

Энтропийный анализ сложных систем как инструмент инженерной деятельности

А.В. Благин¹, Л.В. Благина², И.Г. Попова¹, Ю.В. Сахарова³

¹Донской государственной технической университет, Ростов-на-Дону

²Институт технологий ДГТУ, г. Волгодонск

³Центр дополнительного образования, г. Волгодонск

Аннотация: В работе обсуждаются модельные представления сложных систем как объектов с самоорганизованной структурой. Энтропия трактуется как мера структурного разнообразия систем. Этот подход, развитый в последние годы в информатике, используется авторами в теории неорганических систем, в частности, многокомпонентных полупроводниковых твердых растворов. Сформулированы закономерности динамического процесса самоорганизации сверхструктуры в полупроводниковой системе. Показано, что в ряде случаев исследователь может задавать физико-технологические условия согласованного поведения элементов системы, находящейся в состоянии с выбором сценария эволюции. Модель иллюстрируется результатами экспериментальных исследований кинетики кристаллизации твердых растворов с мезоструктурой.

Ключевые слова: энтропия, неэнтропия, коэнтропия, мера упорядоченности, структурное разнообразие, нормальное распределение, диссипативные системы, асимметричное строение, ортогональные распределения, инверсия зависимости.

Введение

Энтропийный подход, традиционно используемый в неравновесной термодинамике, в последние десятилетия находит все более широкое применение в таких сферах научного знания, как информатика, теория времени, экология, методология научного познания [1-5].

Трактовка энтропии как меры теплосодержания системы и беспорядка в статистической физике расширяется – эта физическая величина может также играть роль показателя структурной организации сложных систем [6]. На первый план выступает удобство использования энтропии, обусловленное ее инвариантностью по отношению к широкому классу преобразований.

Прикладной областью, на которой иллюстрируются модели энтропийного подхода, является технология сложных полупроводников.

Статистической трактовкой энтропии является формула Больцмана:

$$S = k_B \ln \Omega, \quad (1)$$

где $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{Джс}{К}$ – постоянная Больцмана; Ω – статистический вес системы (число детальных равновесных состояний, соответствующих конкретному макросостоянию с определенными значениями давления, объема и температуры).

Теория сочетаний определяет статистический вес как число способов размещения частиц N_i по m группам, состоящим из $N_1 \dots N_m$ частиц, как

$$\Omega = \frac{N!}{N_1! \dots N_m!} \approx N \ln N - \sum_{i=1}^m N_i \ln N_i, \quad (2)$$

где использовано приближение Стирлинга $N! = e^{-N} N^N$ для больших значений N). Тогда

$$S = k(N \ln N - \sum_{i=1}^m N_i \ln N_i). \quad (3)$$

Уже сам Больцман понимал, что такое определение энтропии выходит далеко за рамки термодинамики и может выступать показателем структурного разнообразия сложных систем.

«Безразличие» системы к возможным способам организации ее макросостояний можно трактовать, как беспорядок на микроуровне, что не препятствует росту числа ее возможных упорядоченных состояний. Такая неоднозначность определения энтропии в физике конденсированного состояния была установлена в [7].

Физический хаос, согласно последним исследованиям [8], вовсе не является состоянием с предельно высоким уровнем беспорядка. Напротив, это состояние со сложным, многоуровневым порядком, для которого можно находить параметры только локально [9].

Введем безразмерную энтропию

$$\zeta = \frac{S}{k} \approx N \ln N - \sum_{i=1}^m N_i \ln N_i. \quad (4)$$

Первое слагаемое справа – это максимально возможная структурная энтропия для фиксированной величины N_n . Второе слагаемое может рассматриваться в качестве меры устраненного беспорядка (в теории информации Шеннона используется термин «негэнтропия» [9]).

Удачной попыткой рассмотрения энтропии как меры разнообразия сложных систем является подход, развитый в [10]. Энтропия понимается как сумма импульсного и структурного факторов. Первый выражает разнообразие ресурсов системы, необходимых для ее эволюции и поддержания гомеостаза. Второй выступает фактором текущей организации системы. Такой подход допускает распространение понятия энтропии на все процессы, протекающие во Вселенной.

