МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. Ломоносова
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

УДК 539.219.3, 536.425, 53.072.121

Мортеза Хаджи Махмуд Задех

ДИНАМИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ С АНОМАЛИЯМИ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Специальность 01 04 07- физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

М О С К В А — 2005

Работа выполнена на кафедре физики твердого тела физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, профессор **Кацнельсон Альберт Анатольевич**,

доктор физико-математических наук, профессор **Лубашевский Игорь Алексеевич**

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор **Каленков Сергей Геннадиевич**

доктор физико-математических наук, профессор **Морозов Владимир Георгиевич**

Ведущая организация:

Институт Общей Физики РАН

Защита состоится « 17 » марта 2005 г. В 16-30 на заседании Диссертационного совета К.501.001.02 в Московском государственном университете им. М.В.Ломоносова по адресу: 119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В.Ломоносова, физический факультет, ЮФА.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова.

Автореферат разослан «_____»________________2005 г

Ученый секретарь

Диссертационного Совета К.501.001.02

кандидат физико-математических наук И.А.Никанорова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Развитие водородной энергетики требует фундаментального исследования водородсодержащих систем, по своей природе являющихся открытыми и неравновесными. Разнообразие свойств и проявлений неравновесных фазовых переходов в свою очередь требует развития новых методов их описания. В частности, в сплавах палладия после насыщения водородом наблюдается сложная немонотонная структурная релаксация, которую сложно описать в рамках существующих классических теорий, так как исследуемая система является не только открытой и неравновесной, но также является системой со сложной иерархической дефектной и энергетической структурой, эволюция которой может носить стохастический характер. Точное микроскопическое описание подобных систем в настоящее время невозможно из-за необходимости учета взаимодействия большого количества элементов разной структуры и недостатка экспериментальных и теоретических знаний на масштабах атомных кластеров. Поэтому происходит поэтапное развитие методов вторичной динамики, объясняющих все новые особенности немонотонной структурной релаксации. На сегодняшний день актуально развитие новых моделей.

Данная работа является следующей в цепочке моделей, объясняя природу возникновения неравновесных фазовых переходов, а также синхронизацию структурной эволюции микрообластей сплава, качественное описание которой сформировалось предыдущими моделями. Актуальность исследований обусловлена также наблюдением подобного класса явлений в социальных, биологических и экономических системах. В работе использован новый подход к анализу динамических состояний через управление кинетическими коэффициентами системы, учета их аномальных свойств и положения системы в фазовом пространстве. Для этой цели было введено понятие динамической ловушки. Физика систем с динамическими ловушками находится на начальном этапе развития, что также обусловливает актуальность данного исследования, позволившего выявить основные свойства фундаментальной системы — цепочки осцилляторов с динамическими ловушками.

Цели работы.

1. Исследовать особенности и механизм неравновесных фазовых переходов в отдельном осцилляторе и в цепочке осцилляторов с динамическими ловушками.
2. Исследовать динамические состояния в цепочке осцилляторов с динамическими ловушками после возникновения неустойчивости при разных физических параметрах модели.

Научная новизна и практическая значимость работы.

1. Разработан новый способ исследования неравновесных фазовых переходов в сложных открытых системах путем построения аномальных функций кинетических коэффициентов в области динамической ловушки. (ОДЛ) — «низкоразмерной» неограниченной области фазового пространства, где все характерные масштабы времени динамики системы принимают значения, существенно превышающие их значения в остальной части фазового пространства.
2. Впервые проведено исследование динамических состояний в отдельном осцилляторе и в цепочке осцилляторов с динамическими ловушками. Выявлен механизм и условия возникновения различных динамических состояний.
3. Построена новая модель в цепочке моделей, направленных на объяснение немонотонной структурной эволюции насыщенных водородом сплавов палладия. Модель объясняет неустойчивость однородного со-

стояния сплавов и возникновение синхронизации эволюции различных областей сплава.

Положения, выносимые на защиту.

1. В конденсированных системах динамические ловушки индуцируют образование макроскопических состояний, характеристики которых определяются не стационарными точками регулярной силы, а сложным кооперативным движением частиц. Эти динамические состояния можно интерпретировать как фазовые состояния нового типа, а переходы между ними — фазовыми переходами нового типа.
2. Фазовые переходы в цепочке осцилляторов, индуцированные динамическими ловушками, характеризуются:
   - Спонтанным нарушением симметрии системы. В зависимости от параметров системы функция распределения локальной симметрии приобретает либо бимодальную форму, либо характеризуется двумя масштабами с формированием «жирных», хвостов и значительным отклонением от гауссового вида для обоих компонент.
   - В зависимости от параметров системы функция распределения индивидуальных скоростей движения частиц либо обладает аномально большой дисперсией, либо приобретает негауссовый вид с ярко выраженным изломом в области максимума.
   - В системе возникают долгоживущие макроскопические состояния, которые обладают индивидуальной жизнью. Характерное время жизни таких макроскопических состояний значительно превосходит среднее время нахождения в них отдельных частиц, формирующих данные состояния в текущий момент времени.
   - При определенных параметрах формируются иерархические состояния.

3. Динамика системы с динамическими ловушками имеет вид последовательных случайных скачкообразных переходов между долгоживущими состояниями, принадлежащими некоторому квазиконтинууму.
4. Случайные силы характеризуются конструктивной ролью в возникновении фазовых переходов. Их наличие необходимо для возникновения рассматриваемых фазовых переходов (это могут быть как внешние случайные силы, так и обусловленные динамическим хаосом). Интенсивность случайных сил должна принадлежать некоторому ограниченному интервалу. Если интенсивность мала или велика, фазовые переходы, индуцированные динамическими ловушками, не возникают.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 6 печатных работ и 3 в электронном виде.

