

ОСОБЛИВОСТІ ПОВЕДІНКИ ЛЯПУНОВСЬКИХ ПОКАЗНИКІВ ЗА УМОВИ ІСНУВАННЯ ПРОСТОРОВИХ ОБЛАСТЕЙ СКОРЕЛЬОВАНОГО РУХУ ТЕТРАЕДРИЧНИХ ГРУП

С. Свелєба¹, І. Катеринчук¹, І. Куньо¹, І. Карпа¹, Я. Шмигельський¹,
О. Семотюк²

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Ген. Тарнавського, 107, 79017 Львів, Україна
incomlviv@gmail.com

²Українська академія друкарства,
вул. Підголюско, 19, 79020 Львів, Україна

У роботі розглядається неспівмірна надструктура, що описується двома диференціальними рівняннями другого порядку. Досліджено динаміку неспівмірної надструктури в момент її виникнення при зміні двох безрозмірних параметрів T і K математичної моделі. Перший з них відповідає за стійкість неспівмірної надструктури, а другий - за її анізотропну взаємодію. Проаналізовано спектри величини показників Ляпунова та карти динамічних режимів неспівмірної фази при зміні параметрів T і K в інтервалі $[0,1]$. Розрахунок показників Ляпунова виконано в середовищі Python із використанням бібліотек Skipy, JitCODE.

При малих значеннях параметрів T і K ($0.0015 \div 0.03$) в даній системі виникає хаотичний стан, який обумовлений взаємодією між різними просторовими областями скорельованого руху тетраедричних груп. Появу хаотичного стану (при зародженні неспівмірної надструктури) та його існування при малих значеннях параметра T , засвідчують як спектри показників Ляпунова так і карти динамічних режимів. При збільшенні параметра T хаотичний стан відсутній.

Ключові слова: неспівмірна надструктура, фазовий портрет, динамічні режими, спектри показників Ляпунова.

Відомо [1], що у значному температурному інтервалі вище фазового переходу в неспівмірну фазу структура кристалу зазнає структурних порушень, пов'язаних з утворенням просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп. Так в кристалах $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{MeCl}_4$ ($\text{Me} = \text{Zn}, \text{Co}, \text{Cu}$) ці області характеризуються поворотом тетраедричних груп MeCl_4 . Цей температурний інтервал становить кілька десятків градусів, і характеризується немонотонною поведінкою як діелектричних [2] так і двопротенезаломлюючих властивостей [3]. Нелінійність даних залежностей збільшується при підході до фазового переходу вихідна – неспівмірна фаза, що може свідчити як про ріст даних областей, так і про збільшення величини повороту тетраедричних груп в кристалах $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{MeCl}_4$ ($\text{Me} = \text{Zn}, \text{Co}, \text{Cu}$). З ростом даних областей збільшується факт їхнього взаємовпливу одну на одну. Ця взаємодія в процесі утворення неспівмірної надструктури може приводити до виникнення хаотичного стану,

який по своїй природі є відмінним від хаотичного стану, що виникає в солітонному і стохастичному режимі неспівмірної надструктури. В підтвердження наявності виникаючих механічних напружень між областями скорельованого руху тетраедричних груп виступають дослідження по впливу рухомих і нерухомих дефектів на температурну поведінку двопротенезаломлення в температурному інтервалі існування просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп [4].

Розрахунок показників Ляпунова здійснювався для неспівмірної надструктури, що описується двома диференціальними рівняннями другого порядку [1]:

$$R'' - R^3 + (1 - \varphi'^2 + T\varphi')R - R^{n-1}K(\cos n\varphi + 1) = 0; \quad (1)$$

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

де T і K - безрозмірні параметри, що описують стійкість неспівмірної структури та її анізотропну взаємодію відповідно, n - ціле число, що характеризує симетрію потенціалу [1]. З метою дослідження динамічних режимів неспівмірної надструктури в момент її виникнення були проведені дослідження фазових портретів та показників Ляпунова при малих значеннях параметрів T і K .

Систему, що складається з двох диференціальних рівнянь (1) і (2) другого порядку розв'язували чисельним методом BDF [5, 6].

Розрахунок коефіцієнтів Ляпунова виконано в середовищі Python із використанням бібліотек Skipy, JiTCODE по методиці описаної в роботі [6].

