx 0.09 zJ/k_B$, 其中 z 为晶格原子配位数.

2.3.2 结构因子与特征波矢 k_*

格子气模型的结构因子函数定义为

$$S(\mathbf{k}, t) = \left| \sum_i (n_i - c) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2, \quad (5)$$

式中 \mathbf{k} 为波矢量, \mathbf{r}_i 为格点位置矢量, c 为少数相体积比 (即粒子浓度), n_i 为格点 i 处的粒子数, 如果格点 i 处有粒子占据则 $n_i = 1$, 否则 $n_i = 0$. 由于系统构型满足或近似满足各向同性, 因此计算 $S(\mathbf{k}, t)$ 对空间各方向的平均值 $S(k, t)$.

由于采用周期性边界条件, 相当于有限模拟系统在三维空间中周期性重复排列, 这样将人为地引入 $(2\pi/L, 0, 0)$, $(0, 2\pi/L, 0)$, $(0, 0, 2\pi/L)$ 等小波数的超周期衍射斑点, 而它们在实验观测中并不存在. 为了将这些人为衍射斑点去掉, 将限制小波数的结构因子等于 0, 具体而言, 在 $k \leq 6\pi/L$ 段令

$S(k, t) = 0$, 仅计算 $k > 6\pi/L$ 的结构因子. 这样粒子数守恒等式

$$\frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^\infty S(k, t) k^2 dk = c$$

被破坏 (式中 a 为晶格常数), 对 $S(k, t)$ 乘以适当系数, 使守恒等式仍成立.

特征波矢一般采用结构因子峰值位置 k_m 或一阶矩

$$k_1 \equiv \frac{\int_0^\infty k S(k, t) k^2 dk}{\int_0^\infty S(k, t) k^2 dk},$$

而将 k_m^{-1} 或 k_1^{-1} 作为系统特征长度 [5,6]. 在本文中, 这两种特征波矢的定义都不太适用, 主要原因在于, 粒子浓度低导致团簇形成时间大大延长, 可接受的计算量限制了模拟系统的规模, 结构因子曲线 $S(k, t)$ 数值振荡较大, 导致峰值位置 k_m 和一阶矩波矢 k_1 的计算不准确 [23]. Puri 和 Oono 曾采用更人为的定义形式

$$\langle k \rangle \equiv \frac{\int_0^\infty k S(k, t) dk}{\int_0^\infty S(k, t) dk}$$

作为特征波矢, 以降低大 k 段数值振荡的影响 [23]. 在计算中, 发现 $\langle k \rangle$ 的数值效果也不理想. 最后本文采用一种新的积分方式来定义特征波矢, 记为 k_* , 它可以使等式

$$\int_0^{k_*} S(k, t) k dk = \int_{k_*}^\infty S(k, t) k dk \quad (6)$$

成立. 波矢区间 $[k_i, k_{i+1}]$ 中的函数值采用线性插值得到, 积分定义使得数值振荡的影响基本消除. 积分式中采用 $S(k, t) k dk$ 而不是 $S(k, t) k^2 dk$, 突出了小波数峰值区域的权重, 计算效果更好. 由于特征波矢几种定义的比较不是关注的重点, 因此不作详细介绍.

原则上, 波矢区间 $[k_i, k_{i+1}]$ 宽度 dk 取值越小越能反映曲线的细致变化, 但实际数值上 dk 不能取得太小, 否则波矢区间 $[k_i, k_i + dk]$ 内的数据点太少会导致统计曲线剧烈振荡. 经比较后选取 $dk = 0.05a^{-1}$.

2.3.3 标度律

如果系统演化的主要结构只有一个特征长度, 经过特征长度约化后空间构型相同或相近, 即不同时刻的系统构型具有相似性, 反映在物理量上即满足标度律. 结构因子满足的标度律形式为 (1) 式. 如

果 (1) 式成立, 以 k/k_c 为横坐标, $S(k, t)k_c^3$ 为纵坐标, 则不同时刻的曲线将重合在一起.

标度律是相分离理论的一个常见假设, 一些实验和数值模拟研究考察了这一理论假设, 发现有的成立 [4,5], 有的不成立 [7]. 在相分离研究中检验这一理论假设是否成立很有意义.

3 模拟结果与讨论

3.1 结构因子与生长律

图 1 至图 3 显示了 sc, fcc, bcc 等 3 种晶格类型系统在相对温度 $T/T_c = 0.45$ 的结构因子函数, 波矢大小和晶格常数的乘积 ka 在 0.1 到 2 之间, 图中不同曲线对应于不同的演化时间. 曲线对应的时间为 10^4 MCS, 3×10^4 MCS, 10^5 MCS, 3×10^5 MCS ..., 截止到系统中单个大团簇形成, 最长模拟时间为 3×10^8 MCS. 相邻曲线对应的时间为 3 倍或 10/3 倍的关系.

