

ВПЛИВ ПОВЕРХНЕВОЇ ЕНЕРГІЇ НА ПРОЦЕСИ ФОРМУВАННЯ НЕСПІВМІРНОЇ НАДСТРУКТУРИ

С. Свелеба, І. Катеринчук, І. Куньо, І. Карпа, Я. Шмигельський.

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Ген. Тарнавського, 107, 79017 Львів, Україна
incomlviv@gmail.com*

У роботі проведено дослідження фазових портретів та показників Ляпунова для неспівмірної надструктури. Розглянуто вплив поверхневої енергії на метастабільні стани та хаотичну фазу. У програмному середовищі Python з використання бібліотеки JiTCODE, JiTCDDE, проведено побудову фазових портретів досліджуваної системи.

Описано вплив поверхневої енергії на неспівмірну фазу, який зумовлює перехід системи із неоднорідного стану в однорідний. Наведено фазові портрети для різних значень параметрів, які описують стійкість неспівмірної надструктури (T) та анізотропну взаємодію (K). Виявлено, що зміна фази та амплітуди параметра порядку під впливом зовнішніх чинників та поверхневої енергії при малих значеннях параметрів T і K , не зумовлює перехід системи до хаотичного режиму з виникненням хаотичної фази.

Ключові слова: неспівмірна надструктура, фазовий портрет, поверхнева енергія.

Відомо [1], що поверхневу енергію не можна розглядати як процес впливу поля поверхневих дефектів на неоднорідний стан кристала, оскільки поверхнева енергія на відміну від поля приводить до зняття виродження досліджуваної системи. Підтвердженням цього висновку є поява ефекту проковзування фази та зникнення таких ефектів як ефект термооптичної та діелектричної пам'яті, ефект термічного гістерезису типу паралелограм при зміні розмірів тонкошарових кристалів з неспівмірною фазою.

Характеристичні показники Ляпунова дозволяють проводити якісний аналіз динамічних систем. Як відомо, показник Ляпунова динамічної системи є величиною, що характеризує швидкість поділу нескінченно близьких траєкторій. Він відіграє вирішальну роль у виявленні динамічної поведінки і хаотичного ступеня дивного атрактора [2]. Фазовий портрет - це повна сукупність різних фазових траєкторій. Він добре ілюструє поведінку системи та її основні властивості. За допомогою фазових портретів можна провести аналіз стану стійкості та характеру рухів системи.

Для опису впливу спотворення хвилі неспівмірності на неспівмірну (НС) надструктуру розглянемо функціонал вільної енергії для модульованих структур, які описуються двокомпонентним параметром порядку [3]:

$$\Phi = \int dz \left\{ -r(\eta_1^2 + \eta_2^2) + u_1(\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 + u_2(\eta_1^2 \eta_2^2) \right\} + \int dz \left\{ \sigma \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial z} - \eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial z} \right) + \gamma \left[\left(\frac{\partial \eta_1}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta_2}{\partial z} \right)^2 \right] + \beta \left[\left(\frac{\partial^2 \eta_1}{\partial z^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 \eta_2}{\partial z^2} \right)^2 \right] \right\}, \quad (1)$$

який в полярних координат $\eta_1 = \eta \cos \varphi$, $\eta_2 = \eta \sin \varphi$ має вигляд:

$$\begin{aligned} \Phi = \int dz & \left(-r\eta^2 + u\eta^4 + \omega\eta^4 (1 + \cos n\varphi) - \sigma\eta^2 \frac{\partial\varphi}{\partial z} + \frac{\gamma}{4} \left[\left(\frac{\partial\eta}{\partial z} \right)^2 + \eta^2 \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)^2 \right] \right) + \\ & + \int dz \left[\beta \left[\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial z^2} - \eta \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)^2 \right)^2 \right] + \left(2 \frac{\partial\eta}{\partial z} \frac{\partial\varphi}{\partial z} + \eta \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Введемо безрозмірні змінні $\eta = \left(\frac{r}{2u} \right)^{1/2} R$, $z = \left(\frac{\gamma}{r} \right)^{1/2} \xi$, тоді функціонал (2) із врахуванням поверхневої енергії прийме вигляд:

$$\begin{aligned} \Phi = \int d\xi \frac{r^2}{2u} & \left(-R^2 + \frac{R^4}{2} + \frac{\omega r^{\frac{n-2}{2}}}{(2u)^{\frac{n-1}{2}}} R^n (1 + \cos n\varphi) - \frac{\sigma}{(r\gamma)^{1/2}} R^2 \varphi' + (R')^2 + R^2 (\varphi')^2 \right) + \\ & + \int d\xi \frac{r^2}{2u} \left\{ \frac{\beta r}{\gamma} \left[(R'' - R\varphi'^2)^2 + (2R'\varphi' + R\varphi'')^2 \right] \right\} - \frac{\alpha r}{4u} R^2 \end{aligned} \quad (3)$$

Варіація функціоналу вільної енергії (3) дає безрозмірні рівняння для фазової функції, разом з граничними умовами за умови $R''' = 0$; $R'' = 0$; $\varphi''' = 0$; $(\varphi')^3 = 0$:

$$\varphi'' \left(1 - 10 \left(\frac{R'}{R} \right)^2 + 6(\varphi')^2 \right) + \frac{R'}{R} (2\varphi' - T) K R^{n-2} \sin n\varphi = 0 \quad (4)$$

$$\left[\frac{\partial\psi(\varphi)}{\partial\varphi} + \frac{\partial F}{\partial\varphi'} + \frac{\partial}{\partial\xi} \frac{\partial F}{\partial\varphi''} \right]_{\frac{L}{2}} = 0, \quad \left[\frac{\partial F}{\partial\varphi''} \right]_{\frac{L}{2}} = 0, \quad (5)$$