Апробация работы. Материалы диссертации докладывались на следующих семинарах и конференциях:

1. Международная научно-практическая конференция "фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения" (Московский институт радиоэлектроники и автоматики, Москва, 9--12 июня 2003).
2. The Workshop on Traffic and Granular Flow '03 (TGF03) (Delft University of Technology, The Netherlands, 1–3 October 2003).
3. Семинар по проблемам физики неравновесных систем и прикладных задач в описании динамики систем с мотивацией (Институт транспортных проблем Германского Аэрокосмического Центра в Берлине, Германия, 2004).
4. Семинар по проблемам статической физики неравновесных систем, (Университет г. Ростока, Германия, 2004).

5. Семинар по проблемам фазовых переходов в неравновесных системах (Институт Физической Химии, Университет г. Мюнстера, Германия, 2004).
6. 12 международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». (г. Пущино, Московская область, 17–22 января 2005).
7. Семинар по математическому моделированию развивающихся систем (ФИАН, Москва, 2005).

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и содержит 109 страниц, 25 рисунков и список литературы из 115 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение. Обоснована актуальность темы, показана научная новизна и практическая значимость работы, сформулирована цель диссертационной работы, дано краткое содержание глав диссертации. Оригинальные результаты работы содержатся в третьей, четвертой и пятой главах.

Первая глава. Содержит обзор литературы по теме диссертации, состоящий из четырех частей. В первой части рассматриваются работы, посвященные исследованию фазовых переходов, индуцированных шумом. Показывается конструктивная роль шума в физических процессах. Во второй части рассматриваются работы, посвященные исследованию динамического хаоса и переходам между регулярной и хаотической динамикой. В третьей части рассматриваются работы по моделированию немонотонной релаксации в насыщенных водородом сплавах палладия. В четвертой части формулируется концепция динамических ловушек, приводится обзор работ, использующих понятие динамической ловушки, и ставятся задачи диссертационной работы. Приводится отличие нового подхода к описанию фазовых переходов на основе динамических ловушек от классического подхода, основанного на свойствах термодинамического потенциала.

Вторая глава. Приводится описание численного метода, использованного для получения результатов диссертации. После сравнения ряда методов численного решения стохастических дифференциальных уравнений был выбран четырехшаговый метод Рунге-Кутта «CL» с сильным порядком сходимости 1.5. В качестве генератора случайных чисел был выбран генератор псевдослучайных чисел, основанных на рекурсии числа со сдвигом вдоль разрядной сетки, с длинной цикла $3 \cdot 10^{47}$.

Третья глава. Рассмотрен отдельный осциллятор с динамической ловушкой. Для получения динамической ловушки в фазовом пространстве был введен фактор Q, зависящий только от скорости частицы u, управляющий коэффициентами трения (σ) и упругости. Когда скорость частицы мала, регулярная сила ослабевает и ее движение в большей степени определяется действием случайной силы амплитуды ε. Уравнения движения в безразмерном виде следующие:

$$\frac{dz}{dt} = u, \qquad \frac{du}{dt} = -Q(u)\cdot\left(z + \sigma u\right) + \varepsilon\,\xi(t). \tag{1}$$

$$Q(u) = \frac{u^2 + \Delta^2}{u^2 + 1}. \tag{2}$$

Здесь $\xi(t)$ — белый шум, а Δ — параметр эффективности ловушки (0 — ловушка отсутствует, 1 — регулярная сила полностью подавлена при нулевой скорости частицы). Область динамической ловушки в фазовом пространстве представлена на рис. 1.

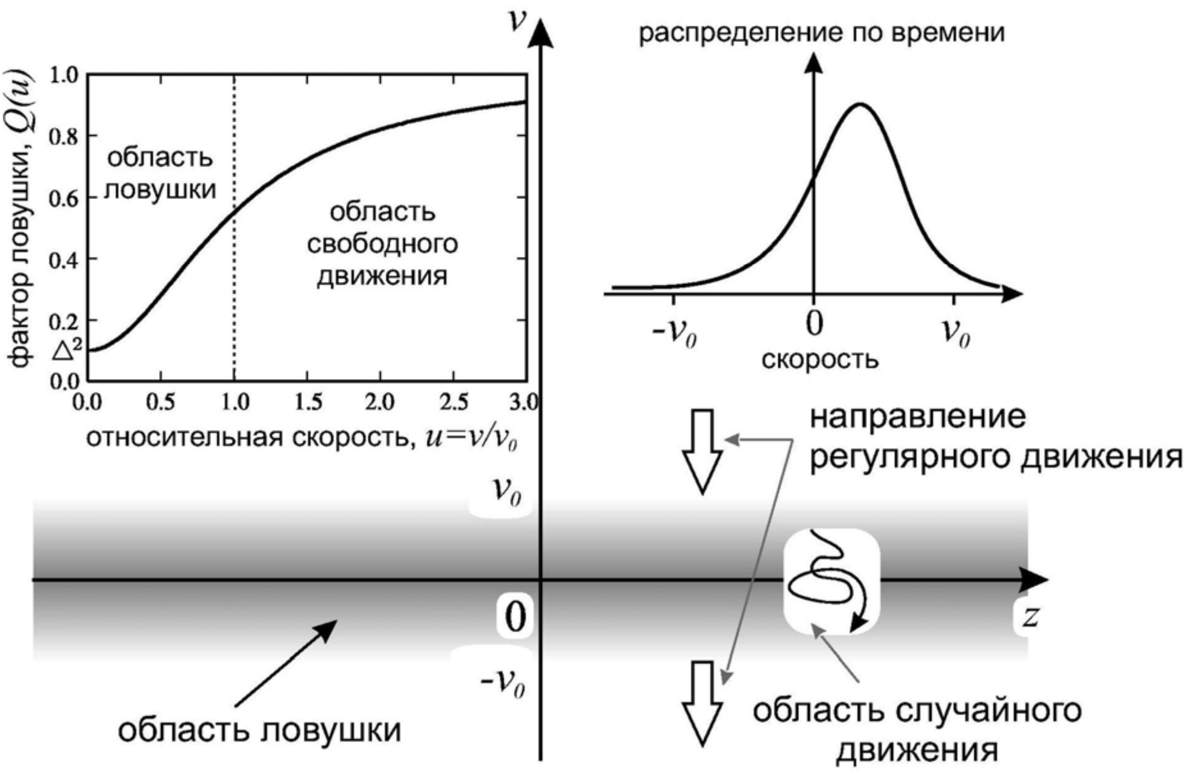

Рис. 1. Область динамической ловушки (ОДЛ) в фазовом пространстве (затемнение). При небольшой скорости частицы регулярная сила подавлена и движение носит в большей степени случайных характер. В ОДЛ распределение скорости асимметрично, из-за чего возникает накачка энергии в осциллятор.

