

УДК 536.759, 537.312

М.І. Мар'ян, Н.В. Юркович

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

e-mail: marjan@univ.uzhgorod.ua

ПРОЦЕСИ САМООРГАНІЗАЦІЇ ТА ФОРМУВАННЯ ФРАКТАЛІВ У НЕКРИСТАЛІЧНИХ ТІЛАХ

Встановлено, що формування фрактальної дисипативної структури в некристалічних твердих тілах пов'язане із самоузгодженим створенням областей м'яких атомних конфігурацій і такої температурної поведінки структурно-чутливих характеристик, що відповідають мінімуму дисипації енергії при заданих зовнішніх параметрах – швидкості охолодження та технологічних режимах одержання. Показано, що ця обставина дає змогу визначити некристалічну структуру через процеси самоорганізації з формуванням фракталів.

Ключові слова: фрактал, процеси самоорганізації, м'які атомні конфігурації, некристалічні тіла, дисипативні структури.

Вступ

Авторами [1] отримана самоузгоджена система рівнянь, яка дає можливість дослідити динамічну стійкість та температурну поведінку системи при нерівноважних фазових перетвореннях, зокрема при переході в некристалічний стан через процеси самоорганізації та формування дисипативних структур. В даній частині роботи представлено аналіз утворення фрактальної структури, яка є результатом втрати динамічної стійкості основного рівноважного стану при пониженні

температури. Дана структура формується через самоузгоджене підсилення флуктуацій (середньоквадратичних зміщень атомів, їх частки у м'яких атомних конфігураціях), котрі досягають мезоскопічного рівня та роблять стійкою нову структуру.

1. Процеси самоорганізації та формування дисипативних структур

Розв'язок системи рівнянь [1]

$$F_1(\sigma) = -\tilde{a}_0 \tilde{q} \eta + c \eta^2 + b \eta^3, \quad F_2(y_i) = \frac{\eta_{y_i}}{\tau_{y_i}}, \quad F_3(y_i) = \frac{\eta_{y_i}}{\tau_{y_i}} \quad (1)$$

отримано чисельно з використанням ітераційної процедури. Результати розрахунку температурної залежності частки атомів у м'яких атомних конфігураціях σ , приведених середньоквадратичних зміщень атомів вздовж зв'язку y_i та y_i , нецентральної взаємодії y_i , у випадку різних швидкостей охолодження ($q = (5 \div 20)q_c$, q – швидкість охолодження) представлено на рис. 1-3.

Проаналізуємо особливості зміни динамічної стійкості стану системи зі зміною зовнішнього керуючого параметру – швидкості охолодження q , зокрема при

$\tilde{q} \rightarrow \tilde{q}_c$. Розв'язки системи рівнянь для частки атомів у м'яких конфігураціях, яка пов'язана з фрактальною розмірністю, мають при одному значенні керуючого параметру та температури (тиску) по крайній мірі два стійких стани, які відрізняються ступенем динамічної стійкості та впорядкування (рис. 1-3). Перша область охоплює стан системи при швидкостях охолодження $\tilde{q} < \tilde{q}_c$, яка містить перехід від динамічно нестійкого до динамічно стійкого твердого (кристалічного, квазікристалічного) стану та супроводжується аномальним збільшенням