для амплітудної функції за умови $R'' \neq 0$

$$R'' \left(1 + \frac{5\beta r}{\gamma} (\varphi')^2 - \frac{\beta r}{\gamma} \varphi'' \right) - R^3 + (1 + T\varphi' - (\varphi')^2) R - K R^{n-1} (1 + \cos n\varphi) = 0 \quad (6)$$

$$\left[\frac{\partial\psi(R)}{\partial R} + \frac{\partial F}{\partial R'} + \frac{\partial}{\partial\xi} \frac{\partial F}{\partial R''} \right]_{\frac{L}{2}} = 0, \quad \left[\frac{\partial F}{\partial R''} \right]_{\frac{L}{2}} = 0, \quad (7)$$

де $T = \frac{\sigma}{(\gamma r)^{1/2}}$, $K = 2 \frac{\omega}{r^{\frac{n-2}{2}}} \frac{r^{\frac{n-2}{2}}}{2u} \omega u^{1-\frac{n}{2}}$ — безрозмірні параметри, u — характеризує величину

ізотропних взаємодій, а ω — анізотропних взаємодій, n — ціле число, що характеризує симетрію потенціалу. $F(R(\xi), R')$ — підінтегральний вираз функціонала (3), причому

$R' = \frac{\partial R}{\partial\xi}$, $R'' = \frac{\partial^2 R}{\partial\xi^2}$, $\psi \left(R \left(\frac{L}{2} \right) \right)$ — задана функція значень параметра порядку на границі

$$\xi = \frac{L}{2}.$$

Якщо врахувати вирази (5) і (7), а також прийняти до уваги форму функціонала (3), то граничні умови при $\xi \geq 0$ приймуть вигляд:

$$\left[2\varphi' - T - \frac{12\beta r}{\gamma} \left(\frac{R'}{R} \right)^2 \varphi' + \frac{12\beta r}{\gamma} \left(\frac{R'}{R} \right) \varphi'' \right]_{\frac{L}{2}} = 0, \quad \left[\varphi'' + 2 \frac{R''}{R} \varphi' \right]_{\frac{L}{2}} = 0, \quad (8)$$

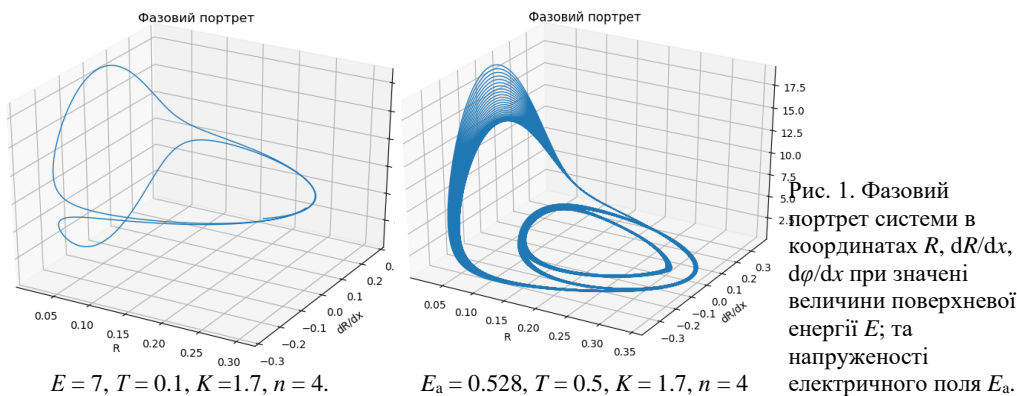
$$\left[-\frac{\alpha R}{r} + \left(2 + \frac{6\beta r}{\gamma} (\varphi')^2 \right) R' \right]_{\frac{L}{2}} = 0, \quad \left[R'' - R \cdot (\varphi')^2 \right]_{\frac{L}{2}} = 0. \quad (9)$$

Для даної системи згідно роботи [4], поверхнева енергія знімає виродження системи шляхом лінійного пониження величини показника Ляпунова λ_3 . Тобто третій показник приймає від'ємне значення (порядку -10^{11}), яке по величині значно перевищує інші показники Ляпунова, то стабільною критичною точкою є атрактор. Згідно досліджуваної системи [1], що описує неспівмірну надструктуру, коефіцієнт Ляпунова λ_3 визначає просторову поведінку фази параметра порядку.

За умови коли $T=1$, при збільшенні впливу поверхневої енергії проходить зменшення кількості біфуркацій, що свідчить про зняття виродження неспівмірної надструктури. Аналогічні результати були отримані в роботі [1], де зазначалось, що вклад поверхневої енергії у вільну енергію тонкошарового кристала супроводжується зменшенням кількості біфуркацій НС надструктури. Отримані фазові портрети досліджуваної системи в [4] при $T = 0.1$, $K = 1.7$, $n = 4$, від величини поверхневої енергії вказують на те, що зменшення кількості біфуркацій системи вказує на перехід системи до стаціонарного стану. Цей стан характеризується складним атрактором, який відповідає двом взаємно симетричним його траєкторіям (рис. 1).