Модель структурной эволюции систем с использованием параметра плотности энтропии

Аддитивность состояний системы задана уравнениями:

$$\sum_{i=1}^m N_i = N_n,$$

где N_n – число частиц в системе с энергией $E = \sum_{i=1}^m N_i \varepsilon_i$; ε_i – энергия частицы в i -м состоянии.

В этом случае условный максимум статистической энтропии может быть записан в виде

$$S_{\max} = k(N_n \ln Z + \beta E),$$

где $Z = \sum_{i=1}^n e^{-\beta \varepsilon_i}$ – статистическая сумма по состояниям с энергией ε_i , $\beta = (kT)^{-1}$,

Аддитивность энтропии может нарушаться (например, при образовании смеси газов).

Обратимся к выражению (2). Поскольку энтропия не может принимать отрицательные значения, $\Omega_{\min}=0$, откуда $\sum_{i=1}^m N_i \ln N_i = Nn$, тогда максимум энтропии $\zeta_{\max} = N_n \ln \frac{N_n}{e}$.

По структуре это выражение соответствует гиббсовскому формализму, в котором впервые получили статистическое описание новые сложные объекты – многокомпонентные гетерогенные системы. По Гиббсу

$$S = k(N_n \ln N_n - N_n - N_n \ln \Omega - \beta E).$$

Выражения для равновесных распределений частиц в подходах Больцмана и Гиббса совпадают:

$$2k(N_n \ln Z + \beta E) = k(N_n \ln N_n - N_n) = kN_n (\ln N_n).$$

Это позволяет согласовать определения условных максимумов энтропии: $\xi_{\max} = S_{\Gamma_{\max}}$, или $2\xi_{\max} = kN_n \ln N_n = S_{\Gamma}$, откуда, в безразмерном виде:

$$\tilde{S}_{\Gamma_{\max}} = \frac{1}{2} N_n \ln N_n \approx N_n \ln \sqrt{N_n}.$$

Таким образом, структурный хаос отвечает значению максимальной упорядоченности. Условный максимум энтропии составляет 1/2 от предельно возможной; параметр $\sqrt{N_n}$, согласно базовым представлениям неравновесной термодинамики определяет среднюю флуктуацию термодинамических параметров. Категория «беспорядка» при этом сохраняет свое значение только как фиксация состояния системы на пороге бифуркации, чему соответствует точка $\frac{1}{2} N_n \ln N_n$.

Предшествующие – равновесные состояния описываются нормальным распределением Гаусса. Максимум распределения соответствует максимуму энтропии системы:

$$\xi_{\text{норм}} = kN_n \ln \sqrt{2\pi e \sigma^2}, \quad (5)$$

где σ^2 – средний квадрат отклонения параметра от среднего значения, по которому оценивается энтропия. (5) преобразуется к виду

$$\xi_{норм} \approx kN_n (\ln \sigma + \alpha),$$

где $\alpha = 1,418$ есть отношение максимальной и наиболее вероятной ошибок среднего значения указанного выше параметра.

В больцмановской формулировке $\alpha = 1,5$. Это различие связано с тем, что по Гиббсу дискретное распределение заменятся непрерывным.

Используем методику М. Планка. Рассмотрим плотности энтропии – их значения, отнесенные к отдельному числу возможных состояний ω (ω_B – энтропия, ω_K – коэнтропия):

$$h_B = \frac{\ln \omega_B}{\omega_B}, \quad h_K = \frac{\ln \omega_K}{\omega_K},$$

(число состояний есть отношение энтропии и коэнтропии к числу элементов

системы, $\frac{\ln \Omega_B}{N_n} = \ln \Omega_B^{1/N_n} = \ln \omega_B$ и $\frac{\ln \Omega_K}{N_n} = \ln \Omega_K^{1/N_n} = \ln \omega_K$).

Расчет на нормированном множестве значений фиксированного термодинамического параметра, например, давления смеси газов, дает характерные кривые, представленные на рис. 1 (пунктир – сумма плотностей).