На рис. 1 наведено залежність показників Ляпунова, спектрів їх величин та карти динамічних режимів від зміни параметрів T і K в інтервалі 0.0÷1.0.

Згідно з рис. 1 перший показник Ляпунова є додатній, другий приймає як від'ємні так і додатні значення з незначним відхиленням його величини. Третій і четвертий показники є від'ємними. Слід зазначити, що перший, другий і четвертий показники Ляпунова носять аномальний характер з явно вираженою періодичністю. При K і $T < 1$ дана система характеризується одним позитивним значенням показника Ляпунова і трьома від'ємними значеннями. Причому третій показник приймає від'ємне значення, яке по модулю значно перевищує інші показники. Отже сума всіх показників Ляпунова є від'ємною величиною, тобто система має атрактор.

Слід також зазначити, що третій показник Ляпунова носить аномальний характер при $T < 0.2$ і $K < 1$. На це зокрема вказує і спектр величини λ_3 . На наявність аномального періодичного характеру поведінки λ_1 , λ_2 вказують як спектри їх величин так і карта динамічних режимів досліджуваної системи (рис. 1). Згідно карти динамічних режимів даної системи за умови $R = 0.3$, $\varphi = 0.3$, T , $K = 0.00\div 1$ дана система характеризується двома сигнатурами (0,-,- та +,-,-), які періодично змінюють одна одну (рис. 1).

Збільшення величини зміни фази φ супроводжується збільшенням величини аномальної поведінки λ_3 (рис. 1), причому даний коефіцієнт Ляпунова набуває додатне значення. Зокрема це добре ілюструє спектр величини даного коефіцієнта. Карта динамічних режимів за даних умов (рис. 1,в) характеризується трьома сигнатурами (0,-,-,-; +,-,-,-; +,0,-,-) і засвідчує появу хаотичного режиму надструктури (сигнатура коефіцієнтів Ляпунова: +,0,-,-). Як відомо такий зсув по фазі може бути викликаний як впливом зовнішніх чинників (напруження механічних і електричних полів) так і поверхневою енергією. Зокрема про це зазначалось в роботі [7].