Таким чином, поверхнева енергія переводить систему із неоднорідного стану в однорідний шляхом зміни спектру коливань фазової функції неспівмірної надструктури.

В даній роботі було проведено дослідження фазових портретів, та показників Ляпунова для неспівмірної надструктури, що описується диференціальними рівняннями другого порядку [1]. Побудову фазових портретів нелінійних динамічних систем, здійснено в програмному середовищі Python з використання бібліотеки JitCODE, JitCDDDE [5]. Систему, що складається з двох диференціальних рівнянь другого порядку розв'язували чисельним методом BDF.



Для даного типу атракторів характерним є те, що перехід до хаотичного стану супроводжується заповнення простору між атракторами, а метастабільні стани неспівмірної надструктури характеризуються лише каскадами подвоєння і різняться між собою лише їх кількістю. Тому в роботі було розглянуто вплив поверхневої енергії на неспівмірну надструктуру в солітонному режимі, тобто вплив поверхневої енергії на метастабільні стани та хаотичну фазу. Отже за умови коли $K = 1.4$ і $K = 1.7$, та незначної величини поверхневої енергії ($E < 500000$ В) простежуються лише біфуркація типу подвоєння. Хаотичність даної системи проявляється в наявності траєкторій в середині атрактора, які здійснюють непередбачене блукання вздовж витків атрактора і завжди повертаються в деякий незначний окіл будь-якої його точки, однак це повернення є непередбачене, і являє собою деяку хаотичну послідовність моментів часу. Збільшення величини поверхневої енергії супроводжується зникненням даних траєкторій і в подальшому зменшенні кількості біфуркацій.

При перебуванні неспівмірної надструктури в хаотичному стані (тобто при $T = 1.0$; $K = 2.3$; $K = 4.0$) дія поверхневої енергії на неспівмірну фазу спочатку приводить до зникнення траєкторій між атракторами, а пізніше і в самому атракторі. Це в подальшому приводить до зменшення кількості біфуркацій.

Отже поверхнева енергія знімає виродження зумовлюючи тим самим перехід системи із неоднорідного стану в однорідний. Тобто перехід неспівмірної надструктури із хаотичного стану в метастабільний стан, в подальшому із метастабільного стану в стан існування довгоперіодичних співмірних фаз.

Виходячи із залежностей показників Ляпунова від параметрів K і T хаотичний стан виникає в околі $K = 2.0$ і $K > 3.8$ [6]. Це обумовлено солітонним і стохастичним режимами неспівмірної надструктури, як це зокрема відзначалось в роботі [7]. В синусоїдальному режимі неспівмірної надструктури фазовий портрет характеризується суцільними кривими які відповідають неспівмірному стану [7].

Фазові портрети отримані із феноменологічної теорії [4], також характеризуються атракторами у вигляді шлейфу. При збільшенні параметрів T і K (що еквівалентно понижень температури) внаслідок біфуркації кількість атракторів збільшується, приводячи до виникнення хаотичного стану при $K = 2.0$ і $K > 3.8$ [5]. Виходячи із отриманої поведінки λ_4 на рис. 2, особливу увагу заслуговує діапазон $K = 0 \div 1$ і $T = 0 \div 1$. На рис. 3 наведено поведінку коефіцієнтів Ляпунова у визначеному діапазоні T і K . Згідно даного рисунку поведінка коефіцієнтів Ляпунова носить аномальний характер, з яскраво вираженою поведінкою в околі малих значень параметра T . Тобто різким зменшенням величин коефіцієнтів λ_1 , λ_2 і λ_4 та збільшенням λ_3 . Це добре ілюструє карта значень коефіцієнтів Ляпунова (рис. 4,б). Слід зазначити, що значної зміни зазнає величина коефіцієнта λ_3 , та оскільки він залишається від'ємним, то хаотичний стан в системі за даних параметрів не виникає. На це зокрема вказує карта динамічних режимів (рис. 4,а). Згідно рис. 4,а вона характеризується наступною сигнатурою коефіцієнтів Ляпунова: (+,0, -, -) та (+,-,-,-).

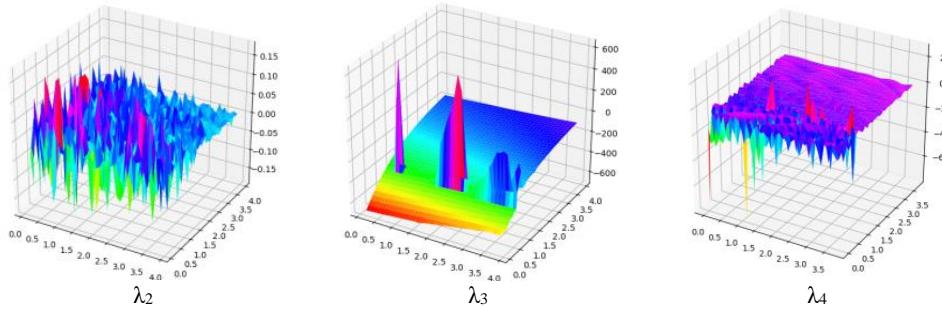


Рис. 2. T, K - діаграми поведінки коефіцієнтів Ляпунова за умови $R = 0.3, R' = 0, \varphi = 0, \varphi' = 0, n = 4$ в синусоїдальному, солітонному та стохастичному режимі неспівмірної надструктури

