

14. *Nozieres P., Pines D.* The Theory of Quantum Liquids. Normal Fermi Liquids. V. 1. Cambridge, Massachusetts: Perseus Books, 1999. 355 p.
15. *Reggiani L., Lugli P., and Jauho A. P.* Quantum kinetic equation for electronic transport in nondegenerate semiconductors // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 36. No. 12. P. 6602–6608.
16. *Schmielau T.* Phase Space Filling in the Electron-Hole Pair Green's Function: Proc. of the Conf. "Progress in Nonequilibrium Green's Functions". Dresden, Germany, 2002. P. 265–273.
17. *Spicka V., Lipavsky P.* Quasiparticle Boltzman equation in semiconductors // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 52. No. 20. P. 14615–14635.

A. В. Ляпцев

СИММЕТРИЯ РЕГУЛЯРНЫХ И ХАОТИЧЕСКИХ ДВИЖЕНИЙ В ЗАДАЧАХ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ. УРАВНЕНИЕ ДУФФИНГА

Предложен метод исследования симметрии регулярных и хаотических движений в задачах нелинейной динамики. При регулярных движениях исследуется симметрия фазовой траектории системы. При хаотических движениях симметрия исследуется при помощи сечений Пуанкаре. Показано, что для нелинейного осциллятора, описываемого уравнением Дуффинга, группа симметрии уравнений в зависимости от параметров изоморфна различным точечным группам. При этом симметрия решений может быть такой же, как симметрия исходной группы или нарушаться в зависимости от параметров задачи.

Ключевые слова: нелинейная динамика, динамический хаос, сечения Пуанкаре, странный аттрактор.

A. Liaptsev

The Symmetry of Regular and Chaotic Motions in Nonlinear Dynamic Problems. Duffing Equation.

A method of investigation of symmetry of regular and chaotic motions in nonlinear dynamic problems is suggested. The symmetry of regular motions is investigated by means of analysis of phase trajectory. The symmetry of chaotic motions is investigated by means of analysis of Poincare cross-sections. It is shown that for a nonlinear oscillator described by Duffing equation, group symmetry of the equations depending on a parameter is isomorphic to a variety of point groups. At the same time the symmetry of the solutions might be the same as the symmetry of the initial group or violated depending on the parameters of the problem.

Keywords: nonlinear dynamics, dynamic chaos, the Poincare cross-section, of a strange attractor.

Симметрия играет значительную роль как в задачах классической механики, так и в задачах квантовой механики. Существенным различием является то, что в квантовой механике после установления равновесия плотность вероятности является полностью симметричной по отношению к группе симметрии исходных уравнений, в то время как в классической физике решения могут не быть полностью симметричными, то есть симметрия может нарушаться. Чтобы это понять, достаточно обратиться к решениям кеплеровской задачи в квантовой (атом водорода) и классической (движение планет) задачах.

В задачах нелинейной динамики решения могут быть как регулярными (периодическими, или условно-периодическими), так и хаотическими. Если понятие симметрии для регулярных решений очевидно, то для хаотических движений понятие симметрии является достаточно условным. Тем не менее такая симметрия наблюдается в численных экспериментах с различными моделями диссипативных систем, для которых хаотическое движение по истечении некоторого времени представляет собой предельный цикл, являющийся странным аттрактором (по другой терминологии [2] — стохастическим аттрактором). В данном случае симметрия, как и в квантовой механике, имеет вероятностный характер и лучше всего наблюдается при исследовании сечений Пуанкаре. Проявление подобной симметрии наблюдалось для системы Лоренца (см., например, литературу [1]), для решений уравнения Дуффинга [6], для механической системы, совершающей хаотические автоколебания при воздействии силы сухого трения [4]. Следует отметить, что во всех случаях имеет место простейшая симметрия — симметрия зеркального отражения. Картина Пуанкаре для этих решений статистически (при большом числе точек) является симметричной по отношению к зеркальному отражению.

Подобное свойство симметрии хаотического движения, по-видимому, не случайно и соответствует тому, что классическая динамика является предельным случаем квантовой динамики. В связи с этим представляет интерес исследование симметрии хаотических решений для систем с более «богатой» симметрией. Модели таких систем можно получить, обратившись к задаче о движении частицы, находящейся под воздействием внешней гармонической силы и некоторого симметричного внешнего поля. В данной статье мы приведем результаты численного эксперимента для нелинейного гармонического осциллятора, описываемого уравнением Дуффинга, исследуя проявление симметрии при регулярных и хаотических движениях в зависимости от параметра, характеризующего диссипацию энергии. В последующих статьях мы рассмотрим симметрию движений для ротатора, находящегося под воздействием периодического поля, для которого регулярные движения при изменении амплитуды внешнего воздействия чередуются с хаотическими движениями [3] и имеют более «богатую» симметрию.

