

Детерминированные и стохастические колебания фрактального типа при охлаждении расплава

© 2021 И. Б. Краснюк¹, А. Е. Заболотин*²

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАНУ, Донецк, Украина

²Институт морской геологии и геофизики ДВО РАН, Южно-Сахалинск, Россия

*E-mail: a.zabolotin@imgg.ru

Резюме. Рассматривается «однофазная» модель кристаллизации расплава в представлении Пенроуза–Файфа для распределений температуры при неизотермических условиях. Граничные условия предполагаются нелинейными и динамическими, т.е. характеризуют скорость релаксации поверхностного параметра порядка. При этом краевые условия зависят от частоты зародышеобразования новой фазы и скорости кристаллизации расплава в (при)поверхностных слоях изложницы. Предложен метод прогнозирования возникновения упорядоченных пространственно-временных (квази)кристаллических структур фрактального типа кристаллической фазы в жидком расплаве. Поверхностный параметр порядка определяет механические и деформационные свойства образца в зависимости от температуры твердого тела.

Ключевые слова: аморфный расплав, разностное уравнение с квазипериодическими возмущениями, бифуркации удвоения периода

Deterministic and stochastic oscillations of fractal type during cooling of the melt

Igor' B. Krasnyuk¹, Andrey E. Zabolotin*²

¹Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin of NASU, Donetsk, Ukraine

²Institute of Marine Geology and Geophysics, FEB RAS, Yuzhno-Sakhalinsk, Russia

*E-mail: a.zabolotin@imgg.ru

Abstract. A "single-phase" model of melt crystallization in the Penrose–Fife representation for temperature distributions under non-isothermal conditions is considered. The boundary conditions are assumed to be nonlinear and dynamic, i.e. they characterize the relaxation rate of the surface order parameter. In this case, the boundary conditions depend on the frequency of new phase nucleation and the rate of a melt crystallization in the (near-)surface layers of the mold. A method is proposed for predicting the appearance of ordered spatiotemporal (quasi-)crystalline structures of the fractal type of the crystalline phase in a liquid melt. The surface order parameter determines the mechanical and deformation properties of the sample depending on the temperature of the solid.

Keywords: amorphous melt, difference equation with quasi-periodic perturbations, period-doubling bifurcations

Для цитирования: Краснюк И.Б., Заболотин А.Е. Детерминированные и стохастические колебания фрактального типа при охлаждении расплава. *Геосистемы переходных зон*, 2021, т. 5, № 4, с. 439–447. <https://doi.org/10.30730/gtr.2021.5.4.439-447>

For citation: Krasnyuk I.B., Zabolotin A.E. Deterministic and stochastic oscillations of fractal type during cooling of the melt. *Geosistemy perehodnykh zon = Geosystems of Transition Zones*, 2021, vol. 5, no. 4, pp. (In Russ., abstr. in Engl.). 439–447. (In Russ., abstr. in Engl.). <https://doi.org/10.30730/gtr.2021.5.4.439-447>

Введение

В данной работе мы рассматриваем «однофазную» модель возникновения и дальнейшей эволюции зародышей кристаллической фазы в (квази)одномерном жидком расплаве, который ограничен двумя плоскими стенками

[Caginalp, Xie, 1993]. На стенках изложницы для параметра порядка задаются нелинейные граничные условия вида

$$\phi_t = \Phi(\phi, T),$$

где (в частных случаях) температура T рассматривается как параметр. При этом функция Φ

может быть определена аналитически при условии, что известен закон образования новой фазы $\phi(\theta, t)$ на стенке изложницы $x = 0$, ограничивающей расплав. Доля образовавшейся новой фазы $\phi(\theta, t)$ определяется на основе уравнения Колмогорова [Колмогоров, 1937] и зависит, как известно, от частоты зародышеобразования $J(\theta, t)$ и скорости роста кристалла $V(\theta, t)$.

Модельные уравнения, описывающие долю кристаллической фазы $\phi(x, t)$ при неравномерном распределении температуры $T(x, t)$, выбираются для однофазной модели кристаллизации в форме Пенроуза–Файфа [Fife, Penrose, 1995; Penrose, Fife, 1993; Krasnyuk et al., 2018]. Решения так поставленной краевой задачи описывают процесс возникновения упорядоченных зародышей кристаллической фазы релаксационного (рис. 1) и турбулентного типа. При этом период и число колебаний на периоде зависят от функции $\Phi(k, \mu)$ в граничных условиях (точнее, от суперпозиции таких функций, поскольку нелинейные граничные условия задаются на каждой из плоских стенок изложницы). Параметры k и μ определяются по формулам $\mu = -\frac{U_a}{k_B T}$, $k = -\frac{U_{cr}}{k_B T}$, где U_a – энергия активации перехода атома через границу раздела фаз (границу изложницы), U_{cr} – работа образования критического зародыша на стенке, ограничивающей расплав; k_B – постоянная Больцмана.

Мы покажем процесс образования структур кристаллической фазы в расплаве как каскад-

ный процесс возникновения зародышей все уменьшающихся размеров. При этом размеры уменьшающихся кластеров (для двумерной геометрии) характеризуются универсальным отношением амплитуд (в одномерном случае) или радиусов кластеров кристаллической фазы (в двумерном случае). В реальных ситуациях каскадный процесс образования структур в конце концов обрывается из-за присутствия в системе вязкости [Колмогоров, 1941] или других параметров, приводящих к диссипации энергии.

