

М.І. Мар'ян, Н.В. Юркович

## Дисипативні структури та фрактальний підхід до формування некристалічного стану

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, e-mail: [mcmaryan@rambler.ru](mailto:mcmaryan@rambler.ru)

Установлено, 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:** дисипативні структури, некристалічний стан, синергетичні ефекти, процеси самоорганізації, фрактал, самоузгоджений розгляд.

Стаття постуила до редакції 19.06.2015; прийнята до друку 15.12.2015.

Авторами [1] отримано самоузгоджену систему рівнянь відносно частки атомів у м'яких атомних конфігураціях  $s$ , приведених середньоквадратичних зміщень атомів уздовж зв'язку  $y_l$  та нецентральної

взаємодії  $y_t$  у випадку різних швидкостей охолодження  $q$ :

$$F_1(s) = -\tilde{a}_0 \tilde{q} h + ch^2 + bh^3, \quad F_2(y_l) = \frac{h y_l}{t y_l}, \quad F_3(y_t) = \frac{h y_t}{t y_t} \quad (1)$$

Тут коефіцієнти  $\tilde{a}_0, c, b$  описують дисипативний процес релаксації частки атомів у м'яких конфігураціях, деформації та зсуву до рівноважного значення з часом релаксації  $t_{ij} = a_{ij}^{-1}$ , параметри  $h_{y_l}, h_{y_t}$  – описують

відхилення системи від рівноважного стану, функції  $F_1(s), F_2(y_l), F_3(y_t)$  визначаються згідно рівнянь [1, 2]:

$$F_1(s) = s + 12 \cdot (1-s) \left\{ \frac{e^{-y_l}}{2} \left[ B(y_l) - \frac{P e^{y_l}}{12(1-s)^2} \left( \frac{r}{a_0} \right)^2 \right] + \frac{0.1}{(1+2y_l)} \right\} - 12 \cdot (1-s) s \left( 1 + \frac{y_l}{4} - \frac{1}{6} \ln \frac{B(y_l)}{2} \right) A(y_l) - t \ln \frac{\frac{1}{s} - 1}{\frac{1}{1-s} - 1}$$

$$F_2(y_l) = \frac{3e^{-y_l}t}{8\sqrt{2}(1-s)} \left[ B(y_l) + \frac{P e^{y_l}}{6(1-s)^2} \left( \frac{r}{a_0} \right)^2 \right]^{-1} \left( 1 + \frac{0.022(1+2y_t)^{-2}}{e^{y_l} \left[ B(y_l) + \frac{P^* e^{y_l}}{6(1-s)^2} \left( \frac{r}{a_0} \right)^2 \right]} \right)^{-y_l},$$

$$F_3(y_t) = \frac{3(1+2y_t)t}{8(1-s)e^{\frac{y_l}{2}}} \left[ B(y_l) + \frac{P \cdot e^{y_l}}{6(1-s)^2} \left( \frac{r}{a_0} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} - y_t,$$

де міжатомна відстань  $r$  при наявності зовнішнього тиску  $P$  рівна

$$r = a_0 \left( 1 + \frac{y_l}{4} - \frac{1}{6} \ln \left\{ \frac{B(y_l)}{2} \right\} \right)$$

$$B(y_l) = 1 + \sqrt{1 + \frac{P r^2 e^{y_l}}{6(1-s)^2 a_0^2}}$$

$$A(y_l) = 0.62 \left[ \exp \left\{ 0.36 - 0.91 y_l + 1.94 \ln \frac{B(y_l)}{2} \right\} - \exp \left\{ 0.18 - 0.955 y_l + 0.97 \ln \frac{B(y_l)}{2} \right\} \right]$$

$a_0$  – міжатомна відстань в гармонічному наближенні,  $t = k_B T / V$  -приведена температура,  $k_B$ - постійна Больцмана,  $V$ -енергія дисоціації зв'язку. Самоузгоджена система рівнянь (1) дає можливість дослідити динамічну стійкість та температурну поведінку системи при нерівноважних фазових перетвореннях (швидкостях охолодження системи  $q > q_c$ , де  $q_c$  - гранична швидкість охолодження [1]), зокрема при переході в некристалічний стан через процеси самоорганізації та формування дисипативних структур.

У даній статті представлено аналіз утворення в некристалічних тілах (НКТ), отриманих при швидкостях охолодження  $q > q_c$ , 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.

