



Краткие сообщения

Краткое сообщение

УДК 538.975

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/12071>

$1/f^2$ шум как предвестник структурных перестроек вблизи точки плавления кристаллических веществ с различным типом химической связи

Е. С. Машкина[✉]

Воронежский государственный университет,
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация

Аннотация

Переходные явления в окрестности точки плавления (эффект предплавления) являются фундаментальным процессом и возникают в материалах с различным типом химической связи. При $T \geq 0.8T_m$ наблюдается флуктуационное выделение тепла. Анализ флуктуационных процессов дает информацию о проходящих в системе динамических перестройках и взаимосвязях различных подсистем. Цель данной работы – исследование спектральных характеристик тепловых флуктуаций в стационарных режимах предплавления веществ с ионным, ковалентным и металлическим типом химической связи (KCl, Ge, Cu, Sb) и определение типа данного флуктуационного процесса с помощью показателя Херста.

Спектральные характеристики тепловых флуктуаций в стационарных режимах предплавления KCl, Ge, Cu, Sb при $T \sim 0.9T_m$ определялись методом вейвлет-анализа. Данный метод позволяет анализировать поведение сложных систем в критических точках с целью выявления в них определенных корреляций и тенденций развития.

Исследования показали, что в области предплавления частотный спектр тепловых флуктуаций представляет собой шум $1/f^2$ или нелинейный броуновский шум, который является предвестником структурных перестроек при фазовых переходах. Тип флуктуационных процессов в области предплавления KCl, Ge, Cu, Sb определен на основе показателя Херста (H). Показано, что в стационарных режимах предплавления $H > 0.5$. Следовательно, динамика процесса в прошлом, имеющая определенную тенденцию, с большой долей вероятности продолжится в том же направлении. Однако с уменьшением энергии химической связи $H \rightarrow 0.5$, что свидетельствует о снижении устойчивости системы и вероятной смене тенденции развития структурных перестроек в переходной области предплавления.

Таким образом, вблизи точки плавления возникают неустойчивые динамические состояния, являющиеся прекурсором структурных изменений в системе, которые имеют определенные тенденции развития. Это должно учитываться при расчете устойчивости и надежности материалов и систем.

Ключевые слова: предплавление, флуктуации, вейвлет-анализ, $1/f^2$ шум, показатель Херста, структурные перестройки

Для цитирования: Машкина Е. С. $1/f^2$ шум как предвестник структурных перестроек вблизи точки плавления кристаллических веществ с различным типом химической связи. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2024;26(2): 362–366. <https://doi.org/> <https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/12071>

For citation: Mashkina E. S. $1/f^2$ noise as a precursor of structural reconstructions near the melting point of crystalline materials with different types of chemical bonds. *Condensed Matter and Interphases*. 2024;26(2): 362–366. <https://doi.org/> <https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/12071>

✉ Машкина Екатерина Сергеевна, e-mail: me22-1@phys.vsu.ru

© Машкина Е. С., 2024



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

1. Введение

Существует большое количество данных по наблюдению 1/f^β-шума в различных сложных системах [1–3]. Возникновение флуктуаций в переходной области при фазовых переходах I рода представляют в этом отношении особенный интерес, поскольку такой шум, в отличие от равномерного распределения, предопределяет возникновение определенных корреляций, связанных с возникновением пространственного или временного упорядочения, аналогичного фазовому переходу. Флуктуационные прекурсоры проявляются в виде аномального поведения различных макроскопических параметров: физических, электрофизических, структурных [4, 5]. Это указывают на то, что в определенных критических точках (точках бифуркации) происходит потеря устойчивости предыдущего состояния и возникновение динамических диссипативных структур. При этом система становится чувствительной к малым изменениям начальных условий, а флуктуации начинают играть важную роль. Это явление известно как «упорядочение через флуктуации» [6]. Таким образом, флуктуационные предвестники при фазовых переходах требуют детализации степени пространственно-временных локализаций в системе и выявления новой информации о поведении системы в данных неравновесных условиях.

Целью настоящей работы является изучение спектральных характеристик тепловых флуктуаций в стационарных режимах предплавления веществ с различным типом химической связи и определение типа данного флуктуационного процесса с помощью показателя Херста.

2. Экспериментальная часть

Как было показано нами ранее при исследовании плавления материалов с ионным, ковалентным и металлическим типом химической связи методом ДТА при $T \geq 0.8T_m$ выявлены температурно-временные области существования флуктуационных фаз предплавления [7].