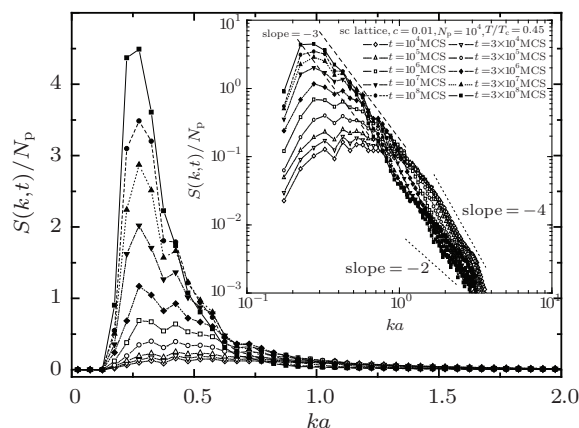


图 1 sc 晶格系统在相对温度 $T/T_c = 0.45$ 的结构因子演化

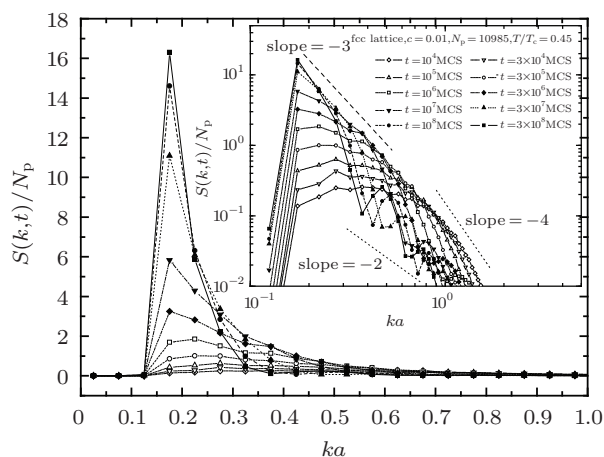


图 2 fcc 晶格系统在相对温度 $T/T_c = 0.45$ 的结构因子演化

从图 1 至图 3 中发现: 随着时间增加, 结构因子的峰值高度 S_{\max} 不断增大, 符合相分离实验观测结果的特点^[5-7]. 在图 4 中画出结构因子峰值高度 S_{\max} 与时间 t 的关系, 可以看到, 在系统达到稳定状态 (即形成一个大团簇而不再演化) 之前, 幂函数关系 $S_{\max} \propto t^{\alpha}$ 成立, 幂指数 $\alpha \approx 1/2$ 不依赖晶格类型和系统温度. 指数 1/2 的物理意义在后面再作分析.

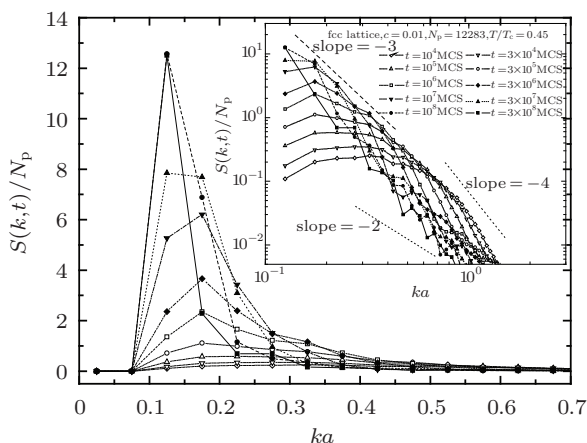


图 3 bcc 晶格系统在相对温度 $T/T_c = 0.45$ 的结构因子演化

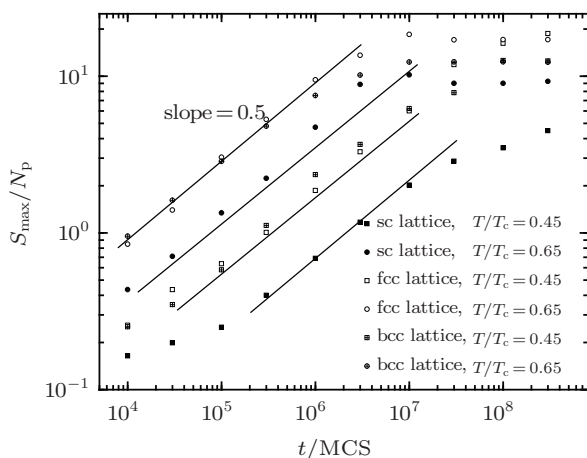


图 4 系统结构因子峰值高度 S_{\max} 随时间 t 的变化

从图 1 和图 3 我们看到, 随着时间增加, 结构因子峰的位置不断减小, 这符合衍射实验的观测结果; 但 fcc 晶格似乎是例外, 图 2 中峰的位置几乎不变, 认为这是由于 fcc 晶格系统的结构因子峰的位置变化较小, 而波矢离散分点间距 dk 有限, 导致不能看到峰的位置在波矢区间 $[k_i, k_{i+1}]$ 之内的变化.