При отсутствии динамической ловушки ($\Delta = 1$) система представляет собой обычный затухающий осциллятор с шумом Функция распределения скорости и координаты в фазовом пространстве является гауссианой, рис. 2, с максимумом в области нулевых значений. С увеличением эффективности ДЛ в точке $\Delta < \Delta_c$ происходит фазовый переход, при котором функция распределения принимает бимодальную форму с двумя максимумами (отчетливо представлены в нижней части рисунка, а также на рис. 4).

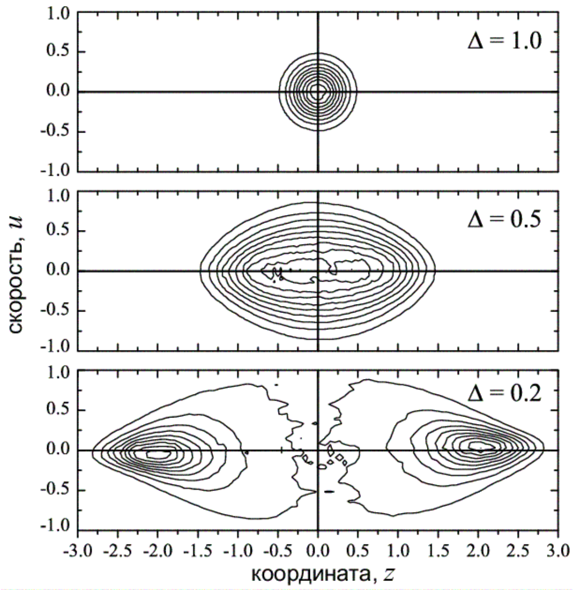

Рис. 2. Контурный вид функции распределения параметров системы в зависимости от эффективности динамической ловушки. ($\sigma = \xi = 0.1$)

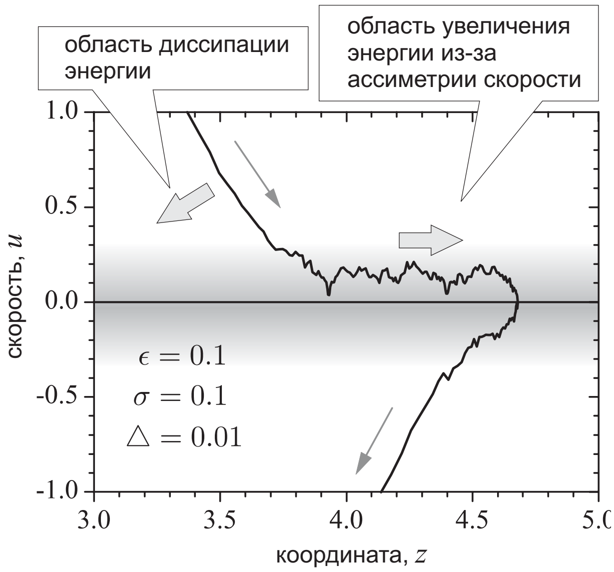

Рис. 3. Фрагмент траектории частицы при прохождении области динамической ловушки. Большими стрелками указано направление действия силы.

Механизм фазового перехода можно понять с помощью рис. 3. Вне ОДЛ система представляет собой затухающий осциллятор. При положительной скорости регулярная сила вталкивает частицу в ОДЛ, где она совершает случайные блуждания. Из этого состояния частица может выйти только при отрицательной скорости в ОДЛ, где регулярная сила за короткое время выталкивает частицу из ОДЛ. Разная роль верхней и нижней части ОДЛ на графике приводит к асимметрии скорости частицы в ОДЛ и, как следствие, к раскачке осциллятора. Увеличение энергии осциллятора при прохождении ОДЛ приводит к тому, что равновесное состояние с $u = 0$ и $z = 0$ (попадающее в ОДЛ) становится неустойчивым. Возникает бимодальная функция распределения.

Второй тип неравновесного фазового перехода, связанного с изменением формы функции распределения скорости, представлен на рис. 4. При наличии ОДЛ возникает двухмасшабность функции распределения (вверху) и негауссовая форма вида $exp(-|u|)$ (внизу). Двухмасшабность связана с наличием двух областей движения с разными свойствами: область динамической ловушки и область регулярного движения.

