

05;07

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФРОНТА ВОЛНЫ ГЕНЕРАЦИИ ДЕФЕКТОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ

© Ф.Х.Мирзоев, Л.А.Шелепин

Известно, что при воздействии мощных световых потоков ($\hbar\omega \geq E_g$) на твердые тела происходит генерация точечных дефектов (ТД) (вакансий, межузлий). Согласно тепловой модели, образование ТД носит термофлуктуационный характер и его вероятность возрастает с ростом температуры среды (или интенсивности излучения), а также плотности дефектов [1]. Последнее связано с изменением высоты активационного барьера образования дефектов за счет упругой деформации среды, обусловленной самими дефектами. В действительности же концентрационная зависимость функции источника (g) может иметь максимум, связанный с ростом энергии активации при достаточно высоких плотностях дефектов. В данной работе впервые показано, что в этом случае может наблюдаться своеобразное явление — наличие двух устойчивых состояний равновесия и распространение волнового фронта плотности ТД по кристаллу. Установлено, что в чистых кристаллах раскачка волны генерации дефектов может приводить к аморфизации поверхностного слоя кристалла в световых полях, не вызывающих плавления решетки.

Теоретический анализ этого эффект можно провести на основе нелинейного уравнения кинетики ТД, имеющего следующий вид:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{d^2 n}{dr^2} + g_0 \exp -(E + W)/kT - \gamma n, \quad (1)$$

$$E = E_0 - z\varphi(\bar{r}), \quad (2)$$

где $g_0 \simeq d^{-3}\nu$, d — постоянная решетки; ν — частота колебаний атомов (порядка дебаевской): $\nu \simeq v_{\phi}/d \simeq 10^{14} \text{ с}^{-1}$; скорость рекомбинации $\gamma = \gamma_0 \exp(-W/kT)$, $\gamma_0 = \rho\nu d^2$, ρ — плотность центров рекомбинации, W — энергия активации диффузии дефекта; D — коэффициент диффузии дефектов.

Формула (2) означает, что создаваемое дефектами поле деформаций облегчает процесс их генерации путем уменьшения энергии активации E . Здесь $\varphi(\bar{r})$ — потенциал поля

деформаций; $\bar{r} = n^{-1/3}$ — среднее расстояние между дефектами; z — координационное число; E_0 — энергия образования дефекта в отсутствие взаимодействия. Взаимодействие между дефектами описывается через поле упругих деформаций в рамках приближения ближайших соседей.

В общем виде выражение для потенциала поля деформации вокруг дефекта может быть представлено в виде [2]

$$\varphi(r) = \frac{\alpha_1 r^m}{\alpha_3 + \alpha_4 r^{p+m}}$$

($p = 3$ или 6 , $m = 3$), которое вдали от дефекта ($r \rightarrow \infty$) имеет асимптотику $\varphi(r) \rightarrow r^{-p}$, а вблизи него ($r \rightarrow 0$) — $\varphi(r) \rightarrow r^m$. В частном случае в пределе $r \rightarrow 0$,

$$\varphi(r) = 2\varphi_0 \frac{(r/r_0)^3}{1 + (r/r_0)^6},$$

где φ_0 , r_0 — характерные амплитуда и радиус взаимодействия для поля деформаций.

Тогда энергию активации генерации дефекта можно записать в виде

$$E(n) = E_0 - 2z\varphi_0 \frac{n\Omega}{1 + (n\Omega)^2}, \quad (3)$$

где $\Omega \simeq d^3$ — объем дефекта, $d \simeq r_0$.

Уравнения (1)–(3) образуют нелинейную систему, типичную для физики автоволновых процессов, для которой характерно решение типа бегущий фронт. Она во многом аналогична рассматриваемой в теории горения и взрыва [3] или теории неравновесной взрывной кристаллизации в аморфных средах [4].

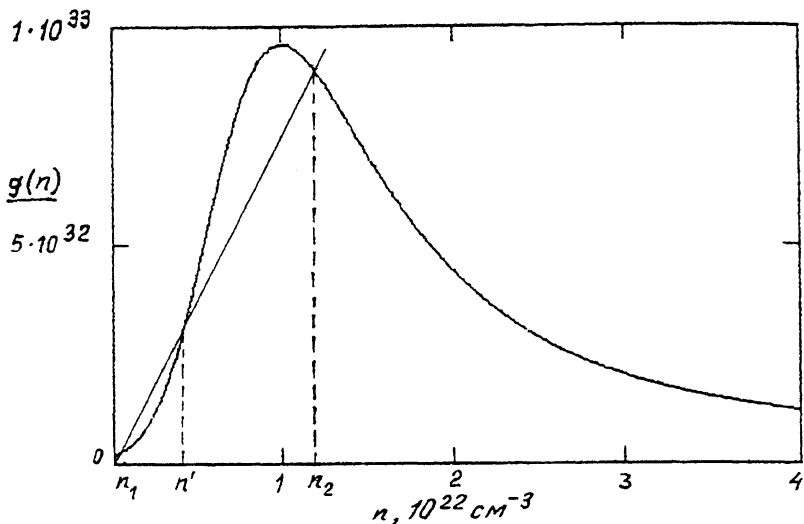
В стационарно-однородном случае из (1)–(3) имеем

$$g_0 \exp \left[-\frac{E(n)}{kT} \right] = \gamma_0 n. \quad (4)$$

Уравнение (4) можно решить графически. В общем случае возможно существование от одного до трех корней этого уравнения, т. е. $n = n_i$, $n_1 < n < n_2$ (см. рисунок).