由于结构因子峰位置 k_{\max} 数值上较难准确读取, 采用特征波矢大小 k_* 来反映系统的结构尺寸, k_* 在数值上比波峰位置 k_{\max} 大, 肉眼判断

$k_{\max}/k_* \approx 0.3-0.4$. 图 5 显示了不同晶格系统在不同相对温度下的特征波矢 k_* 随时间 t 的变化, 发现存在较好的幂函数关系 $k_* \propto t^{-\beta}$, 指数 $\beta \approx 1/6$ 不依赖于晶格类型和温度.

系统特征长度 $l \approx k_*^{-1} \propto t^{1/6}$, 指数 1/6 小于 LSW 生长指数 1/3, 也小于表面扩散生长指数 1/4. $l \propto t^{1/6}$, 依赖空间维数的一般形式为 $l \propto t^{1/(d+3)}$, 是一种慢化的生长律, 最早由 Binder 和 Stauffer 给出理论解释^[2]. 物理机理上则被解释为畴壁突起的布朗凝并^[6]. $t^{1/6}$ 生长率在以往的文献中很少报道, 这是因为它仅在相分离早期出现甚至不出现. 对于体积比 $c = 0.01$ 的系统, 在 5×10^8 MCS 的模拟时间内, $l \propto t^{1/6}$ 都是我们观察到的唯一生长律. 这表明, 小体积比使两相分离系统早期慢化动力学的经历时间大大延长了, 并且这不依赖于晶格类型和系统温度.

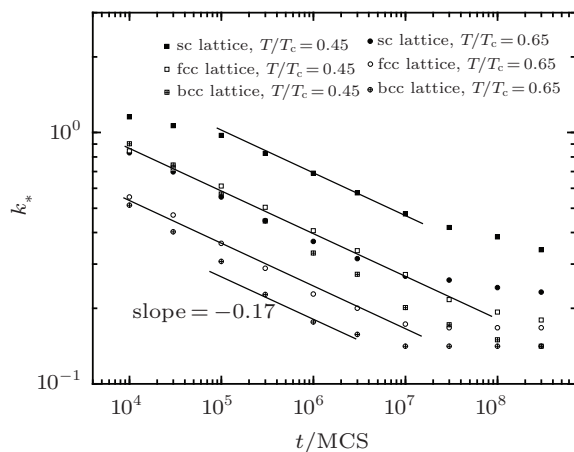


图 5 系统特征波矢大小 k_* 随时间 t 的变化

最后需要指出的是, $l \propto t^{1/6}$ 并非长时生长律, 如果时间足够长, 系统必然会演化为 $t^{1/3}$ 律, 即 L-S 律. 这是由粒子扩散驱动的最大生长指数. 在 $t^{1/3}$ 和 $t^{1/6}$ 之间是否还会出现 $t^{1/5}$, $t^{1/4}$ 等其他过渡生长形式, 目前还不得而知.

从本文的研究中发现, 降低粒子浓度 c 值能延长相分离早期过程经历的时间, 使得能在实验的观测窗口看到早期生长律以及生长律的转化, 希望有这样的实验来检验此想法.

3.2 标度律的检验

本文所关注的另一问题是结构因子随时间演化是否满足标度律, 即 (1) 式是否成立. 为了清晰地

看出 $S(k, t)$ 的变化趋势, 在图 1 至图 3 中以图中图的形式表示双对数坐标下 $S(k, t)$ 随 k 的变化.

图 1 至图 3 中显示的演化时间最长的曲线对应系统中的团簇数量很少, 其结构因子的统计意义基本丧失, 因此不是分析的主要对象. 从图 1 至图 3 的图中图可以清楚看到, 在 $(k/k_*(t), S(k, t)k_*^3(t))$ 表示下, 不同时刻的函数曲线并不重合, 表明系统未进入标度区域.