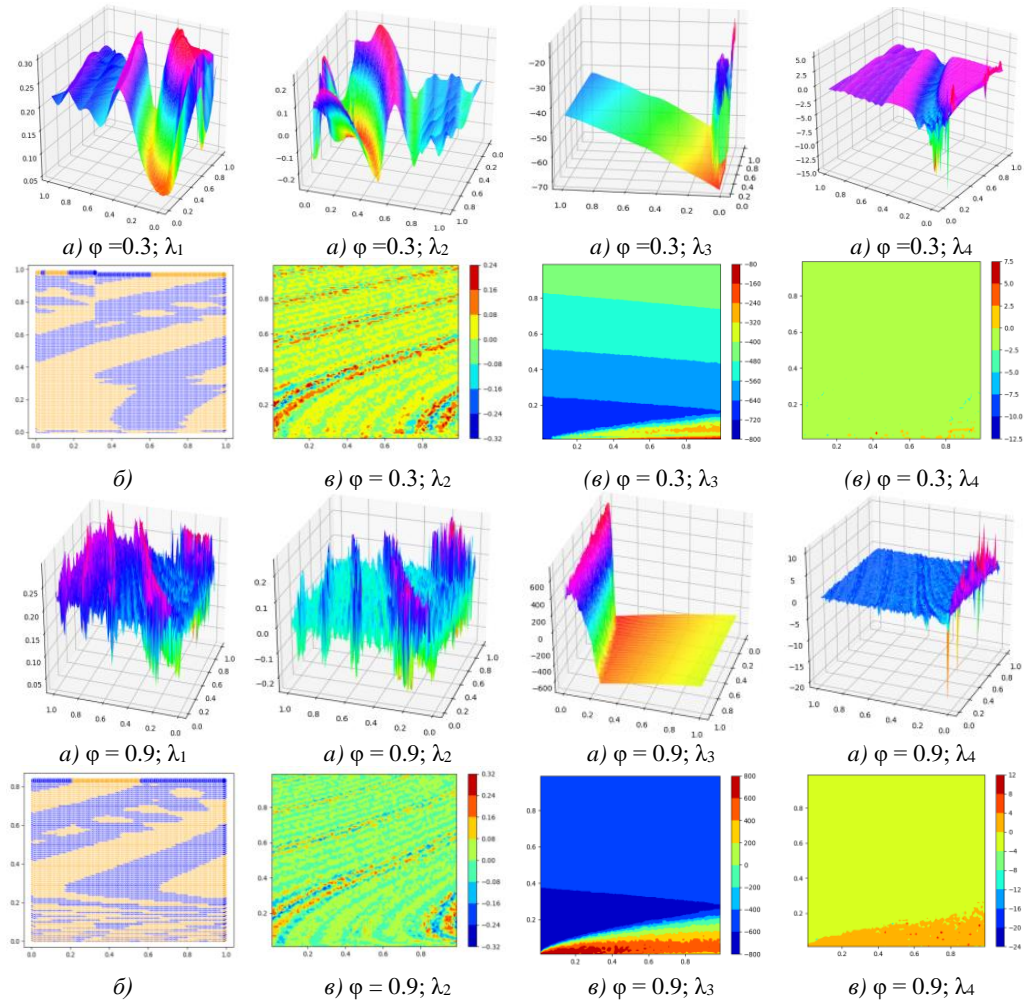


Рис. 1. Залежність показників Ляпунова (а), спектру їх величин (б), та карти динамічних режимів (б) при зміні параметрів T і K в інтервалі $0.0 \div 1.0$, та різних початкових значень фази параметра порядку $\varphi = 0.3$ і $\varphi = 0.9$.

Подальше збільшення величини зсуву фази приводить до зменшення аномальної поведінки коефіцієнтів Ляпунова та зникнення на карті режимів неспівмірної надструктури сигнатури, що відповідає за хаотичний її стан. Отже при $T < 0.1$ і $K < 0.4$ в даній системі виникає хаотичний стан, який на думку авторів обумовлений взаємодією між різними просторовими областями скорельованого руху тетраедричних груп.

Коли відстань між просторовими областями скорельованого руху тетраедричних груп є такою, що вони не впливають одна на одну, хаотичний стан повинен бути відсутнім. З цією метою було проведено дослідження даної системи за умови $T = 0.00005 \div 0.005$; $K = 0.00005 \div 0.005$ (рис. 2)

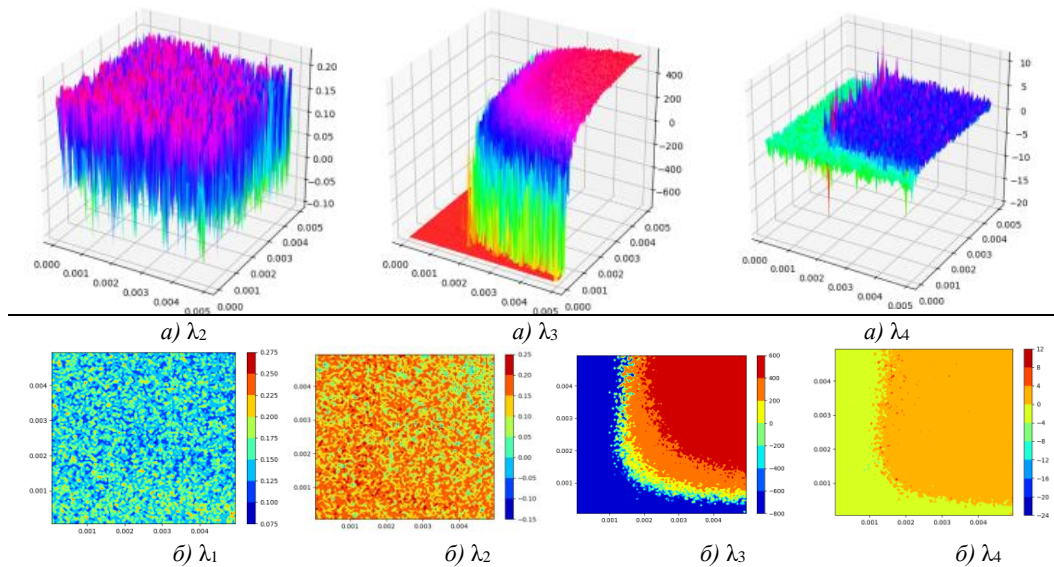


Рис. 2. Залежність показників Ляпунова $a)$, спектру їх величин $b)$ при зміні параметрів T і K в інтервалі $0.00005 \div 0.005$