Что касается сценария возникновения упорядоченных зародышей кристаллической фазы релаксационного типа в расплаве (рис. 1) при неизотермических условиях, то такой сценарий моделирует, например, формирование на поверхности кремния объемных периодических структур субмикронных размеров, изучение которых представляет интерес для разработки микроэлектронных устройств [Асташинский и др., 2002]. Такие системы рассматриваются в работах [Эйдельман, 1995; Углов и др., 2001], где исследуется механизм формирования структур при быстрой кристаллизации расплавленного слоя на фоне различного рода неустойчивостей. В отличие от [Эйдельман, 1995; Углов и др., 2001], мы рассматриваем медленную кристаллизацию, однако механизмы возбуждения таких неустойчивостей предполагаются сильно нелинейными, что и приводит в результате к возникновению (квази)кристаллических асимптотически периодических структур, изображенных на рис. 1. В отличие от результатов [Эйдельман, 1995; Углов и др., 2001], получен-

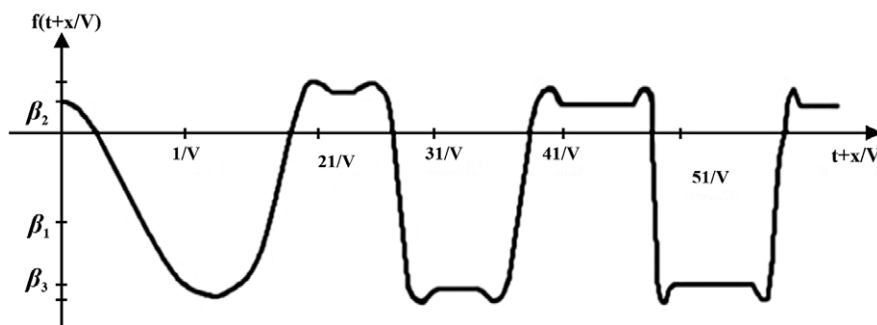


Рис. 1. Изменение средней безразмерной концентрации анортита An в затвердевшей породе в процессе кристаллизации расплава. Релаксационные колебания сопровождаются «выбросами» в окрестности разрывов. Такого рода сходимость последовательности непрерывных функций к многозначной функции получила название явления Гиббса. Здесь V – скорость распространения бегущей волны (характерные изменения скорости кристаллизации составляют $\approx 10^{-7}$ м/с), β_2, β_3 – «концентрации» одной из компонент бинарной смеси после расслоения расплава при охлаждении, β_3 – неустойчивое состояние магматического расплава. Функция f описывает одну из двух встречных бегущих волн. Сумма таких волн представляет собой искомую концентрацию (или параметр порядка).

Fig. 1. Change in the average dimensionless concentration of anorthite An in the solidified rock during the melt crystallization. Relaxation oscillations are accompanied by “emissions” in the vicinity of discontinuities. This kind of convergence of sequence of continuous functions to a multivalued function is called the Gibbs phenomenon. Here V – the propagation velocity of a travelling wave (character changes in the crystallization rate are $\approx 10^{-7}$ m/s), β_2, β_3 – the “concentrations” of one of the components of binary mixture after the melt layering during its cooling, β_3 – unstable state of the magmatic melt. Function f describes one of two counter-travelling waves. The sum of these waves is a desired concentration (or the order parameter).

ные в данной работе периодические структуры субмикронных масштабов являются не стационарными, а нестационарными пространственно-временными структурами. Эти структуры имеют вид простых импульсных бегущих волн (предполагается, что число ударных слоев конечно). Бегущую волну называем простой, если фронт волны распространяется с постоянной скоростью. Если скорость волны положительна, такую волну называем прямой.

Постановка задачи

Известно, что существуют структурные различия в ближней упорядоченности жидкости и кристалла [Скрипов, Коверда, 1984]. Мы рассмотрим бинарный сплав, который есть смесь двух материалов *A* и *B* с концентрацией $c(x, t) \in (0, 1)$, представляющей собой долю материала *A* в бинарной смеси. Соответствующая фазовая диаграмма для «идеальной» бинарной смеси или сплава показана в работе [Александров, 1989]. Интригующим свойством этой фазовой диаграммы является то, что жидкая и твердая фазы не разделены единственной кривой, а состоят из двух кривых (ликвидуса и солидуса), которые пересекаются при температуре плавления $|T_m|$ для чистого (*B*) материала (при $c = 0$). Мы предположим в дальнейшем, что при малых c эти кривые представляют собой прямые линии. Отсюда вытекает (рис. 2), что существует поверхность раздела при равновесной температуре T_E между концентрациями c_L и c_S жидкой и твердой фазы соответственно [Александров, 1989].

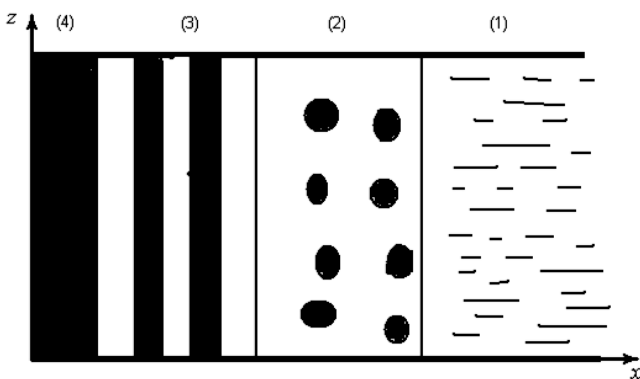


Рис. 2 Схема модели двухфазной зоны: (1) жидкость, (2) активная область двухфазной зоны, (3) область медленного роста твердой фазы в слабой гетерогенной зоне (в почти идеальном расплаве), (4) затвердевшая порода (диопсид–анортит Di–An) [Александров, 1989].

Fig. 2. Scheme of the model of a two-phase zone: (1) fluid, (2) active area of a two-phase zone, (3) area of slow growth of the solid phase in a weak heterogeneous zone (in an almost ideal melt), (4) solidified rock (diopside-anorthite Di-An) [Alexandrov, 1989].