Результаты численного эксперимента для этих систем позволяют сделать следующие выводы.

1. При малой диссипации хаотические решения в вероятностном смысле являются полностью симметричными по отношению к группе симметрии исходного уравнения, в то время как регулярные решения могут быть как полностью симметричными, так и с нарушением симметрии.

2. В пределе малой диссипации наблюдается также симметрия, связанная с обратимостью движения, что эквивалентно расширению группы симметрии.

3. При увеличении диссипации симметрия может нарушаться также и для хаотических решений.

Уравнение Дуффинга имеет вид:

$$\ddot{x}(t) + \gamma \dot{x}(t) - \alpha x(t) + \beta x^3(t) = F \sin(\omega t). \quad (1)$$

В этом уравнении константы α и β характеризуют нелинейную упругую силу, константы F и ω — амплитуду и частоту внешней силы, константа γ — диссипацию энергии вследствие неконсервативной силы вязкого трения.

Уравнение (1) можно свести к системе трех автономных дифференциальных уравнений 1-го порядка:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \nu, \\ \dot{\nu} &= F \sin \varphi + \alpha x - \beta x^3 - \gamma \nu, \\ \dot{\varphi} &= \omega.\end{aligned}\tag{2}$$

Под симметрией мы подразумеваем инвариантность уравнений относительно некоторых преобразований переменных, входящих в уравнение. Существует очевидная симметрия $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$. Симметричные относительно такого преобразования движения — периодические движения, несимметричные — могут иметь период, кратный периоду внешнего воздействия или могут быть хаотическими. Помимо этой, есть еще одна симметрия относительно совокупности преобразований:

$$x \rightarrow -x, \quad \nu \rightarrow -\nu, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi.\tag{3}$$

Вместе с тождественным преобразованием эта совокупность преобразований образует группу симметрии, изоморфную точечной группе C_s (сведения о точечных группах симметрии и их представлениях см., например, в книге [5]). Чтобы это понять, достаточно перейти к «декартовым» координатам в трехмерном пространстве при помощи преобразований:

$$\begin{aligned}X &= x \cos \varphi, \\ Y &= x \sin \varphi, \\ Z &= \nu.\end{aligned}\tag{4}$$

Естественно, размерность этих переменных не соответствует размерности пространственных координат исходной задачи, поэтому мы будем употреблять кавычки для понятия «декартовы». В новых координатах преобразования симметрии сводятся к следующим:

$$X \rightarrow X, \quad Y \rightarrow Y, \quad Z \rightarrow -Z,\tag{5}$$

что есть просто отражение относительно плоскости (X, Y) .

Еще одно преобразование симметрии имеет место в пределе $\gamma \rightarrow 0$, то есть в отсутствие диссипации. Это симметрия обращения времени. Делая формальную замену $t \rightarrow -t$, получим из системы уравнений следующую систему:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= -\nu, \\ \dot{\nu} &= -F \sin \varphi - \alpha x + \beta x^3 + \gamma \nu, \\ \dot{\varphi} &= -\omega.\end{aligned}\tag{6}$$

Сделаем теперь замену переменных:

$$x \rightarrow -x, \quad \nu \rightarrow \nu, \quad \varphi \rightarrow -\varphi.\tag{7}$$

В результате из системы уравнений (6) получим:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \nu, \\ \dot{\nu} &= F \sin \varphi + \alpha x - \beta x^3 + \gamma \nu, \\ \dot{\varphi} &= \omega.\end{aligned}\tag{8}$$

Очевидно, система уравнений (8) переходит в систему (2) при $\gamma \rightarrow 0$.

Замене переменных (7) соответствует преобразование «декартовых» координат:

$$X \rightarrow -X, \quad Y \rightarrow Y, \quad Z \rightarrow Z, \quad (9)$$

что соответствует преобразованию отражения в плоскости (Y, Z) . Произведение преобразований (3) и (7), оставляющему инвариантной систему уравнений при $\gamma \rightarrow 0$, эквивалентно произведению преобразований (5) и (9), результатом чего является преобразование

$$X \rightarrow -X, \quad Y \rightarrow Y, \quad Z \rightarrow -Z, \quad (10)$$

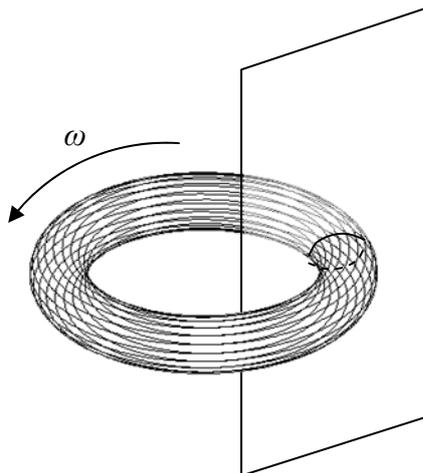
представляющее собой поворот вокруг оси Y на π . В результате при $\gamma \rightarrow 0$ группа симметрии преобразований, оставляющей инвариантной систему уравнений, является группа, изоморфная точечной группе C_{2v} .

