

МОДЕЛИРОВАНИЕ КООПЕРАТИВНЫХ ЭФФЕКТОВ ПРЕДПЛАВЛЕНИЯ С ПОЗИЦИЙ ТЕОРИИ ДЕТЕРМИНИРОВАННОГО ХАОСА

С.Г. Жицкий

Плавление кристаллических веществ рассматривается с позиций детерминированного хаоса для объяснения эффектов выброса тепла вблизи точки плавления в реальных динамических условиях. Поведение кристаллической решетки при реальном плавлении исследуется на основе пространственно-распределенной модели связанных хаотических осцилляторов. Показано, что вблизи точки плавления возможен переход твердого тела в качественно новое упорядоченное состояние в результате хаотической синхронизации колебаний узлов кристаллической решетки. Рассматриваются условия такого перехода. Полученные результаты сопоставляются с ранее имевшимися объяснениями данного явления.

Введение

С развитием методов нелинейной динамики появилась возможность описания многих явлений, имеющих хаотический характер, на языке детерминированного хаоса. К числу таких явлений относятся неравновесные фазовые переходы, наблюдаемые методом дифференциального термического анализа при плавлении изотропных кристаллических веществ (KCl, Ge, Cu) [1-4]. Процесс плавления кристаллов в реальных динамических условиях происходит не в точке, а в достаточно протяженном интервале температур и сопровождается эффектами предплавления и постплавления. Характерной особенностью этих эффектов является их скачкообразность, экзотермичность и флуктуационность выделяемой теплоты диссипации (рис. 1). Следует подчеркнуть, что наблюдаемые эффекты, непосредственно примыкая к области плавления, являются экзотермическими (с выделением тепла), в то время как само плавление представляет собой эндотермический процесс (с поглощением тепла).

В настоящее время нет моделей, дающих удовлетворительное объяснение данному явлению.

Представления о кооперативных переходных процессах при плавлении были впервые введены Френкелем [5]. В работах Хайта [6] эффект предплавления рассматривается как результат корреляций фоновой подсистемы, приводящей к образованию кластеров. Образование в системе кластеров можно трактовать как возникновение в ней стационарных возбужденных состояний. Однако в модели Хайта не рассматривается механизм корреляции, приводящий к кластеризации, и условия существования этих кластеров. Поэтому модель Хайта не объясняет такие

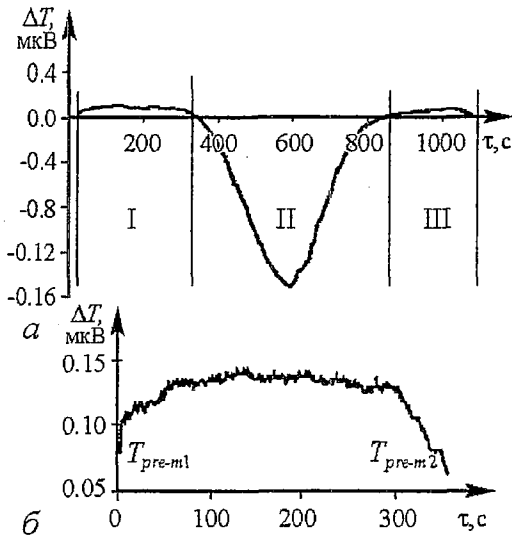


Рис. 1. а - Термограмма плавления Си, полученная на установке ДТА: I - область предплавления, II - область плавления, III - область постплавления. б - увеличенный участок термограммы I, T_{pre-m1} и T_{pre-m2} - температуры начала и конца эффекта предплавления

кристаллической решетки твердого тела, поток энергии к которым поступает от внешнего нагревательного источника. При этом, согласно принципам теории физики твердого тела, в любой узел решетки возможен как приток энергии от соседних, более нагретых узлов, так и ее передача менее нагретым узлам кристаллической решетки. Получение и передача энергии узлами кристаллической решетки осуществляется квантами элементарных возбуждений твердого тела - фононами [9]. Таким образом, любой узел кристаллической решетки может рассматриваться как автоколебательная диссипативная динамическая система.