Згідно з рис. 2. показники Ляпунова λ_3 , λ_4 характеризуються аномальною поведінкою і розбивають простір в координатах T і K на два підпростори. Перший характеризується додатними значеннями λ_1 , λ_2 та від'ємними значеннями λ_3 , λ_4 , а другий додатними значеннями всіх коефіцієнтами Ляпунова. Отже, як припускалось вище, при $T < 0.0015$ і $K < 0.0015$ існує стан системи, коли просторові області скорельованого руху тетраедричних груп не взаємодіють. За умови, коли T і $K > 0.0015$ система характеризується появою хаотичного стану зі сигнатурою «+;+;+».

В працях [1, 4] неодноразово відмічалось, що рухомі і нерухомі домішки і дефекти приводять до збільшення аномальної поведінки фізичних величин в температурному інтервалі існування просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп [1]. Такі дефекти та домішки можна також асоціювати із збуренням фази параметра порядку φ' . Тому на рис. 3 наведені дослідження впливу збурення фази на динаміку даної системи.

Згідно з T -, K -діаграмами показників Ляпунова вже при малих значеннях збурення фази ($\varphi' = 0.1$) простежується поява позитивних значень λ_3 і λ_4 (рис. 3,а), що може свідчити про виникнення хаотичного стану системи. На спектрах величини коефіцієнтів Ляпунова чітко окреслюється область появи можливого хаосу (рис. 3,б). Беручи до уваги карту динамічних режимів неспівмірної надструктури (рис. 3,б), поява хаотичного стану простежується при малих значеннях параметра T ($0.001 < T < 0.1$). Подальше збільшення величини φ' стимулює збільшення області існування хаотичного стану, і при $\varphi' = 0.75$ основним режимом даної системи є хаотичний.