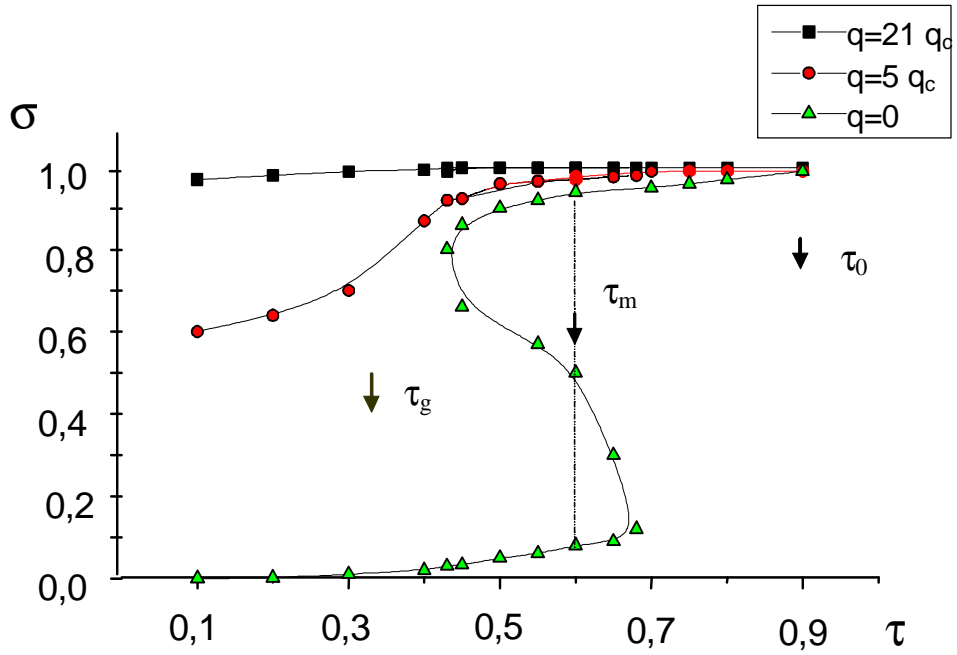


Рис. 1. Температурна залежність частки атомів у м'яких конфігураціях σ при різних швидкостях q охолодження ($P^* = 0.5$).

