

АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ И АДАПТИВНОСТИ СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПЕРЕХОДНЫХ ФАЗ ПРИ ПЛАВЛЕНИИ ГЕРМАНИЯ

© 2013 Е. С. Машкина, М. В. Гречкина

Воронежский государственный университет, Университетская пл. 1, 394006 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 22.10.2012 г.

Аннотация. Изучена эволюция частотного спектра флуктуаций теплоты диссипации предплавления как индикатора структурирования фаз предплавления Ge. Методом вейвлет-анализа проведена параметризация процессов формирования переходных фаз предплавления Ge в различных кинетических режимах. На основе экспериментальных данных, полученных при изучении переходных процессов при плавлении Ge, проведены расчеты радиусов кластеров, формирующихся в предплавлении. Проанализированы зависимости меры устойчивости кластерных структур переходных фаз при плавлении. Показано, что ослабление корреляций в системе за счет уменьшения скорости нагревания приводит к уменьшению размеров кластеров и снижению их устойчивости.

Ключевые слова: германий, предплавление, тепловые флуктуации, вейвлет-анализ, кластер, корреляции, устойчивость, адаптивность.

ВВЕДЕНИЕ

В классических работах А. Р. Регеля и В. М. Глазова [1, 2] было показано, что элементарные полупроводники (кремний, германий), соединения $A^{III}B^V$ плавятся по типу полупроводник-металл. При исследовании температурных зависимостей плотности, вязкости, теплофизических и электрофизических свойств обнаружено, что расплавы полупроводников вблизи точки плавления микро неоднородны [3, 4]. Утверждается, что структурные изменения при переходе твердое — жидкое тело распространяются на некоторый температурный интервал при нагреве выше T_m , что свидетельствует о наличии эффекта постплавления.

С помощью проведенных нами исследований выявлено, что при плавлении кристаллических веществ в динамических и квазистатических режимах вблизи точки плавления возникают особые диссипативные состояния [5—7]. Особенности этих состояний следующие: система становится чувствительной к внешним воздействиям по мере приближения к точке фазового перехода (T_m); при достижении критической точки — температуре начала эффекта предплавления (T'_{pre-m}) происходит скачкообразное флуктуационное выделение тепла, которое связано с изменением структуры вещества — возникновением кластеризованных фаз

предплавления. Таким образом, переход системы в диссипативное состояние связан с нарушением устойчивости системы.

Целью настоящей работы является анализ устойчивости кластеризованных фаз предплавления германия к структурным перестройкам на основе универсального алгоритма самоорганизации структур в системах с управляемой обратной связью.

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ. МЕТОДИКА ОБРАБОТКИ

Для исследования переходных процессов при плавлении германия была использована цифровая методика регистрации и обработки сигналов ДТА [6], имеющая чувствительность по каналу «температура» 0.1 К и по каналу «разность температур» 0.01 К. Постоянная времени регистрации ограничивалась инерционностью термопар и составляла 0.1—1 с, что позволяет фиксировать низкочастотные колебания (0.01—10 Гц). Исследования проводились как в динамическом ($v = 5, 10$ К/мин), так и в квазистатическом ($v = 1$ К/мин) режимах.

Для спектрального анализа флуктуаций теплоты диссипации и параметризации фаз предплавления Ge использовалась база данных — записи показаний дифференциальной термопары с по-

стоянным шагом записи 1 с. Длина записи в файлах определялась характером эксперимента и составляла от 200 до 500 отсчетов.

Временные ряды тепловых флуктуаций теплоты пред- и постплавления Ge исследовались методом вейвлет-анализа. В качестве базисной функции был выбран вейвлет Symlet8. Вейвлет-анализ дает нам возможность анализировать флуктуации теплоты диссипации переходных процессов при плавлении одновременно в физическом (время) и частотном пространствах [8]. Выявляя локальные особенности сигнала на разных масштабах, можно изучать локальные свойства процесса, выделяя характеристические частоты флуктуационного процесса.