Мы рассмотрим «однофазную» модель кристаллизации расплава (плавления кристалла), не учитывая диффузию примесей в твердой фазе, которые предполагаются достаточно малыми. Отметим также, что при достаточно малых можно не учитывать зависимость внутреннего (скрытого) тепловыделения от концентрации (см. ниже). Далее мы рассмотрим параметр порядка $\phi(x, t)$ в рамках модели фазового поля [Беленький, 1989; Ананин и др., 2006], такой, что $\phi = 0$ в твердой фазе и $\phi = 1$ в жидкой фазе. Тогда эволюционные уравнения для скоростей изменения параметра порядка $(\phi)_{\bar{t}}$ и температуры в жидкой фазе $T_{\bar{t}}$ могут быть записаны в виде [Беленький, 1989; Ананин и др., 2006]

$$cT_{\bar{t}} + \bar{w}(\phi)_{\bar{t}} = \nabla D(\phi, T) \nabla T, \tag{1}$$

$$k_0(\phi, T)\phi_{\bar{t}} = k_1 \nabla^2 \phi - \frac{1}{T} \frac{\partial f(\phi, T)}{\partial \phi}, \tag{2}$$

где $x \in R^1$ и $t \in R^1$ суть пространственная и временная переменные; c – удельная теплоемкость, D – коэффициент теплопроводности, функция $k_0(\phi, T)$ характеризует скорость релаксации параметра порядка к положению равновесия, k – коэффициент подвижности атомов, $f(\phi, T)$ – свободная энергия Гельмгольца, которая будет определена ниже.

Потенциальная энергия $\bar{w}(\phi)$ определяется через внутреннюю энергию $\bar{e}(\phi, T)$ по формуле [Беленький, 1989]

$$\bar{e}(\phi, T) = \frac{\partial(f/T)}{\partial(1/T)} = \bar{w}(\phi) + cT,$$

где

$$\bar{w}(\phi) = -a\phi^2 + b\phi + d.$$

Здесь a, b и d – произвольные постоянные, которые имеют размерность энергии.

Введем безразмерные переменные $x = \bar{x}/L$ и $t = \bar{t}D/cL^2$, где L – некоторый характерный макроразмер системы. Тогда (как показано в [Беленький, 1989]) система (1), (2) допускает редукцию к безразмерным уравнениям

$$u_t + \nu w(\phi)_t = u_{xx}, \tag{3}$$

$$\alpha \epsilon^2 \phi_t = \epsilon^2 \phi_{xx} + F(\phi, u), \tag{4}$$

где $\epsilon^2 = k/L^2 \nu c$ и $\alpha = k_0 D/k_1 c$; ν – некоторый безразмерный параметр; $u = (T/T_m) - 1$, где T_m – температура плавления.

Здесь $w(\phi) = \frac{\bar{w}(\phi)}{\nu c T_m}$, $F(\phi, u) = \frac{1}{\nu c T(u)} \frac{\partial}{\partial \phi} f(\phi, T(u))$,

а параметр ν определяется таким образом, что

$\frac{\partial F}{\partial \phi}(\phi_c, 0) = 1$, где $\phi_c = h_0(T) \in (h(T), h+(T))$ представляет собой локальный максимум функции $f(\phi, T)$. При этом локальные минимумы определяются функциями $\phi = h-(T)$ и $\phi = h+(T)$ [Fife, Penrose, 1995; Penrose, Fife, 1993].

Целью данной работы является исследование асимптотического поведения решений уравнений (3), (4) с граничными условиями вида

$$\phi_t = F_1(T)|_{x=0}, \quad \phi_t = F_2(T), \quad (5)$$

где F_1 и F_2 – заданные функции, и граничными условиями

$$\phi_x = 0|_{x=0}, \quad \phi_x = 0 \text{ и} \quad (6)$$

$$T_x = 0|_{x=0}, \quad T_x = 0. \quad (7)$$

Граничные условия (6) и (7) имеют простой физический смысл. Физическая интерпретация краевых условий (5) состоит в следующем: известно, что кинетика фазовых превращений описывается на основе уравнения Колмогорова [Асташинский и др., 2002; Эйдельман, 1995]. В рамках такого подхода доля образовавшейся новой фазы выражается через частоту зародышеобразования $J(0, t)$, а скорость роста $V(0, t)$, по формуле

$$\phi(x, t) = 1 - \exp\left\{-\beta_0 \int_{t_1}^t J(\tau) \left(\int_{\tau}^t V(t')t'\right)^n d\tau\right\}, \quad (8)$$

где β_0 – коэффициент формы, t_1 – время начала зародышеобразования при $x=0$. Показатель степени может принимать значения $n=1, 2, 3$. Значение $n=1$ соответствует одномерному механизму роста.

По классической теории гомогенной нуклеации [Шарковский, 1964; Шарковский и др., 1985] частота зародышеобразования определяется выражением

$$J(t) = N \frac{k_B}{\hbar} \exp\left(-\frac{H_a}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{W_{cr}}{k_B T}\right), \quad (9)$$

где N – число атомов в единице «объема» метастабильной фазы (при $n=2$ – число атомов на единицу поверхности), H_a – энергия активации перехода атома через границу раздела фаз, W_{cr} – работа образования критического зародыша, \hbar – постоянная Планка.

Далее, согласно теории кристаллизации, кристаллы растут по-разному в зависимости от состояния поверхности граней. Если грань растущего кристалла перемещается однородно (нормально к самой себе), то скорость роста грани кристалла в этом случае выражается формулой [Шарковский и др., 1986]

$$V(t) = a \frac{k_B}{\hbar} \exp\left(-\frac{H_a}{k_B T}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{L^*}{k_B T_m} \frac{\Delta T}{T}\right)\right], \quad (10)$$

где L^* – теплота плавления на один атом; $\Delta T = T - T_m$ – величина перегрева монокристалла при плавлении или $\Delta T = T_m - T$ – величина переохлаждения расплава при кристаллизации, a – межатомное расстояние (высота монослоя).