对于 sc 晶格在温度 $0.45T_c$ (图 1). 我们看到, $t < 10^6$ MCS 时, 结构因子有 3 个峰, 10^5 MCS $< t < 10^6$ MCS 结构因子则有 2 个峰, 而到 $t > 10^7$ MCS 时, 结构因子就只有 1 个峰了. 这表明随着时间增加, 细致结构逐渐消失, 而趋于单个特征尺度的结构形态. 对于 sc 晶格的更高温度, 看到了结构因子从双峰向单峰的演化, 曲线形态与 $0.45T_c$ 时十分类似.

对于 fcc 晶格和 bcc 晶格, 从图 2 和图 3 看, 结构因子并没有出现双峰或多峰结构, 这与 sc 晶格明显不同, 原因有待进一步探索. 不过曲线形态却随着时间增加而改变, 可以清楚看到不同时刻的曲线不能通过平移而重合, 表明系统还没有进入结构相似的演化阶段.

研究发现温度并不会影响结构因子曲线的形态特征, 但不同晶格类型的结构因子曲线形态则明显不同. 对于 fcc 晶格, 结构因子函数在主峰小 k 一侧 $0.1 < ka < 0.2$ 之间有较显著的变化, 而 sc 和 bcc 晶格系统的结构因子在主峰小 k 一侧变化较平缓, 以 bcc 晶格变化最缓. 这种结构因子形态上的差别表明, 在相分离早期, 结构特征尺寸与晶格常数可比时, 晶格类型对相分离结构特征有显著影响. 这方面的研究目前还很缺乏.

3.3 标度律的趋势

从图 1 至图 3 中发现, 结构因子曲线细致结构逐渐消失, 而趋向于较简单的形态, 对于 sc 晶格尤其明显. 如果观察图中图曲线簇的右上缘的外包络线斜率, 发现等于 -3 . 要说明的是, 这是系统在标度区 (结构相似) 的一个性质. 对此作一个简单说明. 如果系统满足标度律, 则 (1) 式成立, 容易看出, $S_{\max} = \tilde{S}_{\max} k_*^{-d}$, $k_{\max} = x_{\max} k_*$, 因此 $S_{\max} = \tilde{S}_{\max} x_{\max}^d k_{\max}^{-d}$, 故而 $S_{\max} \propto k_{\max}^{-d}$, 即在双对数坐标表示下, 结构因子主峰顶点的连线斜率等于 $-d$. 不难证明结构因子曲线簇的外包络线斜率也

等于 $-d$. 图 1 至图 3 的图中图清晰地显示了这一性质 ($d = 3$). 然而此时系统还没有进入标度区, 这表明系统演化已满足标度区的轮廓特征, 有满足标度律的趋势.

从另一事实也可看出上述结论. 在 3.2 节中, 发现 $S_{\max} \propto t^\alpha$, $k_* \propto t^{-\beta}$, 并且 $\alpha \approx 1/2$, $\beta \approx 1/6$, 因此 $\beta = 3\alpha$ 成立. 容易看出 $\beta = d\alpha$ 是标度关系 (1) 式成立的自然推论, 因此本文中系统演化尽管还不满足标度律, 但已满足标度律的一些推论.

3.4 结构因子的大 k 渐近行为

结构因子的形状包含了系统结构的重要信息. Furukawa 曾讨论过结构因子的形状与团簇外形以及团簇间关联的关系^[16], 认为团簇表面光滑时 $G(k, t) \propto k^{-(d+1)}$ (大 k 时), 即 Porod 律; 团簇表面特别纠缠时 $G(k, t) \propto k^{-2d}$ (大 k 时). Langer 等的非线性理论预测 $G(k, t) \propto k^{-2}$ (大 k 时)^[3], 被认为可能出现在相分离早期^[7].

在图 1 至图 3 的图中图双对数坐标表示中, 对比标出了斜率分别等于 -4 和 -2 的直线, 发现结构因子的大 k 渐近行为不是 k^{-2} 和 k^{-6} 形式. 总体而言 Porod 律 $G(k, t) \propto k^{-4}$ 近似成立.

4 结 论

采用 Monte Carlo 方法模拟了小体积比 $c = 0.01$ 的三维格子气模型中的相分离早期过程, 计算了 sc, fcc, bcc 等 3 种晶格类型和相对温度 $T/T_c = 0.45$ — 0.85 的系统结构因子, 发现:

1. 小体积比 ($c=0.01$) 使相分离早期慢化动力学经历的时间大大延长, 在 $t < 5 \times 10^8$ MCS 的模拟时间内, $l \propto t^{1/6}$ 是系统遵循的唯一生长律形式, 不依赖于晶格类型和系统温度, 另外结构因子不满足标度关系 $S(k, t) = \tilde{S}(k/k_*)k_*^{-3}$;

2. 晶格类型对相分离早期演化的结构特征影响显著, 而温度的影响则不明显;

3. 系统结构因子曲线演化的外包络线 $\sim k^{-3}$, 以及 $l \propto t^\alpha$ ($\alpha = 1/6$) 和 $S_{\max} \propto t^\beta$ ($\beta = 1/2$), 显示 $\beta = 3\alpha$ 成立, 这些结果符合标度关系的推论, 表明系统演化趋向于标度律;

4. 结构因子的大 k 渐近行为不满足 Langer 等预测的 k^{-2} 形式, 也不满足 k^{-6} 形式, 而近似满足 Porod 律的 k^{-4} 形式.

