

01;05

Пространственно-временной хаос в процессе образования твердотельного состояния

© Н.В. Бодягин, С.П. Вихров

Рязанская государственная радиотехническая академия

Поступило в Редакцию 21 апреля 1997 г.

Рассматривается динамика образования твердой фазы вещества. Установлено наличие стадии низкоразмерного пространственно-временного хаоса в процессе отвердевания. Обсуждается идея восстановления динамики роста по структуре материала.

Переход от жидкого (газообразного) состояния вещества к твердотельному является процессом самоорганизации. Для исследования его динамики может быть использован известный в теории нелинейных систем метод Такенса [1].

Вещество при отвердевании изменяет свои свойства во времени и неоднородно распределяется в пространстве, т.е. является пространственно-временной системой. Для реконструкции ее динамики необходимо восстановить временную эволюцию с помощью метода Такенса в различных точках структуры материала. Такой подход возможен, но несовместим с современными вычислительными мощностями. Более перспективным представляется получение информации о динамике роста из характеристик структуры материала.

В [2] доказана возможность реконструкции пространственного распределения мгновенных снимков пространственно-временной системы с помощью методов, разработанных для восстановления временной эволюции. "Мгновенным снимком" процессов отвердевания является поверхность материала. Исходя из этого, мы измеряли фрактальную размерность D_S поверхностей арсенида галлия, углерода, аморфного кремния, вольфрама и других материалов по профилю поверхности, получаемому с помощью туннельного электронного микроскопа. Высота профиля отсчитывалась от некоторого уровня, принятого за нулевой, и измерялась через дискретные расстояния в 15–20 тысячах точек

в каждом случае. Для обработки данных использовался алгоритм Грассбергера–Прокаччи. Было установлено, что для всех поверхностей величина D_S заключена в интервале от 2 до 3 и имеет дробную часть. Аналогичные значения D_S были обнаружены у поверхностей различных материалов, исследованных методами адсорбции, вторичной электронной спектроскопии, малоуглового рассеяния, а также в структуре пористых и аморфных материалов [3,4].

То, что фрактальная размерность имеет величину $2 < D_S < 3$ означает [5], что структура поверхности материалов может быть описана как "застывший" низкоразмерный хаос.

По аналогии с показателями Ляпунова, характеризующими временную эволюцию системы λ_t , для структуры поверхности введем понятие пространственных показателей Ляпунова λ_r . Они могут быть определены с помощью методов измерения λ_t путем прямой замены времени на расстояние.

λ_r и λ_t характеризуют устойчивость пространственно-временной системы. Положительные λ_r определяют скорость разбегания близких траекторий системы в фазовом пространстве и вычисляются по формуле

$$\lambda_t = A/t_c, \quad (1)$$

где A — константа; t_c — время корреляции, за которое система утрачивает информацию о своем начальном состоянии. По аналогии можно предположить, что λ_r характеризует пространственные корреляции и определяется как

$$\lambda_r = B/l_c, \quad (2)$$

где B — константа, l_c — длина корреляции, т.е. расстояние между двумя областями структуры вещества, на котором взаимная информация между областями становится равной нулю. С позиции термодинамики λ_r определяет степень неравновесности структуры вещества.

В работе [6] было показано, что l_c и t_c определяются по формулам

$$l_c = \rho_t/2\rho_S, \quad (3)$$

$$t_c = \rho_r/2\rho_S, \quad (4)$$

где ρ_t и ρ_r — плотности временной и пространственной размерностей, ρ_S — плотность обычной энтропии. С другой стороны,

$$\rho_t/\rho_r = v_i, \quad (5)$$

где v_i — скорость распространения информации в среде [7]. С учетом формул (3) и (4) выражение (5) примет вид

$$l_c/t_c = v_i. \quad (6)$$

В процессах отвердевания носителями информации являются атомы вещества, поступающие на поверхность во время роста. Поэтому v_i эквивалентна скорости образования твердотельного состояния v_g , а выражение (6) можно переписать в виде

$$l_c/t_c = v_g. \quad (7)$$

Подставляя в (7) выражение для l_c и t_c из формул (1) и (2), получим

$$\lambda_t/\lambda_r = Cv_g, \quad (8)$$

где $C = A/B$ — константа. Очевидно, что C , v_g — положительные величины. Поэтому из выражения (8) следует, что если существует $\lambda_r > 0$, то существует и $\lambda_t > 0$. Другими словами, если система хаотически распределена в пространстве, то во времени она тоже ведет себя нерегулярно. Для больших пространственно-временных систем, по-видимому, справедливо и обратное утверждение.

Поскольку структура поверхности материалов представляет собой "замороженный" хаос, то найдется хотя бы один $\lambda_r > 0$ [5]. Следовательно, существует по крайней мере один $\lambda_t > 0$, а динамика образования твердотельного состояния определяется пространственно-временным хаосом небольшой размерности.

Предлагаемый подход позволяет идентифицировать динамику процессов роста с помощью обработки методами нелинейной динамики информации о структуре материалов, получаемой традиционными способами. Точное знание динамики позволит управлять процессами отвердевания и получать материал с запланированной структурой.

Список литературы

- [1] Aivazov A.A., Bodyagin N.V., Vikhrov S.P. // Material Research Society USA, Spring Meeting Proceedings. 1996. V. 420. P. 145–151.
- [2] Afraimovich V.S., Ezersky A.B., Rabinovich M.I. // Physica D. 1992. V. 58. P. 365–383.

-
- [3] *Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогов А.А.* Синергетика и фракталы в материаловедении. М.: Наука, 1994.
- [4] *Федер Е.* Фракталы. М.: Мир, 1991. 298 с.
- [5] *Никлис Г., Пригожин И.* Познание сложного. М.: Мир, 1990. 342 с.
- [6] *Корзинов Л.Н., Рабинович М.И.* // Изв. вузов. ПНД, 1994. Т. 2. № 1. С. 59–69.
- [7] *Grassberger P* // Physica Scripta. 1989. V. 40. P. 346–353.