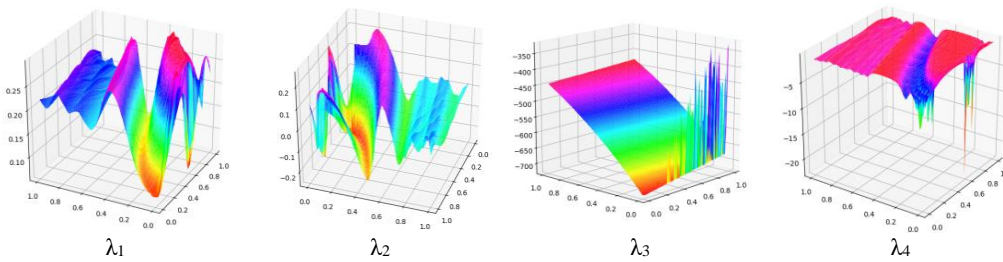


Рис. 3. T, K - діаграми поведінки коефіцієнтів Ляпунова за умови $R = 0.3, R' = 0, \varphi = 0, \varphi' = 0, n = 4$ в процесі зародження надструктури.

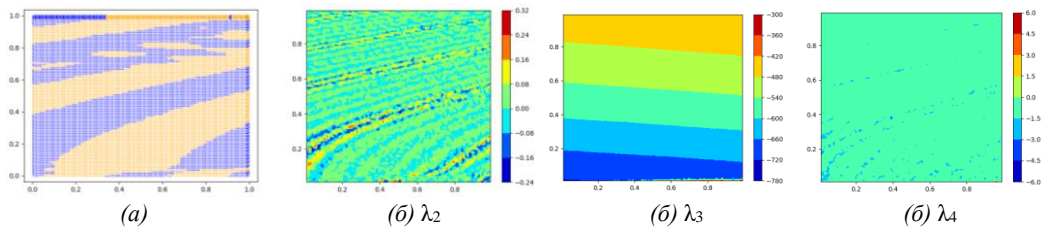


Рис.4. Карта динамічних режимів (а), та карти величини коефіцієнтів Ляпунова λ_2, λ_3 і λ_4 (б) в залежності від параметрів T, K

Припустимо, що за даних умов ($K = 0 \div 1$ і $T = 0 \div 1$) в даній системі реалізується синусоїдальний режим неспівмірної надструктури, і розглянемо вплив зсуву фази на дану систему. Такий зсув фази може бути викликаний як зовнішніми чинниками (дією як електричного поля так і механічного), так і під впливом поверхневої енергії. Виходячи із результатів наведених на рис. 5,а, зміна величини зсуву фази параметра порядку не приводить до зміни спектру сигнатури на карті динамічних режимів, а отже не приводить до появи хаотичного стану даної системи.

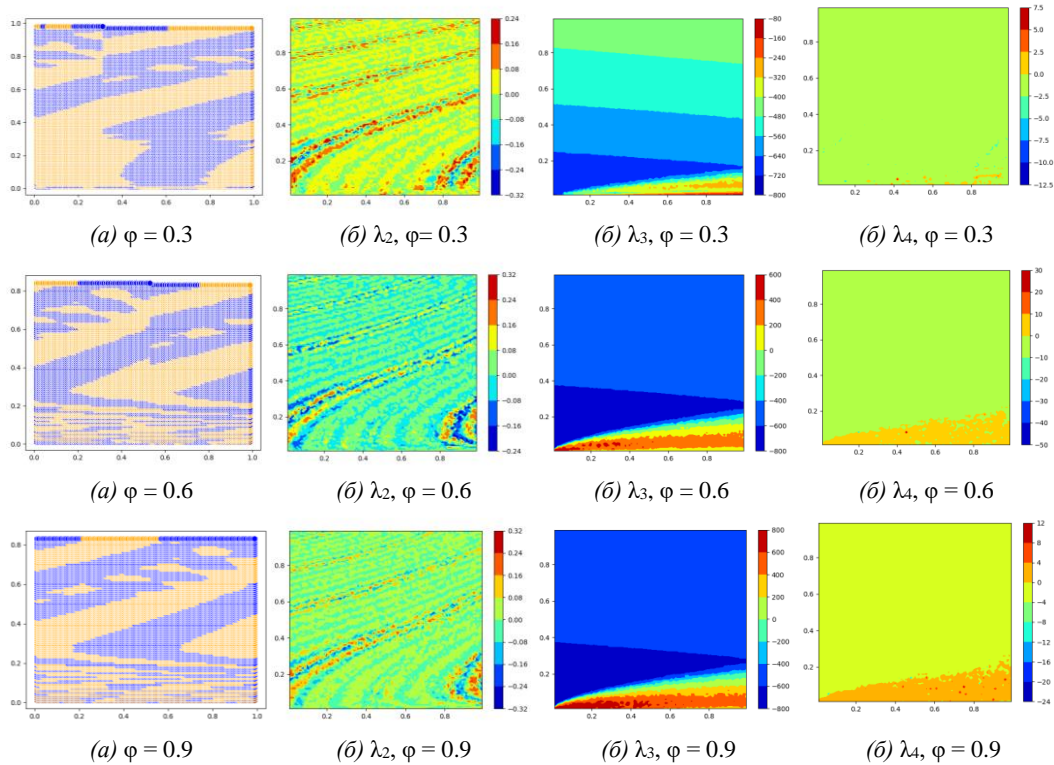


Рис. 5. Карта динамічних режимів (а), та карти величини коефіцієнтів Ляпунова λ_2 λ_3 і λ_4 (б) в залежності від параметрів T, K при різних значеннях величини зсуву фази φ .