Предположим, что выполняется неравенство

$$\frac{\Delta T}{T} \ll 1, \quad (11)$$

т.е. мы находимся в окрестности линии плавления на фазовой диаграмме в работах [Fife, Penrose, 1995; Penrose, Fife, 1993].

Тогда формулу (10) можно записать в виде

$$V(0, t) = a \frac{k_B T}{\hbar} \exp\left(-\frac{U_a}{k_B T}\right) \frac{L^*}{k_B T_m} \frac{\Delta T}{T}. \quad (12)$$

Далее, в силу малости скорости роста $V(0, t)$, формулу (8) можно записать в виде

$$\phi(0, t) = \beta_0 \int_{t_1}^t J(0, \tau) \left[\int_{\tau}^t V(0, t') dt' \right] d\tau \quad (13)$$

при $n=1$. Из (13) и правила дифференцирования интегралов с переменным верхним пределом и интегралов, зависящих от параметра, вытекает, что

$$\phi_t(0, t) = \beta_0 V(0, t) \int_{t_1}^t J(0, \tau) d\tau. \quad (14)$$

Пусть выполняются неравенства

$$\frac{U_a}{k_B T} \ll 1, \quad \frac{W_c}{k_B T} \ll 1. \quad (15)$$

Тогда из (15) вытекает, что соотношение (9) можно записать в виде

$$J(0, t) = N \frac{k_B T}{\hbar}. \quad (16)$$

В результате из (16) и (14) получаем соотношение

$$\phi_t(0, t) = \beta_0 a N \frac{k_B}{\hbar^2} L^* u(0, t) \int_{t_1}^t (u(0, \tau) + 1) d\tau. \quad (17)$$

Понятно, что функция $\phi_t(0, t)$ не может возрастать до бесконечности при $t \rightarrow \infty$, поэтому в формуле (17) мы должны выполнить «обрезание» по характерному временному масштабу t_T изменения температуры $u(0, \tau)$. В результате модифицированную версию формулы (17) можно записать в виде

$$\phi_t(0, t) = A u(0, t) \int_{t_1}^{t_T} (u(0, \tau) + 1) d\tau, \quad (18)$$

где $A = \beta_0 a N k_B L^* / \hbar^2$.

Введем обозначение

$$\langle u(0, \tau) \rangle = \frac{1}{t_T - t_1} \int_{t_1}^{t_T} (u(0, \tau) + 1) d\tau.$$

Тогда соотношение (18) можно записать в виде

$$\phi_t(0, t) = A(t_T - t_1) [\langle u(0, \tau) \rangle + 1] u(0, t). \quad (19)$$

Теперь для иллюстрации метода вместо граничных условий (7) рассмотрим краевые условия

$$T_{xx}|_{x=0} = 0. \quad (20)$$

Тогда из уравнения (3) следует, что для гладких решений должно выполняться требование

$$u = -vw(\phi)|_{x=0}. \quad (21)$$

В результате из (21) и (19) вытекает, что граничное условие при $x = 0$ можно записать в виде

$$\phi_t(0, t) = \tilde{A}w(\phi(0, t)), \quad (22)$$

где $\tilde{A} = -A(t_T - t_1) (\langle u(0, \tau) \rangle + 1)v$. Аналогичное граничное условие можно записать и при $x = L$.

Таким образом, мы дали простейшую физическую интерпретацию граничных условий (5) в случае слабого зародышеобразования и малой скорости кристаллизации расплава. В общем случае физическая интерпретация нелинейных граничных условий аналогична.

Редукция модельной задачи к уравнению волнового типа для параметра порядка

Простейшая форма функции плотности свободной энергии получена в приложении к статье [Вул и др., 1984] и в размерной форме может быть записана в следующем виде:

$$f = f_0 \left[\frac{T}{4T_m} (\phi^2 - 1)^2 + \left(\frac{T}{T_m} - 1 \right) a(\phi + 1)^2 \right] + cT \log \frac{T}{T_m}, \quad (23)$$

где параметр f_0 имеет размерность плотности энергии, а параметр a является безразмерным. Согласно определению (23), функция

$$F(\phi, 0) = -\frac{f_0}{vcT_m} \phi(\phi^2 - 1), \text{ поэтому определение параметра } v \text{ по формуле } \frac{\partial F}{\partial \phi}(\phi_c, 0) = 1 \text{ приводит к равенству}$$

$$f_0 = vcT_m. \quad (24)$$

Определим

$$w(\phi) = \frac{\bar{w}(\phi)}{vcT_m}, \quad F(\phi, u) = -\frac{1}{vcT(u)} \frac{\partial}{\partial \phi} f(\phi, T(u)). \quad (25)$$

Тогда из (25) следует, что равенство (23), в силу определения (24), может быть представлено в виде

$$F(\phi, u) = \frac{1}{2} \phi(1 - \phi^2) + 2a \frac{u}{u + 1} (\phi + 1). \quad (26)$$

Разложим функцию $F(\phi, u)$ в ряд Тейлора в некоторой точке (ϕ_*, u_*) в линейном приближении таким образом, что

$$F(\phi, u) = F(\phi_*, u_*) + \frac{1}{2} (1 - 3\phi_*^2) (\phi - \phi_*) + 2a \frac{u_*}{u_* + 1} (\phi - \phi_*) + 2a \frac{\phi_*}{(u_* + 1)^2} (u - u_*). \quad (27)$$

Выполним замену: $\phi = \phi - \phi_*, \bar{u} = u - u_*$:

$$\lambda = \frac{1}{2} (1 - 3\phi_*^2) + 2a \frac{u_*}{u_* + 1}, \quad \beta = 2a \frac{(\phi_* + 1)}{(u_* + 1)^2}$$