Целью данной работы является исследование условий возникновения стационарных возбужденных состояний при плавлении твердого тела как результата синхронизации в пространственно-распределенной системе связанных хаотических осцилляторов, моделирующих колебания узлов кристаллической решетки твердого тела.

1. Базовая модель

В качестве базовой модели рассматривается одномерная цепочка связанных осцилляторов Ресслера [10] (рис. 2). Выбор системы Ресслера в качестве

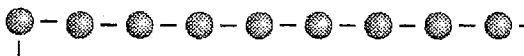


Рис 2. Модель одномерной цепочки осцилляторов Ресслера

Для j -го осциллятора система уравнений запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{x}_j &= -\omega y_j - z_j, \\ \dot{y}_j &= \omega x_j + a y_j + \gamma(y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}), \\ \dot{z}_j &= b + z_j(x_j - c). \end{aligned} \quad (1)$$

экспериментальные факты, обнаруженные в работах [1-4], как выделение тепла и флуктуации теплоты диссипации.

В последние годы активно изучаются нелинейные динамические процессы и связанные с ними эффекты синхронизации и стохастического резонанса в хаотических колебательных системах [7]. В работе [8] было показано, что для пространственно-распределенных (2- и 3-мерных) систем связанных хаотических осцилляторов при определенных условиях возможно формирование кластерных подсистем, образующихся в результате эффекта синхронизации между ее элементами.

При рассмотрении эффектов, связанных с плавлением кристаллических веществ, хаотической колебательной системой можно считать колеблющиеся узлы атомов кристал-

Здесь γ - параметр связи; ω - частота рассогласования; a - параметр, определяющий режим хаотичности осциллятора; b, c - параметры осциллятора. Для такой модели изучались условия возникновения эффекта синхронизации в зависимости от режимов хаоса (слабый хаос при значениях параметра $a \leq 0.21$ и сильный хаос при $0.21 < a \leq 0.3$), параметра связи γ , длины цепочки и пространственного строения модели. С этой целью проводилось численное решение системы уравнений на ЭВМ с использованием следующих граничных условий:

$$\begin{aligned} y_0 &= 0, \\ y_{n+1} &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

При численном моделировании стартовые точки на аттракторе выбирались каждый раз произвольным образом, в результате ни в одном из экспериментов начальные условия не повторялись. Таким же образом задавалась частотная расстройка осцилляторов в пределах $1 \leq \omega \leq 1.05$. Параметры системы Ресслера имели значения: $b=0.4, c=8.5$.

Разность фаз между соседними осцилляторами рассчитывалась по формуле:

$$\Delta\Phi = \sin^2[1/2(\gamma_j / x_j - \gamma_{j+1} / x_{j+1})], \quad (3)$$

то есть в данном случае рассматривалась пространственная синхронизация осцилляторов, а не синхронизация отдельных временных реализаций какой-либо из переменных.

В качестве критерия сравнения степени синхронности колебаний использовалась средняя разность фаз колебаний всей цепочки, взятая в некоторый произвольный момент времени.

При оценке влияния степени хаотичности на возможность синхронизации в одномерной системе осцилляторов видно, что с ростом параметра a , а следовательно, и степени хаотичности колебаний каждого осциллятора, синхронность колебаний уменьшается, отсутствуя полностью в режиме сильного хаоса, $a=0.3$ (рис. 3).

В случае реальных хаотических систем, таких как колебания цепочки узлов кристаллической решетки на этапе предплавления, произойдет увеличение ангармонизма колебаний, что приведет к возникновению режима сильного хаоса. Кроме того, любая реальная кристаллическая решетка является пространственно-распределенной системой. Следовательно, говорить об одномерной модели цепочки осцилляторов как о реально отражающей процессы колебаний узлов решетки, не приходится. Поэтому целесообразно перейти от рассмотрения одномерной цепочки осцилляторов Ресслера к пространственно-распределенной системе.