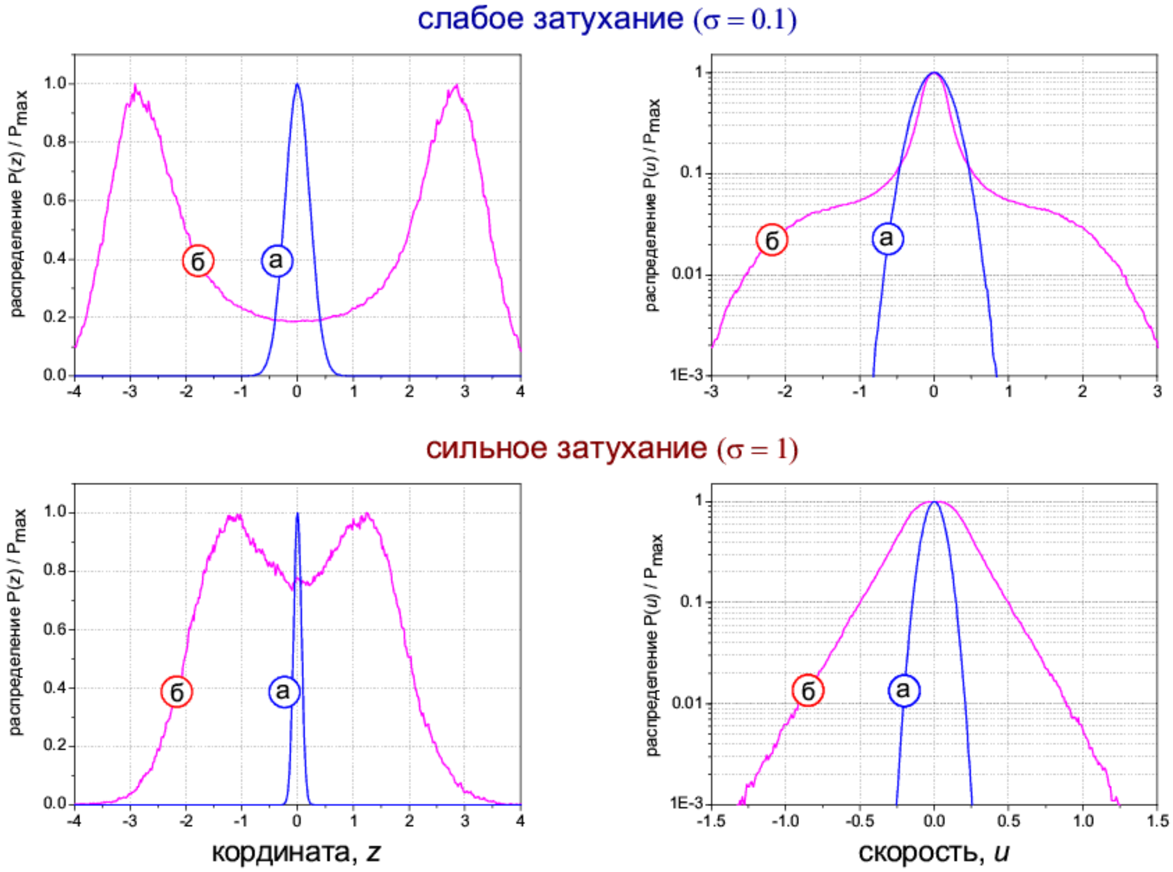

Рис. 4. Функция распределения координаты и скорости при разном затухании, а также при: (а)- отсутствии ловушки и (б)- ее наличии с $\Delta = 0.1$

Проведя большое количество вычислительной работы, была построена фазовая диаграмма перехода от унимодальной функции распределения к бимодальной, рис. 5. Из нее следует, что фазовый переход не происходит при слишком малой или слишком большой интенсивности шума. Существует оптимальное значение интенсивности шума, при котором требуется динамическая ловушка минимальной эффективности для осуществления неравновесного фазового перехода. Эта величина связана с коэффициентом трения, уменьшаясь по мере увеличения трения.

