СТРУКТУРНІ НЕОДНОРІДНОСТІ НЕКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА ЇХ МОДЕЛЮВАННЯ В НАБЛИЖЕННІ БІЛОГО ШУМУ

Н.В. Юркович, М.І. Мар'ян, І.М. Миголинець

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

Проведені дослідження впливу зовнішнього випадкового поля в наближенні білого шуму на структуру і стійкість некристалічних матеріалів. Встановлені закономірності пояснюються з позицій синергетики з врахуванням мікронеоднорідної будови і нелінійної поведінки флуктуацій при переході в нерівноважний стан.

Поняття структурної цілісності відіграє важливу роль в теорії самоорганізації та відкриває нові можливості для розгляду формування дисипативних структур в некристалічних твердих тілах [1,2]. Дисипативні структури визначають як спосіб самоорганізації системи, який здійснюється у відповідності з умовами одержання через нелінійну взаємодію із середовищем та вплив зовнішніх полів. Структурні одиниці некристалічних матеріалів розглядають як результат самоорганізації конденсованого середовища на відповідних рівнях (ближній, середній порядок), а ієрархія рівнів (або "квантова драбина") - як результат попередньої самоорганізації. Кількісно мірою рівня служить просторова область кореляції фізичних параметрів та час життя дисипативної структури. Вказаний підхід дає змогу дослідити моделі формування дисипативних структур в халькогенідних стеклах [2], плівкових структурах з градієнтом складу [3,4]. В останньому випадку, виникненню нелінійності сприяє збільшення числа компонент системи та їх перемішування за певним законом.

В теорії самоорганізації випадковість відіграє важливу конструктивну роль , а питання впливу зовнішнього шуму на відкриті системи є предметом постійної уваги [5-9]. Це пов'язано насамперед з тим, що параметри макроскопічної системи (в тому числі параметри біфуркації) являють собою величини, які керуються зовні і також підвладні флуктуаціям. Такі флуктуації сприймаються системою як зовнішній шум.

1.Модель системи

Розглянемо синергетичний підхід до вивчення процесів переходу в некристалічний стан при охолодженні розплавів склоподібних напівпровідників або осадженні плівкових структур. Врахуємо істотно нелінійну динаміку внутрішніх флуктуацій системи [2,8](долі атомів в аморфних станах, середньоквадратичних зміщень атомів, зміни складу). Ці випадкові флуктуації незначні при значеннях керуючого параметра $\mathbf{q<q_c}$ ($\mathbf{q_c}$ - критична швидкість охолодження або осадження), посилюються за областю стійкості рівноважного стану ($\mathbf{q \geq q_c}$), внаслідок чого середнє значення флуктуацій змінюється макроскопічно помітно [2]. Параметри, що описують систему в процесі одержання, представляють собою величини, які змінюються завдяки тепло-масообміну з навколишнім середовищем, а отже, також флуктують і можуть бути керовані. Флуктуації зовнішнього середовища, наприклад, зміна швидкості охолодження розплаву, швидкості осадження, діють на формування дисипативних структур і, що більш

істотно, породжують якісно нові нерівноважні переходи.

Розглянемо вплив зовнішнього шуму на структуру некристалічних матеріалів. Формування некристалічної структури може бути змодельованою біфуркаційним процесом [2], який характеризується розв'язком нелінійного диференційного рівняння:

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = -\frac{\partial\psi}{\partial\eta}, \qquad \psi = -\frac{\lambda}{2}\eta^2 - \frac{\gamma}{3}\eta^3 + \frac{\beta}{4}\eta^4 + \frac{G}{2}(\nabla\eta)^2. \tag{1}$$

де η - відхилення системи від стану рівноваги, якому відповідає нульова варіація **ψ(t)** (в якості параметру η розглядається відхилення долі атомів нерівноважної системи в аморфних станах від таких для рівноважної системи); керуючий параметр системи може бути заданий виразом :

$$\lambda = \begin{cases} a\tilde{q}, \tilde{q} = \dfrac{q - q_c}{q_c} \ \text{при}\ \tilde{q} \to \tilde{q}_c, \\ a\arctan(\ln[1 + \tilde{q}])\ \text{при}\ \tilde{q} >> \tilde{q}_c. \end{cases} \tag{2}$$