- [1] Lifshitz I M, Slyozov V 1961 *J. Phys. Chem. Solids* **19** 35
- [2] Binder K, Stauffer D 1974 *Phys. Rev. Lett.* **33** 1006
- [3] Langer S, Bar-on M, Miller H D 1975 *Phys. Rev. A* **11** 1417
- [4] Marro J, Lebowitz J L, Kalos M H 1979 *Phys. Rev. Lett.* **43** 282
- [5] Komura S, Osamura K, Fujii H, Takeda T 1984 *Phys. Rev. B* **30** 2944
- [6] Katano S, Iizumi M 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 835
- [7] Furusaka M, Ishikawa Y, Mera M 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 2611
- [8] Bray A J 1994 *Adv. Phys.* **43** 357
- [9] Majumder S, Das S K 2011 *Phys. Rev. E* **84** 021110
- [10] Chou Y C, Goldburg W I 1979 *Phys. Rev. A* **20** 2105
- [11] Lebowitz J L, Marro J, Kalos M H 1982 *Acta Metall.* **30** 297
- [12] Huse D A 1986 *Phys. Rev. B* **34** 7845
- [13] Roland C, Grant M 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 2657
- [14] Kubota K, Kuwahara N 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 197
- [15] Tanaka S, Kubo Y, Yokoyama Y, Toda A, Taguchi K, Kajioka H 2011 *The Journal of Chemical Physics* **135** 234503
- [16] Furukawa H 1981 *Phys. Rev. A* **23** 1535
- [17] Mazenko G F 1991 *Phys. Rev. B* **43** 5747
- [18] Mazumder S, Sen D, Batra I S, Tewari R, Dey G K, Banerjee S, Sequeira A, Amenitsch H, Bernstorff S 1999 *Phys. Rev. B* **60** 822
- [19] Furukawa H, Binder K 1982 *Phys. Rev. A* **26** 556
- [20] Ahmad S, Das S K, Puri S 2012 *Phys. Rev. E* **85** 031140
- [21] Zheng H, Shen L, Bai B 2009 *Acta Phys. Chim. Sin.* **25** 2531 (in Chinese) [郑晖, 申亮, 白彬 2009 物理化学学报 **25** 2531]
- [22] Zheng H, Shen L, Bai B, Sun B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 016104 (in Chinese) [郑晖, 申亮, 白彬, 孙博 2012 物理学报 **61** 016104]
- [23] Puri S, Oono Y 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1542

Study on early stage of phase-separation process with low volume ratio using lattice gas model in three dimensions*

Zheng Hui^{1)†} Zhang Chong-Hong²⁾ Sun Bo¹⁾ Yang Yi-Tao²⁾
Bai Bin³⁾ Song Yin²⁾ Lai Xin-Chun³⁾

1) (Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

2) (Institute of Modern Physics, China Academy of Science, Lanzhou 730000, China)

3) (National Key Laboratory for Surface Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621907, China)

(Received 9 November 2012; revised manuscript received 12 April 2013)

Abstract

The phase separation process in a three-dimensional lattice gas model with a low volume ratio $c = 0.01$ was studied. Using Monte Carlo simulation, the evolution behaviors of sc, fcc, bcc lattices, and 5 relative temperatures $T/T_c = 0.45\text{--}0.85$ were simulated. It was found that the structure factor functions did not satisfy the scaling relationship, and the growth index was $1/6$, less than the value of Lifshitz-Slyozov theory.

Keywords: lattice gas model, phase separation process, Monte Carlo simulation, growth law

PACS: 64.75.Gh, 64.60.qe, 64.75.Op

DOI: 10.7498/aps.62.156401

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10575124), the National Magnetic Confinement Fusion Program (Grant No. 2011GB108003), the Science and Technology Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant Nos. 2009A0301019, 9090902), and NPL Foundation of CAEP (Grant No. 2012AB02).

† Corresponding author. E-mail: zheng_hui@iapcm.ac.cn