Эксперименты проводились на веществах с различным типом химической связи, не имеющих фазовых превращений до и после точки плавления - KCl, Ge, Cu, Sb. Изотермические выдержки (стационарный режим) осуществлялись при температурах $T^* \sim 0.9T_m$. Время изотермической выдержки составило 35 минут. При этом флуктуационное состояние сохраняется продолжительное время с медленной релаксацией к равновесию, что характерно для диссипативных процессов.

Для спектрального анализа флуктуационных процессов и параметризации фаз предплавления веществ с различным типом химической связи в стационарных режимах использовался метод непрерывного вейвлет-преобразования [8]. Спектральный анализ флуктуационных сигналов проводился в программной среде MatLab с базисной функцией Symlet8.

3. Результаты и обсуждение

Рассмотрим влияние химической связи на спектральные характеристики тепловых флуктуаций в области предплавления KCl, Ge, Cu и Sb. Для получения информации о закономерностях эволюции динамических переходных состояний при плавлении наибольший интерес представляют тепловые флуктуации в стационарных режимах, поскольку в данных режимах предплавления проявляется долговременная последовательность коррелированных флуктуационных всплесков, продуцирующих нелинейный броуновский шум. При этом такие спектральные параметры как коэффициент самоподобия (β) и интенсивность тепловых флуктуаций несут информацию о динамике образования переходных фаз.

В качестве примера рассмотрим картину вейвлет-коэффициентов $W(a,b)$ эффекта предплавления Cu в стационарном режиме при $T^* = 1221.8$ К (рис. 1). На данной картине на разных масштабах проявляется иерархическая самоподобная структура локальных экстремумов. Ветвления на картине локальных экстремумов отвечают перемасштабированию флуктуаций и переходу на другой уровень процесса. В целом такая картина вейвлет-преобразования тепловых флуктуаций в KCl, Ge и Sb, также как и для Cu, характерна для сигналов нелинейного броуновского шума или шума типа 1/f^β, что свидетельствует о наличии корреляций в переходных областях предплавления [9]. Это также подтверждается статистическим, корреляционным и Фурье-анализом, проведенным в работе [10], показывающими, что флуктуационные процессы в области предплавления являются случайными процессами с нормально распределенными коррелированными приращениями.

Значения показателя спектра β тепловых флуктуаций переходных процессов при плавлении KCl, Ge, Cu и Sb при изотермической выдержке приведены в табл. 1. Коэффициент самоподобия $\beta \sim 2$ свидетельствует о единой физической природе диссипативных процессов в переходной области при плавлении и указывает