При регулярных колебаниях, когда траектория движения частицы в фазовом пространстве представляет собой замкнутую кривую, можно наглядно судить о симметрии, сопоставив переменным x , v и φ декартовы координаты в трехмерном пространстве. Преобразование к координатам (4) позволяет сделать такое сопоставление не взаимно-однозначным образом (одни и те же «декартовы» координаты могут соответствовать различным наборам x , v и φ). Взаимно-однозначное сопоставление можно получить, модифицировав преобразование (4):

$$\begin{aligned} X &= (r + x) \cos \varphi, \\ Y &= (r + x) \sin \varphi, \\ Z &= v. \end{aligned} \quad (11)$$

При достаточно большом значении параметра r получается взаимно-однозначное соответствие. Фазовая траектория в этом случае представляет собой линию, намотанную на тор (рис. 1). При гармонических колебаниях сечение тора является эллипсом, при негармонических колебаниях сечение, естественно, деформируется.

Рис. 1.



Далее мы приведем примеры численных расчетов при значениях параметров $\alpha = -1$, $\beta = 1$. В этом случае потенциальная энергия, соответствующая упругой силе, имеет вид W -потенциала с двумя «ямами». В зависимости от значения амплитуды внешней силы колебания могут ограничиваться областью одной ямы или могут захватывать обе ямы.

На рис. 2 приведены графики, соответствующие регулярному колебанию в области одной из ям при значениях параметров $\omega = 1,2$, $F = 0,1$, $\gamma = 0,3$. На рис. 2,а приведена зависимость $x(t)$, а на рис. 2,б — фазовые траектории, полученные после преобразований симметрии, о которых говорилось выше. Символами g обозначены элементы группы симметрии:

$$\begin{aligned} E: & \quad x \rightarrow x, v \rightarrow v, \varphi \rightarrow \varphi, \\ g1: & \quad x \rightarrow -x, v \rightarrow -v, \varphi \rightarrow \varphi + \pi, \\ g2: & \quad x \rightarrow -x, v \rightarrow v, \varphi \rightarrow -\varphi. \end{aligned} \tag{12}$$

Четыре преобразования соответствуют группе симметрии системы уравнений (2), причем два из них относятся к группе симметрии, которая имеет место в пределе $\gamma \rightarrow 0$ (здесь и далее соответствующие кривые изображены на сером фоне).

Как видно из рисунка 2,б симметрия в данном случае оказывается нарушенной, фазовая траектория не обладает какой-либо симметрией.

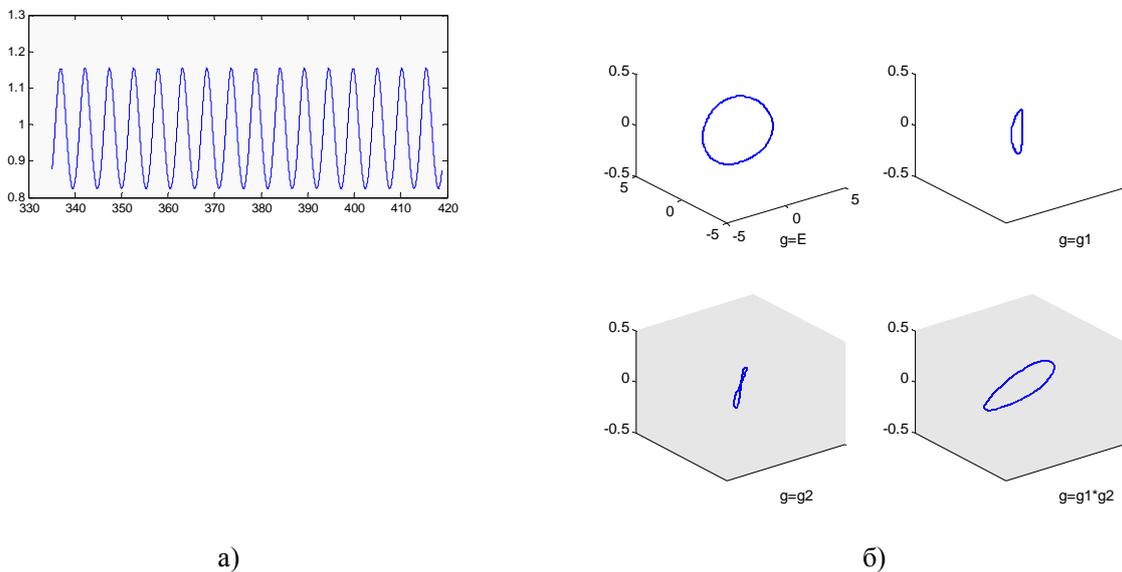
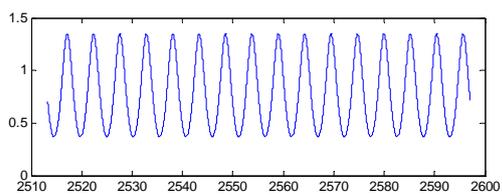