## I. Процеси самоорганізації та формування дисипативних структур в некристалічних тілах

Розв'язок отриманої авторами [1, 2] системи рівнянь (1) проведено чисельно з використанням ітераційної процедури [3] в середовищі Delphi

(рис. 1).

Результати розрахунку температурної залежності частки атомів у м'яких атомних конфігураціях  $s$ , приведених середньоквадратичних зміщень атомів вздовж зв'язку  $y_l$  та  $y_t$  нецентральної взаємодії  $y_t$  у випадку різних швидкостей охолодження  $q$  ( $q = (5 \div 20)q_c$ ) представлено на рис. 2 - 4. (Використано такі позначення:  $t_0$  - приведена температура гартування,  $t_m$  - приведена температура плавлення,  $t_g$  - приведена температура розм'якшення). Зокрема, для НКТ систем  $As - S(Se)$  характерні значення граничної швидкості охолодження  $q_c = 5 \cdot 10^{-3} K/c$  та швидкостей охолодження  $q = (1,5 \cdot 10^{-2} \div 1)K/c$  [2].

Проаналізуємо особливості зміни динамічної стійкості стану системи зі зміною зовнішнього керуючого параметру – швидкості охолодження  $q$ , при  $q \rightarrow q_c$ . 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. 2 - 4). Перша область охоплює стан системи при швидкостях охолодження  $q < q_c$ , яка містить перехід від динамічно нестійкого до динамічно стійкого твердого (кристалічного, квазікристалічного) стану та супроводжується

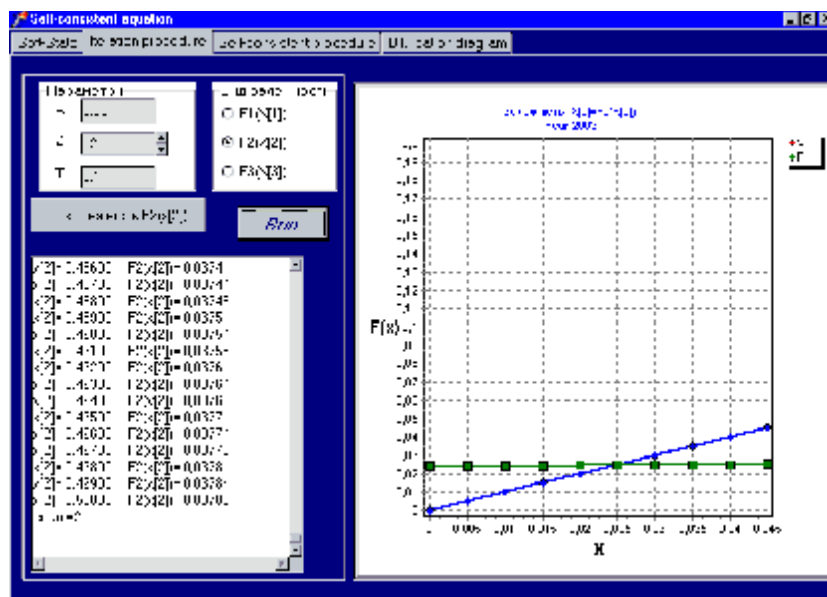


Fig. 1. The visual interface is self-consistent calculation equations (1) in the Delphi.

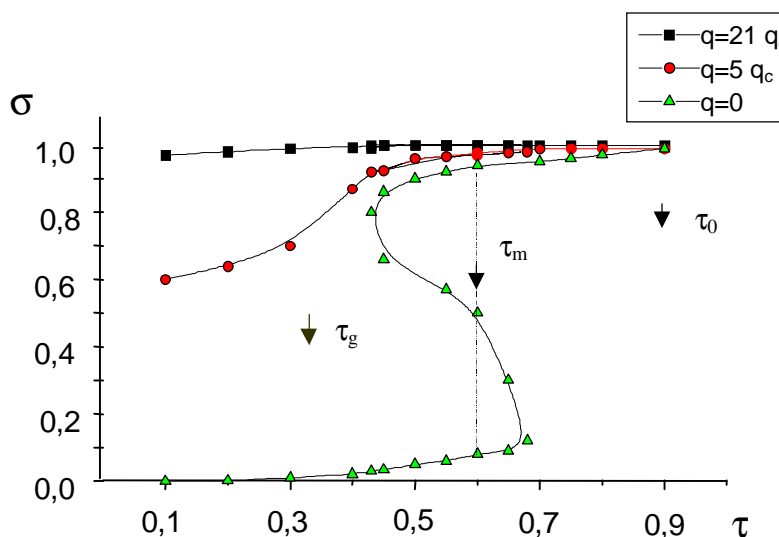


Fig. 2. Temperature dependence of atomic particles in soft configurations  $S$   $q$  at different speeds cooling.