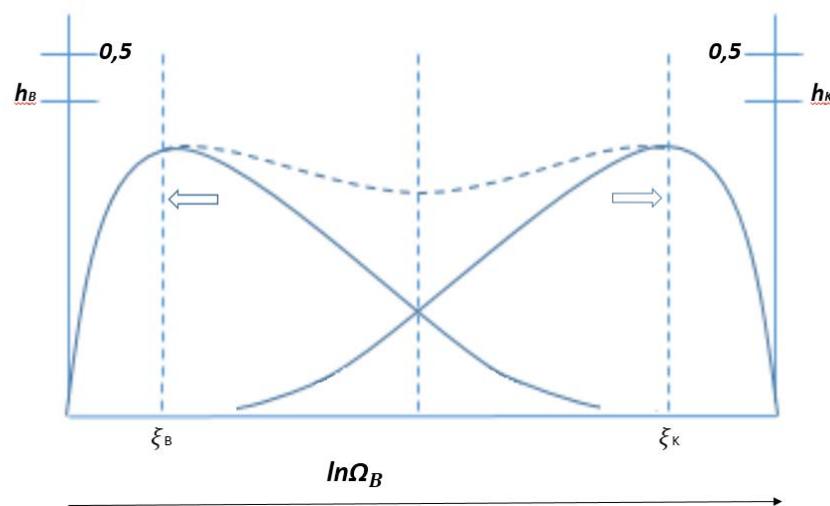


Рис. 1 – Эволюция сложной системы в терминах плотности энтропии и коэнтропии

Видно, что резкий рост плотности энтропии h_e приводит к достижению экстремального значения ($h_e \approx 0,37$). Этой точке соответствует устойчивое стационарное состояние системы.

Левее расположена зона значений параметра, отвечающих высокой упорядоченности системы (например, для газа – это жидкая фаза). Зона правее экстремума соответствует переходным хаотичным состояниям.

График симметричен по паре «энтропия-коэнтропия», таким образом, рост разупорядоченности зеркально сопровождается «устранением состояний».

Зона правее максимума коэнтропии является зоной бифуркаций (т. е., поливариантности эволюции).

Диапазон между пиками плотностей энтропии и коэнтропии соответствует распределению Пуассона; вне диапазона следует использовать формулу Пуассона для редких событий.

Область левее $\xi_B = \xi_{B \max}$ соответствует недиссипативным структурам (для них не существенны процессы переноса импульса, энергии, массы и т. д.). Структуры в этой области «замораживаются»; их эволюция замедляется.

Точка пересечения кривых $\omega_B = \omega_K = \sqrt{N_n}$ соответствует так называемой инверсии, энтропия и коэнтропия в этой точке равны; структура в этой точке может скачком переходить от исходного распределения к некому смежному. Минимум на кривой суммы плотностей энтропий (пунктир на рис. 1) соответствует структурной перестройке системы. Она разграничивает области упорядоченных (левее минимума) и неупорядоченных (правее) состояний. Стрелки указывают тенденции эволюции систем.

Таким образом, результаты расчета позволяют сделать нетривиальный вывод о равновероятных возможностях эволюции систем к беспорядку и порядку (при условии, если он достаточно сложен, и при описании систем

можно использовать приближение достаточно большого N_n – трактовки Больцмана и Гаусса совпадают в пределе $N_n \rightarrow \infty$).

Обозначим $\Delta\xi_B$ – прирост структурной энтропии; $D_i(\xi_{Bi})$ – относительная энтропия; ΔD_i – её прирост.

$$\text{Тогда } \Delta\xi_{Bi} = \xi_{B0} \left(1 - \frac{\xi_{Bi}}{\langle \xi \rangle} \right),$$

где $\langle \xi \rangle$ – среднее по состояниям ξ_{Bi} значение энтропии; $\Delta D_i = D_{i0}(1 - D_i)$.

Линейная зависимость приращения энтропии от исходных значений (ΔD_i от ΔD_{i0} и $\Delta\xi_{Bi}$ от ξ_{B0} соответственно) отражает дихотомический характер перестройки системы, обусловленный конкурентным механизмом тенденций сложной системы к порядку и беспорядку.

$$\xi_{B0} \text{ – «накопленная энтропия», } \left(1 - \frac{\xi_{Bi}}{\langle \xi \rangle} \right) \text{ – не задействованная,}$$

«потенциальная» энтропия системы в её дальнейшей эволюции.