Типичная вейвлет-диаграмма предплавления Ge в динамическом режиме при скорости нагрева 5 К/мин представлена на рис. 1. По оси абсцисс отложено время τ (или параметр сдвига b), по оси ординат — временной масштаб вейвлета a . На приведенной вейвлет-диаграмме видна воспроизводимая на разных масштабах иерархическая самоподобная структура локальных экстремумов вейвлет-коэффициентов $W(a, b)$ — ветвящихся «арок», что демонстрирует масштабное самоподобие флуктуаций теплоты диссипации германия в неравновесном состоянии предплавления. Такой тип ветвления и масштабного самоподобия характерен для случайных процессов типа броуновского шума [9].

С помощью спектра энергии коэффициентов вейвлет-преобразования $E_W(a, b) = W^2(a, b)$ — скейлограммы определяется коэффициент самоподобия β . Скейлограмма соответствует сглаженному спектру мощности Фурье-преобразования. Коэффициент самоподобия указывает на степень коррелированности разных частотных компонент.

Значения коэффициентов самоподобия β и частотных интервалов тепловых флуктуаций теплоты переходных процессов при плавлении Ge приведены в табл. 1.

Анализ спектральных данных показал, что в случае предплавления Ge коэффициент самоподобия флуктуаций теплоты диссипации β при переходе от квазистатического режима к динамическому уменьшается.

Таблица 1. Спектральные параметры флуктуаций теплоты диссипации переходных процессов при плавлении Ge

ν , К/мин	b	$\Delta f_{\text{pre-m}}$, Гц
1	2.1	0.002—0.01
5	1.9	0.01—0.11
10	1.7	0.02—0.14

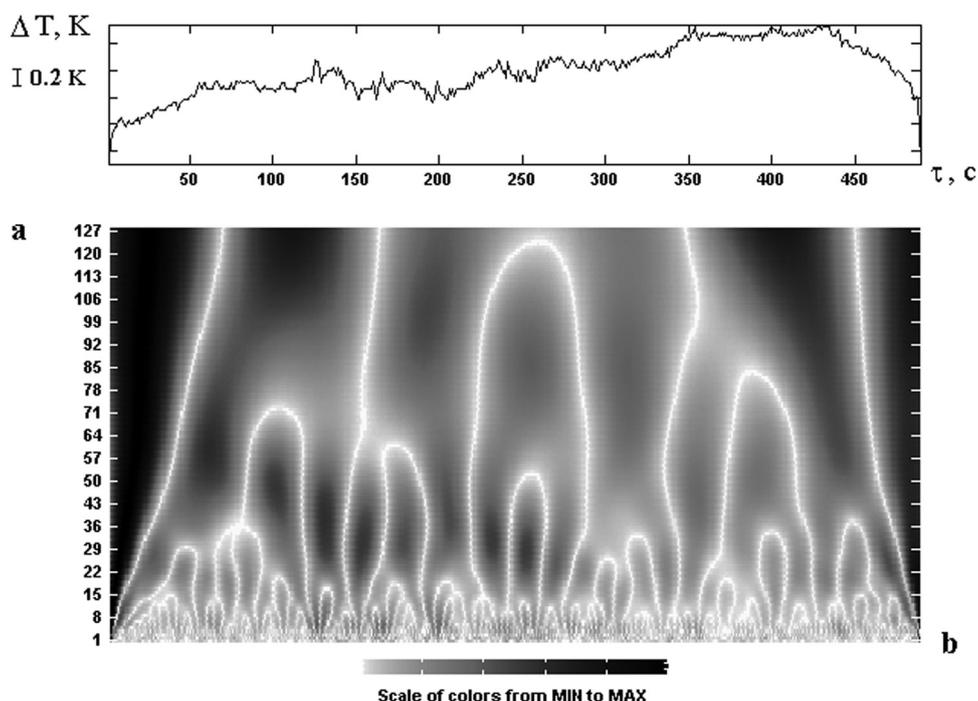


Рис. 1. Кривая ДТА флуктуаций теплоты диссипации и вейвлет-диаграмма эффекта предплавления Ge (динамический режим, $\nu = 5$ К/мин)