Однак слід зазначити, що при збільшенні величини φ простежується просторова зміна існуючих режимів неспівмірної надструктури в околі $T = 0 \div 0.2$ і $K = 0 \div 1$. Ця зміна динаміки надструктури супроводжується зміною величини коефіцієнтів λ_3 і λ_4 . На це, зокрема, вказують карти величин коефіцієнтів Ляпунова (рис. 5,б). Згідно отриманих карт величини λ_3 і λ_4 приймають додатні значення, а λ_2 характеризується періодичним коливанням своєї величини, приймаючи як додатні так і від'ємні значення. За умови, коли величина λ_1 є завжди додатною, та беручи до уваги вище зазначене, можна припустити, що в розглянутому інтервалі може виникати хаотичний стан.

Для перевірки даних припущень були проведені дослідження фазових портретів та спектр частот неспівмірно модульованої надструктури.

На рис. 6 наведено фазові портрети досліджуваної системи при $K = 0.0001, R = 0.3$ при зміні параметра стійкості T в діапазоні від 0.005 до 0.9. При $T = 0.005$ і $K = 0.0001$ існує аттрактор, який характеризується шлейфовою поведінкою в нижній його частині, та злипання їх в одну лінію в другій - верхній його частині (рис. 6,а). При збільшенні параметра стійкості системи T ($T = 0.01 \div 0.9$), простежується зникнення спостережуваного шлейфу та наближення форми аттрактора до еліптичної (рис. 6,а).

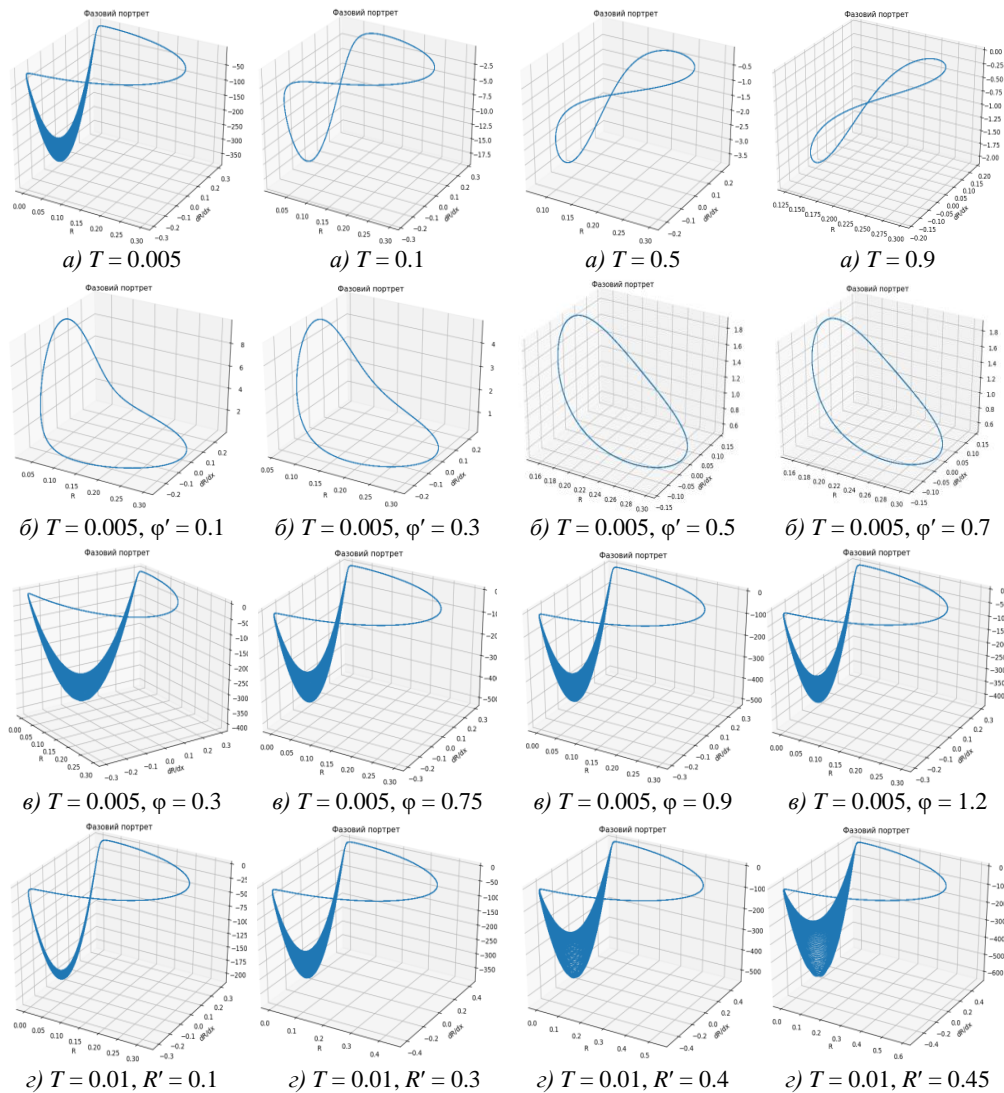


Рис. 6. Фазовий портрет системи в координатах $R, dR/dx, d\varphi/dx$ за умови $n = 4, K = 0.0001, R = 0.3$ при зміні: а) - T ; б) - φ' (при $T = 0.005$); в) - φ (при $T = 0.005$); г) - R' (при $T = 0.01$).