Следуя [11] проанализируем выражение (6) по методике Лео П. Каданова на наличие точек бифуркации, введя параметр бифуркации $\lambda = \frac{D_{i+1}}{\Delta D_i}$.

Значению срединной точки $D = 0,5$ соответствует пороговая точка, соответствующая $\lambda = 3$. Одновременно это и точка инверсии, в которой накопленная энтропия D_i равна её нереализованному потенциалу $(1 - D_i)$.

Одним из наглядных примеров инверсии неограниченной системы является процесс взаимодействия паровой и жидкой фазы в режиме барботирования, что представлено на рис. 2, где А – барботажный режим; В – инверсный режим; С – эмульсионный (капельный режим).

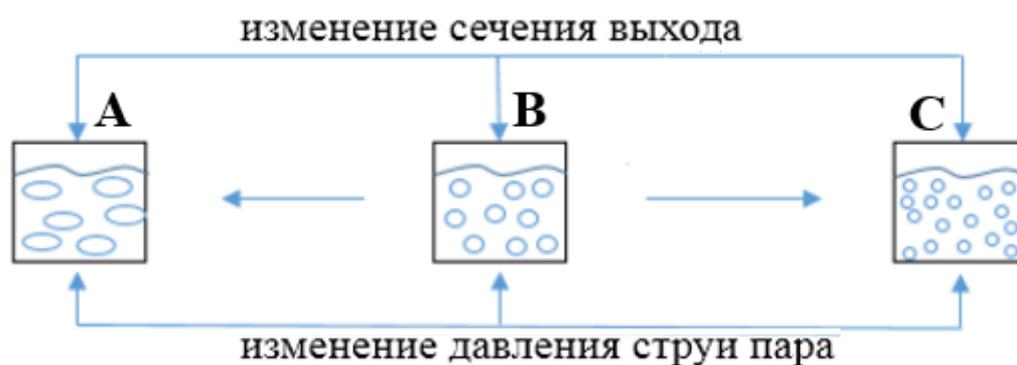


Рис. 2. – Процесс взаимодействия паровой и жидкой фазы в режиме барботирования

Система «жидкость-струя пара» (B) может эволюционировать как к барботажу (A), так и к дисперсионной эмульсии (C) (рис. 2).

Ещё один механизм инверсии, зафиксированный авторами, заложен в термодинамически нестабильной двухфазной системе (бинарная подложка-многокомпонентный расплав), эволюция которой представлена на рис. 3 (A – эпитаксиальный монокристаллический слой; B – двухфазная система кристалл+расплав; C – система с мезоструктурой).

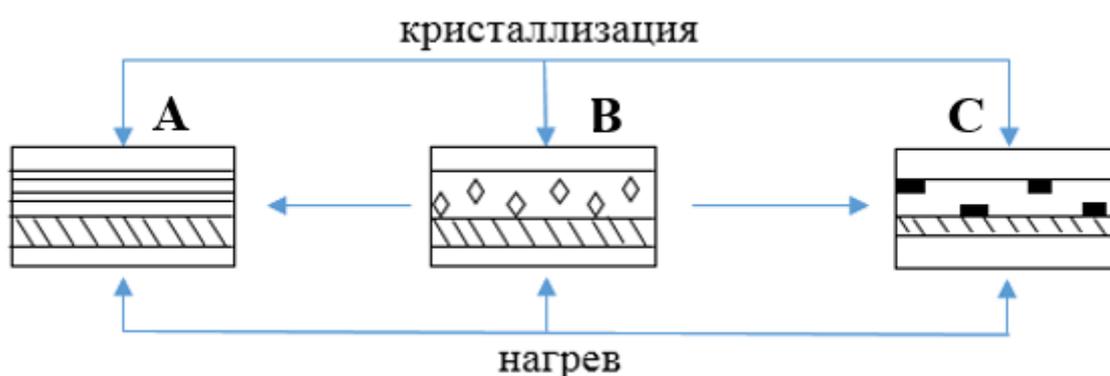


Рис.3 – Эволюция двухфазной многокомпонентной полупроводниковой системы

Физические свойства системы с мезоструктурой описаны в [12].