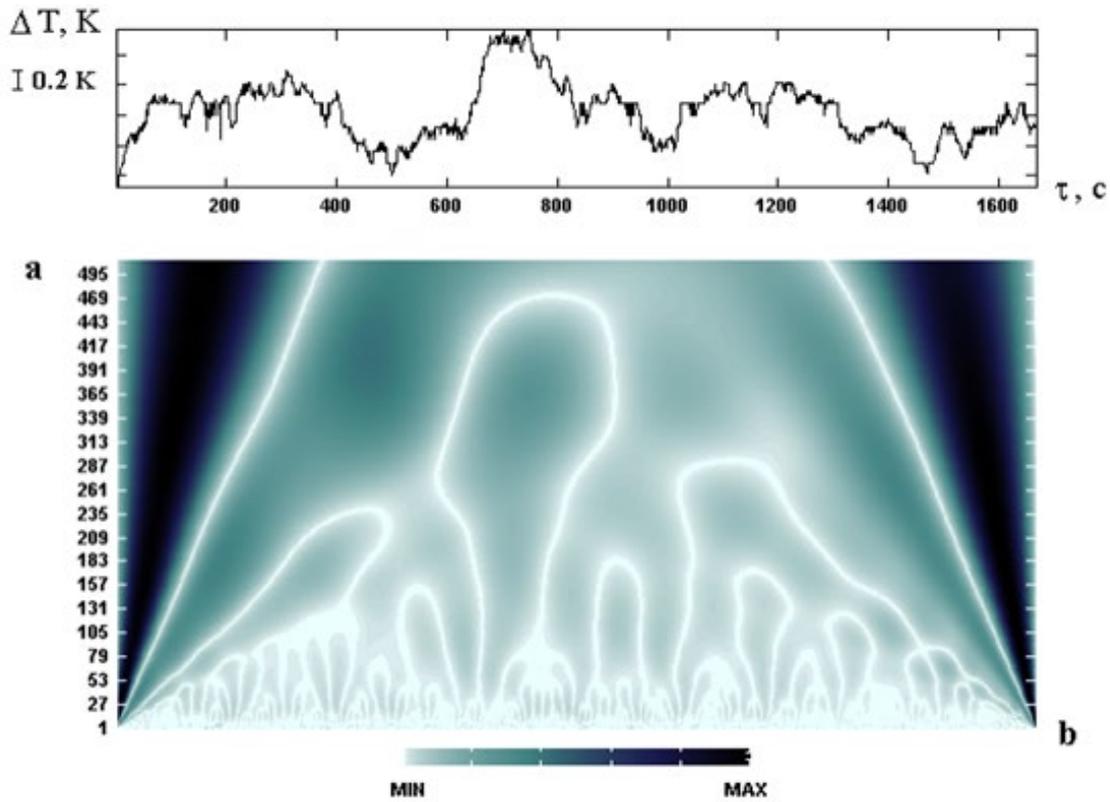


Рис. 1. Кривая ДТА и вейвлет-преобразование флуктуационного процесса предплавления Cu ($T^* = 1221.8$ K)

Таблица 1. Параметры переходных процессов предплавления KCl, Ge, Cu, Sb в стационарном режиме и энергия химической связи

| | T^* , K | β | H | ΔE , кДж/моль |
|-----|-----------|---------|------|-----------------------|
| KCl | 940 | 2.1 | 0.58 | 423.2 |
| Ge | 1180 | 2.2 | 0.56 | 327.6 |
| Cu | 1220 | 2 | 0.55 | 306.7 |
| Sb | 814 | 2.1 | 0.52 | 165.8 |

на универсальность флуктуационного характера переходных процессов предплавления кристаллических веществ с различным типом химической связи. Это косвенно отражает возникновение структурных перестроек в веществе, находящимся в фазе предплавления.

Энергетический спектр $E_w(a)$ тепловых флуктуаций переходных процессов предплавления KCl, Ge, Cu и Sb в стационарных режимах представлен на рис. 2. Анализ энергетического спектра показал, что с уменьшением энергии химической связи от KCl к Sb происходит понижение интенсивности флуктуационного процесса в предпереходной области. Изменение интенсивности тепловых флуктуаций отражает раз-

личную степень коррелированности в системе. Так, низкое значение энергии химической связи (ΔE) Sb приводит, по всей видимости, к возникновению длинновременных корреляционных связей в динамической системе. В то время как для KCl, имеющего наибольшую из рассмотренной группы веществ энергию химической связи, характерно возникновение короткоживущих корреляционных состояний.

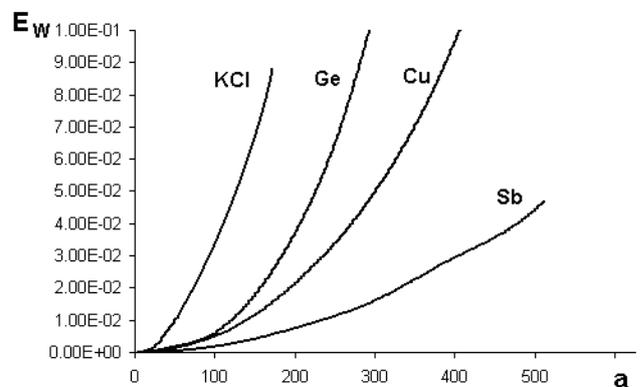


Рис. 2. Энергетические спектры тепловых флуктуаций в фазе предплавления KCl, Ge, Cu, Sb в стационарном режиме

Оценка показателя Херста позволила выявить во флуктуационном процессе в области предплавления определенные скрытые закономерности или так называемые тренды. При значении $H > 0.5$ с большой долей вероятности можно сказать, что определенное направление тенденции преобразования системы в прошлом продолжится в том же направлении. Если $H < 0.5$, то тенденция направленности процесса изменится, а при $H = 0.5$ сложно определить направление тренда [11, 12]. Вычисление показателя Херста производилось на основе RS-анализа.