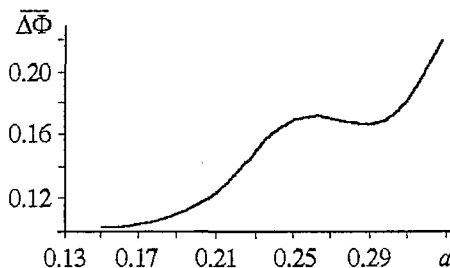


Рис. 3. Зависимость средней разности фаз колебаний цепочки осцилляторов Ресслера от параметра a

2. Пространственно-распределенная модель связанных хаотических осцилляторов

Рассматриваемая двумерная модель представляет собой две цепочки из 50 осцилляторов Ресслера, пересекающиеся в одной точке, то есть имеющие один

общий узел-осциллятор (рис. 4). Система уравнений для осцилляторов, расположенных по осям x и y , соответственно, будет иметь следующий вид.

По оси x :

$$\begin{aligned} \dot{x}_j &= -\omega y_j - z + \gamma(x_{j-1} - 2x_j + x_{j+1}), \\ \dot{y}_j &= \omega x_j + ay_j, \\ \dot{z}_j &= b + z_j(x_j - c). \end{aligned} \quad (4)$$

По оси y :

$$\begin{aligned} \dot{x}_j &= -\omega y_j - z_j, \\ \dot{y}_j &= \omega x_j + ay_j + \gamma(y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}), \\ \dot{z}_j &= b + z_j(x_j - c). \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения для общего осциллятора цепочек запишутся как:

$$\begin{aligned} \dot{x}_j &= -\omega y_j - z + \gamma(x_{j-1} - 2x_j + x_{j+1}), \\ \dot{y}_j &= \omega x_j + ay_j + \gamma(y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}), \\ \dot{z}_j &= b + z_j(x_j - c). \end{aligned} \quad (6)$$

В результате исследования данной двумерной системы было отмечено следующее. Добавление в модель еще одной цепочки влияет на колебания во всей системе. На рис. 5 можно видеть типичное изменение траектории движения осциллятора, расположенного вблизи точки пересечения цепочек, в зависимости от параметров связи. С возрастанием параметра связи по дополнительной цепочке она все сильнее начинает взаимодействовать с первой, что влияет на траектории осцилляторов в обеих цепочках, изменяя их структуру.

Характерной особенностью плавления любого твердого тела является возникновение в нем при нагреве точечных дефектов-вакансий, приводящих к разрывам в непрерывной цепочке узлов кристаллической решетки. Это вызывает ослабление взаимодействия между соседними атомами решетки.

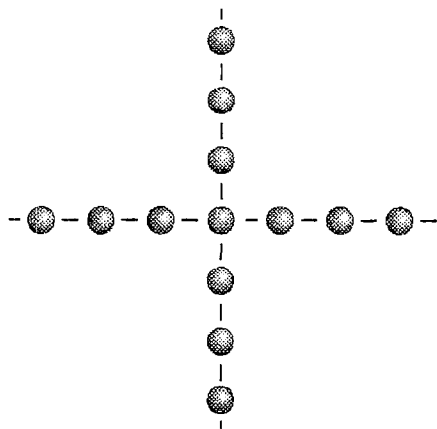


Рис. 4. Модель двумерной цепочки осцилляторов Ресслера

концентрация вакансий в кристалле экспоненциально возрастает с увеличением температуры. В работе [11] отмечается, что в кристалле вблизи точки плавления на каждые 5 узлов кристаллической решетки приходится одна вакансия. Таким образом, вблизи точки плавления не могут находиться длинные, не деформированные вакансии цепочки узлов кристаллической решетки. Их реальная длина будет составлять на момент предплавления всего несколько узлов. Таким образом, двумерная модель должна быть проверена на зависимость степени синхронности колебаний от длины цепочки (рис. 6). Видно, что по мере