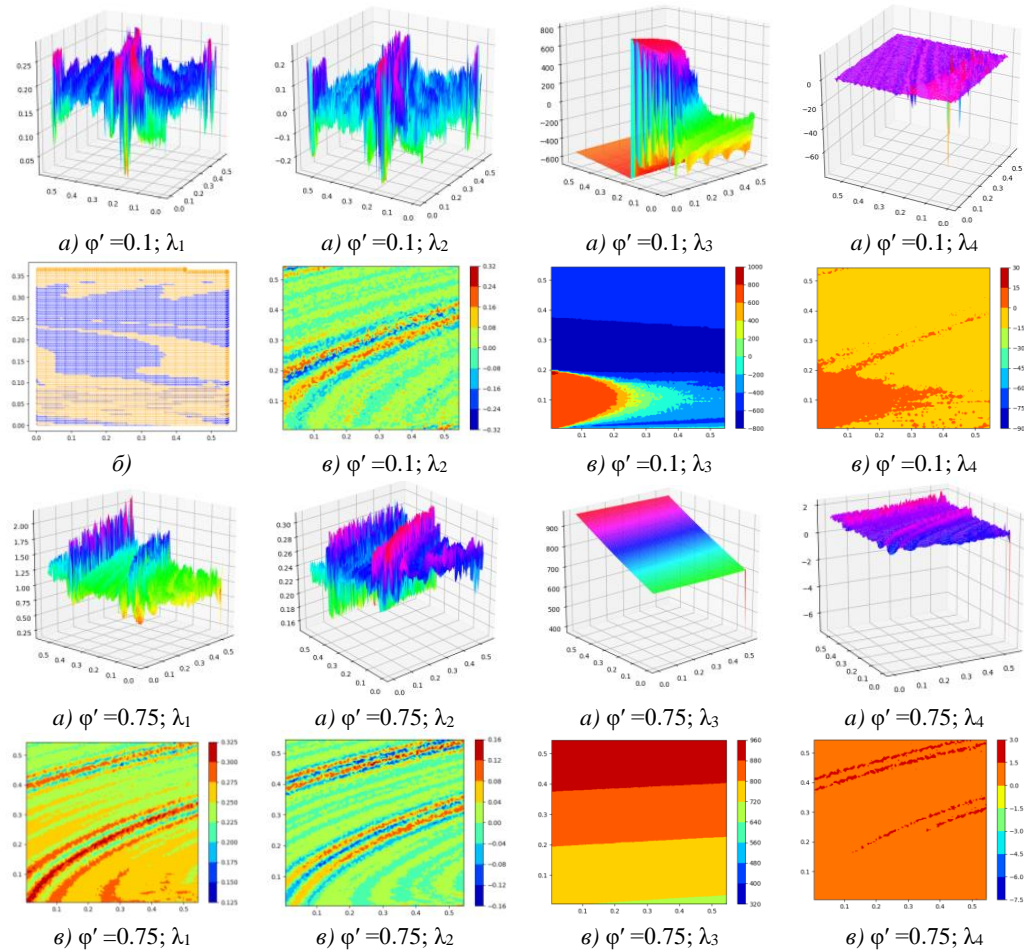


Рис. 3. Залежність показників Ляпунова *a)*, спектру їх величин *б)*, та карти динамічних режимів *б)* при зміні параметрів T і K в інтервалі $0.0 \div 1.0$, та різних початкових значеннях збурення фази параметра порядку $\varphi' = 0.1$ і $\varphi' = 0.75$.

За умови, коли T і $K \ll 0.001$, фазовий портрет даної системи характеризується областю, де аттрактор приймає характер вузького шлейфу, та області, де простежується розширення аттрактора (рис. 4,*a*). Збільшення величин параметрів T і K супроводжується збільшенням кількості біфуркацій (рис.4,*a*). Коли T і K приймає значення ≥ 0.0015 (рис. 4,*б-г*) фазовий портрет даної системи характеризується роздвоєнням аттрактора на дві гілки в області, де раніше простежувалось розширення. Подальше збільшення параметрів T і K супроводжується збільшенням роздвоєння, яке досягає максимуму при T і $K = 0.003$. При подальшому збільшенні величини цих параметрів проходить процес зменшення роздвоєння, та зменшення кількості біфуркацій.

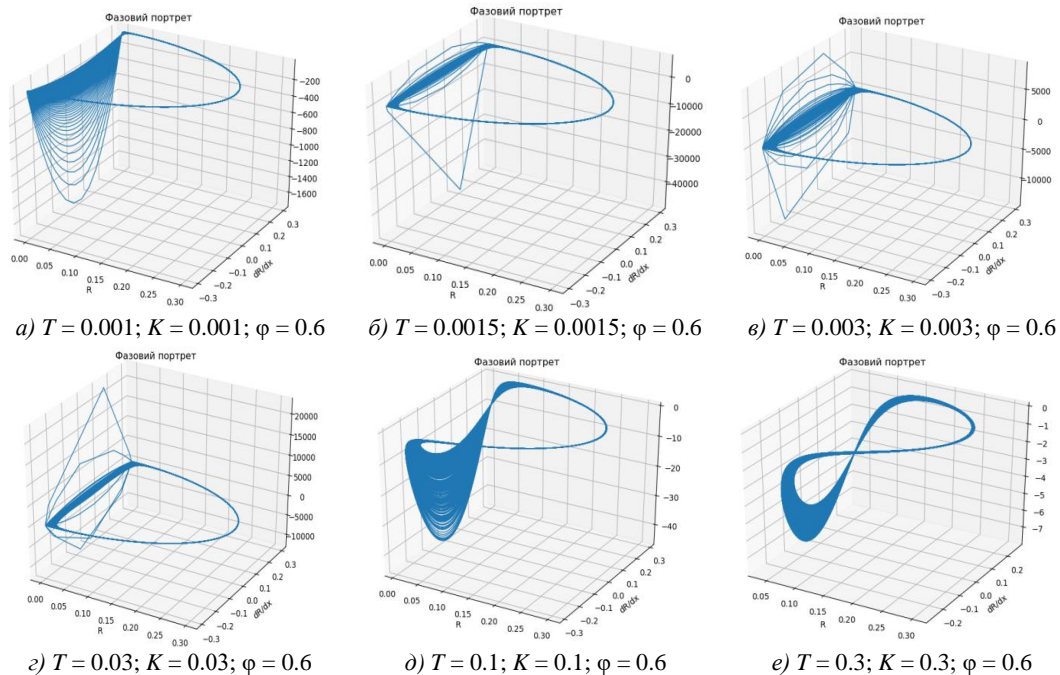


Рис. 4. Фазовий портрет в координатах R, R', φ при різних значеннях параметрів T і K та $R = 0.3; n = 4; \varphi = 0.6$.