Специфика градиентной эпитаксии пленок твердых растворов в условиях возвратного движения расплава изложена в [13].

Качественное описание возможного механизма скоррелированного поведения двухфазной многокомпонентных системы

Процессы самоорганизации [14], понимаемые как следствие нелокальных корреляций по макроскопическому объему системы, могут развиваться в открытых средах, далеких от равновесия, если через них упорядоченно перемещается вещество и/или теплота. При этом в системе должна поддерживаться положительная обратная связь.

В условиях направленной кристаллизации это означает влияние структуры, формирующейся в конце перемещения расплава в направлении, перпендикулярном плоскости кристаллической матрицы, на старт жидких зон следующего цикла. Схематически эволюцию системы можно представить, как «дерево сценариев» (рис. 4), где А – зона линейной зависимости Φ ($\nabla\phi$); В – переход к нелинейной эволюции системы; С – область бифуркаций; D – область поливариантности системы (участки с наименьшими значениями Φ соответствуют росту монокристаллических пленок, далее, с ростом Φ – переход к мезоструктурам; поликристаллам; полупроводниковым стеклам).

Движущую силу процесса (градиент некоторой функции координат, в случае термомиграции – градиент температуры, обозначим $\nabla\phi$).

Обобщенный поток – Φ (в случае градиентной эпитаксии Φ играет роль твердой фазы).

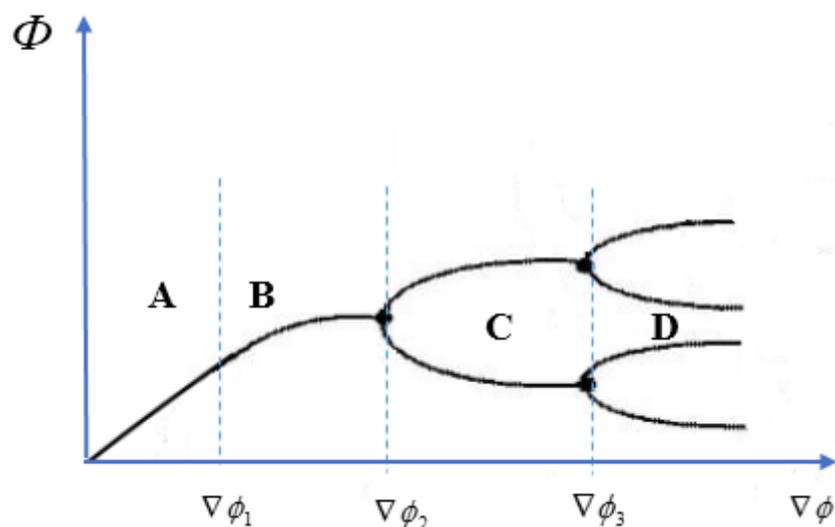


Рис. 4 – Самоорганизация: зависимость обобщенного потока Φ от величины движущей силы $\nabla\phi$

В растворе-расплаве в качестве движущей силы может выступать избыточная энергия Гиббса [15]:

$$\Delta F = -RT \ln \frac{A}{A_0},$$

где A_0 – активность растворенного вещества в насыщенном; A – в пересыщенном растворах. Равновесное состояние имеет место при $\nabla\phi = 0$.

В случае малых отклонений от равновесия (область А) зависимость $\Phi(\nabla\phi)$ имеет линейный характер; поведение системы детерминировано. С ростом $\nabla\phi$ возникает отклонение от нелинейности (область В). На графике с областью С система оказывается в области бифуркаций. Очевидно, пороговое значение $\nabla\phi$ соответствует точке инверсии – равенства энтропии и коэнтропии (рис. 1).

Возникает несколько сценариев, которые можно считать равновероятными. Сценариям с меньшими значениями $\Phi(\nabla\phi)$ соответствует формирование упорядоченных фаз. При реализации больших значений потока возможно формирование аморфной фазы.