аномальним збільшенням 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  $q$  (рис. 2). Відхилення середньоквадратичних зміщень атомів від аналогічних значень у рівноважному стані  $\Delta y_l(q) = y_l(q) - y_l(q=0)$  з ростом  $q$  збільшується. Як видно з рис. 2, ступінь статистичного розупорядкування у твердому тілі зростає при  $q \rightarrow q_c$  (різка зміна спостерігається при переході в 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  $q$  для динамічно

стійкої кристалічної вітки (рис. 2). При  $q < q_c$  в області температур переходу  $t = t_m$  ( $t_m$  -приведена температура плавлення) частка атомів у м'яких атомних конфігураціях та середньоквадратичні зміщення атомів змінюються стрибкоподібно (величина даної зміни зменшується з ростом  $q$ ) (рис. 3). Отже, макроскопічні властивості системи, пропорційні  $S$ ,  $y_l$  (наприклад, об'єм), та їх похідні  $s'(t)$ ,  $y_l'(t)$ , (наприклад, коефіцієнт лінійного розширення, теплоємність) володіють аномалією при  $q \rightarrow q_c$ . Друга область, яка реалізується при  $q > q_c$ , характеризується неперервним аномальним зростанням жорсткості каркасу та пружних постійних, неперервним зменшенням  $s$ ,  $y_l$  при пониженні температури. Отже, крива  $s(t, q)$ , при

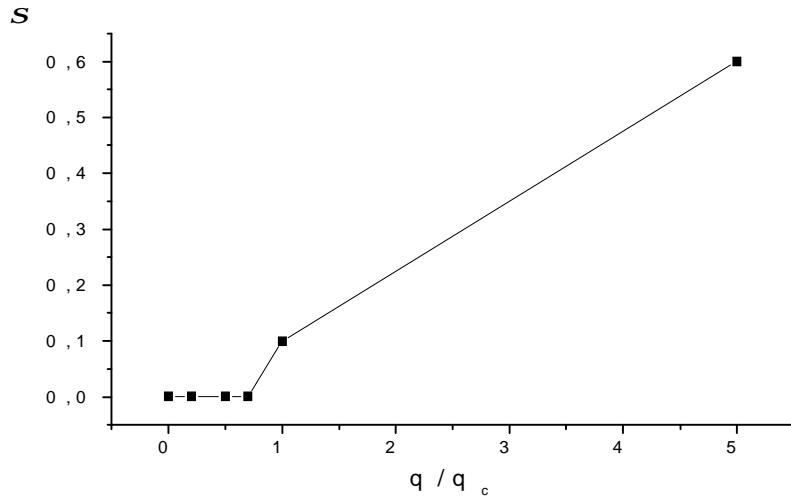


Fig. 3. The bifurcation dependence of atomic particles in soft configurations  $S$  at  $t = 0,1$  on the cooling rate  $q/q_c$ .

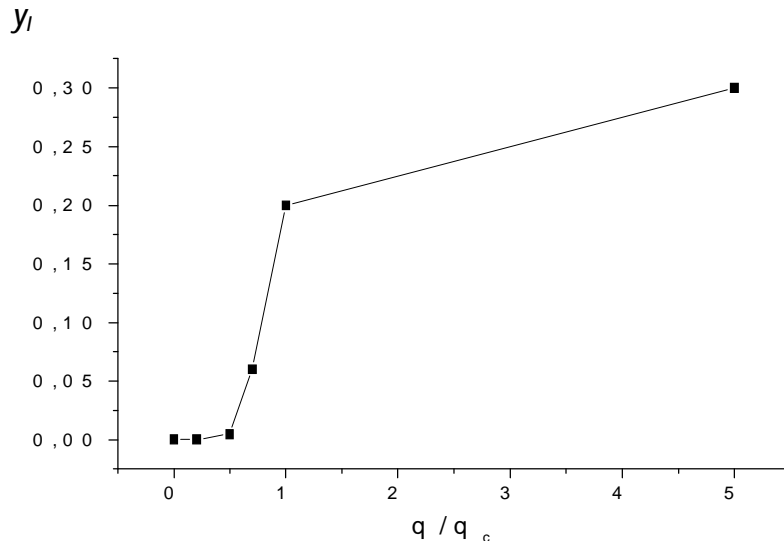


Fig. 4. The bifurcation dependence of reduced mean displacement of atoms at  $y_l$  by temperature  $t = 0,1$  on the cooling rate  $q/q_c$ .