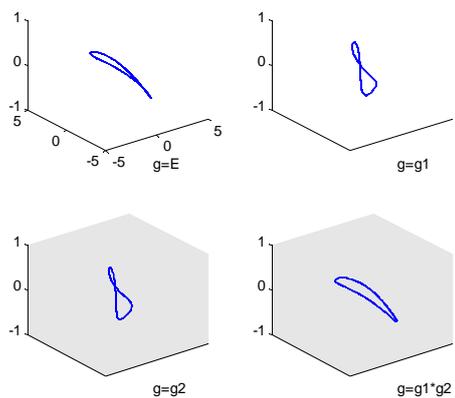
Рис. 2

Будем далее проводить численный эксперимент, плавно уменьшая параметр диссипации при сохранении остальных параметров. Таким способом можно получить более симметричное регулярное решение при значении параметра $\gamma = 0,01$ (рис. 3). В данном случае симметрия отражения также оказывается нарушенной (колебание в одной ямке), однако симметрия обращения времени имеет место, что видно из подобия графиков при $g = E$ и $g = g1 * g2$, так же как и из подобия графиков при $g = g1$ и $g = g2$.

При изменении параметра амплитуды внешнего воздействия F прослеживаются переходы от регулярных движений к хаотическим и обратно. Пример регулярного движения, симметричного относительно операции отражения (колебание, одинаково затрагивающее обе ямы), приведен на рис. 4. Вычисления проведены при значениях параметров $F=0,8$, $\gamma=0,3$. При таком значении параметра диссипации, как видно из рисунка, симметрия обращения времени пропадает. Медленно («адиабатически») уменьшая параметр диссипации, можно получить колебание симметричное как относительно операции отражения, так и относительно операции обращения времени. Результаты соответствующих вычислений при значении параметра $\gamma = 0,01$ приведены на рис. 5.

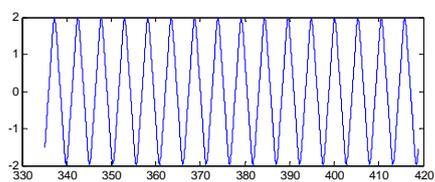


a)

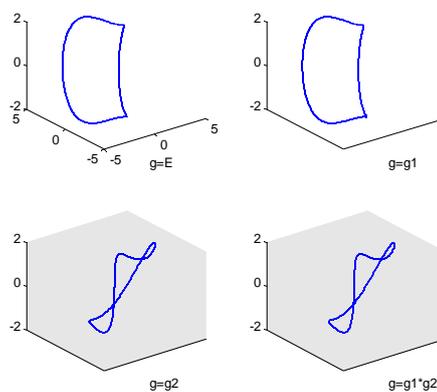


б)

Рис. 3

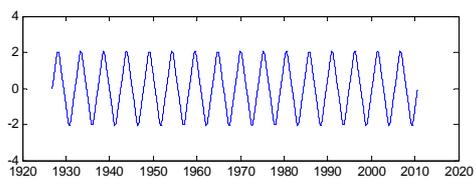


a)

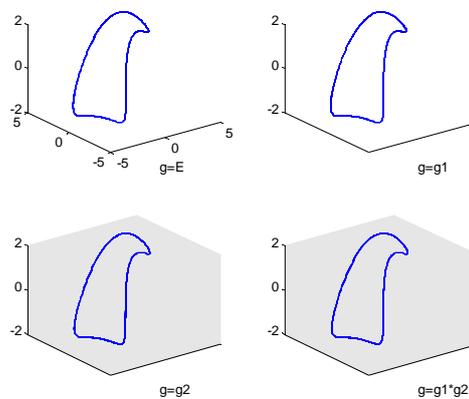


б)

Рис. 4



a)



б)

Рис. 5

Физически объяснить распространение колебания из одной ямы на обе ямы при увеличении амплитуды внешнего поля можно тем, что увеличивается работа внешней силы. Однако, как показывает расчет, регулярное колебание, затрагивающее обе ямы, не обязательно является симметричным. Пример такого несимметричного колебания приведен на рис. 6, расчет проведен при значениях параметров $\omega = 1,2$, $F = 9$, $\gamma = 0,3$. В этом случае, как при колебаниях, приведенных на рис. 2, оказывается нарушенной и симметрия зеркального отражения, и симметрия обращения времени.