Тогда систему уравнений (3), (4) можно записать в виде

$$\bar{u}_t + vw'(\phi_*) \bar{\phi}_t = \bar{u}_{xx}, \quad (28)$$

$$\alpha \epsilon^2 \bar{\phi}_t = \epsilon^2 \bar{\phi}_{xx} + \lambda \bar{\phi} + \beta \bar{u} + F(\phi_*, u_*). \quad (29)$$

Выполним замену $\bar{u} \mapsto \bar{u} + \lambda^{-1} F(\phi_*, u_*)$ (в дальнейшем верхнюю черту в обозначениях будем опускать) и запишем уравнения (28), (29) в виде

$$u_t + vw'(\phi_*) \phi_t = u_{xx}, \quad (30)$$

$$\alpha \epsilon^2 \phi_t = \epsilon^2 \phi_{xx} + \lambda \phi + \beta u. \quad (31)$$

Тогда нетрудно видеть, что из (30) и (31) вытекает следующее уравнение:

$$\alpha \epsilon^2 \phi_{tt} + \lambda \phi_{xx} = (\lambda - \beta vw'(\phi_*)) \phi_t + \epsilon^2 (1 + \alpha) \phi_{txx} - \epsilon^2 \phi_{xxxx}. \quad (32)$$

Мы ограничимся исследованием случая, когда выполняется неравенство $\lambda < 0$, что (согласно определению λ) отвечает выполнению неравенства

$$|u| > 1/\sqrt{3}. \quad (33)$$

Неравенство (33) выполняется правее точки максимума при $\phi_{max} < \phi < 1$ и левее точки минимума при $-1 < \phi < \phi_{min}$ [Fife, Penrose, 1995; Penrose, Fife, 1993] и означает, что мы имеем дело либо со слабо расплавленным кристаллом, либо с сильно закристаллизовавшимся охлажденным расплавом.

В этом случае в уравнении (32) слева мы имеем волновой оператор и, следовательно, решение уравнения можно искать в виде

$$\phi(x, t) = f(t + x/V) + g(t - x/V), \quad (34)$$

где f и g – произвольные функции, а параметр

$$V > 0 \text{ определяется равенством } V = \sqrt{-\frac{\lambda}{\alpha \epsilon^2}}.$$

Тогда подстановка функции, определяемой равенством (34), в уравнение (32) приводит

к следующему уравнению:

$$\phi_t + a_1 \phi_{txx} + a_2 \phi_{xxxx} = 0, \quad (35)$$

где $a_1 = \frac{\epsilon^2(1+\alpha)}{\lambda - \beta v w'(\phi_s)} V^2$, $a_2 = -\frac{\epsilon^2}{\lambda - \beta v w'(\phi_s)} V^4$.

Из (35) вытекают уравнения

$$\phi_\zeta + a_1 \phi_{\zeta\zeta\zeta} + a_2 \phi_{\zeta\zeta\zeta\zeta} = 0, \quad (36)$$

$$\phi_\eta + a_1 \phi_{\eta\eta\eta} + a_2 \phi_{\eta\eta\eta\eta} = 0. \quad (37)$$

Из (36) и (37), в свою очередь, интегрированием этих уравнений вдоль характеристик $dx/dt = V$ и $dx/dt = -V$, соответственно, от значения $\zeta_0 = t + l/v$ до значения $\zeta_1 = t$ и от точки $\eta = t$ до точки $\eta = t - l/v$ нетрудно получить следующие функциональные соотношения:

$$f(t + l/v) = f(t) + Y_1(t), \quad (38)$$

$$g(t) = g(t - l/v) + Y_1(t), \quad (39)$$

где $Y_1(t)$ и $Y_2(t)$ суть решения уравнения

$$Y_{k'}(t) + a_1 Y_{k''}(t) + Y_{k'''}(t) = 0, k = 1, 2 \quad (40)$$

с различными начальными условиями. Решения уравнения (40) имеют вид

$$Y(t) = C_1 e^{(A+B)t} + C_2 e^{-\frac{(A+B)}{2}t} \sin\left\{\left(\frac{A-B}{2}\right)\sqrt{3}t\right\} + C_3 e^{-\frac{(A+B)}{2}t} \cos\left\{\left(\frac{A-B}{2}\right)\sqrt{3}t\right\}, \quad (41)$$

где C_1, \dots, C_3 – произвольные постоянные.

Из (38) и (39) вытекают функциональные соотношения

$$f'(t + l/v) = f'(t) + Y_{1'}(t), \quad (42)$$

$$-g'(t) = -g'(t - l/v) - Y_{2'}(t). \quad (43)$$

Далее из (42) и (43) вытекает соотношение

$$f'(t + l/v) + g'(t - l/v) = f'(t) + g'(t) + Y_{1'}(t) - Y_{2'}(t). \quad (44)$$

Далее нетрудно проверить, что в представлении решения (41) параметры A и B определяются по формулам

$$A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}}, A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}}, \quad (45)$$

где

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2, p = a_1, q = a_2. \quad (46)$$

Поскольку $a_1 \sim v^2$ и $a_2 \sim v^4$ по определению, то из (45) и (46) следует, что постоянные A и B сколь угодно малы, если скорость $v > 0$ сколь угодно мала. Тогда при достаточно малых скоростях фронта кристаллизации расплава в функциональном соотношении (44) послед-

ним слагаемым можно пренебречь, что приводит к равенству

$$f'(t + l/v) + g'(t - l/v) = F_1(f(t + l/v) + g(t - l/v)), \quad (47)$$

$$f'(t) + g'(t) = F_2(f(t) + g(t)). \quad (48)$$

Из (47) и (48), в свою очередь, вытекает, что равенство (46) допускает редукцию к соотношению

$$F_1(f(t + l/v) + g(t - l/v)) = F_2(f(t) + g(t)). \quad (49)$$

Далее из однородных граничных условий Неймана для параметра порядка вытекают соотношения

$$f(t) = g(t) + c_1, \quad (50)$$

$$f(t + l/v) = g(t - l/v) + c_2, \quad (50)$$

где c_1 и c_2 – постоянные, которые в дальнейшем положим равными нулю. Тогда из (50) вытекает, что равенство (49) можно записать в виде

$$F_1(2f(t + l/v)) = F_2(2f(t)). \quad (51)$$

Переобозначим $f \mapsto 2f$ и запишем равенство (51) в виде

$$f(t + l/v) = F_1^{-1}(F_2(f(t))), \quad (52)$$

где F_1^{-1} обратная к F_1 функция.