Таким чином, збільшення параметра T супроводжується зняттям виродження системи, тобто приводить до зменшення кількості існуючих гармонік коливань системи. На цей висновок, зокрема, вказують результати дослідження спектру потужності (рис. 7,а). Тобто зі збільшенням величини параметра T кількість гармонік зменшується. Як зміщення по фазі (рис. 7,б), так і просторове збурення амплітуди параметра порядку (рис. 7,г) не приводить до зміни спектру коливань (кількості гармонік). На це вказують і отримані фазові портрети (рис. 6,в і г). Беручи до уваги збурення фази, видно, що із

збільшенням її величини спостерігається зменшення кількості існуючих гармонік коливань (рис. 7,в). За цих умов фазовий портрет характеризується граничним атрактором, і засвідчує відсутність біфуркацій.

Для пояснення отриманих результатів скористаємося експериментальними результатами по дослідженню поведінки оптичного двозаломлення [8] та діелектричної проникливості [9] в околі фазового переходу вихідна–неспівмірна фаза. З експериментальних досліджень відомо, що у вихідній – парафазі в околі фазового переходу вихідна–неспівмірна фаза (T_i) існують просторові області скорельованого руху тетраедричних груп, які і визначають нелінійну поведінку фізичних величин [1]. При фазовому переході другого роду (T_i) відбувається процес злиття цих областей по всьому кристалу, який супроводжується перерозподілом просторових коливань тетраедричних груп (їх поворотів) в кожній просторовій області скорельованого руху тетраедричних груп, та виникнення просторової хвилі модуляції неспівмірної надструктури. На думку авторів, цей процес супроводжується зникненням багатомодової структури, та появою хвилі неспівмірної модуляції з незначною кількістю гармонік. Це яскраво демонструє зменшення кількості гармонік коливань при збільшенні параметра T , який описує стійкість неспівмірної надструктури. Введення стаціонарних дефектів та домішок провокує збільшення температурного інтервалу існування просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп [1, 10].

Як відомо [1], дефекти та домішки приводять до просторового збурення фази параметра порядку, спричиняючи немонотонну поведінку фізичних величин в температурному інтервалі існування просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп. Виходячи із рис. 7,в, просторове збурення фази параметра порядку блокує появу гармонік фази параметра порядку в області скорельованого руху тетраедричних груп (тобто при малих значеннях T і K). А просторове збурення амплітуди параметра порядку провокує перерозподіл інтенсивності існуючих гармонік хвилі неспівмірної модуляції та зміну їх кількості (рис. 6,з – 7,з). Останній висновок добре узгоджується з результатами досліджень по впливу радіаційних дефектів на фізичні властивості кристалів $[N(CH_3)_4]_2MeCl_4$ (де $Me = Zn, Cu$) [1, 10]. Тобто стаціонарні дефекти приводять до зміни величини поворотів тетраедричних груп в просторовій області їх скорельованого руху. В підтвердження даного припущення свідчать результати наведені на рис. 8, тобто при збільшенні величини амплітуди параметра порядку збільшується кількість біфуркацій на фазовому портреті.

При розгляді впливу поверхневої енергії на скорельований рух тетраедричних груп та на фазовий перехід вихідна–неспівмірна фаза (T_i), слід зазначити, що згідно з експериментальними дослідженнями [1], поверхнева енергія спричиняє аномальну поведінку фізичних величин в температурному інтервалі таких фазових перетворень. Відомо [1], що поверхневий шар можна розглядати як деяку просторову область з аномальною зміною як фази так і амплітуди параметра порядку. Із приведених вище результатів розрахунку впливу збурення фази та амплітуди параметра порядку на неспівмірну надструктуру, можна зазначити, що амплітуда параметра порядку є визначальним фактором в процесі утворення неспівмірної надструктури та впливу на неї поверхневої енергії.