$q = q_c$  розмежує в області температур  $t \geq t_c$  існування метастабільної переохолодженої рідини та динамічно стійкої некристалічної системи. Вона визначає нижню границю можливого в області температур від  $t_0$  до  $t_c$  при охолодженнях  $q < q_c$  ( $t_0$  –приведена температура гартування НКТ) існування переохолодженого стану. Температура  $t_c$  на кривій  $s(t, q)|_{q=q_c}$ , для якої вироджуються метастабільні стани, є температурою співіснування при заданому тиску трьох станів – кристалічного, рідкого та некристалічного: 
$$\left( \frac{q^2 s}{q t^2} \right)_{t_c} = 0.$$

Дослідження особливостей поведінки термодинамічних властивостей системи в околі

$\{t_c, q_c\}$  викликає самостійний інтерес [4].

## II. 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 рівні мікроструктурної перебудови, для яких в залежності від значень керуючого параметру  $q$  формується некристалічна структура з параметром порядку  $h$ . Використовуваний нами параметр порядку визначається спонтанною появою ненульових

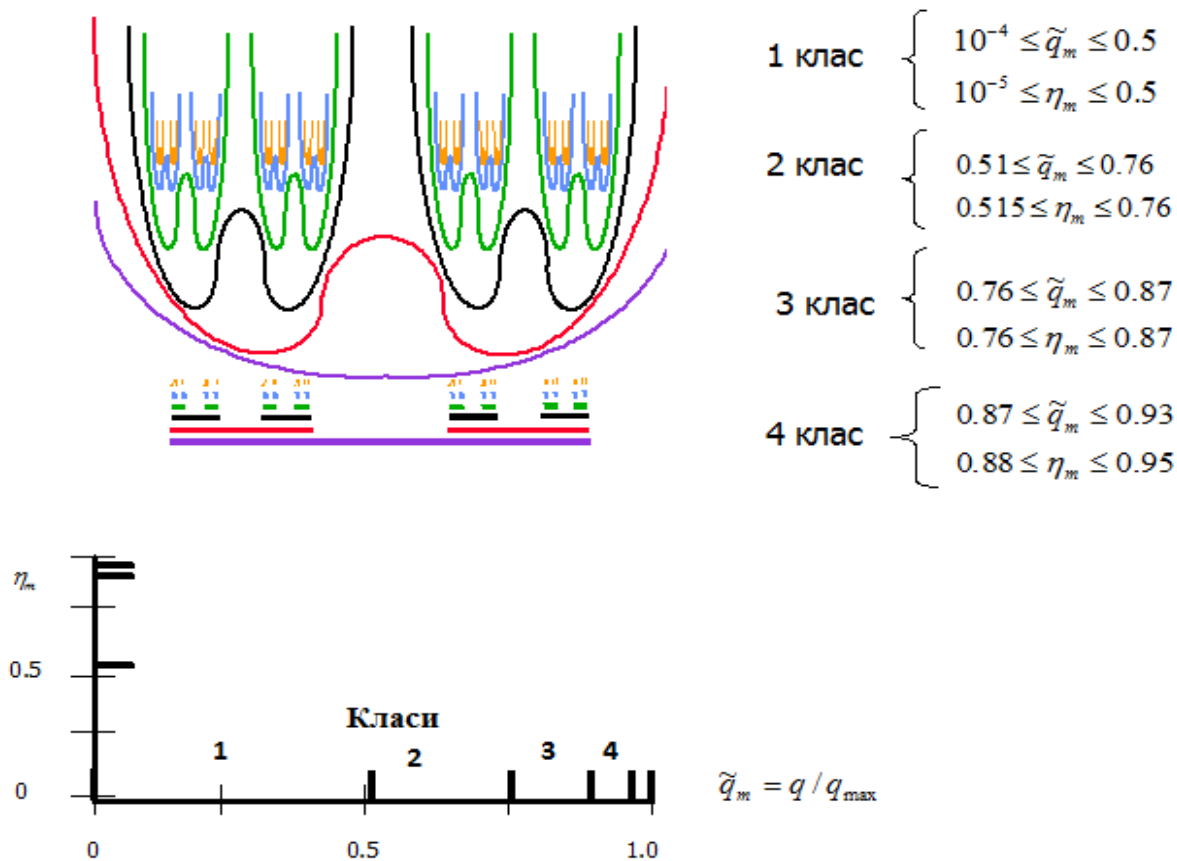


Fig. 5. Levels of structuring conditions and range of dissipative structures tubing.