На основі (1) детерміноване рівняння руху для параметру η в знехтуванні просторовими флуктуаціями має вигляд :

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = \lambda g(\eta) + h(\eta), \quad g(\eta) = \eta, \qquad h(\eta) = \gamma\eta^2 - \beta\eta^3. \tag{3}$$

Уявимо, що на систему діє зовнішнє випадкове поле, яке описується випадковими величинами ξ_t та інтенсивністю σ $\left(\sigma^2 = \rangle\xi_t,\xi_t,\langle\right)$. Розглянемо поведінку системи, коли флуктуації відносно середнього значення проходять досить швидко, що дозволяє використати наближення гаусівського білого шуму. Для білого шуму суттєвим є розділення часових масштабів, а саме, стан зовнішнього середовища змінюється набагато швидше, ніж макроскопічний стан системи. Якщо τ_m - характерний час макроскопічної еволюції системи ($\tau_m = \left|1/\omega(\eta)\right|_{\eta_s}$, $\omega(\eta) = \partial_\eta f_\lambda(\eta)\big|_{\eta_s}$), $f_\lambda(\xi) = \lambda g(\xi) + h(\xi)$ а τ_{cor} - час кореляції випадкового процесу $\lambda_t = \lambda + \sigma\xi_t$, то для білого шуму $\tau_{cor} << \tau_m$.

Рівняння (3) в цьому випадку зводиться до стохастичного диференціального рівняння, яке в інтерпретації Стратоновича запишеться у формі:

$$d\eta(t) = \left(\lambda\eta + \gamma\eta^2 - \beta\eta^3\right)dt + \sigma\eta dW_t. \tag{4}$$

Тут $dW_t = \xi_t dt$ - приріст випадкової величини ξ_t. Еволюція густини $P_s(\eta)$ розподілу величини η задається:

$$\partial_t P(\eta,t) = -\partial_\eta\left(\lambda\eta + \gamma\eta^2 - \beta\eta^3 + \frac{\sigma^2}{2}\eta\right)\times P(\eta,t) + \frac{\sigma^2}{2}\partial^2_{\eta\eta}\left(\eta^2 P(\eta,t)\right). \tag{5}$$

Стаціонарна густина ймовірності $P_s(\eta)$, для якої $\partial_t P(\eta,t) = 0$ і встановлюється стаціонарний режим поведінки системи, визначається функціональним співвідношенням:

$$P_s(\eta) = \frac{N}{g(\eta)}exp\left\{\frac{2\lambda}{\sigma^2} - \frac{\lambda(\xi) + h(\xi)}{g(\xi)}\right\} = N\eta^{\frac{2\lambda}{\sigma^2}-1}exp\left\{\frac{2\lambda}{\sigma}\eta - \frac{\beta}{\sigma}\eta^2\right\}. \tag{6}$$

N - нормуючий множник, який знаходиться з умови нормування $\int_0^\infty P_s(\eta)d\eta = 1$. Екстремуми стаціонарної густини $P_s(\eta)$ відповідають макроскопічним стаціонарним нерівноважним станам системи. Рівняння для визначення екстремумів стаціонарної густини ймовірності (5) у випадку $q \to q_c$ має вигляд:

$$\mathbf{N} \qquad \lambda\eta_m + \gamma\eta_m^2 - \beta\eta_m^3 - \frac{\sigma^2}{2}\eta_m = 0,$$

а його розв'язки задаються співвідношеннями

$$\eta_1 = 0,\ \eta_{2,3} = \frac{\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 + 4\beta(\lambda - \sigma^2/2)}}{2\beta}.$$

Корені $\eta_{2,3}$ існують при $\lambda > \frac{\sigma^2}{2} - \frac{\gamma^2}{4\beta}$ і завжди відповідають максимуму $P_s(\eta)$, а η_1 – максиму $P_s(\eta)$ тільки при $0 < \lambda < \sigma^2/2$. Таким чином, при наявності випадкового поля можлива реалізація якісно відмінних переходів в некристалічний стан. Перехід при σ=**0** і $\lambda=0$ відповідає дермінованому випадку $(q=q_c)$. Перехід при $\sigma\neq0$ і $\lambda=\sigma^2/2$ супроводжується різкою зміною форми густини ймовірності, коли відбувається розмивання δ- подібного розподілу $P_s(\eta)$ в бік відмінних від нуля значень η [5].