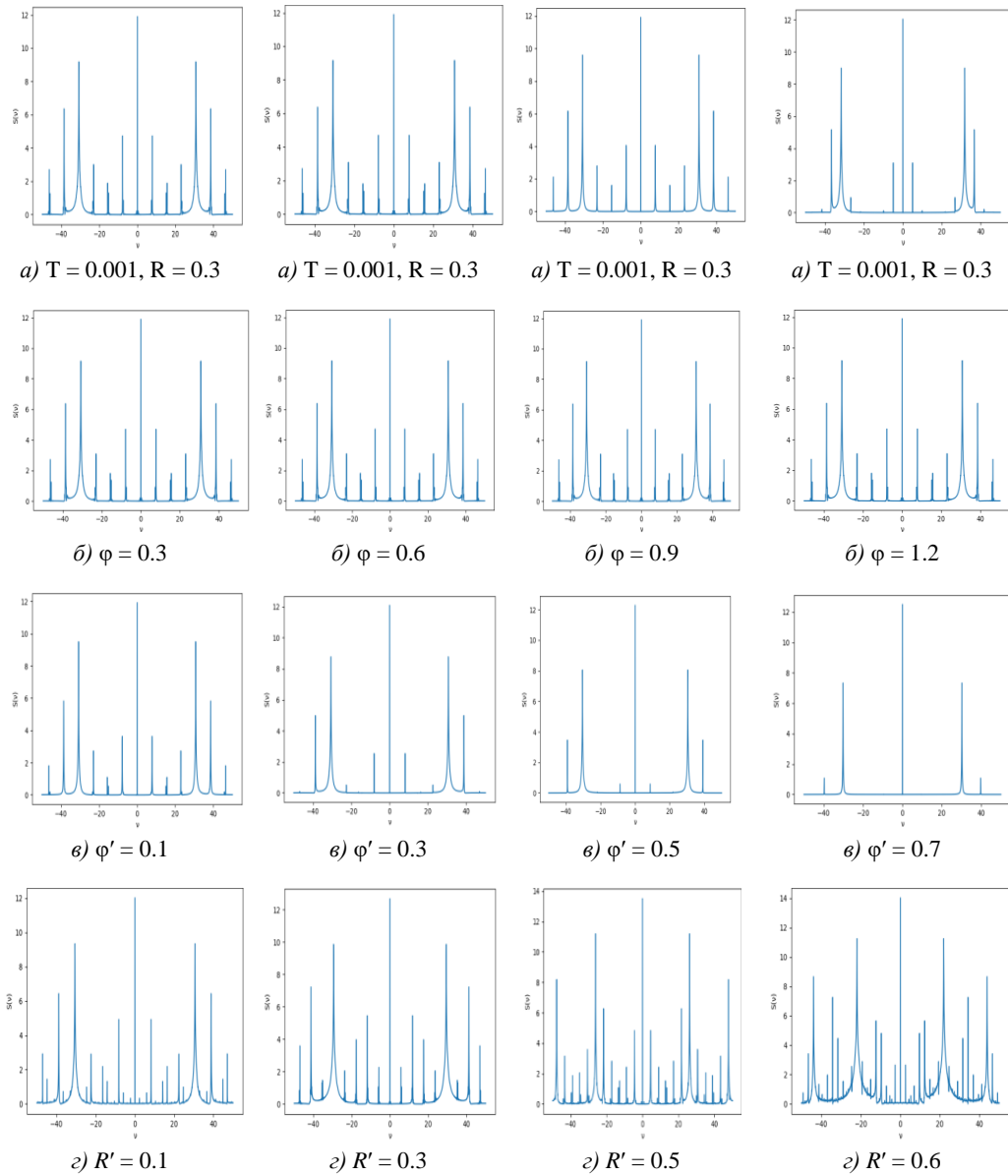


Рис. 7. Спектри потужності отримані із просторової поведінки параметра порядку за умови $T = 0.01, K = 0.0001, R = 0.3, n = 4$ при зміні: б) - φ ; в) - φ' ; г) - R' .

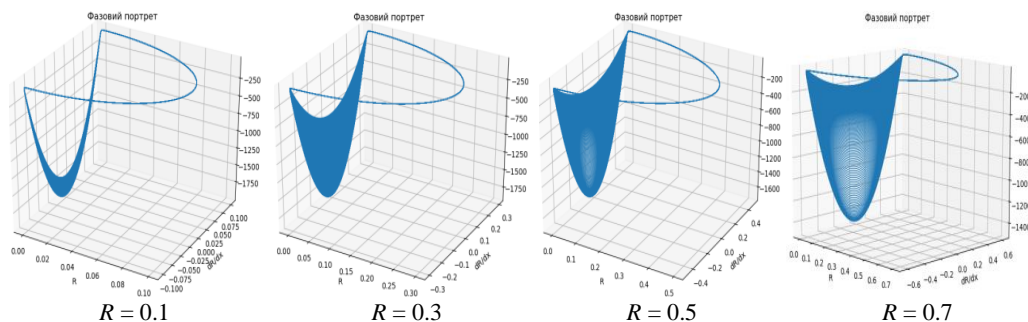


Рис. 8. Фазовий портрет системи в координатах R , dR/dx , $d\phi/dx$ за умови $T = 0.001$, $K = 0.0001$, $n = 4$, при зміні R .

Отже при малих значеннях параметрів T і K , які описують стійкість неспівмірної надструктури та анізотропну взаємодію відповідно, дана система диференціальних рівнянь (6 – 9) описує процес виникнення неспівмірної надструктури з просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп. Внаслідок існування в кристалі неконтрольованих дефектів і домішок, просторові області скорельованого руху тетраедричних груп характеризуються дещо відмінними модуляційними параметрами. Виникаючі напруження при стику таких просторових областей, в процесі утворення неспівмірної надструктури, приводять до появи гармонік хвилі неспівмірної надструктури при малих значеннях параметрів T і K ($T, K < 0.001$). Зміна фази та амплітуди параметра порядку під впливом зовнішніх чинників, та поверхневої енергії, не зумовлює перехід системи до хаотичного режиму з виникненням хаотичної фази.