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ вейвлет-диаграмм позволил выявить характерные частоты флуктуаций теплоты диссипации переходных процессов при плавлении Ge как индикаторы самоорганизованного динамического структурирования. При неравновесных фазовых пререходах частота флуктуаций теплоты диссипации в конденсированных средах связана с характеристической длиной корреляции A_i , определяющей размеры кластеров переходных фаз при плавлении [10]:

$$f = \Delta t_{01}^{-1} \exp \left[-\frac{3A_i^3 z(T) \left(\frac{\delta T_{pre-m}}{T} \right)^2}{2} \right], \quad (1)$$

$$\Delta t_{01} \approx \frac{A_i^2 a}{c_0},$$

где t_{01} — время жизни тепловой флуктуации, A_i , a — межатомное расстояние, $z(T)$ — теплоемкость на одну степень свободы, δT_{pre-m} — температурный интервал предплавления.

Через характеристическую длину корреляции A_i оценивался средний радиус кластеров r , формирующихся на этапе предплавления [7]:

$$A_i = \sqrt[3]{\frac{(T'_{pre-m})^2}{\delta T_{pre-m}^2 z(T'_{pre-m})}}, \quad r = A_i \cdot a. \quad (2)$$

где T'_{pre-m} — температура начала эффекта предплавления.

В табл. 2 приведены данные расчетов частотного интервала флуктуаций теплоты диссипации, корреляционных длин и радиусов кластеров переходных процессов при плавлении германия.

Для количественного описания устойчивости кластеризованных фаз предплавления германия к структурным перестройкам нами использован универсальный алгоритм самоорганизации структур в системах с управляемой обратной связью, примененный Ивановой В.С. для конденсированных сред [11]. Согласно [11] устойчивость системы контролируют критические значения управляющих

параметров. Динамика развития диссипативной системы описывается следующим образом. Исходная устойчивая структура в процессе эволюции достигает критического состояния, отвечающего порогу устойчивости структуры, начинает осциллировать, а возникающие флуктуации приводят к организации новой, более устойчивой структуры на данном иерархическом уровне эволюции. А переход «устойчивость — неустойчивость — устойчивость» как раз и будет контролироваться отрицательной обратной связью.

Адаптивность системы к структурным перестройкам (A_m) можно определить следующим образом [11]:

$$A_m = x_i / x_{i+1} = \Delta_i^{1/m}, \quad (3)$$

где: x_i и x_{i+1} — предыдущее и последующее критическое значение управляющего параметра; Δ_i — мера устойчивости структуры (константа самоподобия структурных перестроек); m — показатель способности структуры к перестройке или показатель обратной связи. При $\Delta_i = \text{const}$ адаптивность изменяется в геометрической последовательности $m = 1, 2, 4, 8, 16, \dots, m^*$, а m^* является пороговым показателем обратной связи.

Соотношение (3) содержит меры устойчивости симметрии системы, детерминированные спектром чисел обобщенной золотой пропорции. Это позволяет по критическим значениям управляющего параметра для предыдущей и последующей точек бифуркации, отношение которых равно $\Delta_i^{1/m}$, определить меру устойчивости системы Δ_i и показатель обратной связи m .