Для всех типов изучаемых веществ параметр Херста $H > 0.5$ (табл. 1). В нашем случае значение $H > 0.5$ указывает на возникновение корреляций в системе по типу персистентности, когда тенденция изменения характера процесса сохраняется. Однако уменьшение энергии химической связи приводит к уменьшению устойчивости системы и приближению к неопределенности. Это коррелирует с изменением интенсивности флуктуационного процесса в области предплавления в ряду KCl, Ge, Cu, Sb.

4. Заключение

Не зависимо от типа и энергии химической связи картина вейвлет-преобразования тепловых флуктуаций предплавления Ge, Sb и Cu в стационарном режиме для сигналов шума типа 1/f² (нелинейный броуновский шум). Таким образом, можно констатировать идентичность энергетической картины процессов, происходящих при неравновесных фазовых переходах в веществах с ионным, ковалентным и металлическим типом химической связи.

При уменьшении энергии химической связи в ряду от KCl к Sb интенсивность флуктуационного процесса в фазе предплавления снижается, что свидетельствует об определяющем влиянии энергии химической связи на характер образования и флуктуационные параметры переходных процессов предплавления различных кристаллических веществ.

Оценка степени хаотичности флуктуационных процессов с помощью стохастического параметра – показателя Херста (H) показала, что определенный тренд структурных перестроек в прошлом, по всей вероятности, не изменится. Следовательно, анализ спектральных характеристик флуктуационных процессов вблизи точки плавления может дать информацию не только о состоянии системы, но и быть основой методик прогноза ее эволюции.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Жигальский Г. П. *Флуктуации и шумы в электронных твердотельных приборах*. М.: Физматлит; 2012. 512 с.
2. Геращенко О. В., Матвеев В. А., Плешанов Н. К., Байрамуков В. Ю. Электрическое сопротивление и 1/f-флуктуации в тонких пленках титана. *Физика твердого тела*. 2014;56(7): 1386–1390. Режим доступа: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/26940>
3. Павлов А. Н., Павлова О. Н., Короновский А. А. (мл.) Модифицированный метод флуктуационного анализа нестационарных процессов. *Письма в ЖТФ*. 2020;46(6): 47–50. Режим доступа: <https://doi.org/10.21883/PJTF.2020.06.49166.18136>
4. Шибков А. А., Гасанов М. Ф., Золотов А. Е., ... Кочегаров С. С. Электрохимическая эмиссия при деформировании и разрушении алюминий-магниевого сплава в водной среде. *ЖТФ*. 2020;90(1): 85–93. <https://doi.org/10.21883/JTF.2020.01.48666.151-19>
5. Копосов Г. Д., Бардюг Д. Ю. Анализ предплавления льда во влагосодержащих дисперсных средах. *Письма ЖТФ*. 2007;33(14): 80–86. Режим доступа: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/13605>
6. Малинецкий Г. Г., Потапов А. Б. *Нелинейная динамика и хаос: Основные понятия*. М.: УРСС; 2018. 240 с.
7. Bityutskaya L. A., Mashkina E. S. System of thermodynamic parameters of the transient processes under melting of crystalline substances. *Phase Transition*. 2000;71: 317–330. <https://doi.org/10.1080/01411590008209312>
8. Смоленцев Н. К. *Основы теории вейвлетов. Вейвлеты в MATLAB*. М.: ДМК Пресс; 2014. 628 с.
9. Машкина Е. С. Спектральный анализ тепловых флуктуаций в переходных областях предплавления KI. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2020;22(2): 238–244. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2020.22/2837>
10. Битюцкая Л. А., Селезнев Г. Д. Тепловой фликкер-шум в диссипативных процессах предплавления. *Физика твердого тела*. 1999;41(9): 1679–1682. Режим доступа: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/35546>
11. Алфёрова Е. А., Лычагин Д. В. Связь показателя Хёрста и эффективности самоорганизации деформируемой системы. *Журнал технической*

физики. 2018;88(4): 555–560. <https://doi.org/10.21883/JTF.2018.04.45723.2416>

12. Чен Б. Б., Имашев С. А. Оценка параметра Херста по наклону энергетического спектра на основе вейвлет-преобразования. *Вестник КРСУ*. 2007;7(8): 65–75. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=13519890>

Информация об авторе

Машкина Екатерина Сергеевна – к. ф.-м. н., доцент кафедры физики полупроводников и микроэлектроники, Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-9911-5208>
me22-1@phys.vsu.ru

Поступила в редакцию 26.03.2024; одобрена после рецензирования 18.04.2024; принята к публикации 15.05.2024; опубликована онлайн 25.06.2024.