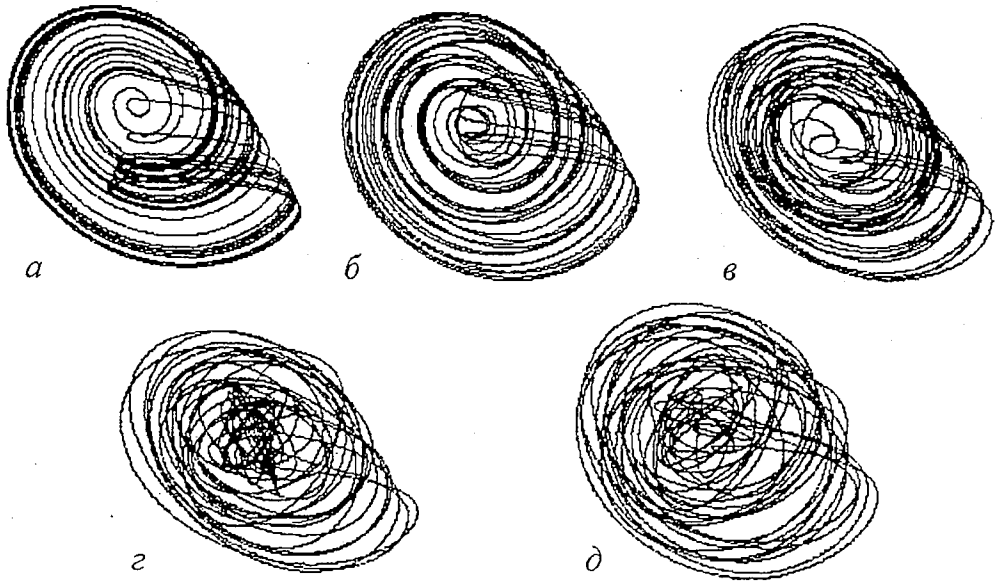


Рис. 5. Изменение траектории движения 25-го осциллятора в зависимости от параметров связи: а - $\gamma_x = \gamma_y = 0$; б - $\gamma_x = 0, \gamma_y = 0.8$; в - $\gamma_x = 0.1, \gamma_y = 0.8$; г - $\gamma_x = 0.5, \gamma_y = 0.8$; д - $\gamma_x = \gamma_y = 0.8$

уменьшения длины цепочки при сильной связи между соседними осцилляторами (случай, реализуемый в области предплавления) возникают устойчивые области сильной синхронизации. Численный расчет показывает, что степень синхронности колебаний в этих областях на 3-4 порядка превосходит этот параметр для случая 50-ти сильносвязанных осцилляторов. Таким образом, несмотря на то, что рассмотрение двумерной модели из 5 осцилляторов ведется исключительно для режима сильного хаоса, порядок синхронизации на значительных промежутках времени может достигать тех же значений, что и в одномерной модели в режиме слабого хаоса.



Рис. 6. Зависимость степени синхронизации двумерных цепочек осцилляторов Ресслера от степени связи между осцилляторами и количеством осцилляторов в цепочке для 50 несвязанных осцилляторов (кривая 1), 50 сильносвязанных (2) и 5 сильносвязанных осцилляторов (3)

3. Двумерная модель связанных хаотических осцилляторов

Двумерная модель связанных хаотических осцилляторов Ресслера представляет собой дальнейшее развитие одномерных моделей. Рассматриваемая двумерная система является матрицей осцилляторов размером $n \times n$, взаимодействующих друг с другом (рис. 7).

Уравнения (i, j) -го осциллятора ($1 < i < n, 1 < j < n$) такой системы будут иметь вид

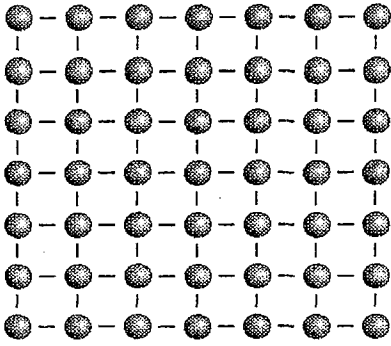


Рис. 7. Двумерная модель связанных хаотических осцилляторов Ресслера

Первоначально рассматривалась система размером 65×65 осцилляторов. В качестве критерия возникновения синхронизации в системе использовалась визуальная оценка трехмерного графика, по осям x и y которого располагались соответствующие осцилляторы, а по оси z откладывалась разность фаз между соседними осцилляторами. Различным численным интервалам разности фаз соответствовал определенный цвет. Таким образом, синхронизированной системе соответствовала бы однородная окраска поверхности (или близкая к однородной), а построенная таким образом поверхность рассинхронизированной системы представляла бы собой совершенно неупорядоченную картину. В качестве дополнительного критерия синхронизации рассчитывалась средняя разность фаз в системе.