Наступним етапом є розширення вузького шлейфу за рахунок збільшення кількості біфуркаційних траєкторій. Отже в процесі виникнення неспівмірної надструктури в околі фазового переходу вихідна-неспівмірна фаза простежується інтервал, який характеризується взаємовпливом просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп. Дана взаємодія порушує просторово модульований стан, як в самих просторових областях скорельованого руху тетраедричних груп, так і поза ними і може приводити до виникнення хаотичного стану. На думку авторів ця ситуація і реалізується при малих значеннях параметра T і K ($0.0015 \div 0.03$). Згідно з картами динамічних режимів, наведених на рис. 1 і рис. 2, хаотичний стан спостерігається при $T > 0.1$ та у всьому досліджуваному діапазоні K . Виходячи із означення параметра T (параметр що описує далеко діючу взаємодію), збільшення величини його веде до збільшення далекодіючої взаємодії, що і зумовлює зменшення стійкості хаотичного стану системи та переходу до однорідної картини модульованої надструктури.

Аналогічна картина простежується і при наявності збурення фази (рис. 5). Тобто при малих значеннях параметра T виникає нестійкий хаотичний стан, який при збільшенні величини параметра, що описує далеко діючу взаємодію, зникає. Відомо [4], що в загальному вплив дефектів і домішок на просторові області скорельованого руху тетраедричних груп є подібний. Це, зокрема, проявляється у збільшенні нелінійної поведінки фізичних величин в температурному інтервалі їх існування. Вплив фази та її

збурення зумовлюють подібну поведінку атракторів на фазовому портреті системи (рис. 4, 5). Тобто, появою атрактора, який характеризується вузьким шлейфом в одному просторі фазового портрету та розгалуженим хвостом (роздвоєнням) в іншому (рис. 4, б, в, з; рис. 5, з).

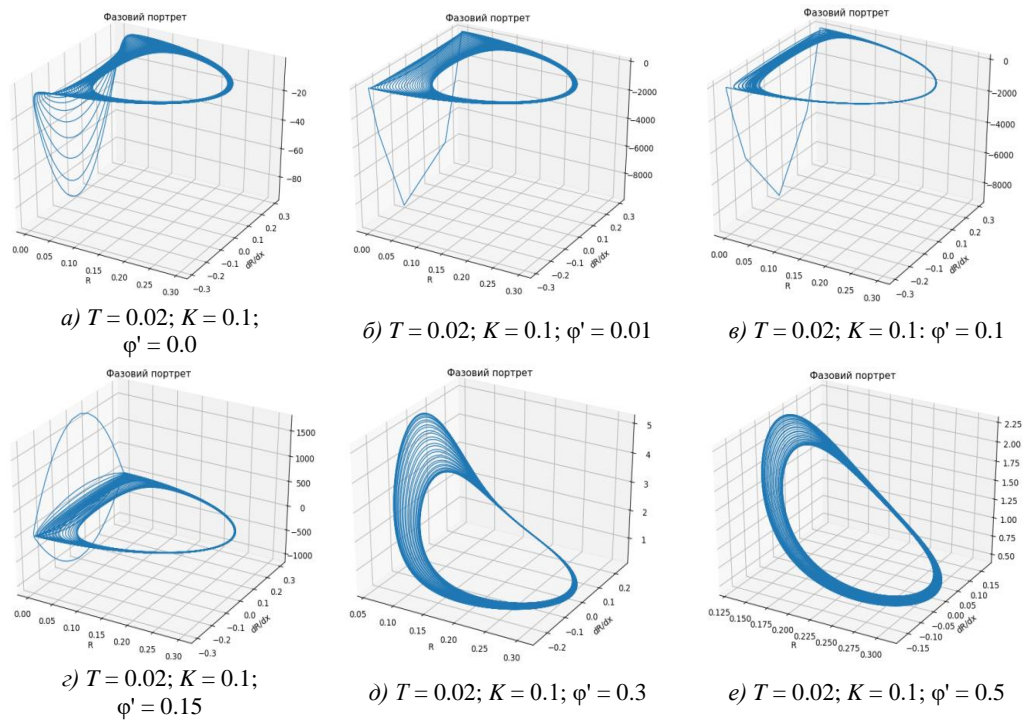


Рис.5 Фазовий портрет в координатах R, R', φ при різних значеннях φ' та $R = 0.3; n = 4; T = 0.02; K = 0.1$.