Положим $\Phi = F_1^{-1} \circ F_2$, где (\circ) – суперпозиция соответствующих функций.

В результате равенство (52) можно записать в виде

$$f(t + l/v) = \Phi(f(t)). \quad (53)$$

Итак, мы получили разностное уравнение с непрерывным временем. Решения уравнения (53) находятся методом итераций некоторого начального распределения зародыша кристаллической фазы $f(t) = h(t)|_{t \in [0, l/v]}$. Если отображение $\Phi: I \rightarrow I$ переводит некоторый открытый ограниченный интервал I в себя, то все решения разностного уравнения (53) неограниченно продолжимы на интервал $t \in [0, +\infty)$ и ограничены. При этом упорядоченные структуры возникают, если и только если доля некоторого кристаллического начального зародыша (который может возникнуть флуктуационным образом) превышает некоторую критическую массу (размер зародыша превышает некоторый критический радиус).

Обозначим через $Fix \Phi = \{f \in \Phi(f) = f\}$ множество неподвижных точек отображения Φ . Обозначим через $P^+(\Phi) = \{f \in Fix \Phi: |\Phi'(f)| < 1\}$ множество притягивающих неподвижных то-

чек, а через $P^-(\Phi) = \{f \in \text{Fix } \Phi: |\Phi'(f)| > 1\}$ – множество отталкивающих неподвижных точек. Тогда из [Беленький, 1989] вытекает, что для достаточно широкого множества начальных функций $h(t)$ почти все решения уравнения (53) с отображением Φ , обладающим указанными выше свойствами, сходятся при $t \rightarrow +\infty$ к некоторой асимптотически $2^N l/v$ -периодической кусочно-постоянной функции с конечным, счетным или несчетным нигде не плотным множествами точек разрыва на периоде. Здесь N – наименьшее общее кратное периодов притягивающих циклов отображения Φ (см. [Беленький, 1989]). Решения уравнения (53), обладающие такими свойствами, называют соответственно решениями релаксационного, предтурбулентного и турбулентного типа. На рис. 1 показаны решения релаксационного типа, которые моделируют процесс возникновения зародышей кристаллической фазы в жидком расплаве.

В общем случае отображение $\Phi = \Phi(\mu, \kappa)$ зависит от параметров $\mu = -\frac{U_a}{k_B T}$ и $\kappa = -\frac{W_{cr}}{k_B T}$ для изотермической задачи и параметров $\mu_m = -\frac{U_a}{k_B T_m}$ и $\kappa_m = -\frac{W_{cr}}{k_B T_m}$ для неизотермической задачи. Например, при изменении параметра μ имеют место бифуркации решений, которые сопровождаются изменением периодов в соответствии с универсальным порядком Шарковского [Ананин и др., 2006] $1 < 2 < 4 < \dots < 5 \times 2 < 3 \times 2 < \dots < 5 < 3$, который означает, что если отображение $\Phi(\mu)$ имеет цикл периода 3, то оно имеет циклы всех периодов. Напомним, что циклом периода n отображения Φ называется последовательность неподвижных точек, которые после n -итераций переходят в себя. При этом в аналитическом случае удвоение периодов происходит с универсальной скоростью $\delta = 4.669\dots$ и характеризуется универсальным отношением амплитуд возникающих колебаний $\alpha = 2.502\dots$ [Шарковский, 1964; Шарковский и др., 1986]. Это дает возможность говорить о каскадном процессе образования зародышей кристаллической фазы в жидком расплаве.

В самом деле, именно с помощью решений турбулентного типа, изображенных на рис. 1, можно дать наглядное представление такого явления, как каскадный процесс образования зародышей кристаллической фазы все уменьшающихся масштабов. Если проследить поведение решений $f(t)$ на рис. 1, то легко заме-

тить, что рост частоты колебаний решения $f(t)$ сопровождается появлением «полочек» (интервалов медленных движений или медленной кристаллизации). С течением времени число вновь появившихся «полочек» растет, а их размеры убывают к нулю, что дает возможность говорить о моделировании «идеальных» наноструктур. Тогда на рис. 1 можно увидеть, как рождаются кристаллические структуры в жидком расплаве, причем все более мелких масштабов.

Число $k_m = G$, где $G = W_{cr}/k_B T$, называется числом Гиббса [Скрипов, 1972], оно определяет наиболее существенную информацию об устойчивости метастабильного расплава и частоте спонтанного зародышеобразования. Оно представляет собой отношение высоты активационного барьера при гомогенной флуктуации к средней энергии теплового движения на одну степень свободы. Тогда имеет место универсальное упорядочение по Фейгенбауму

$$[\text{Шарковский и др., 1986}]: \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{G_{n+1} - G_n}{G_n - G_{n-1}} = \delta$$

где $\delta = 4.669\dots$ – постоянная Фейгенбаума [Шарковский, 1964]. При таком выборе последовательности чисел Гиббса происходит последовательное удвоение числа колебаний на периоде с универсальной скоростью δ .