Процессы самоорганизации «запускаются» в точке бифуркации при соблюдении следующих физико-технологических условий:

1) достаточно большое значение движущей силы. В наших экспериментах необходимо достижение порогового значения градиента температуры 70 К/см [17];

2) чтобы система вышла в режим инверсии, необходимо обеспечить некоторое минимальное количество незатухающих флуктуаций (условие 2);

3) размер гетерокомпозиции «подложка-расплав» в направлении роста должен быть сопоставим с масштабом возмущений поверхности раздела (порядка 50 мкм), что достигается в технологии градиентной жидкофазной эпитаксии (ГЖЭ) с использованием точек расплава диаметром 30 мм.

Положительная обратная связь (условие 3) обеспечивается в случае, если зависимость Φ ($\nabla\phi$) нелинейна, при этом производная $d\Phi/d(\nabla\phi)$ должна быть положительна; (условие 4). В условиях ГЖЭ это выполняется, если величина концентрационного избытка возрастает при увеличении градиента температуры. Это требование представляется соблюденным *a priori*, однако перемещение может замедляться летучестью компонентов. Этот фактор устраняется повышением давления среды (H_2) от 1,5 до 1,7 атмосфер. Т.е., технолог управляет созданием условий для коррелированного поведения ростовой системы.

Дальнейший анализ может быть проведен в рамках теории хаотической динамики роста кристаллов и аморфных структур [16] с использованием критериев устойчивости по Ляпунову.

Заключение

В работе предпринята попытка описания процессов в неорганических системах, связанных с взаимодействием фаз, в терминах энтропийного подхода, основанного на фундаментальных работах Больцмана и Гиббса.

Существенно новым аспектом является расширение физического содержания понятия энтропии, как это ранее было сделано в теории информации.

Такая интерпретация результатов экспериментальных исследований, изложенных в предыдущих работах авторов, приводит к новым модельным представлениям об энтропии как о мере структурного разнообразия систем, применимым как к беспорядку, так и к сложному порядку.

Литература

1. Арманд А.Д. Иерархия информационных структур мира // Вестник РАН, 2001. Т.71. № 9. С.797-806.
2. Пригожин И.Р. От существующего к возникающему: время и сложность в физических науках. М.: КомКнига, 2006. 312 с.
3. Kauffman S. At Home in the Universe. The Search for Laws of Self-Organization and Complexity. London: Viking, 1995. P.29.
4. Bimberg D., Richter U., Heudenreich J., Ustinov V.M., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I. Self-Organization processes in MBE-grown quantum dot structures // Thin Solid Films. 1995. Vol. 267. pp. 32-36.
5. Сахаров В.В., Лукичев П.Н. Структура научного знания: концепция разнообразия / ЮРГТУ, ВРО РФО Волгодонск. Изд-во ВРО РФО, 2005. 96 с.
6. Сахарова Ю.В., Сахаров В.В. Очерки структурной организации сложных систем: приложение к журналу "Интегралы культуры" / Научн. издание. М.: Спутник+, 2008. 163 с.
7. Стишов С.М. Энтропия, беспорядок, плавление//Успехи физических наук. РАН, 1988. Т.154. С.119.
8. Денбиг К. К вопросу об энтропии, беспорядке и дезорганизации // Знание – сила, 1995. № 9. С. 44-51.