На рис. 8 приведена картина потери синхронизации системы 65×65 осцилляторов для параметра связи $\gamma_x = \gamma_y = 0.85$ при изменении параметра a от 0.15 до 0.3. Можно сделать вывод, что для значений $a = 0.15 - 0.26$ средняя разность фаз колебаний осцилляторов довольно велика и сопоставима со значениями средней разности фаз для $a = 0.28 - 0.3$. Но, вместе с тем, на рис. 8, a и b видно, что разность фаз довольно однородна для всей системы. Это позволяет говорить о наличии в области $a = 0.15 - 0.26$ синхронизации, но без захвата фазы, то есть разность фаз во всей системе примерно одинакова.

При уменьшении размеров рассматриваемой системы картина радикально меняется. Так для системы 10×10 осцилляторов зависимость $\overline{\Delta\Phi}$ от параметра a выглядит следующим образом (см. таблицу).

Если построить для такой системы графики разности фаз осцилляторов, аналогичные рис. 8, в тех же интервалах, то они будут представлять собой сплошное одноцветное поле для всех значений параметра a в силу малых значений разности фаз. Таким образом, при уменьшении размеров исследуемой системы выясняется, что это также ведет к появлению устойчивых синхронных состояний даже при значениях параметра $a = 0.3$, то есть при максимальной хаотичности исследуемой системы. Возникновение таких состояний связано с захватом фазы колебаний, что не наблюдается в больших системах даже при меньших значениях параметра a , то есть при меньшей хаотичности исследуемой системы.

Применительно к реальному плавлению твердого тела, наличие областей сильной синхронизации означает следующее. Переход к синхронным колебаниям неизменно будет сопровождаться выделением некоторого количества энергии, а именно такого, которое ранее затрачивалось на совершение работы по преодолению сил взаимодействия между соседними узлами решетки. Процесс

$$\begin{aligned} \dot{x}_{i,j} &= -\omega_{i,j} y_{i,j} - z_{i,j} + \gamma(x_{i,j-1} - 2x_{i,j} + x_{i,j+1}), \\ \dot{y}_{i,j} &= \omega_{i,j} x_{i,j} + a y_{i,j} + \gamma(y_{i-1,j} - 2y_{i,j} + y_{i+1,j}), \\ \dot{z}_{i,j} &= b + z_{i,j}(x_{i,j} - c) \end{aligned} \quad (7)$$

при следующих граничных условиях:

$$x_0 = x_{n+1} = y_0 = y_{n+1} = 0. \quad (8)$$

Для данной модели исследовалась возможность возникновения синхронизации при различных режимах осциллятора и зависимость степени синхронности колебаний от размера матрицы осцилляторов (числа n).