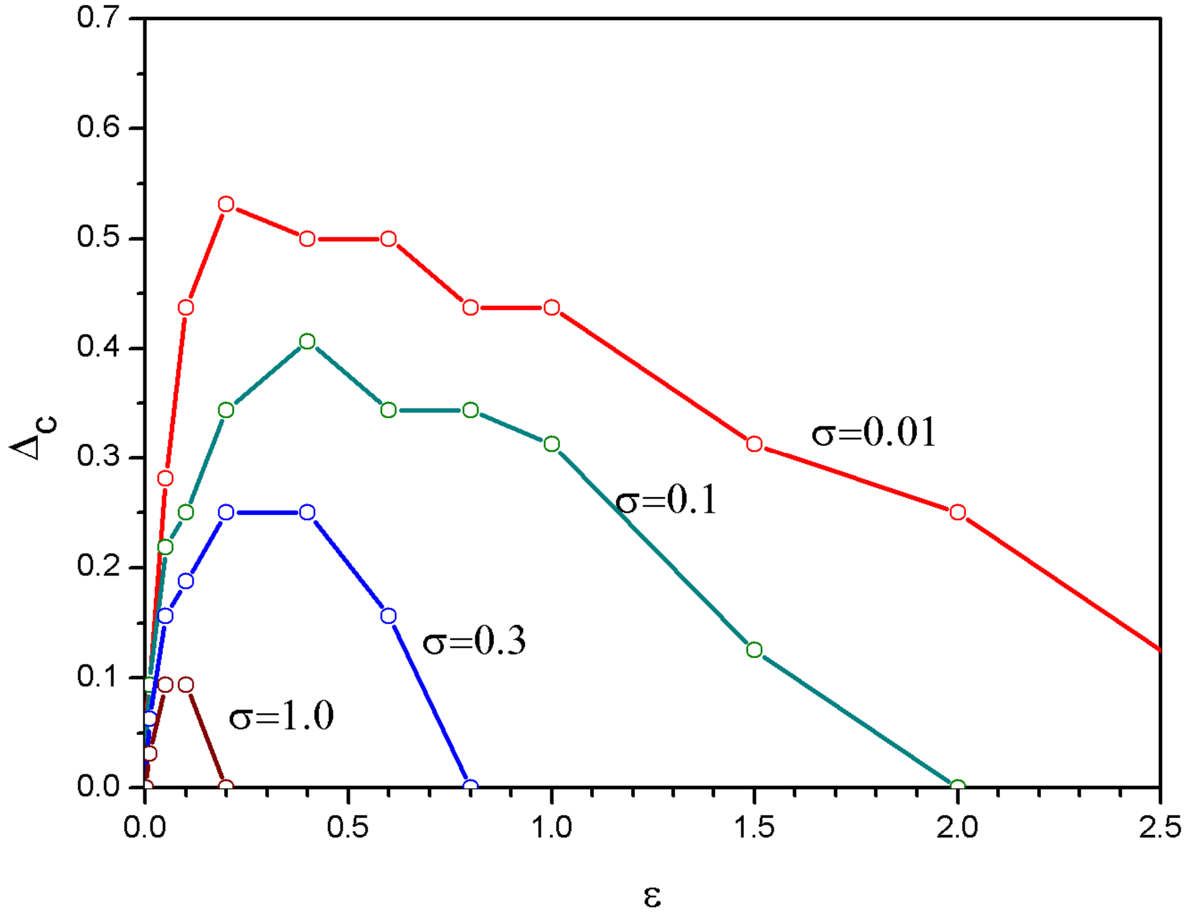

Рис. 5. Фазовая диаграмма перехода от унимодальной к бимодальной форме функции распределения. Зависимость эффективности ловушки, при которой происходит переход Δ_{max}, от интенсивности белого шума ε.

Четвертая глава. Исследована цепочка из 1000 частиц, связанных пружинами. Крайние частицы жестко закреплены. Для каждой частицы численно вычислялись: положение x, скорость v, величина относительного сжатия соседних пружин z (упругое напряжение, характеризующее локальное нарушение симметрии) и его скорость u. ОДЛ была задана фактором $Q(u)$, на частицы действовал белый шум интенсивности ε. Эффективность ловушки задана величиной Δ (1 — нет ловушки, 0 — регулярная сила полностью подавлена при $u = 0$). Еще одним ключевым параметром моделирования является расстояние между частицами l (плотность частиц). При соударении частицы упруго отталкиваются. Уравнения системы в безразмерном виде следующие:

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i, \qquad z_i = x_i - \frac{1}{2}\left(x_{i-1} + x_{i+1}\right)., \qquad i = 2, 3, .., 999. \tag{3}$$

$$\frac{dz_i}{dt} = u_i, \qquad \frac{du_i}{dt} = -Q(u_i)\cdot\left(z_i + \sigma u_i\right) + \varepsilon\,\xi(t). \tag{4}$$

$$Q(u) = \frac{u^2 + \Delta^2}{u^2 + 1}. \tag{5}$$

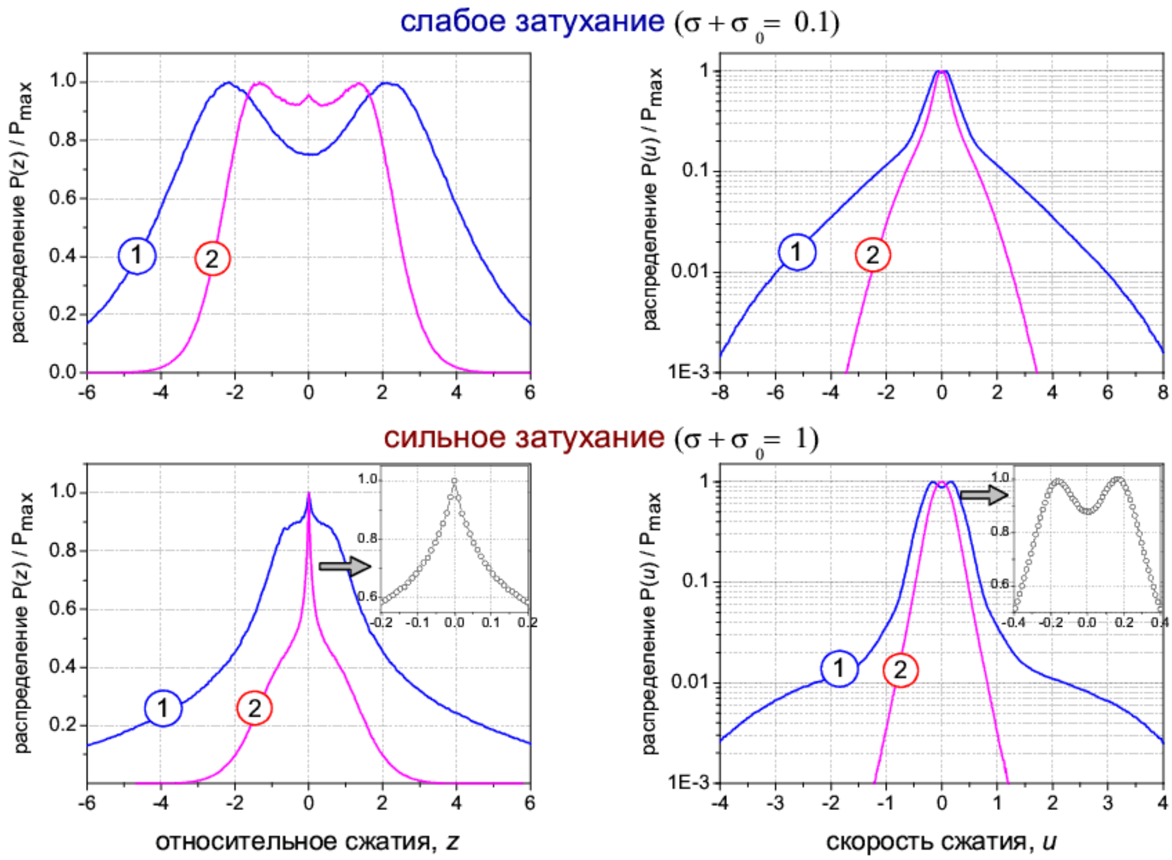

Рис. 6. Функция распределения параметров локальной симметрии совокупного ансамбля частиц (кроме граничных) при сильном и слабом затухании, а также при 1 — низкой (l=50) и 2 — высокой плотности частиц (l=5).