Функция самоподобия $\Delta_i^{1/m}$ базируется на законе деления целого на части и законе кумулятивной обратной связи. В качестве меры устойчивости структуры Δ_i , определяющей бифуркационные переходы, выделяется ряд универсальных мер устойчивости, отвечающих спектру чисел обобщенной золотой пропорции (обратные величины): 0.618, 0.465, 0.38, 0.324, 0.285, 0.255, 0.232, 0.213. Функция самоподобия контролирует адаптивность

Таблица 2. Рассчитанные параметры кластерной структуры фаз предплавления Ge в различных кинетических режимах

ν , К/мин	T'_{pre-m} , К	δT_{pre-m} , К	Δf_{pre-m} , Гц расч.	A_i	r , Å
1	1101.7	109.0	0.05—10	2.5	14.2
5	1157.9	48.2		4.3	24.5
10	1139.4	64.9		3.5	20.1

структуры к внешнему воздействию. Значение $m = 1$ отвечает линейной обратной связи, при которой реализуются мультипликативные свойства системы, а $m \geq 2$ — нелинейной обратной связи, при которой реализуются репликативные свойства системы.

Определим меру устойчивости кластеров, формирующихся на этапе предплавления Ge в различных кинетических режимах. Поскольку в нашем случае флуктуации теплоты диссипации предплавления f зависят от характеристической длины корреляции A_i , определяющей радиус кластеров в предплавлении (соотношение (1)), то интегральная частота тепловых флуктуаций выступает как индикатор динамической кластеризации фаз предплавления и рассматривается как управляющий параметр. Следовательно, изменение $F(f)$ будет характеризовать изменение устойчивости кластеров фаз предплавления Ge в различных кинетических режимах. В этом случае мера устойчивости кластерной структуры фазы предплавления представляется в виде [12]:

$$\Delta_i^{1/m} = A_m = f_i / f_{i+1}, \quad (4)$$

где f_i и f_{i+1} — предыдущее и последующее значение характерной частоты флуктуаций теплоты диссипации предплавления. Характерные частоты определяются программно сечением вейвлет-диаграммы по экстремумам для каждого временного интервала.

Изменение меры устойчивости Δ_i кластерной структуры предплавления Ge в различных кинетических режимах приведены на рис. 2. Средние значения меры устойчивости и показателя обратной связи в сравнении с радиусом кластера фаз предплавления Ge приведены в табл. 3.

Значения Δ_i , характеризующие образование кластерной структуры предплавления Ge, отвечают спектру чисел обобщенной золотой пропорции и имеют колебательный характер. В условиях сильной корреляции при скорости нагревания $v = 5$ К/мин мера устойчивости кластерной структуры фаз предплавления Ge выше, чем в динамическом режиме нагревания при $v = 10$ К/мин и сравнима со средней мерой устойчивости кластерной структуры предплавления, формируемой в условиях слабой корреляции (квазистатический режим нагревания).

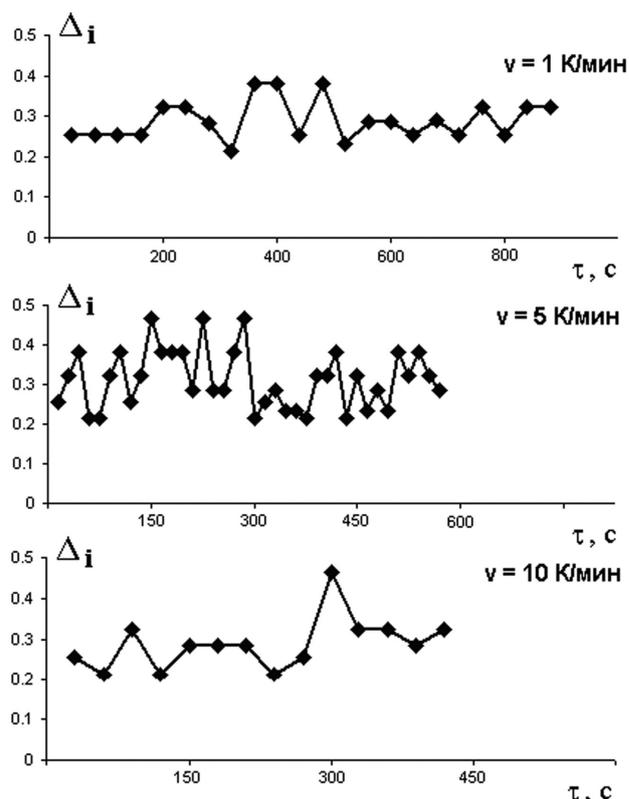


Рис. 2. Динамика изменения меры устойчивости Δ_i кластерной структуры фаз предплавления Ge в различных кинетических режимах