Отже, система, яка моделюється двома диференціальними рівняннями для опису неспівмірної надструктури, за наявності двокомпонентного параметра порядку характеризується складною динамікою в процесі її зародження. Важливу роль в динаміці зародження неспівмірної надструктури відіграє величина, що описує ступінь далекодіючої взаємодії. При малих значеннях її величини просторові області скорельованого руху тетраедричних груп не взаємодіють одна з одною. Ангармонізм коливання основної ґратки і підґратки (яка описує модуляційну надструктуру) спричиняє збільшення далекодіючої взаємодії, що породжує розширення просторової області скорельованого руху тетраедричних груп та їх взаємодію. Взаємодія просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп приводить до порушення модуляційної картини руху тетраедричних груп, спричиняючи тим самим появу хаотичного стану надструктури. На це зокрема вказують експериментальні дослідження по впливу дефектів та домішок на двозаломлюючі та діелектричні

властивості кристалів $(N(CH_3)_4)_2MeCl_4$ (де $Me = Zn; Cu$) в температурному інтервалі існування просторових областей скорельованого руху тетраедричних груп [1]. Дослідження показників Ляпунова λ_3 і λ_4 , які описують поведінку фази параметра порядку і фазової швидкості надструктури відповідно (рис. 1–3) свідчать про появу хаотичного стану та залежність його від початкових умов.

Розглянута дисипативна система характеризується втратою енергії в процесі свого розвитку, тобто початкова область в фазовому просторі зменшується, і, нарешті, траєкторії від всіх початкових умов, узятих в певній області (басейні тяжіння), сходяться до деякого встановленого в фазовому просторі атрактора (рис. 3-4). Зазвичай дисипативна динамічна система володіє тільки одним або декількома такими атракторів при певних значеннях параметрів. Відомо, що кількість атракторів зростає зі зменшенням дисипації, але хаотичних між ними мало. Це явище сильно пов'язано з кризами, які атрактор відчуває при зміні параметрів, і викликає зіткненням з межами басейну при зміні параметра нелінійності. В результаті хаотичний атрактор зникає відразу після його появи з каскаду подвоєння періоду. Зміни також відбуваються з басейнами тяжіння і межами басейнів. Перші стають досить малими для більшості співіснуючих атракторів.

Таким чином отримані карти динамічних режимів (рис. 1, 3) засвідчують, що недорозвинутий хаотичний стан неспівмірної надструктури, який виникає в процесі її утворення, існує при малих значеннях параметра T (тобто величини далекодіючої взаємодії) і при його збільшенні зникає.

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. Свелеба С. Скорельований рух Т-груп у парафазі кристалів $[N(CH_3)_4]_2CuCl_4$ / С. Свелеба, І. Катеринчук, О. Семотюк, О. Фіщич, Ю. Панківський, І. Куньо // Вісн. Львів. Ун-ту. Сер. фіз. – 2006. - Вип. 39. – С. 76–81.
3. Свелеба С.А. Двוזаломлюючі 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.
4. Sveleba S. Properties of Anisotropic Interaction of the Incommensurate Superstructure as Described by Dziloshinsky's Invariant / S. Sveleba, I. Katerynychuk, I. Kunyo, I. Karpa // The X th International Scientific and Practical Conference "Electronics and Information Technologies" (ELIT-2018) - August 30-September 2, 2018. - Lviv-Karpaty village, Ukraine. - A-159–162.
5. Sveleba S. Multi-steps Methods for Calculating the Phase Portrait of the Incommensurate Superstructure with the Lifshitz's Invariant / S. Sveleba, I. Katerynychuk, I. Kunyo, I. Karpa // The X th International Scientific and Practical Conference "Electronics and Information Technologies" (ELIT-2018) - August 30-September 2, 2018. - Lviv-Karpaty village, Ukraine. – A-155–158.
6. Gerrit A. Efficiently and easily integrating differential equations with JiTCODE, JiTCDDE, and JiTCSDE. Mathematical Software. / A. Gerrit / Chaos. 2018. – 28. – 043116.