2. Залежність характеристик системи від інтенсивності білого шуму та біфуркаційна діаграма

Поведінка стаціонарної густини розподілу відхилення долі атомів в аморфних станах від їх рівноважного значення в залежності від інтенсивності зовнішнього шуму приведена на рис.1,2. Густина ймовірності виявляє наступні особливості. Якщо швидкість менше критичної ($\lambda<0$), то стаціонарна точка $\eta=0$, яка відповідає кристалічному стану, є асимптотично стійкою (розподіл $P_s(\eta)$ в цьому випадку веде себе як δ- функція). При наявності зовнішнього шуму і значенні керуючого параметру $0<\lambda<\sigma^2/2$ стаціонарна густина ймовірності перетвориться в нескінченість при $\eta\to0$, тобто зберігається частина властивостей δ- функції і $\eta=0$ залишиться найбільш ймовірним значенням, але воно вже не є стійкою стаціонарною точкою (рис.1.2). Отже в даному випадку реалізується перехід в частково розупорядкований стан, який при $t\to\infty$ релаксує до рівноважного, можливе також утворення нерівноважної структури, оскільки $P_s(\eta)\neq0$ при $\eta\neq0$, але він не є асимптотично стійким. Іншими словами випадкове поле здійснює дезорганізуючу дію на систему в процесі одержання. Якщо $\lambda=\sigma^2/2$, характер розподілу знову різко зміниться - хоч густина ймовірності відмінна від нуля при $\eta=0$, але найбільш ймовірне значення $P_s(\eta)$ реалізується при $\eta\neq0$, наприклад, криві 2-4 на рис.1,2. Для $\lambda>\sigma^2/2$ ймовірність утворення кристалоподібної структури прямує до нуля (рис.1,2) і спостерігається чітко виражене ненульове екстремальне значення $P_s(\eta)$.

Залежність екстремумів $P_s(\eta)$ від q можна розглядати як свого роду модифікацію детермінованої біфураційної діаграми, при якій спостерігається зміщення кривої $\eta(q)$ по q на $\sigma^2/2$. В точках біфуркації система випадковим чином визначає дисипативну структуру (окреслює тип самоорганізації), в той час як в проміжках між біфуркаціями система підкоряється макроскопічним законам кінетики (3). В околі біфуркації співіснують різні типи впорядкування, коли структура містить в собі різні рівноймовірні можливості, система, здійснюючи випадковий вибір, знову потрапляє на шлях детермінованості.

З приведеного характеру розподілу $P_s(\eta)$ можна встановити критерії виникнення самоорганізації: перехід в конденсованому середовищі можна викликати, підтримуючи постійними керуючі параметри, але збільшуючи або зменшуючи інтенсивність флуктуацій поля в зовнішньому середовищі.. Дійсно, при фіксованому λ, коли $\lambda>\sigma^2/2$, маємо $P_s(0)=0$; при $\lambda=\sigma^2/2$ $P_s(0)$ залишається скінченою і $P_s(0)\to\infty$ при $\lambda<\sigma^2/2$, тобто перехід в некристалічний стан з формуванням дисипативних структур не відбувається.