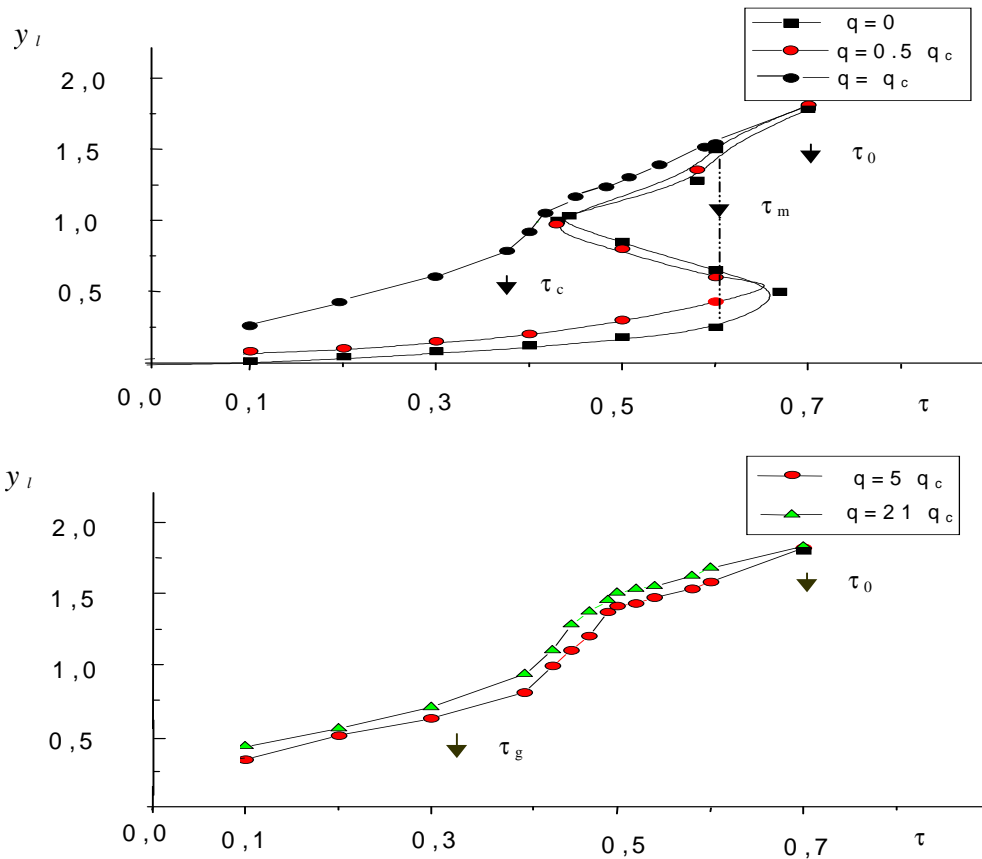


Рис. 2. Температурна залежність приведених середньоквадратичних зміщень атомів вздовж зв'язку y_l при різних швидкостях охолодження q .

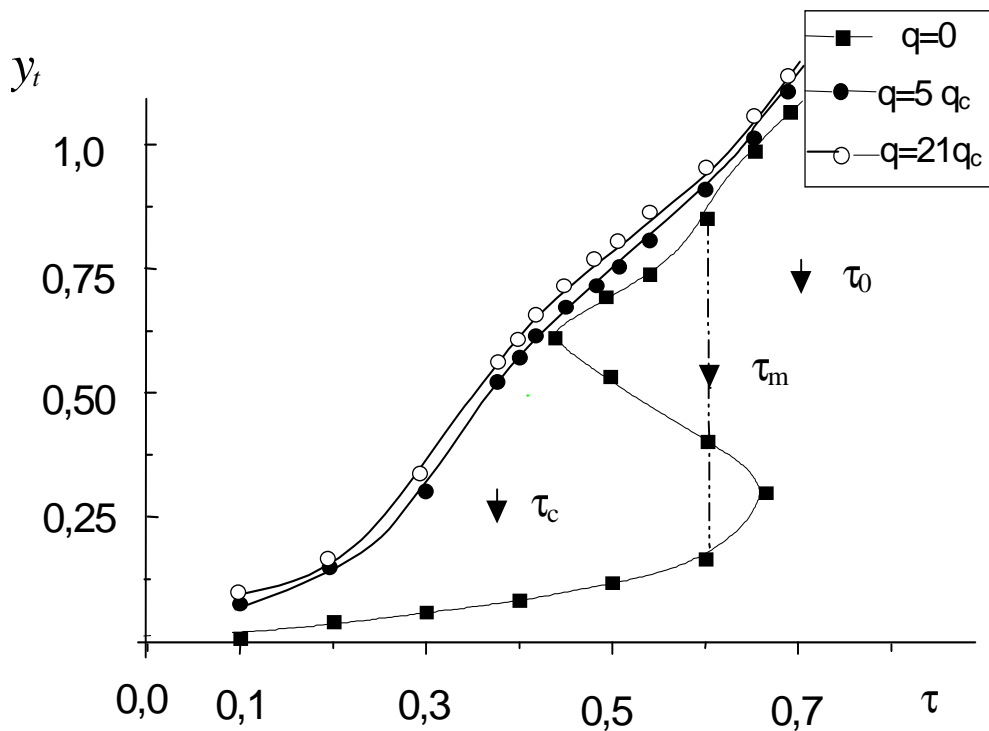


Рис. 3. Температурна залежність приведених середньоквадратичних зміщень атомів y_t нецентральної взаємодії при різних швидкостях q .

пружних констант з одночасним стрибкоподібним зменшенням частки атомів у м'яких атомних конфігураціях та амплітуди середньоквадратичних зміщень при пониженні температури. Слід відмітити, що дана область зменшується з ростом \tilde{q} (рис. 1). Відхилення середньоквадратичних зміщень атомів від аналогічних значень у рівноважному стані $\Delta y_t(\tilde{q}) = y_t(\tilde{q}) - y_t(\tilde{q} = -1)$ з ростом \tilde{q} збільшується. Як видно з рис. 1, ступінь статистичного розупорядкування в твердому тілі зростає при $\tilde{q} \rightarrow \tilde{q}_c$ (різка зміна спостерігається при переході у квазікристалічний стан з боку метастабільного стану – переохолодженої рідини) і, таким чином, збільшується температурний інтервал переходу переохолодженої рідини. Спостерігається квазілінійна залежність параметрів системи у розглядуваному інтервалі зміни \tilde{q} для динамічно стійкої кристалічної вітки (рис. 1, вітка $a-b$). При $\tilde{q} < \tilde{q}_c$ в області температур переходу $\tau = \tau_m$ частка атомів у м'яких атомних