Исследуем сначала устойчивость решений уравнения (1) по отношению к периодическому в пространстве возмущению с длиной волны λ

$$n'(r, t) = n_q \exp [i(\omega t - qr)], \quad (5)$$



Графическое решение уравнения (4).

где $q = 2\pi/\lambda$. Линеаризация уравнения (1) по малым неоднородным добавкам вида $n_1(r, t)$ приводит к уравнению

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n'}{\partial r^2} + n'(r, t) \frac{\partial S}{\partial n'}(n' = n_i),$$

из которого после подстановки (5) получаем дисперсионное соотношение

$$\omega(q) = i \left(Dq^2 - \frac{\partial S}{\partial n'}(n' = n_i) \right),$$

где $S(n) = g_0 \exp(-E(n)/kT) - \gamma n$. В случае $\partial S/\partial n'(n' = n_i) > 0$, т. е.

$$2z\varphi_0 g_0 \Omega > \gamma kT, \quad (6)$$

интервал $0 \leq q \leq q_0$ определяет область неустойчивых значений волновых чисел, где

$$q_0 = \left[\left(\frac{2z\varphi_0 g_0 \Omega (1 - n_0^2 \Omega^2)}{kT(1 + n_0^2 \Omega^2)^2} - \gamma \right) / D \right]^{1/2}.$$

Левый ($n = n_1$) и правый ($n = n_2$) корни на рисунке устойчивы, тогда как средний ($n = n'$) неустойчив.

Пороговый характер процесса позволяет аппроксимировать функцию $S(n)$ полиномом третьей степени:

$$S(n) = \Theta(n - n_1)(n - n')(n_2 - n), \quad (7)$$

где $n_1 < n' < n_2/2$, $\Theta = \Omega^2 \gamma_0$.

Будем искать решение (1) в виде бегущей волны

$$n(r, t) = n(\xi), \quad \xi = r - Vt \quad (8)$$

(ξ — автомодельная переменная). Подставляя (8) в (1), получаем:

$$V \frac{\partial n}{\partial \xi} + D \frac{\partial^2 n}{\partial \xi^2} + S(n) = 0. \quad (9)$$

Из (9) и (7) для профиля волны и ее скорости находим

$$n(\xi) = n_1 - \frac{\Delta n}{1 - \exp[\Delta n \sqrt{(\Theta/2D)} \xi]}, \quad \Delta n = n_2 - n_1, \quad (10)$$

$$V = (n_1 + n_2 - 2n') \sqrt{(\Theta D/2)}. \quad (11)$$

Решение (10) представляет собой ступеньку с характерной шириной переходной области $\delta = (\sqrt{(2D/\Theta)})/\Delta n$, которая движется со скоростью (11) без изменения профиля. Заметим, что в точке $n_1 + n_3 = 2n'$ происходит смена знака скорости, что соответствует условию неподвижности фронта волны генерации. Для раскачки волны генерации дефектов требуется превышение некоторой пороговой плотности дефектов (n_*), определяемой формулой (8). При характерных значениях параметров $\varphi_0 = 0.8 \text{ эВ}$, $\Omega = 10^{-22} \text{ см}^3$ значение n_* составляет $\simeq 10^{19} \text{ см}^3$. При прохождении такой волны плотность дефектов в кристалле повышается от минимального значения n_1 до максимального значения $n_{\max} \geq N_a$ (N_a — плотность узлов решетки), т. е. оказывается возможным переход к аморфному состоянию в режиме предплавления решетки.

Распространение волнового фронта дефектов с генерационным максимумом представляет собой автоволновый процесс в нелинейной активной среде. Она соответствует волне переключения между стационарными состояниями, одно из которых — устойчивое и отвечающее максимальной плотности дефектов n_{\max} — можно отождествить с аморфной фазой. Такого рода автоволновые процессы обнаружены, например, при тепловом распространении нормальной фазы в ВТСП пленках [5]; в диэлектриках при электротепловом разогреве благодаря немонотонной зависимости фактора диэлектрических потерь от температуры [6].

Список литературы

- [1] Мирзоев Ф.Х., Панченко В.Я., Шелепин Л.А. // УФН. 1996. Т. 166. № 1. С. 3-32.
- [2] Моделирование на ЭВМ дефектов в металлах / Под ред. Ю.А. Осипьяна Л.: Наука, 1990. С. 188.
- [3] Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Магвиладзе Г.М. // Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с.
- [4] Шкловский В.А., Кузьменко В.М. // УФН. Т. 157. № 3. С. 311-338.
- [5] Альтов В.А., Львовский Ю.М., Сычев В.В. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 2.
- [6] Бондаренко П.Н., Емельянов О.А., Койков С.Н. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 16. С. 45-48.

Физический институт
им. П.Н. Лебедева
РАН

Поступило в Редакцию
12 марта 1996 г.