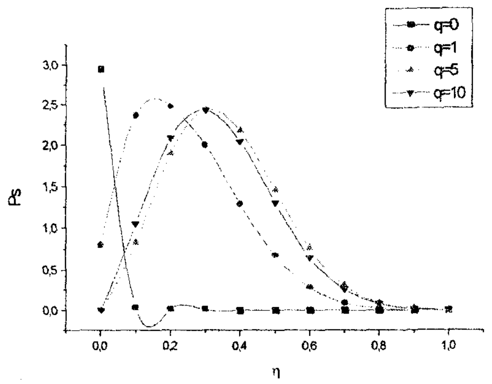
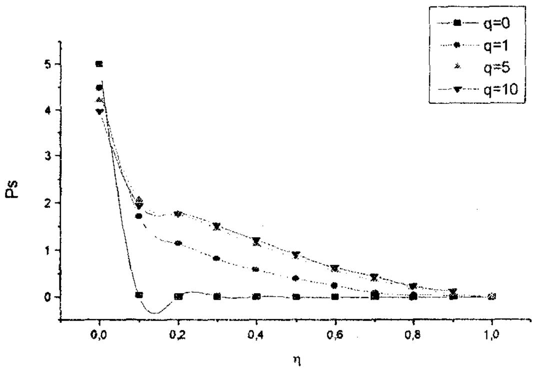


Рис. 1.Залежність стаціонарної густини розподілу відхилення системи від рівноважного стану (σ = 1.0 10^{-2} $(К/с)^2$)



.Рис.2. Залежність стаціонарної густини розподілу відхилення системи від рівноважного стану (σ = 1.5 10^{-2} $(К/с)^2$).

Особливістю індукованих шумом переходів в порівнянні з детермінованим випадком є можливість реалізації набору значень η і, отже, некристалічних структур з різними областями впорядкування. Експериментально параметр η може бути визначений по дослідженню довгохвильової області спектру поглинання некристалічних матеріалів, отриманих при різних умовах синтезу та дії зовнішнього випадкового поля. Запропонований підхід дозволяє розрахувати критичні значення флуктуацій параметрів, при яких структурні характеристики некристалічних матеріалів не чутливі до зміни умов їх одержання і передбачити утворення при визначених інтенсивностях шуму якісно нових дисипативних структур.

1. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного, Мир, Москва, (1990) 342.
2. Mar'yan M. - Scientific Herald of USU, 2 (1998) 43-48.
3. Юдин В.В., Писаренко Т.А., Любченко Е.А., Савчук Е.Г. - Кристаллография, 44 (1999) 413.
4. I.I.Shovak, I.M.Migolinets, V.P.Pinzenik, V.M.Chereshnya, N.V.Yurkovich.- Functional materials. 6.3. (1999),493-496.
5. Horsthemke W., Lefever R. Noise-Induced Transitions. - Berlin-Heidelberg-New York-Tokyo. Springer-Verlag. 1984.
6. Mangioni S., Deza R., Wio H.S., Toral R.- Phys. Rev. Let. 79 (1997), 2389-2393.
7. Godreche C. and Luck J.M.- J.Phys. A: Math. Gen. ,18 (1997) 6245- 6272.
8. Mar'yan M.- 2nd All-Un.Conf.Phys.Glass.Solid. Riga. 1991.
9. Mar'yan M., Yurkovich N., Kikineshy A. - Third Inter. Scool-Conf. Of PPMSS'99, 7-11 sept., Chernivtsi, (1999) 190.

STRUCTURAL INHOMOGENEOUSES OF NON-CRYSTALLINE MATERIALS AND THEIR MODELLING IN THE WHITE NOISE APPROXIMATION

N.V.Yurkovich, M.I.Mar'yan, I.M.Migolinetc

Uzhgorod State University, 32 Voloshin str., 88000 Uzhgorod, Ukraine

The influence of the external random field in the white noise approximation on the structure and stability of the non-crystalline materials formation are consider. These conformity with a law from the viewpoint of synergetic are analysed.

Наталія Юркович –старший лаборант кафедри твердотільної електроніки Ужгородського державного університету
Закінчила фізичний факультет УжДУ у 1996 р.,

Михайло Іванович Марьян - доцент кафедри твердотільної електроніки Ужгородського державного університету
Народився в 1957 р. Закінчив фізичний факультет уУжДУ 1979 р., кандидатську захистив у 1983р

Іван Михайлович Миголинець- доцент кафедри твердотільної електроніки Ужгородського державного університету
Закінчив фізичний факультет у УжДУ 1970 р., кандидатську захистив у 1983р