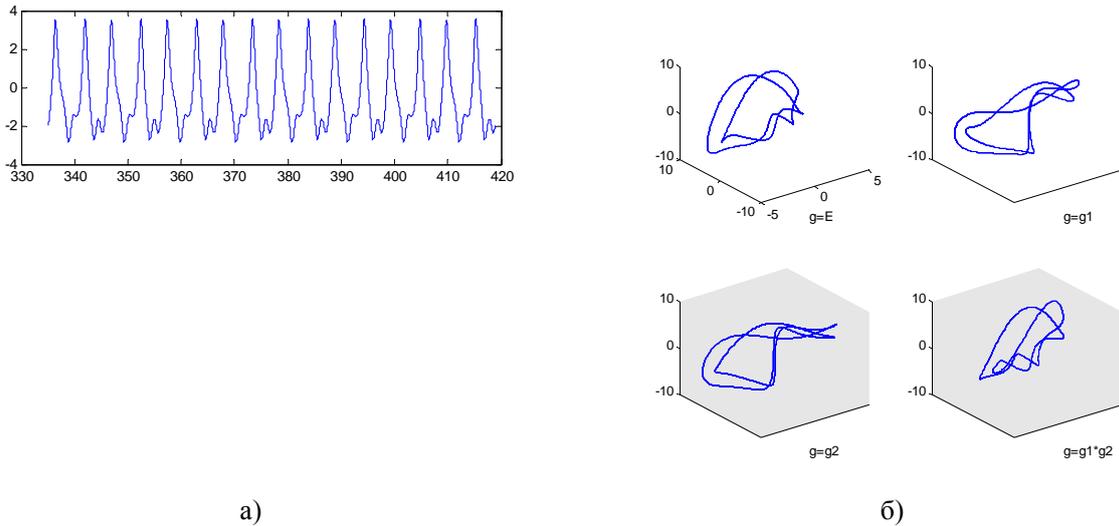


Рис. 6

Если о симметрии регулярных движений можно судить по виду траекторий на фазовой плоскости, то для хаотических движений подобный анализ оказывается невыполнимым. На помощь приходит анализ сечений Пуанкаре. Если провести расчет сечения Пуанкаре при некотором значении $\varphi = \varphi_0 + 2\pi n$, где n — целое число (соответствующее сечение изображено на рис. 1), то элементам симметрии g_1 , g_2 и $g_1 * g_2$ будут соответствовать сечения Пуанкаре при углах $\varphi_0 + \pi + 2\pi n$, $-\varphi_0 + 2\pi n$ и $\pi - \varphi_0 + 2\pi n$. Для сравнения сечений нужно в соответствии с преобразованиями (12) инвертировать ось x и/или ось v (см. рис. 7).

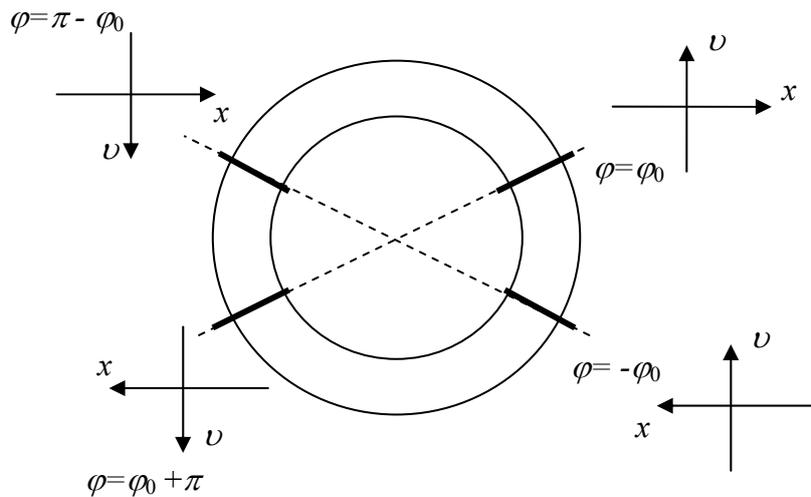


Рис. 7

Результаты расчета сечений Пуанкаре при значениях параметров $\omega = 1,2$, $F = 5,2$, $\gamma = 0,1$, $\varphi_0 = 40^\circ$ приведены на рис. 8.