конфігураціях та середньоквадратичні зміщення атомів змінюються стрибкоподібно (величина даної зміни зменшується з ростом \tilde{q}). Отже, макроскопічні властивості системи, пропорційні σ , y_t (наприклад, об'єм), та їх похідні $\sigma'(\tau)$, $y_t'(\tau)$, (наприклад, коефіцієнт лінійного розширення, теплоємність) володіють аномалією при $\tilde{q} \rightarrow \tilde{q}_c$. Друга область, яка реалізується при $\tilde{q} > \tilde{q}_c$, характеризується неперервним аномальним зростанням жорсткості каркасу та пружних постійних, неперервним зменшенням σ , y_t при пониженні температури. Отже, крива $\sigma(\tau, \tilde{q})$, при $\tilde{q} = \tilde{q}_c$ розмежує в області температур $\tau \geq \tau_c$ існування метастабільної переохолодженої рідини та динамічно стійкої некристалічної системи. Вона визначає нижню границю можливого в області температур від τ_0 до τ_c при охолодженнях $\tilde{q} < \tilde{q}_c$ (τ_0 – температура гартування) існування переохолодженого стану. Темпе-

ратура τ_c на кривій $\sigma(\tau, \tilde{q})|_{\tilde{q}=\tilde{q}_c}$, для якої вироджуються метастабільні стани, є температурою співіснування при заданому тиску трьох станів – кристалічного, рідкого та некристалічного: $\left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \tau^2}\right)_{\tau_c} = 0$. Дослі-

дження особливостей поведінки термодинамічних властивостей системи в околі $\{\tau_c, q_c\}$ викликає самостійний інтерес [2].

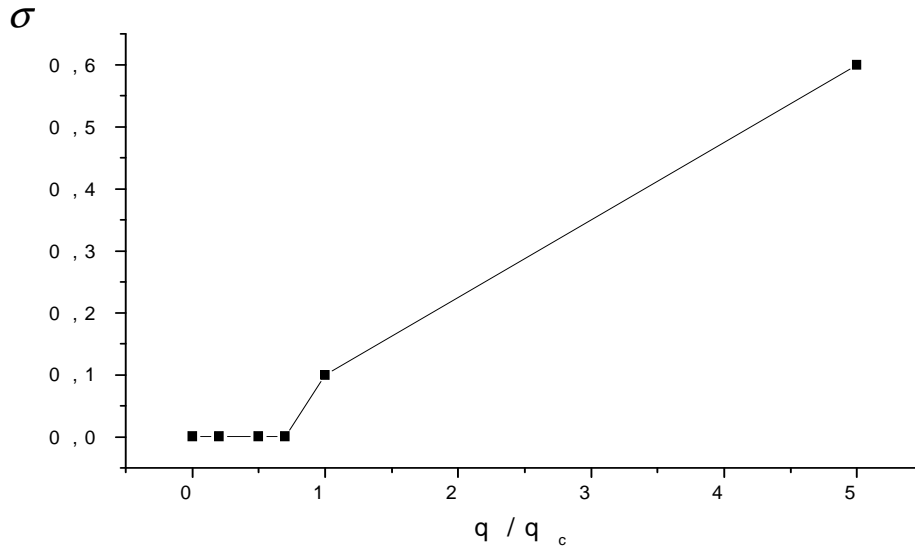


Рис. 4. Залежність частки атомів у м'яких конфігураціях σ при температурі $\tau = 0.1$ від швидкості охолодження q/q_c .