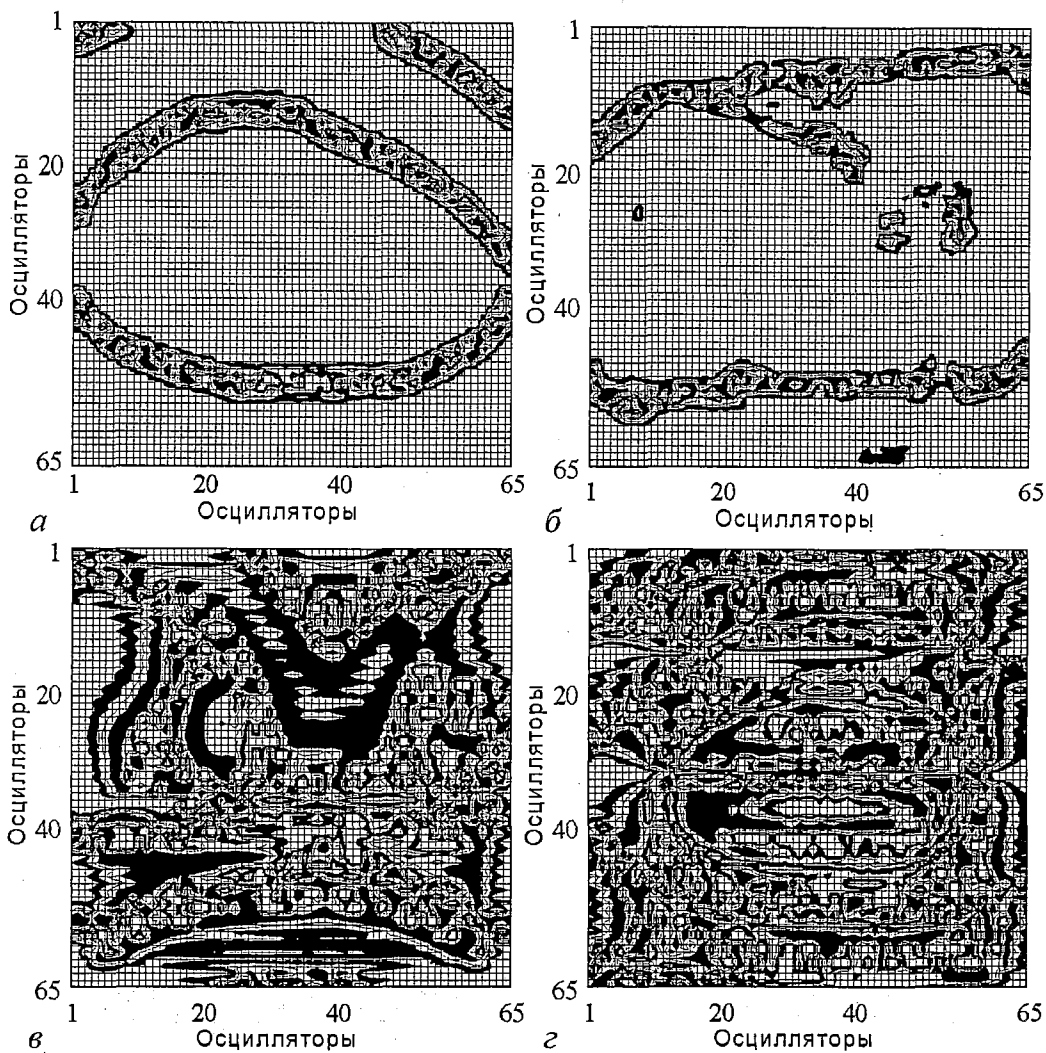


Рис. 8. Потеря синхронизации в системе 65×65 сильно связанных осцилляторов при изменении параметра a : $a=0.15 \rightarrow \Delta\Phi=1.22e-01$ (а); $a=0.26 \rightarrow \Delta\Phi=1.23e-01$ (б); $a=0.28 \rightarrow \Delta\Phi=4.85e-01$ (в); $a=0.3 \rightarrow \Delta\Phi=5.00e-01$ (г)

Таблица

Зависимость средней разности фаз колебаний от параметра a в системе 10×10 сильно связанных осцилляторов

a	0.15	0.26	0.28	0.3
$\Delta\Phi$	1.44E-04	7.53E-03	3.65E-02	6.39E-02

выделения энергии будет носить временный характер, поскольку синхронизация возникает лишь на какой-то промежуток времени. Так как основным условием возникновения синхронных колебаний при сильном хаосе является ограниченность размеров системы взаимодействующих осцилляторов, то можно говорить о возникновении в твердом теле большого числа малых областей - кластеров, которые могут в некоторый момент времени начать выделять энергию. Они, фактически, при этом будут являться некоторыми внутренними источниками выделения тепла.