9. Хакен Г. Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным явлениям. М.: Мир, 1991. 240 с.
 10. Панченков А.Н. Энтропия. Н. Новгород. Изд-во «Интелсервис», 1999. 168 с.
 11. Leo P. Kadanoff. Roads to Chaos. – Physics Today. – Dec.q1983. – pp. 46-53.
 12. А.В. Благин, Л.В. Благина, В.В. Кодин, Н.А. Нефедова, И.Г. Попова / Физические свойства многокомпонентных узкозонных твердых растворов с мезоструктурой. Инженерный вестник Дона, 2018. №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4830.
 13. А.В. Благин, Л.В. Благина, В.В. Кодин, Н.А. Нефедова, И.Г. Попова Структура эпитаксиальных слоев узкозонных твердых растворов и компенсация дефектов // Инженерный вестник Дона, 2018. №2 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4820.
 14. Третьяков Ю.В., Олейников Н.Н., Гудилин Е.А. Самоорганизация в физико-химических системах на пути создания новых материалов // Изв. РАН. Неорганические материалы, 1994. Т. 30. №3. С. 291-305.
 15. Лозовский В.Н., Лунин Л.С., Благин А.В. Градиентная жидкофазная кристаллизация многокомпонентных полупроводниковых материалов. Ростов-на-Дону. Изд. СКНЦ ВШ, 2003. 376 с.
 16. Вихров С.П., Бодягин Н.В., Ларина Т.Г., Мурсалов С.М. Процессы роста неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации // Физика и техника полупроводников, 2005. Т. 39. Вып. 8. С. 953-959.
 17. Благин А.В., Благина Л.В., Баранник А.А., Лунин Л.С., Сысоев И.А. Кинетика роста пленок и макродефекты гетероструктуры GaInAs<Bi>/AsIn в поле температурного градиента // Неорганические материалы, 2009. Т. 45. №8. С. 908-912.
-

References

1. Armand A.D. Vestnik RAN, 2001. V.71. № 9. pp. 797-806.
2. Prigozhin I.R. Ot sushchestvuyushchego k voznikayushchemu: vremya i slozhnost' v fizicheskikh naukakh [From existing to emerging: time and complexity in the physical Sciences]. M.: KomKniga, 2006. 312 p.
3. Kauffman S. London: Viking, 1995. pp. .29.
4. Bimberg D., Richter U., Heudenreich J., Ustinov V.M., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I. Thin Solid Films. 1995. Vol. 267. pp. 32-36.
5. Sakharov V.V., Lukichev P.N. Struktura nauchnogo znaniya: koncepciya raznoobraziya [Structure of scientific knowledge: the concept of diversity]. YURGTU, VRO RFO Volgodonsk. Izd-vo VRO RFO, 2005. 96 p.
6. Sakharova YU.V., Sakharov V.V. Ocherki strukturnoj organizacii slozhnykh sistem: pril. k zhurn. "Integraly kul'tury" [Essays on the structural organization of complex systems: application to the journal "Integrals of culture"]. Nauchn. izdanie. M.: Sputnik+, 2008. 163 p.
7. Stishov S.M. RAN, 1988. V.154. pp.119.
8. Denbig K. Znanie – sila, 1995. № 9. pp. 44-51.
9. K. Haken G. Informaciya i samoorganizaciya. Makroskopicheskiy podkhod k slozhnym yavleniyam [Information and self-organization. Macroscopic approach to complex phenomena]. M.: Mir, 1991. 240 p.
10. Panchenkov A.N. Entropiya. N. Novgorod. Izd-vo «Intelservis», 1999. 168 p.
11. Leo P. Kadanoff. Roads to Chaos. Physics Today. Dec.q1983. pp. 46-53.
12. A.V. Blagin, L.V. Blagina, V.V. Kodin, N.A. Nefedova, I.G. Popova. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2018. №2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4830.



13. A.V. Blagin, L.V. Blagina, V.V. Kodin, N.A. Nefedova, I.G. Popova. Inzhenernyj vestnik Dona (Rus), 2018. №2 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/N2y2018/4820.

14. Tret'yakov YU.V., Olejnikov N.N., Gudilin E.A. Izv. RAN. Neorganicheskie materialy, 1994. V. 30. №3. pp. 291-305.

15. Lozovskiy V.N., Lunin L. S., Blagin A.V. Gradientnaya zhidkofaznaya kristallizatsiya mnogokomponentnykh poluprovodnikovyykh materialov [Gradient liquid-phase crystallization of multicomponent semiconductor materials]. Rostov-na-Donu. SKNTs VSh, 2003. 376 p.

16. Vikhrov S.P., Bodyagin N.V., Larina T.G., Mursalov S.M. Fizika i tekhnika poluprovodnikov, 2005. V. 39. Vyp. 8. pp. 953-959.

17. Blagin A.V., Blagina L.V., Barannik A.A., Lunin L.S., Sysoev I.A. Neorganicheskie materialy, 2009. V. 45. №8. pp. 908-912.