рівні мікроструктурної перебудови, для яких в залежності від значень керуючого параметру \tilde{q} формується некристалічна структура з параметром порядку η . Використовуваний нами параметр порядку визначається спонтанною появою ненульових значень модуля зсуву (рис. 4) та залежить від ступеня відхилення системи від рівноважного стану. Утворена при $\tilde{q} > \tilde{q}_c$ фрактальна структура є результатом втрати динамічної стійкості основного рівноважного стану при пониженні температури в області $\tau \leq \tau_m$. Дана структура виникає через самоузгоджене підсилення флуктуацій (середньоквадратичних зміщень атомів, їх частки у м'яких атомних конфігураціях), котрі досягають мезоскопічного рівня та роблять стійкою нову структуру.

Цей метод організації структури

2. Фрактальний підхід при моделюванні некристалічних тіл

Слід відмітити, що скорельоване зменшення інтенсивності коливань атомів, їх амплітуди та зростання силових постійних при переході від метастабільного переохолодженого розплаву до некристалічного твердого стану свідчить про наявність макроскопічних процесів на

відповідає та визначає фрактальну дисипативну структуру [2, 3]. Формування фрактальної дисипативної структури в некристалічних твердих тілах при охолодженні системи пов'язане із самоузгодженим створенням областей м'яких атомних конфігурацій і такої температурної поведінки структурно-чутливих характеристик, що відповідають мінімуму дисипації енергії при заданих зовнішніх параметрах – швидкості охолодження та технологічних режимах одержання. Ця обставина має істотне значення для некристалічної системи та дає змогу визначити некристалічну структуру через самоорганізацію. Під самоорганізацією у даному випадку розуміють макроскопічний прояв процесів, які відбуваються на мікроскопічному рівні – полях динамічних та статичних зміщень атомів, що обумовлює спонтанне формування ненульової компоненти модуля зсуву [4, 5].