Выводы

Предлагаемая нелинейная модель синхронизации колебаний атомов в кластере позволяет представить кластеры на этапе предплавления не только как структурное образование. Согласно модели синхронизации, кластер представляет собой динамическое и энергетически активное образование, формирующее новое фазовое состояние вещества - мезофазу предплавления. Существование кластера как активного структурного элемента обусловлено взаимодействием коллективных степеней свободы для ограниченного числа связанных пространственно-распределенных колеблющихся атомов. Взаимодействие в такой системе приводит к стационарной генерации энергии, а не локальной, как в случае невозбужденных систем. В силу случайных изменений величины средней разности фаз колебаний кластера с течением времени, внутри кластера генерация энергии носит статистический характер, обуславливая протяженность переходных процессов во времени и флуктуационность процесса в целом. Самоподдерживающийся процесс синхронизации колебаний в кластерах объясняет стационарность переходных процессов в изотермическом режиме. Таким образом, макроскопический подход, используя методы нелинейной динамики, позволяет объяснить механизм возникновения корреляций и дать представление о причине аномального выброса тепла вблизи точки плавления.

Библиографический список

1. Битюцкая Л.А., Машкина Е.С. Кооперативные эффекты пред- и постпереходных состояний при плавлении германия // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21, вып. 17. С. 8-11.
2. Битюцкая Л.А., Машкина Е.С. Влияние анизотропии кристаллической структуры на переходные процессы при плавлении сурьмы // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21, вып. 20. С. 30.
3. Битюцкая Л.А., Машкина Е.С. Особенности пред- и постпереходных состояний при плавлении меди // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21, вып. 24. С. 90.
4. Bityutskaya L.A., Mashkina E.S. System of kinetic parameters of the transition processes under melting of crystalline substances // Phase Transition. 2000. Vol. 71. P. 317.
5. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкости. Л., 1975.
6. Khait Yu.L. Calculation of narrow temperature interval of premelting phenomena // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. Vol. 131. P. K19.
7. Анищенко В.С., Вадивасова Т.Е., Астахов В.В. Нелинейная динамика хаотических и стохастических систем. Саратов: Изд-во СГУ, 1999. 368 с.
8. Belykh V., Belykh I., Hasler M., Nevidin K. Cluster synchronization in three-dimensional lattices of diffusively coupled oscillators // International Journal of Bifurcation and Chaos. 2003. Vol. 13, №. 4. P. 755.
9. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела: Учебник для вузов. 3-е изд. М.: Высшая школа, 2000. 493 с.
10. Osipov G., Pikovskiy A., Rosenblum M., Kurths J. Phase synchronization effects in a lattice of nonidentical Rössler oscillators // Phys. Rev. E. Vol. 55.
11. Карасевский А.И., Любашенко В.В. Физические процессы в твердых телах, приводящие к плавлению. I. Фазовый переход первого рода в кристалле с вакансиями // Расплавы. 1997. № 3. С. 80.

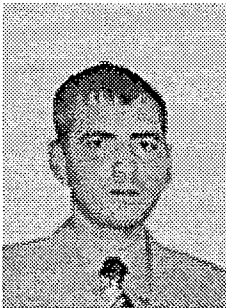
Воронежский государственный
университет

Поступила в редакцию 07.04.2004
после доработки 15.06.2004

MODELING OF COOPERATIVE EFFECTS OF PRE-MELTING FROM POSITIONS OF THE DETERMINISTIC CHAOS THEORY

S.G. Zhitskey

Melting of crystal substances is considered from positions of deterministic chaos. It gives an explanation of the heat generation effects near the melting point in the real dynamic conditions. The behavior of the crystal lattice in the real melting is investigated on the base of the spatial-distributed model of coupled chaotic oscillators. It is shown that a transition is possible from solid to qualitatively new ordered state as a result of chaotic synchronization of oscillation of lattice points. Conditions are considered of such transition. Received results are compared with the results of earlier examinations.



Жицкий Семен Григорьевич - родился в Грозном (1978), окончил Воронежский государственный университет по специальности «физика полупроводников и микроэлектроника» (2001). Аспирант физического факультета ВГУ.