7. Свелєба С.А. Вплив електричного поля на модульовану структуру неспівмірної фази кристалів $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{CuCl}_4$. // Вісн. Львів. Ун-ту. Сер. фіз. – 1998. – Вип. 30. – С. 47-53.

FEATURES OF THE BEHAVIOR OF THE LYAPUNOV'S EXPONENTS UNDER CONDITIONS OF THE TETRAEDRIC GROUPS CORRELATED MOVEMENT SPATIAL AREAS EXISTENCE

S. Sveleba¹, I. Katerynychuk¹, I. Kunyo¹, I. Karpa¹, Ya. Shmygelsky¹, O. Semotyuk²

¹*Ivan Franko National University of Lviv, 107 Tarnavsky St.,
UA-79017 Lviv, Ukraine
incomlviv@gmail.com*

²*Ukrainian Academy of Printing, 19 Pid Holoskom St.,
UA-79020 Lviv, Ukraine*

The dynamics of an incommensurate superstructure at the moment of its appearance is investigated in the work. The spectra of the magnitude of the Lyapunov's exponents and the maps of the dynamic modes of the incommensurate phase are analyzed for the $0.0 \div 1.0$ interval of the T and K parameters. The calculation of Lyapunov's exponents is performed in the Python environment using the libraries Skipy, JiTCODE.

It is established that a chaotic state arises in this system at small values of the T and K ($0.0015 \div 0.03$) parameters, which is caused by the interaction between different spatial regions of the correlated motion of tetrahedral groups. The appearance of a chaotic state (at the origin of an incommensurate superstructure) and its existence at small values of the parameter T are evidenced by both the spectra of the Lyapunov's exponents λ_3 and λ_4 and the maps of dynamic regimes. As the parameter T increases, the chaotic state disappears.

Thus, a system characterized by two differential equations to describe an incommensurate superstructure in the presence of the two-component order parameter is characterized by the complex dynamics in the process of its origin. An important role in the dynamics of the origin of the incommensurate superstructure is played by a quantity that describes the degree of long-range interaction. At small values of its magnitude, the spatial regions of the correlated motion of tetrahedral groups do not interact with each other. The anharmonic oscillations of the main lattice and the sublattice (which describes the modulation superstructure) cause an increase in the long-range interaction, which causes the expansion of the spatial region of the correlated motion of tetrahedral groups, and their interaction. The interaction of the spatial regions of the correlated motion of tetrahedral groups leads to a violation of the modulation picture of the motion of tetrahedral groups, thereby causing the appearance of a chaotic state of the superstructure. Studies of Lyapunov's exponents λ_3 and λ_4 , which describe the phase behavior of the order parameter and the phase velocity of the superstructure, respectively, indicate the appearance of the chaotic state and its dependence on the initial conditions.

The considered dissipative system is characterized by energy loss in the process of its development, so the initial region in phase space decreases, and, finally, trajectories from all initial conditions taken in a certain region (gravity basin) converge to some attractor installed in phase space. Typically, a dissipative dynamic system has only one or more such attractors at certain parameter values. It is known that the number of attractors increases with decreasing dissipation, but there are few chaotic between them. This phenomenon is strongly associated with the crises that the attractor experiences when changing parameters, and causes a collision with the boundaries of the pool when changing the nonlinearity parameter. As a result, the chaotic attractor

disappears immediately after its appearance from the cascade of doubling the period. Changes also occur with “gravity” pools and pool boundaries. The former become quite small for most coexisting attractors.

The obtained maps of dynamic modes show that the underdeveloped chaotic state of the incommensurate superstructure that arises in the process of its formation exists at small values of the parameter T (the magnitude of the long-range interaction) and disappears with its increase.

Key words: the incommensurate superstructure, the phase portrait, the dynamic modes, the spectra of Lyapunov’s exponents.

*Стаття: надійшла до редакції 06.05.2020,
доопрацьована 18.05.2020,
прийнята до друку 20.05.2020*