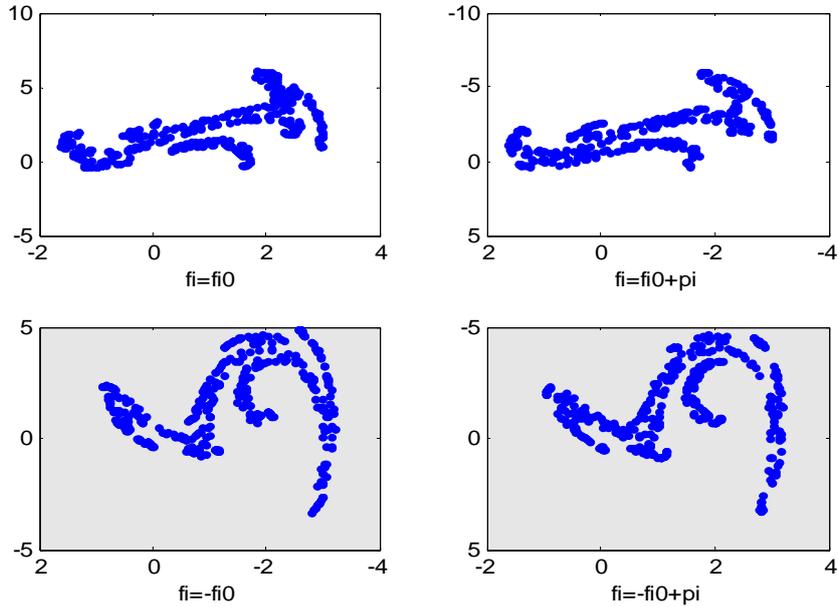


Рис. 8.

Несмотря на относительно небольшое число точек в сечении (384 точки для каждого сечения), видно, что имеет место симметрия отражения и отсутствует симметрия обращения времени. При увеличении числа точек симметричные картины Пуанкаре становятся все более похожими.

Расчет при уменьшении параметра диссипации приводит к полной симметрии картин Пуанкаре. На рис. 9 изображены картины при уменьшении параметра γ до 0,01 и сохранении других параметров.

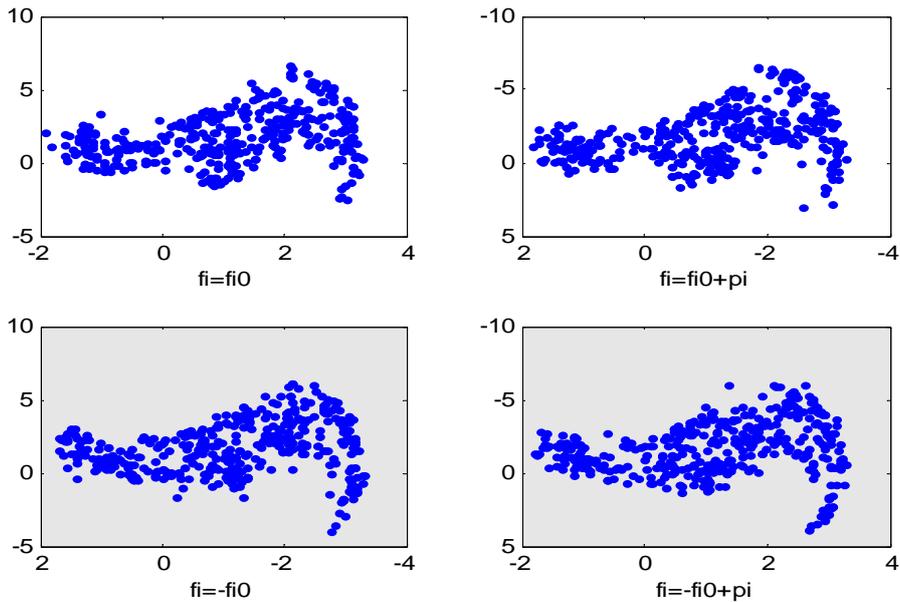
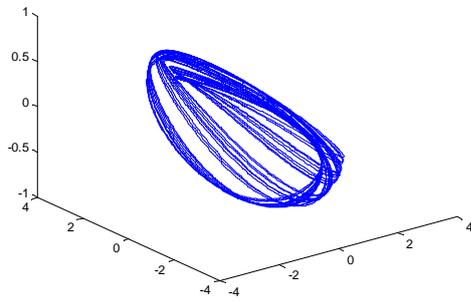


Рис. 9

Несмотря на относительно небольшое число точек, симметрия картин Пуанкаре наглядно проявляется.

Симметричность картин Пуанкаре при малых параметрах диссипации можно понять на основе того, что классическая механика является предельным случаем квантовой механики, где подобная симметрия проявляется в плотности вероятности. Тем не менее при некоторых параметрах задачи симметрия картины Пуанкаре нарушается несмотря на то, что график фазовой траектории выглядит как соответствующие графики для хаотических движений. Примеры приведены на рис. 10 (расчет при параметрах $\omega = 1, 2, F = 0,3, \gamma = 0,3$) и рис. 11 (расчет при параметрах $\omega = 1, 2, F = 10, \gamma = 0,3$). В первом случае движение ограничено областью одной ямы, а во втором — захватывает обе ямы.