Напомним, что параметр $G = G(T)$ зависит от температуры [Скрипов, 1972]. Отсюда вытекает, что, управляя параметром G на эксперименте (охлаждая расплав), мы можем (во всяком случае, теоретически) реализовать режим кристаллизации расплава с удвоением числа колебаний на периоде. При этом существует область значений параметра $G \subset \Pi_{pred}$ такая, что при всех G из этой области число колебаний параметра порядка увеличивается степенным или экспоненциальным образом со временем. Такие колебания параметра порядка называются, по терминологии [Шарковский и др., 1986], распределениями предтурбулентного типа.

Далее существует область значений параметра $G \subset \Pi_{turb}$ такая, что при всех G из этой области число колебаний параметра порядка увеличивается экспоненциальным образом. Такие распределения мы будем называть колебаниями турбулентного типа. Они моделируют каскадный процесс образования зародышей кристаллической фазы при охлаждении расплава.

Существует достаточно узкая область значений параметра G_{stoch} такая, что при всех G из этой области распределение параметра порядка является случайным процессом, для которо-

го можно найти распределения вероятностей, с которыми амплитуда параметра порядка в данной пространственно-временной точке принимает то или иное значение при специальном выборе граничных условий (см. [Шарковский и др., 1986], где построены соответствующие примеры). Это означает, что область значений параметра порядка представляет собой интервал для решений стохастического (случайного) типа, а сами распределения должны принадлежать точкам интервала на каждом шаге с некоторой вероятностью. Разумеется, случайное зародышеобразование наблюдается в эксперименте; более того, как показывают эксперименты для перегретых жидкостей в пузырьковых камерах Вильсона, такое зародышеобразование является типичным. Тем не менее экспериментальное подтверждение последних утверждений данной работы требует статистической обработки данных при экспериментальных измерениях плотности образующихся зародышей кристаллической фазы в жидком расплаве при быстром (непрерывном) охлаждении расплава.

Заключение

Рассмотрена модель системы уравнений Пенроуза–Файфа для концентрации параметра порядка с нелинейными динамическими граничными условиями. Доказано существование предельных (при больших временах) периодических решений типа ударных волн релаксационного, предтурбулентного и турбулентного типа. Поверхностный параметр порядка определяет механические и деформационные свойства образца в приложении к механике деформируемого твердого тела. Показано, что при охлаждении образца в окрестности критической температуры плавления возможны осциллирующие деформационные колебания параметра порядка. При этом характер, амплитуда и число колебаний изменяются при каждой фиксированной температуре на поверхности. Для классической граничной модели Пенроуза–Файфа в приложении к физике деформации твердого тела изложенные результаты являются новыми, в литературе отсутствуют аналоги для данной краевой задачи.

Список литературы

1. Александров Л.Н. **1989**. *Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок*. Новосибирск: Наука, 224 с.
2. Ананин С.И., Асташинский В.М., Емельяненко А.С., Костюкевич Е.А. и др. **2006**. Динамика плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии компрессионных плазменных потоков. *Журнал технической физики*, 76(7): 34–40.
3. Асташинский В.М., Ананин С.Н., Аскерко В.В. и др. **2002**. Воздействие компрессионных потоков плазмы на углеродистую сталь и кремний. *Вакуумная техника и технология*, 12(2): 91–94.
4. Беленький В.З. **1989**. *Геометрико-вероятностные методы кристаллизации*. М.: Наука, 88 с.
5. Вул Е.Б., Синай Я.Г., Ханин К.Н. **1984**. Универсальность Фейгенбаума и термодинамический формализм. *Успехи математических наук*, 39(3): 3–37.
6. Колмогоров А.Н. **1937**. К статистической теории кристаллизации металлов. *Изв. АН СССР. Серия математическая*, 1(3): 355–359.
7. Колмогоров А.Н. **1941**. Локальная структура турбулентности в несжимаемой вязкой жидкости при очень больших числах Рейнольдса. *Докл АН СССР*, 30(4): 299–303.
8. Скрипов В.П. **1972**. *Метастабильная жидкость*. М.: Наука, 312 с.
9. Скрипов В.П., Коверда В.П. **1984**. *Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей*. М.: Наука, 232 с.
10. Углов В.В., Анищик В.Н., Асташинский В.В., Асташинский В.М. и др. **2001**. Формирование субмикронных цилиндрических структур при воздействии на поверхность кремния компрессионным плазменным потоком. *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 74(4): 234–236.
11. Шарковский А.М. **1964**. Сосуществование циклов непрерывного преобразования прямой в прямую. *Украинский математический журнал*, 26(1): 61–71.
12. Шарковский А.Н., Майстренко Ю.Л., Романенко Е.Ю. **1986**. *Разностные уравнения и их приложения*. Киев: Наукова думка, 280 с.
13. Эйдельман Е.Д. **1995**. Возбуждение электрической неустойчивости нагреванием. *Успехи физических наук*, 165(11): 1279–1294.
14. Caginalp G., Xie W. **1993**. Phase-field and sharp-interface alloy models. *Physical Review E*, 48(3): 1897–1909. <https://doi.org/10.1103/physreve.48.1897>
15. Fife P.C., Penrose O. **1995**. Interfacial dynamics for thermodynamically consistent phase-field models with nonconserved order parameter. *Electronic J. of Differential Equations*, 16: 1–49. <https://digital.library.txstate.edu/handle/10877/7579>

16. Krasnyuk I.B., Taranets R.M., Chugunova M. **2018**. Dynamic boundary conditions in the interface modeling of binary alloys. *AIMS Mathematics*, 3(3): 409–425. <https://doi.org/10.3934/Math.2018.3.409>
17. Penrose O., Fife P.C. **1993**. On the relation between the standard phase-field model and a “thermodynamically consistent” phase-field model. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 69(1-2): 107–113. [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(93\)90183-2](https://doi.org/10.1016/0167-2789(93)90183-2)