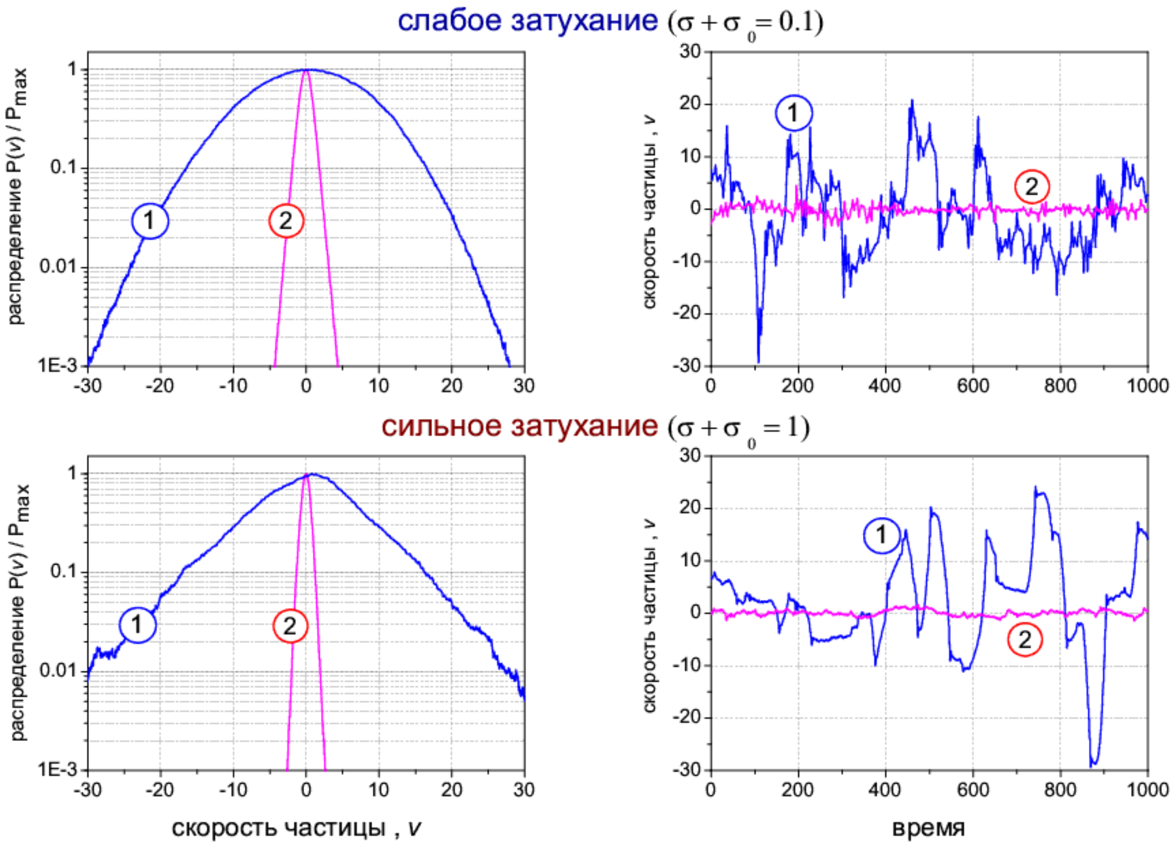

Рис. 7. Функция распределения скорости совокупного ансамбля частиц (кроме граничных) при сильном и слабом затухании, а также при 1 — низкой (l=50) и 2 — высокой плотности частиц (l=5). Справа приведен фрагмент движения одной частицы после возникновения неустойчивости.

В начале численного моделирования состояние системы полагалось однородным, скорости частиц случайным образом были распределены в единичном интервале. Через время порядка 1000 единиц наблюдалось разрушение однородного состояние и образование сложных динамических состояний. Исследование функции распределения совокупного ансамбля частиц (за исключением граничных) после возникновения неустойчивости, рис. 6, показало, что в системе происходит целый ряд неравновесных фазовых переходов при изменении физических параметров системы, в частности, переход от бимодальной формы к унимодальной при высокой плотности частиц, переход от двухмасштабной форме к одномасштабной (при сильном затухании частицы не могут выйти из ОДЛ в область регулярного движения; в другом случае вне области ОДЛ распределение формируется в форме «жирных» хвостов).

На рис. 7 представлена функция распределения скорости частиц, а также фрагмент движения отдельной частицы после возникновения неустойчивости. Неравновесный фазовый переход характеризуется переходом от гауссового распределения к негауссовому $exp(-|v|)$. Переход возникает как при увеличении плотности, так и при увеличении затухания. Движение отдельных частиц при низкой плотности характеризуется «прыжками» между континуумом долгоживущих состояний, время жизни которых значительно превышает время индивидуальной динамики частиц.

Полная картина зависимости скорости от времени для всех частиц представлена на рис. 8. В зависимости от физических параметров в системе наблюдаются макроскопические кооперативные явления, динамика частиц на больших интервалах времени и больших расстояниях приобретает согласованный вид. В частности, при слабом затухании и низкой плотности, рис. 8а, возникают долгоживущие структуры на масштабах времени нескольких тысяч единиц. Происходит распространение возмущений на макроскопические расстояния. При слабом затухании и низкой плотности, рис. 8б, после возникновения неустойчивости на фоне долгоживущих структур проявляется мезоструктура. При высокой плотности частиц, рис. 8в, возникают макроскопические области однородного состояния, проявляющиеся в форме узкого пика в функции распределения локальной асимметрии.