Вперше виявлено, що портрети атракторів збуреної системи при малих значеннях параметрів T і K характеризуються одним атрактором. Причиною є невеликий масштаб басейнів притягання. На нашу думку, як і для систем описаних в [11], це явище стосується кризових станів, в яких аттрактор зазнає зміни параметрів, викликаних зіткненням з межею басейну при зміні параметрів T і K . В результаті хаотичний аттрактор не виникає з каскаду подвоєння періоду.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Куньо І.М. Розмірні ефекти в діелектричних кристалах $[N(CH_3)_4]_2MeCl_4$ ($Me = Cu, Zn, Mn, Co$) з неспівмірною фазою: монографія / І. М. Куньо, І. В. Карпа, С. А. Свелеба, І. М. Катеринчук. Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2019. -220с.
2. Кузнецов С. П. Динамический хаос / С. П. Кузнецов. –Физматлит, М. - 2001. – 296с.
3. Изюмов Ю.А. Фазовые переходы и симметрия кристаллов / Ю.А. Изюмов, М.Т. Сыромятников. – Наука, М. – 1984. – 247с.
4. Свелеба С. Вплив поверхневої енергії на неспівмірну надструктуру / С. Свелеба, І. Карпа, І. Катеринчук, І. Куньо, Я. Шмигельський // Електроніка та інформаційні технології. - 2018. – Вип. 10. - С. 41–51
5. Numpy and Scipy Documentation [Electronic source]. – Available from: <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.ode.html>

6. *Свелеба С.* Особливості поведінки Ляпуновських коефіцієнтів від симетрії термодинамічного потенціалу, який описується інваріантом Ліфшиця / С. Свелеба, І. Катеринчук, І. Куньо, І. Карпа, Я. Шмигельський // Електроніка та інформаційні технології. - 2019. - Вип. 12. - С. 82–91
7. *Bak P.* Commensurate phases, incommensurate phases and the devil's staircase / P. Bak // Rep. Prog. Phys. – 1982. - Vol. 45. - P. 587-629
8. *Свелеба С.* Скорельований рух Т-груп у парафазі кристалів $[N(CH_3)_4]_2CuCl_4$ / С. Свелеба, І. Катеринчук, О. Семотюк, О. Фіцич Ю. Панківський, І. Куньо // Вісн. Львів. Ун-ту. Сер. фіз. – 2006. - Вип. 39. – С. 76–81.
9. *Свелеба С.А.* Двозаломлюючі та діелектричні властивості у вихідній фазі кристалів $[N(CH_3)_4]_2ZnCl_4$ / С.А. Свелеба, І.М. Катеринчук, І.В. Карпа, О.В. Семотюк, З. Чапля // УФЖ. – 2008 – Т. 53, № 11. – С.1099–1101.
10. *Свелеба С.А.* Взаємодія модульованої структури з дефектами у кристалах з несумірною фазою / С.А. Свелеба, І.М. Катеринчук, О.В. Семотюк, І.М. Куньо // Журнал фізичних досліджень. – 2005. – Т. 9, № 1. – С. 334–350.
11. *Feudel U.* Why are chaotic attractors rare in multistable systems / U. Feudel, C. Grebogi // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 91 (Iss. 13). - 134102.

THE INFLUENCE OF SURFACE ENERGY ON THE INCOMMENSURATE SUPERSTRUCTURE FORMATION PROCESSES

S. Sveleba, I. Katerynychuk, I. Kunyo, I. Karpa, Ya. Shmygelsky

*Ivan Franko National University of Lviv, 107 Tarnavsky St.,
UA-79017 Lviv, Ukraine
incomlviv@gmail.com*

The influence of surface energy on the phase portraits and the Lyapunov's exponents for an incommensurate superstructure, which are described by second order differential equations was studied. The phase portraits of nonlinear dynamic systems in Python software using JiTCDDDE library were constructed. Second-order differential equations were solved by the BDF method.

The influence of surface energy on the incommensurate superstructure which causes the transition of the system from a heterogeneous state to a homogeneous one was described. It is established that under the condition when $T = 1$, the increase of the surface energy effect is accompanied by the decrease in the number of bifurcations, which indicates that the degeneration of the incommensurate superstructure is eliminated.

Phase portraits for various parameter values, which describe the stability of the incommensurate superstructure (T) and anisotropic interaction (K) are described. This system of differential equations describes the process of the appearing of the incommensurate superstructure from the spatial regions of correlated motion of tetrahedral groups for the small values of the T and K parameters. The spatial regions of the correlated motion of tetrahedral groups are characterized by slightly different modulation parameters due to the existence of uncontrollable defects and impurities in the crystal. Appeared stresses on the boundaries of such spatial regions, in the process of formation of the incommensurate superstructure lead to the appearance of the harmonics of a wave of the incommensurate superstructure at small values of the T and K ($T, K < 0.001$) parameters. The changing of the phase and the amplitude of the order parameter under the influence of external factors and surface energies does not cause the system to switch to the chaotic mode with the appearing of a chaotic phase.

The first discovered that portraits of attractors of the perturbed system with small values of the T and K parameters are characterized by one attractor. The reason is the small scale of the attraction pools. It is noted that this phenomenon refers to crisis states in which the attractor undergoes changes in parameters caused by collision with the boundary of the basin when changing the T and K parameters. As a result, the chaotic attractor does not arise from the cascade of doubling of the period.

It is shown that the change of the phase and the amplitude of the order parameter under the influence of external factors and surface energies at small values of the T and K parameters, does not cause the system to switch to a chaotic mode with the appearing of the chaotic phase.

Key words: incommensurate superstructures, phase portraits, surface energy.

Стаття: надійшла до редакції 20.03.2020,
доопрацьована 03.04.2020,
прийнята до друку 07.04.2020