а) Траектория в фазовом пространстве



б) Сечения Пуанкаре

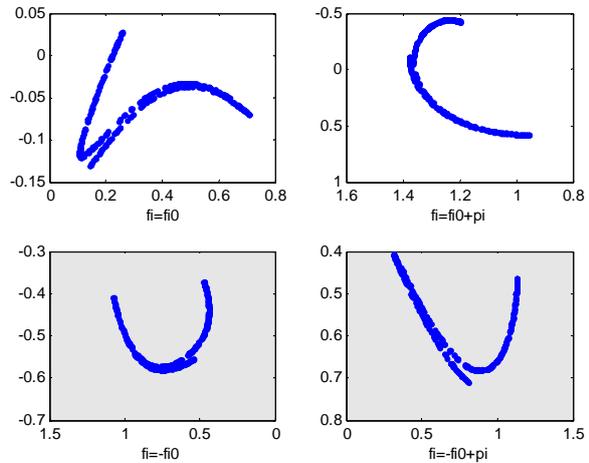
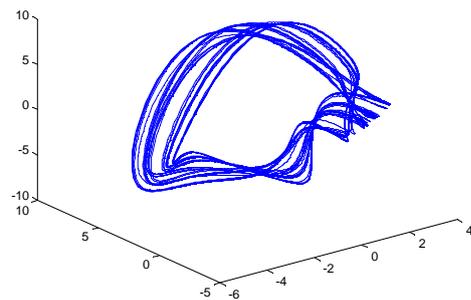


Рис. 10

а) Траектория в фазовом пространстве



б) Сечения Пуанкаре

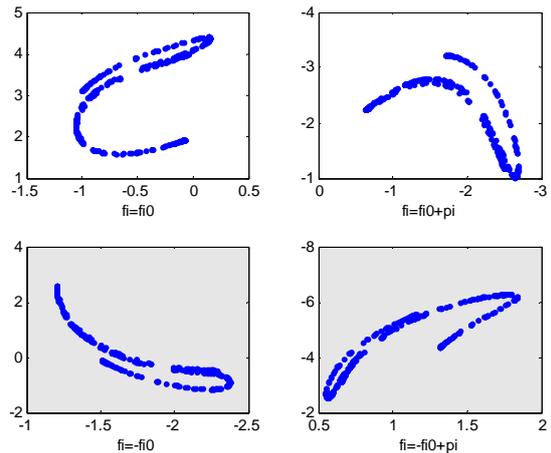
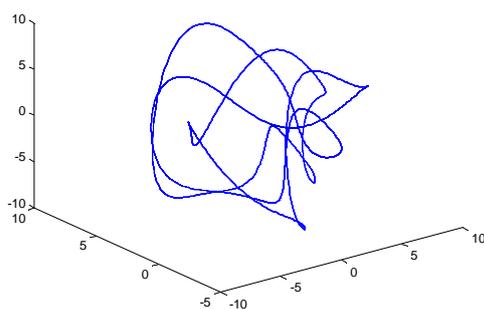


Рис. 11

Подобное нарушение симметрии, возможно, объясняется тем, что если предельные циклы хаотических движений (рис. 8, 9) соответствуют странным (стохастическим) аттракторам, то движение, изображенное на рис. 10 и 11, соответствует, по терминологии Заслав-

ского [2], квазиаттракторам. Такие предельные циклы являются периодическими, однако их период значительно превосходит период внешнего воздействия и при расчете периодичность фактически не проявляется. Это подтверждают расчеты, сделанные при меньшей константе затухания и тех же остальных параметрах, когда движение становится явно периодическим, а картина сечения Пуанкаре вырождается в три точки (рис. 12, выполненный при значениях параметров $\omega = 1, 2, F = 10, \gamma = 0,1$).