Рассмотрим соотношение адаптивности системы к структурным перестройкам A_m с показателем обратной связи. Для этого построим зависимости меры устойчивости Δ_i от A_m , т. е. спектр мер устойчивости кластерной структуры фазы предплавления, отражающий тип обратной связи. На рис. 3—5 приведены теоретические спектры мер устойчивости $\Delta_i(A_m)$ (сплошные линии) при значении $m = 1, 2, 4, 8 \dots$ и определяемые экспериментально как $A_m = f_i / f_{i+1}$ (точки) значения мер устойчивости кластерной структуры фаз предплавления Ge, формирующейся в различных кинетических режимах. Как видно из приведенных рисунков значения мер устойчивости кластерной структуры фаз предплавления Ge укладываются на теоретическую зависимость $\Delta_i(A_m)$, что подтверждает правильность выбора частоты флуктуаций теплоты диссипации переходных процессов в качестве управляющего параметра.

Таблица 3. Параметры устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Ge в различных кинетических режимах

v , К/мин	Δ_i ср	m ср	r , Å
1	0.324	2	14.2
5	0.324	4	24.5
10	0.285	2	20.1

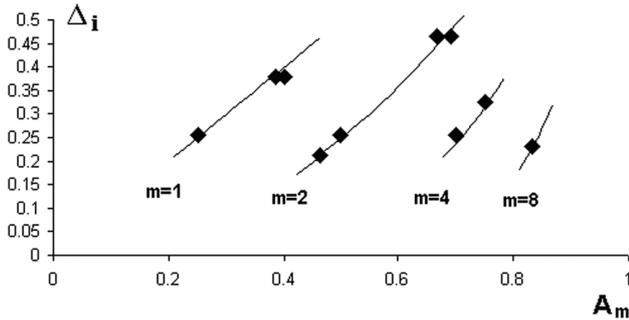


Рис. 3. Спектр мер устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Ge в квазистатическом режиме при $\nu \sim 1$ К/мин

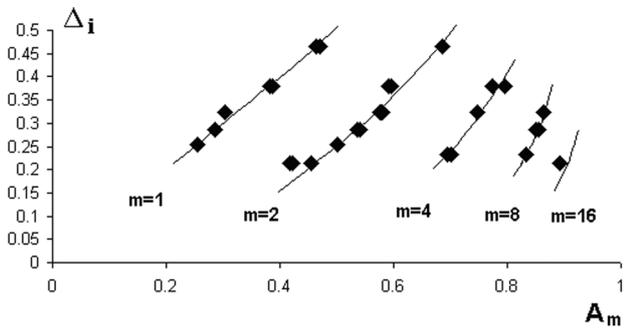


Рис. 4. Спектр мер устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Ge в динамическом режиме при $\nu = 5$ К/мин

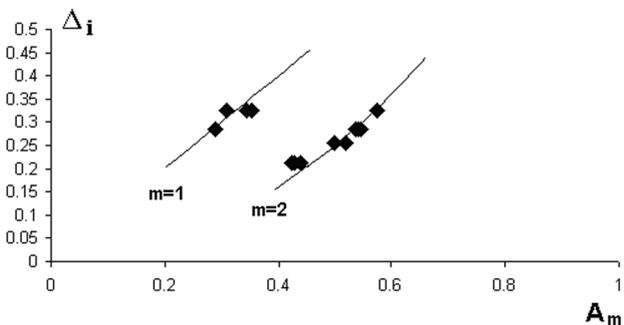


Рис. 5. Спектр мер устойчивости кластерной структуры фазы предплавления Ge в динамическом режиме при $\nu = 10$ К/мин