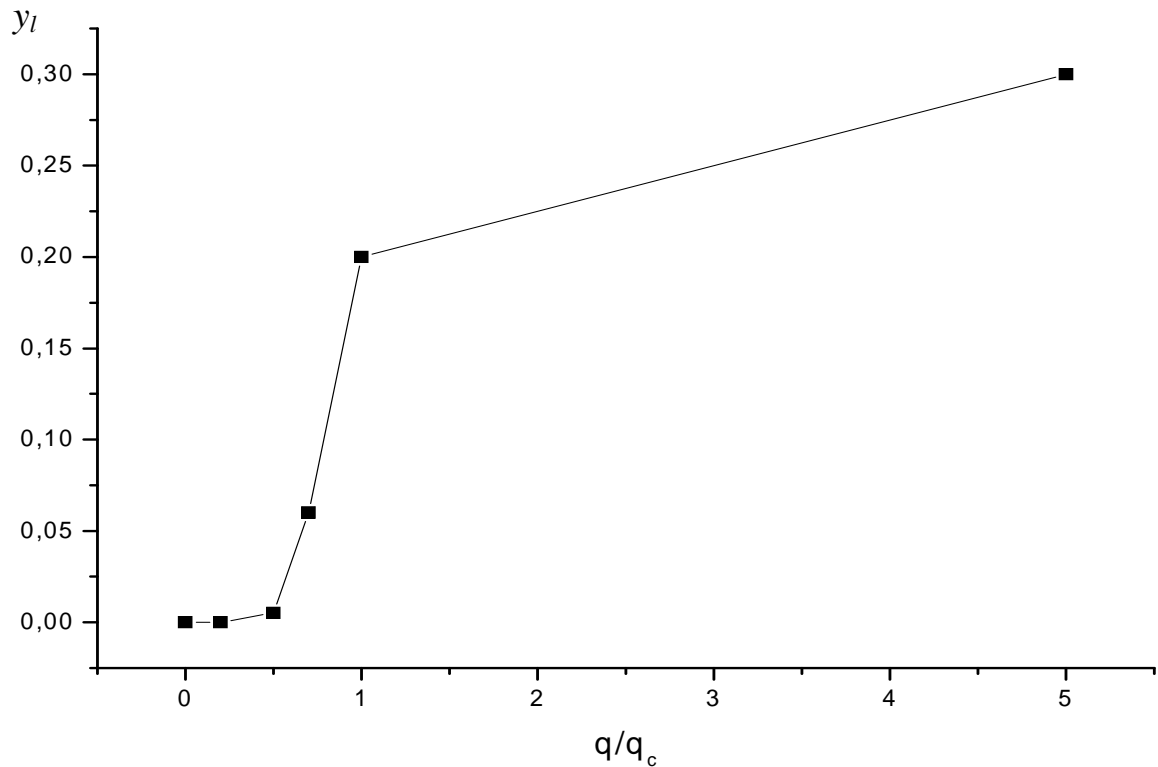


Рис. 5. Залежність приведеного середньоквадратичного зміщення атомів y_l при температурі $\tau = 0.1$ від швидкості охолодження q/q_c .

Необхідно наголосити, що характер залежності ступеня розупорядкування некристалічних тіл від \tilde{q} корелює зі зміною пружних постійних \tilde{f}/f , \tilde{g}/g при заданій

температурі, коли з ростом \tilde{q} відбувається їх зменшення та каркас матеріалу стає більш лабільним та здатним до перебудови під дією зовнішніх факторів (рис. 6).

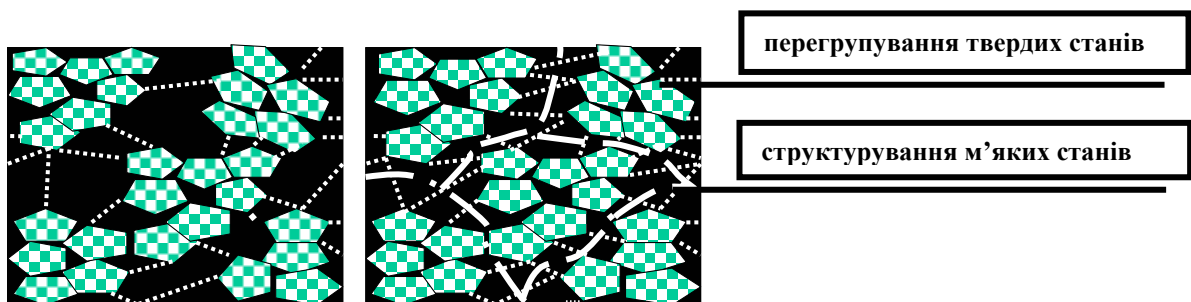


Рис. 6. Схематичне зображення структурування м'яких станів та перегрупування твердих станів при переході в некристалічний стан.

Фрактальна розмірність визначається співвідношенням $d_f \propto 3 \ln(\sigma^{-1}) \approx 2.4 \div 2.7$ (рис. 7). Отриманий фрактал відповідає фракталу Кантора, приведену до тривимірного випадку та узгоджується з

результатами моделювання структури некристалічних тіл в рамках теорії нейронних мереж з алгоритмом самоорганізації Хебба [3, 6]. При формуванні НКТ не просто механічно об'єднуються м'які та

тверді стани, входять в незмінному вигляді. Вони певним чином синергетично трансформуються: отримують нові властивості, які були відсутні у вихідному рівноважному стані, частина ж попередніх властивостей станів відпадає (має місце перекриття із дефектом енергії [3, 4]). М'які та тверді стани отримують нові властивості при $q \geq q_c$, які відсутні при $q < q_c$: м'які стани структуруються (розміщуються впорядковано на рівні середнього порядку), тверді стани отримують можливість дифундувати (схематичне зображення перекриття із дефектом енергії – м'які стани структуруються, тверді стани дифундують, представлено на рис. 6). Саме це є проявом синергетичного