а) Траектория в фазовом пространстве



б) Сечения Пуанкаре

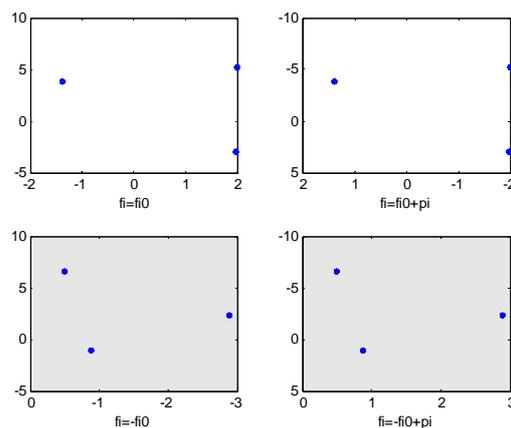


Рис. 12

О симметрии сечения Пуанкаре для уравнения Дуффинга упоминается в книге [6]. Однако данных о симметрии периодических движений и нарушении симметрии для периодических движений и хаотических движений нет. Приведены лишь сечения Пуанкаре для одного из наборов параметров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гритченко В. Т., Мацпура В. Т., Снарский А. А. Введение в нелинейную динамику. М., 2007.
2. Заславский Г. М., Сагдеев Р. З. Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса. М., 1988.
3. Кондратьев А. С., Ляпцев А. В. Динамический хаос в динамических и оптических системах // Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Естественные и точные науки. 2006. № 6 (15). С. 262–273.
4. Кондратьев А. С., Ляпцев А. В. Сечения Пуанкаре при описании поведения нелинейных систем // Компьютерные инструменты в образовании. 2012. № 1. С. 39–47.
5. Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. 280 с.
6. Gilmor R., Lefranc M. The Topology of Chaos. Wiley-Interscience. N.Y., 2002.

REFERENCES

1. Gritchenko V. T., Macpura V. T., Snarskij A. A. Vvedenie v nelinejnuju dinamiku. M., 2007.
2. Zaslavskij G. M., Sagdeev R. Z. Vvedenie v nelinejnuju fiziku: ot majatnika do turbulentnosti i haosa. M., 1988.
3. Kondrat'ev A. S., Ljaptsev A. V. Dinamicheskij haos v dinamicheskikh i opticheskikh sistemah // Izvestija RGPU im. A. I. Gertsena: Estestvennyye i tochnye nauki. 2006. № 6 (15). S. 262–273.
4. Kondrat'ev A. S., Ljaptsev A.V. Sechenija Puankare pri opisaniij povedenija nelinejnyh sistem // Komp'juternye instrumenty v obrazovanii. № 1. 2012. S. 39–47.

5. Petrashen' M. I., Trifonov E. D. *Primenenie teorii grupp v kvantovoj mehanike*. M.: Knizhnyj dom «LIBROKOM», 2010. 280 s.
 6. Gilmore R., Lefranc M. *The Topology of Chaos*. Wiley-Interscience. N.Y., 2002.

G. A. Bordovsky, A. V. Marchenko, A. V. Nikolaeva, A. B. Zharkoi

The Charge State of Copper Impurity Atoms in AgCl

⁶⁷Cu(⁶⁷Zn) emission Mössbauer spectroscopy and measurements of the ⁶⁴Cu decay rate have shown that copper impurity atoms occupying cation sites of the AgCl lattice are in the Cu⁺ state when AgCl single crystals are doped with Cu by diffusion in a vacuum. By contrast, diffusion in a Cl₂ atmosphere leads to partial transition of copper to the Cu²⁺ state and to association of Cu²⁺ with cation vacancies. The dependence of the copper impurity charge on the ambient atmosphere in annealing of AgCl crystals is explained by the effect of the atmosphere on the concentration of cation vacancies.

Keywords: impurity atoms, electron exchange, Mössbauer emission spectroscopy.

Г. А. Бордовский, А. В. Марченко, А. В. Николаева, А. Б. Жаркой

ЗАРЯДОВОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ МЕДИ В AgCl

Методами эмиссионной мессбауэровской спектроскопии ⁶⁷Cu(⁶⁷Zn) и измерения скорости радиоактивного распада ⁶⁴Cu показано, что примесные атомы меди занимают катионные узлы в решетке AgCl и находятся в состоянии Cu⁺, если кристаллы AgCl легируются медью методом диффузии в вакууме. Диффузия в атмосфере Cl₂ приводит к частичному переходу примеси меди в состояние Cu²⁺ и к образованию ассоциатов Cu²⁺ с катионными вакансиями. Зависимость зарядового состояния примеси меди от природы атмосферы отжига кристаллов AgCl объясняется влиянием атмосферы на концентрацию катионных вакансий.

Ключевые слова: примесные атомы, электронный обмен, эмиссионная мессбауэровская спектроскопия.

1. Introduction

Mössbauer spectroscopy is an effective method for investigating the state of impurity atoms in solids [2–7; 11; 12]. Because of the poor solubility of impurity atoms such investigations commonly rely upon the emission variant of Mössbauer spectroscopy (EMS) [8–10]. In EMS, a long-lived radioactive parent isotope is introduced into a sample and decays to give a Mössbauer probe (daughter isotope). In particular, this study employed ⁶⁷Cu (with a half-life of 59 h) as the parent isotope producing the ⁶⁷Zn Mössbauer probe upon β-decay (see Fig. 1).

This means that the EMS information is related to the lattice position and environment symmetry of a parent atom and to the charge state of a daughter atom. In some cases (for ⁶⁷Cu(⁶⁷Zn) impurity atoms in AgCl in the present study), analysis of experimental data allows conclusions to be reached concerning not only the positions and local symmetry of parent impurity atoms but also their charge states.