значень модуля зсуву (рис. 3) та залежить від ступеня відхилення системи від рівноважного стану. Утворена при  $q > q_c$  фрактальна структура є результатом втрати динамічної стійкості основного рівноважного стану при пониженні температури в області  $t \leq t_m$ . 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 відповідає та визначає фрактальну дисипативну структуру [5-7]. 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].

Розподіл частки атомів у м'яких конфігураціях (рис. 2) при зміні технологічних режимів одержання відповідає фрактальній структурі (рис. 5). Тут  $h_m = s - s_e$  – відхилення частки атомів у м'яких конфігураціях НКТ від рівноважного значення (змінюється в інтервалі 0,1),  $\tilde{q}_m = q / q_{\max}$  – приведена до максимальної швидкості охолодження (зокрема, для НКТ систем  $As - S(S_e)$  характерні

значення  $q_{\max} = (1 \div 5 \cdot 10^2) K / c$  [2], а  $\tilde{q}_m$  змінюється в інтервалі 0,1). Отриманий результат дає змогу визначити у вигляді фрактальної структури ціле сімейство НКТ в залежності від хімічного складу та технологічних режимів одержання з відповідними рівнями структурування (класи 1-4  $\{\tilde{q}_m, h_m\}$ , рис. 5). На рис. 5 представлені класи дисипативних структур з відповідними значеннями  $\{\tilde{q}_m, h_m\}$ . Необхідно наголосити, що характер залежності ступеня розупорядкування некристалічних тіл від  $q$  корелює зі зміною пружних постійних при заданій температурі [4, 5], коли з ростом  $q$  відбувається їх зменшення та каркас матеріалу стає більш лабільним та здатним до перебудови під дією зовнішніх факторів. Отриманий

фрактал відповідає фракталу Кантора (рис. 5) з фрактальною розмірністю  $d_f = 0.631$  та

узгоджується з результатами моделювання структури некристалічних тіл в рамках теорії нейронних мереж з алгоритмом саморганізації Хебба [3,6]. При формуванні НКТ не просто механічно об'єднуються м'які атомні конфігурації. Вони певним чином синергетично трансформуються: отримують нові властивості, які були відсутні у вихідному рівноважному стані, частина ж попередніх властивостей станів відпадає. М'які атомні конфігурації отримують нові властивості при  $q \geq q_c$ , які відсутні при  $q < q_c$ : м'які стани структуруються (розміщуються впорядковано на рівні середнього порядку) та отримують можливість дифундувати

самоузгоджено. Саме це є проявом синергетичного ефекту при формуванні НКТ.

## Висновки

Проведено розрахунок температурної залежності частки атомів у м'яких атомних 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.

- [1] M.I. Mar'yan, N.V. Yurkovych, XIV International Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems(Ivano-Frankivsk, 2015), p. 326.
- [2] M.I. Mar'yan, N.V. Yurkovych, Uzhhorod university scientific herald. Series Physics 33, 25 (2013).
- [3] N.V. Yurkovych, M.I. Mar'yan, Uzhhorod university scientific herald. Series Physics 28, 64 (2010).
- [4] N.V. Yurkovych, M.I. Mar'yan, Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics 29, 79 (2011).
- [5] M. Mar'yan, A. Szasz, Self-organizing processes in non-crystalline materials: from lifeless to living objects (Budapest: OncoTherm, 2000).
- [6] M. Popescu, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials 5(5), 1059 (2003).
- [7] M.I. Mar'yan, N.V. Yurkovych, Uzhhorod university scientific herald. Series Physics, 34, 40 (2013).

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

## Dissipative Structures and Fractal Approach to the Formation of Non-Crystalline States

*Uzhgorod National University, Voloshina str. 54, Uzhgorod, Ukraine, 88000*

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:** dissipative structure, non-crystalline state, synergetic effects, self-organising processes, fractal, self-consistent consideration.