ефекту при формуванні НКТ. Таке функціональне впорядкування обумовлює зменшення енергії, а саме за рахунок якісної частини енергії $\Delta E_{quality}$: $\Delta E = \Delta E_{quality} + \Delta E_{quantity}$, порівняно з чисто структурним підходом. Хаос у формі термодифузійних процесів сприяє синхронізації темпів розвитку процесів в системі; вони починають відбуватись з однаковою швидкістю. Дефект енергії перекриття означає, що частина енергії м'яких станів іде на дифузію областей твердих станів (завдяки м'яким станам вони отримують можливість дифундувати), частина енергії твердого стану іде на структурування м'яких станів (структуровані тверді стани виступають як фон для м'яких станів).

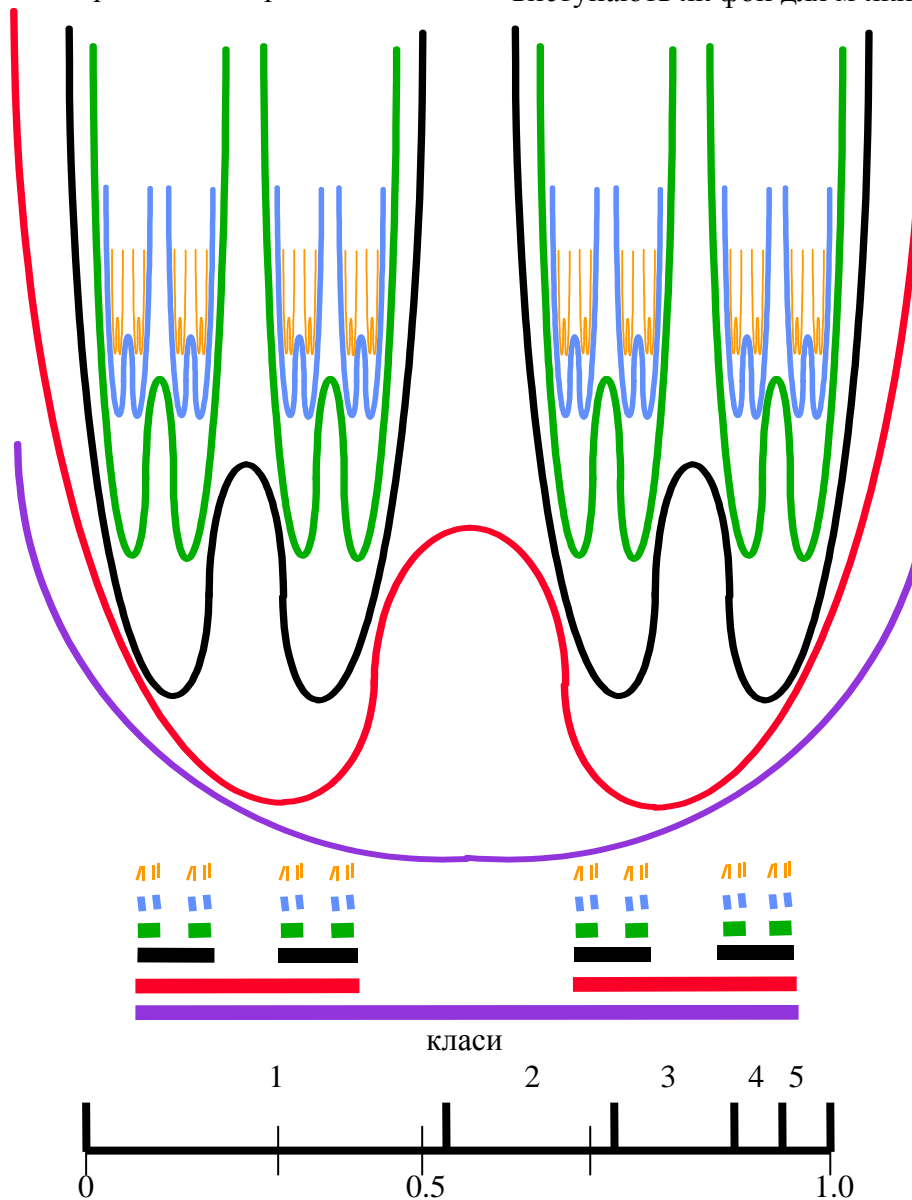


Рис. 7. Рівні структурування станів НКТ з використанням фрактала Кантора [3]..

Висновки

Проведено розрахунок температурної залежності частки атомів у м'яких конфігураціях, середньоквадратичних зміщень в залежності від швидкості охолодження в середовищі Delphi та їх комп'ютерне моделювання. Визначено температурну зміну

частки атомів в м'яких конфігураціях, їх взаємозв'язок з фрактальною структурою і фрактальною розмірністю. Показано, що фрактальна розмірність наближено може бути описана співвідношенням Кантора

$$d_f = 3 \ln(\sigma^{-1}) \approx 2.4 \div 2.7,$$

приведеним до тривимірного випадку.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Мар'ян М.І., Юркович Н.В. Фрактальний підхід до формування некристалічного стану // Науковий вісник УжНУ. – 2013. – № 33. – С. 25-32.
2. Yurkovych N.V., Mar'yan M.I. The processes formation of thin-film heterogeneous structures based on Ge₂S₃ glass in dependence of the technologies conditions of their preparation // Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics. Issue 28. – 2010, P. 64-69.
3. Yurkovych N.V., Mar'yan M.I. Dissipative Structures And Self-Organizing Processes In Non-Crystalline Materials // Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics. Issue 29. – 2011. – P. 79-86.