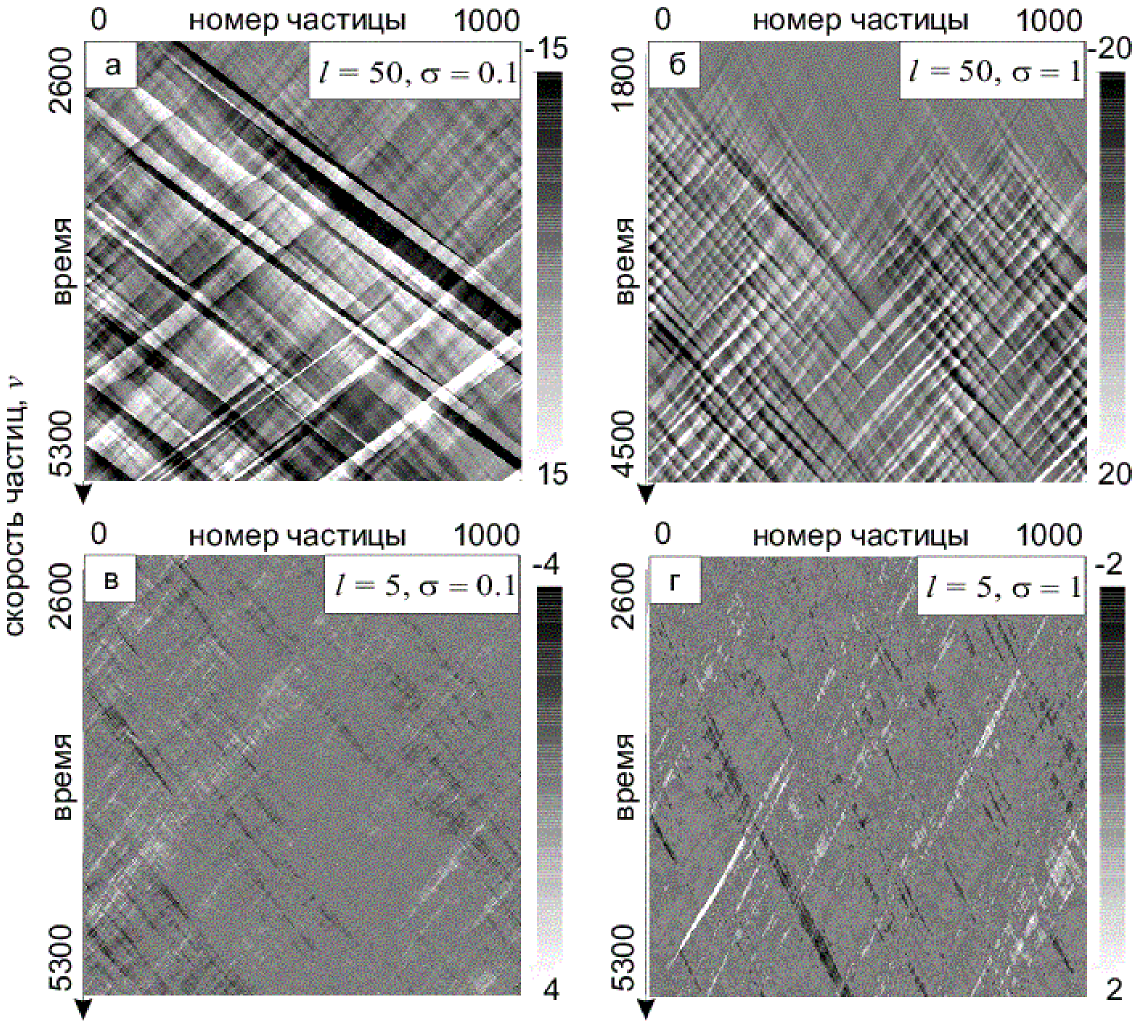

Рис. 8. Контрастный график динамики скорости всех частиц при а) слабом затухании и низкой плотности частиц, б) сильном затухании и низкой плотности, в) слабом затухании и высокой плотности, г) сильном затухании и высокой плотности.

Наличие долгоживущих макроскопических состояний является механизмом синхронизации немонотонной релаксации в различных областях насыщенных водородом сплавов палладия. Это утверждение следует из аналогии цепочки осцилляторов с динамическими ловушками строению водородсодержащих сплавов палладия: релаксация сплавов носит колебательных характер и кинетический коэффициент диффузии аномальным образом связан с концентрацией неравновесных вакансий. При изменении концентрации вакансий на несколько процентов, коэффициент диффузии атомов металла может меняться на несколько порядков. При уменьшении количества вакансий в матрице возникает долгоживущее метастабильное состояние, которое затем скачком переходит в другое метастабильное состояние из некоторого набора и т.д. Данная модель объясняет, почему однородное состояние насыщенного водородом сплава палладия является неустойчивым и не может описываться в рамках классической термодинамики.

Пятая глава. Исследована цепочка осцилляторов с динамическими ловушками при отсутствии соударений между частицами (модель струны), а также в отсутствии шума.

Установлено, что в модели струны уменьшается вероятность образования кластеров однородного состояния.

Установлено, что описанные ранее динамические состояния могут наблюдаться и в отсутствии шума за счет существования в системе динамического хаоса при не очень сильном затухании, играющего роль шума. Пример странного аттрактора одной частицы приведен на рис. 9. Проведено исследование взаимного перехода регулярной и хаотической динамике для цепочки из пяти осцилляторов.

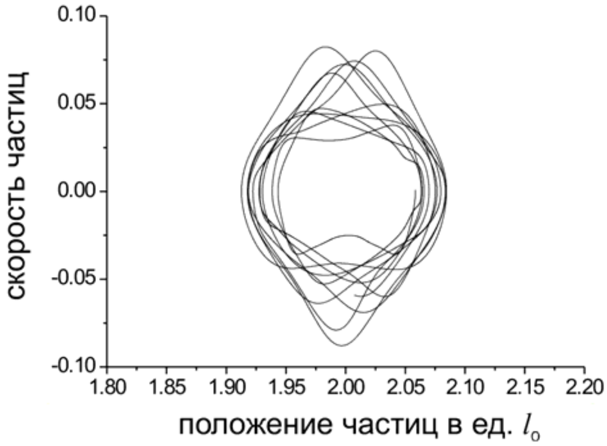

Рис. 9. Пример странного аттрактора одной частицы в отсутствии шума.