References

1. Aleksandrov L.N. **1989**. *Kinetika kristallizatsii i perekristallizatsii poluprovodnikovyykh plenok* [Crystallization and recrystallization kinetics of semiconductor films]. Novosibirsk: Nauka, 224 p. (In Russ.).
2. Ananin S.I., Astashinsky V.M., Emel'yanenko A.S., Kostyukevich E.A., Kuz'mitski A.M., Zhvavy S.P., Anishchik V.M., Uglov V.V., Pun'ko A.V. **2006**. Melting and crystallization dynamics of single-crystal silicon exposed to compression plasma flows. *Technical Physics*, 51(7): 853–859. <https://doi.org/10.1134/s1063784206070061>
3. Astashinskiy V.M., Ananin S.N., Askerko V.V. et al. **2002**. [Compressive plasma flows effect on carbon steel and silicon]. *Vakuumnaya tekhnika i tekhnologiya* [Vacuum engineering and technology], 12(2): 91–94. (In Russ.).
4. Belen'kiy V.Z. **1989**. *Geometriko-veroyatnostnye metody kristallizatsii* [Geometrical and probabilistic methods of crystallization]. Moscow: Nauka, 88 p. (In Russ.).
5. Vul E.B., Sinay Ya.G., Khanin K.N. **1984**. Universal'nost' Feynbaum i termodinamicheskiy formalizm [Feigenbaum universality and thermodynamic formalism]. *Uspekhi matematicheskikh nauk*, 39(3): 3–37. (In Russ.).
6. Kolmogorov A.N. **1937**. K statisticheskoy teorii kristallizatsii metallov [On the statistical theory of metall crystallization]. *Izv. AN SSSR. Seriya matematicheskaya*, 1(3): 355–359. (In Russ.).
7. Kolmogorov A.N. **1941**. Lokal'naya struktura turbulentsi v neszhimaemoy vyazkoy zhidkosti pri ochen' bol'shikh chislakh Reynol'dsa [Local structure of the turbulence in an incompressible viscous fluid at very high Reynolds numbers]. *Dokl AN SSSR*, 30(4): 299–303. (In Russ.).
8. Skripov V.P. **1972**. *Metastabil'naya zhidkost'* [Metastable liquid]. Moscow: Nauka, 312 p. (In Russ.).
9. Skripov V.P., Koverda V.P. **1984**. *Spontannaya kristallizatsiya pereokhlazhdennykh zhidkostey* [The spontaneous crystallization of supercooled liquids]. Moscow: Nauka, 232 p. (In Russ.).
10. Uglov V.V., Anishchik V.M., Astashynski V.V., Astashinsky V.M., Ananin S.I., Askerko V.V., Kostyukevich E.A., Kuzmitskiy A.M., Kvasov N.T., Danilyuk A.L. **2001**. Formation of submicron cylindrical structures at silicon surface exposed to a compression plasma flow. *J. of Experimental and Theoretical Physics Letters (JETP Letters)*, 74(4): 213–215.
11. Sharkovskiy A.M. **1964**. Sosushchestvovanie tsiklov nepreryvnogo preobrazovaniya pryamoy v pryamuyu [Coexistence of the cycles of continuous map of the line into itself]. *Ukrainskiy matematicheskiy zhurnal*, 26(1): 61–71. (In Russ.).
12. Sharkovskiy A.N., Maystrenko Yu.L., Romanenko E.Yu. **1986**. *Raznostnye uravneniya i ikh prilozheniya* [Difference equations and their applications]. Kiev: Naukova dumka, 280 p. (In Russ.).
13. Eydel'man E.D. **1995**. Vozbuzhdenie elektricheskoy neustoychivosti nagrevaniem [Excitation of the electric instability by voltage]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 165(11): 1279–1294. (In Russ.).
14. Caginalp G., Xie W. **1993**. Phase-field and sharp-interface alloy models. *Physical Review E*, 48(3): 1897–1909. <https://doi.org/10.1103/physreve.48.1897>
15. Fife P.C., Penrose O. **1995**. Interfacial dynamics for thermodynamically consistent phase-field models with nonconserved order parameter. *Electronic J. of Differential Equations*, 16: 1–49. <https://digital.library.txstate.edu/handle/10877/7579>
16. Krasnyuk I.B., Taranets R.M., Chugunova M. **2018**. Dynamic boundary conditions in the interface modeling of binary alloys. *AIMS Mathematics*, 3(3): 409–425. <https://doi.org/10.3934/Math.2018.3.409>
17. Penrose O., Fife P.C. **1993**. On the relation between the standard phase-field model and a “thermodynamically consistent” phase-field model. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 69(1-2): 107–113. [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(93\)90183-2](https://doi.org/10.1016/0167-2789(93)90183-2)

Сведения об авторах

КРАСНЮК Игорь Борисович (<https://orcid.org/0000-0001-7816-5743>), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела теории электронных и кинетических свойств нелинейных систем, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина Национальной академии наук Украины, Донецк, Украина, igorkrasnyuk@rambler.ru

ЗАБОЛОТИН Андрей Евгеньевич (<https://orcid.org/0000-0001-5952-9978>), кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории сейсмологии, Институт морской геологии и геофизики Дальневосточного отделения РАН, Южно-Сахалинск, Россия, a.zabolotin@imgg.ru

About the Authors

KRASNYUK Igor B. Cand. of Sci. (Physics and Mathematics), Senior Researcher of the Department of theory of electronic and kinetic properties of the nonlinear systems, The Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin of the National Academy of Sciences of Ukraine (NASU), Donetsk, Ukraine, igorkrasnyuk@rambler.ru

ZABOLOTIN Andrey E. Cand. of Sci. (Physics and Mathematics), Researcher of the Laboratory of seismology, Institute of Marine Geology and Geophysics of the Far Eastern Branch of the RAS, Yuzhno-Sakhalinsk, Russia, a.zabolotin@imgg.ru