Из приведенных спектров видно, что для Ge показатель обратной связи m в условиях сильной корреляции, изменяется в пределе от 1 до 16 при $\nu = 5$ К/мин и от 1 до 2 при $\nu = 10$ К/мин. Для Ge в условиях сильной корреляции характерно образование кластерных структур предплавления как по мультипликативному (геометрическое подобие системы), так и репликативному (качественное изменение структуры вещества) механизмам. Однако в квазистатическом режиме в условиях слабой корреляции влияние линейной обратной связи ослабевает.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, частотный спектр флуктуаций теплоты диссипации эффектов предплавления Ge представляет собой нелинейный броуновский шум или шум типа $1/f^\beta$, отражающий наличие корреляций во временной последовательности флуктуирующей динамической переменной. К тому же шум типа $1/f^\beta$ несет информацию о микроскопических параметрах системы и стадиях перестройки системы в возбужденной переходной области.

При плавлении германия в динамических режимах нагревания (5, 10 К/мин) по сравнению с квазистатическим режимом (1 К/мин) происходит увеличение корреляционной длины, а соответственно увеличение размеров кластеров. В квазистатическом режиме ($\nu \sim 1$ К/мин) фазу предплавления можно рассматривать как систему со слабой корреляцией. Ослабление корреляций в системе за счет уменьшения скорости нагревания (квазистатический режим) приводит к уменьшению размеров кластеров и снижению их устойчивости. В динамическом режиме при скорости нагревания $\nu = 5$ К/мин формируется оптимальная кластерная структура фазы предплавления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Регель А. Р., Глазов В. М. Физические свойства электронных расплавов. М.: Наука. 1980. 296 с.
2. Глазов В. М., Чижевская С. Н., Глаголева Н. Н. Жидкие полупроводники. М.: Наука. 1967. 244 с.
3. Глазов В. М. // Неорган. мат. 1996. Т. 32. № 11. С. 1287—1305.
4. Булярский С. В., Львов П. Е., Светухин В. В. // ЖТФ. 2001. Т. 71. № 9. С. 9—14.
5. Битюцкая Л. А., Машкина Е. С. // ЖТФ. 1999. Т. 69. № 12. С. 57—61.
6. Bityutskaya L. A., Mashkina E. S. // Phase Transition. 2000. V. 71. P. 317—330.
7. Машкина Е. С. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Т. 13. № 3. С. 309—314.
8. Астафьева Н. М. // УФН. 1996. Т. 166. № 11. С. 1145—1170.
9. Малинецкий Г. Г., Подлазов А. В. // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 1997. Т. 5. № 5. С. 89—106.
10. Khait Yu. L. // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. V. 131. P. K19-K22.
11. Иванова В. С. Введение в междисциплинарное материаловедение. М.: Сайнс-пресс. 2005. 208 с.
12. Битюцкая Л. А., Машкина Е. С., Хухрянский М. Ю. и др. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2006. Т. 8. № 1. С. 7—11.

Машкина Екатерина Сергеевна — к.ф.-мат.н., доцент кафедры физики полупроводников и микроэлектроники, Воронежский госуниверситет

Гречкина Маргарита Владимировна — инженер кафедры физики полупроводников и микроэлектроники, Воронежский госуниверситет; e-mail: me22-1@phys.vsu.ru

Mashkina Ekaterina S. — PhD (Phys.-Math.), lecturer of the Physics of Semiconductors and Microelectronics chair, Voronezh State University

Grechkina Margarita Vladimirovna — leading engineer of the Physics of Semiconductors and Microelectronics chair, Voronezh State University; e-mail: me22-1@phys.vsu.ru