Основные результаты и выводы.

1. Рассмотрен новый класс явлений, для описания которых введено понятие динамических ловушек. Под областью динамических ловушек

(ОДЛ) понимается «низкоразмерная», неограниченная область фазового пространства, где все характерные масштабы времени динамики системы принимают значения, существенно превышающие их значения в остальной части фазового пространства. Кинетические коэффициенты в ОДЛ принимают аномальные значения. Толщина области динамических ловушек в одном из направлений значительно меньше характерных размеров области локализации динамики системы в фазовом пространстве. В остальных направлениях ОДЛ неограниченна. В системах Pd-M-H область динамических ловушек, видимо, отвечает малым значениям концентрации неравновесных вакансий, находящихся в дефектных областях кристалла (коэффициент диффузии атомов металла в ОДЛ на несколько порядков меньше).

При пересечении ОДЛ регулярная «сила», не меняет знак, и влияние динамических ловушек сводится только к ее подавлению. Если эффект динамических ловушек значителен, то движение системы в ОДЛ определяется случайными силами.

Динамические ловушки индуцируют образование макроскопических состояний, характеристики которых определяются не стационарными точками регулярной силы, а сложным и непрерывным кооперативным движением частиц. В связи с этим естественно называть такие формирования динамическими состояниями, которые можно интерпретировать как фазовые состояния нового типа (своеобразные диссипативные структуры). Физика таких систем находится только на начальном этапе развития, поэтому конкретные исследования были проведены для простейшей модели цепочки связанных осцилляторов с динамическими ловушками.

2. В конденсированных системах с динамическими ловушками могут возникать неравновесные фазовые переходы нового типа. Механизм, ответственный за возникновение макроскопических структур, связан

не с формированием новых стационарных точек регулярной «силы», а с нарушением симметрии локальной функции распределения параметров системы при пересечении области динамических ловушек. Последнее обусловлено тем, что внутри области ловушек динамика системы контролируется, главным образом, стохастическими силами, при этом структура регулярной силы приводит к асимметрии свойств границ области динамических ловушек, одна из них становится «отражающей», другая — «поглощающей», с точки зрения случайных блужданий системы внутри области ловушек.

3. Фазовые переходы, индуцированные динамическими ловушками, характеризуются:
    - спонтанным нарушением симметрии системы, состоящим в том, что в зависимости от параметров системы функция распределения локальной симметрии приобретает либо бимодальную форму, либо характеризуется двумя масштабами с формированием «жирных», хвостов и значительным отклонением от гауссового вида для обоих компонент;
    - аномально большой дисперсией функции распределения индивидуальных скоростей движения «частиц», в зависимости от параметров системы, либо приобретением негауссового вида с ярко выраженным «изломом», в области максимума;
    - возникновением в системе долгоживущих макроскопических состояний, характерное время жизни которых значительно превосходит среднее время нахождения в них отдельных «частиц», формирующих данные состояния в текущий момент времени;
    - формированием иерархических состояний при определенных значениях параметров системы.

4. Возникающие долгоживущие состояния образуют квазиконтинуум, поскольку попадание системы в любую малую часть области ловушек может привести к формированию долгоживущего состояния.
5. Динамика системы с динамическими ловушками имеет вид последовательности случайных скачкообразных переходов между долгоживущими состояниями, принадлежащих некоторому квазиконтинууму.
6. В отсутствие стохастических сил динамические ловушки обусловливают возникновение эффективного шума, действие которого качественно сохраняет все вышеупомянутые свойства для больших ансамблей частиц (эффект динамического хаоса, индуцирующего фазовый переход).
7. Для возникновения рассматриваемых фазовых переходов необходимо наличие случайных сил (в том числе и обусловленных динамическим хаосом), интенсивность которых принадлежит некоторому ограниченному интервалу. Фазовые переходы, индуцированные ловушками, возникают, если интенсивность стохастических сил имеет промежуточные значения. Они не возникают, если интенсивность этих сил слишком мала или чрезмерно велика, что определяет конструктивную роль случайных сил в возникновении фазовых переходов.

Основные результаты диссертационной работы изложены в следующих публикациях.

1. *Lubashevsky I., Hajimahmoodzadeh M., Katsnelson A., Wagner P.* // Eur. Phys. J. B.-2003.-V.36.-P.115 // Arxiv: cond-mat/0304300.
2. *Хаджи Махмуд Задех М., Лубашевский И. А., Кацнельсон А. А., Гузейнзаде Н.Г. и Вагнер П.* Радиофизические процессы с динамическими ловушками, численное моделирование. // Труды конференции МИРЭА. Intermatic.-2003.-С.250.

3. *Lubashevsky I., Hajimahmoodzadeh M., Katsnelson A., Wagner P.* Toward noise-induced phase transitions in systems of elements with motivated behavior. / In: Hoogendoorn S., Bovy P.V.L., Schreckenberg M. and Wolf D.E. (eds.) Traffic and Granular Flow '03. // Berlin: Springer.-2005.-P.124. // Arxiv: cond-mat/0310189.-2003.
4. *Лавренов А. Ю., Лубашевский И. А., Кацнельсон А. А., Хаджи Махмуд Задех М.* Динамические состояния в цепочке осцилляторов с динамическими ловушками. // Тезисы 12 международной конференции «Математика, компьютер, образование», г. Пущино, 17--22 января 2005.-С.129-130.
5. *Хаджи Махмуд Задех М., Лубашевский И. А., Кацнельсон А. А. и Лавренов А. Ю.* Структуры состояний цепочки осцилляторов с динамическими ловушками. // Краткие Сообщения по Физике.-2005.-N.2.-С.12-18.
6. *Lubashevsky I., Mahnke R., Hajimahmoodzadeh M., Katsnelson A.* Long-lived states of oscillator chain with dynamical traps. // European Physical Journal B.-2005.-принята в печать. // Arxiv: cond-mat/0407324.-2004.