4. Mar'yan M.I., Szasz A. Self-organizing processes in non-crystalline materials: from lifeless to living objects. – Budapest: OncoTherm, 2000. – 304 p.
5. Popescu M. Self-organization in non-crystalline solids // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. – 2003. – Vol. 5. - № 5. – P. 1059-1068.
6. Фракталы в физике. Труды 6-го Международного симпозиума по фракталам в физике. – Триест(Италия). – 1985. – 680 с.

Стаття надійшла до редакції 24.05.2013

M.I. Mar'yan, N.V. Yurkovych

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

e-mail: marjan@univ.uzhgorod.ua

THE PROCESSES OF SELF-ORGANIZATION AND THE FORMATION OF FRACTALS IN NON-CRYSTALLINE SOLIDS

Found that the formation of fractal dissipative structures in non-crystalline solids associated with the creation of self-consistent fields of soft atomic configurations and thermal behavior of such structure-sensitive characteristics that meet the minimum energy dissipation for a given external parameters - speed cooling and process modes receipt. It is shown that this fact makes it possible to determine the non-crystalline structure through the processes of self-organization.

Keywords: fractal, self-organization processes, soft atomic configurations, non-crystalline materials, the dissipative structures.

М.И. Марьян, Н.В. Юркович

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ И ФОРМИРОВАНИЕ ФРАКТАЛОВ В НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛАХ

Установлено, что формирование фрактальной диссипативной структуры в некристаллических твердых телах связано с самосогласованным образованием областей мягких атомных конфигураций и такого температурного поведения структурно-чувствительных характеристик, которые соответствуют минимуму диссипации энергии при заданных внешних параметрах – скорости охлаждения и технологических режимах получения. Показано, что это обстоятельство дает возможность определить некристаллическую структуру через процессы самоорганизации с формированием фракталов.

Ключевые слова: фрактал, процессы самоорганизации, мягкие атомные конфигурации, некристаллические тела, диссипативные структуры.