01;05;07

Уединенные концентрационные волны точечных дефектов при импульсном лазерном воздействии

© Ф. Мирзоев, Л.А. Шелепин

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва
Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН, Москва

Поступило в Редакцию 13 апреля 1999 г.

Впервые предложена модель распространения уединенной (солитоноподобной) концентрационной волны (УКВ) точечных дефектов в кристалле при воздействии лазерных импульсов. Показано, что УКВ возникает благодаря нелинейной концентрационной зависимости функции источника дефектов, связанной с уменьшением энергии активации дефектообразования вблизи кластеров при учете поля упругих напряжений. Получены условия возбуждения УКВ, ее профиль и скорость распространения.

Известно, что действие мощных лазерных импульсов на твердое тело может привести к генерации точечных дефектов (ТД) (вакансий, межузлий) с плотностью, значительно превышающей термодинамически равновесную. При определенных критических условиях, как показано в работах [1–4], концентрация ТД может претерпевать сложные динамические превращения, приводящие к самоорганизации различного рода локализованных структур: кластеров ТД или сверхрешеток плотности ТД (а также статической деформации решетки). При достаточно высоких плотностях в ансамбле дефектов, благодаря нелинейной концентрационной (s-образной) зависимости функции генерации ТД из узлов кристаллической решетки, может наблюдаться распространение волны переключения плотности дефектов, переводящее систему из состояния с некоторым минимальным значением плотности $n_{\min}$ в состояние с максимальным значением $n_{\max}$ [3,4]. Представления о бистабильном поведении системы ТД позволили интерпретировать фазовый переход из кристаллического состояния в аморфное при воздействии лазерных импульсов, не вызывающих плавления решетки (твердофазная аморфизация) [3,4].

В данной работе предложена модель возбуждения уединенных концентрационных волн (УКВ) точечных дефектов в кристалле, первоначально содержащем кластеры ТД. Получены критические условия возбуждения волны плотности, оценка ее профиля и скорости распространения.

Теоретический анализ возбуждения УКВ проведем на основе нелинейной системы уравнений, описывающих совместную динамику ТД и кластеров. Если принять, что основными процессами, контролирующими поведение во времени плотности дефектов, являются генерация, диффузия и рекомбинация, то в одномерном случае (для простоты) имеем:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu\alpha Rn - \frac{n}{\tau} + D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}. \tag{1}$$

В (1) первое слагаемое учитывает деформационно-стимулированную генерацию ТД кластерами сферической формы (R — радиус кластера; $\mu = 4\pi N_0\Omega_0^{-1}$, N_0 —плотность кластеров, Ω_0 — атомный объем; $\alpha = K\Omega^2 D/kT$, K — модуль упругости, Ω — активационный объем образования ТД, D — коэффициент диффузии ТД, k — постоянная Больцмана, T — температура), второе слагаемое — рекомбинацию на центрах (скорость рекомбинации: $\beta = \beta_0 \exp(-W/kT) = \tau^{-1}$, $\beta_0 = \rho\nu d_0^2$, τ — время жизни ТД; ρ — плотность центров рекомбинации; ν — дебаевская частота; d_0 — период решетки; W — энергия активации диффузии дефекта), а третье — их пространственную диффузию.

Уравнение, описывающее динамику изменения во времени размеров кластеров при их ”деформационном испарении”, запишем в виде:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{\alpha n}{R} + D_R\frac{\partial^2 R}{\partial x^2}, \tag{2}$$

D_R — коэффициент диффузии кластера. Так как $D_R \ll D$, в дальнейшем подвижностью кластеров будем пренебрегать.

Переходя в (1) и (2) к автомодельной переменной $\xi = x + \nu t$, получаем

$$\nu\frac{\partial R}{\partial \xi} = -\frac{\alpha n}{R}, \tag{3}$$

$$\nu\frac{\partial n}{\partial \xi} - D\frac{\partial^2 n}{\partial \xi^2} = \mu\alpha Rn - \beta n. \tag{4}$$

Интегрируя (4) и вводя функцию $\eta(\xi) = \int\limits_{-\infty}^{\xi} nd\xi$, получаем:

$$\nu\frac{\partial\eta}{\partial\xi} - D\frac{\partial^2\eta}{\partial\xi^2} = \mu\alpha\int\limits_{-\infty}^{\xi} R(\xi)n(\xi)d\xi - \beta\eta. \tag{5}$$

Из уравнения (3) имеем

$$\alpha\int\limits_{-\infty}^{\xi} Rnd\xi = \frac{\nu}{3}\left[R^3(-\infty) - R^3(\xi)\right] = \frac{\nu}{3}\left[R_0^3 - R^3(\xi)\right]. \tag{6}$$

Подставляя (6) в (5), приходим к уравнению

$$\nu\frac{\partial\eta}{\partial\xi} = D\frac{\partial^2\eta}{\partial\xi^2} + \varphi(R,\eta), \tag{7}$$

где $\varphi(R,\eta) = \mu\nu(R_0^3 - R^3(\xi)) - \beta\eta$.

Для производной φ'_η имеем: $\varphi'_\eta = 3\mu\alpha R - \beta$. Очевидно, что $\varphi'_\eta(0) = 3\mu\alpha R_0 - \beta > 0$, если $\alpha R_0 > \beta/3\mu$. Учитывая, что функция $R(\eta,\nu,R_0)$ с ростом η убывает, имеем $\varphi'_\eta(\eta) < \varphi'_\eta(0)$. Отсюда следует, что имеется единственное значение $\eta_* > 0$ такое, что $\varphi(\eta_*) = 0$.

Таким образом, задачу (1) и (2) свели к задаче Колмогорова–Петровского–Пискунова [5]. Используя аналогию с этой задачей, можно утверждать, что в системе кластер и ТД может возбуждаться волна со скоростью, ограниченной снизу значением

$$\nu_0 = 2\sqrt{D(3\mu\alpha R_0 - \beta)}. \tag{8}$$

Поскольку $d\eta/d\xi = n(\xi)$ и при $\xi \to \mp\infty$ $d\eta/d\xi \to 0$, то волна плотности ТД представляет собой уединенную (солитоноподобную) волну, распространяющуюся с минимальной скоростью (8).

Из формулы (8) следует, что $3\mu\alpha R_0 > \beta$. Таким образом, для возбуждения УКВ дефектов в кристалле необходимо, чтобы начальный размер кластера превышал некоторый критический: $R_0 > R_*$, где $R_* = \beta/3\mu\alpha$.

Определим теперь профиль УКВ. Из (3) имеем: $R^2 = R_0^2 - 2\alpha\eta/\nu$. Далее представляем $R(\eta)$ в виде разложения $R \approx R_0 - \alpha\eta/\nu R_0 + \ldots$

и подставляем в (7). Сохраняя слагаемые порядка α^2, получаем следующее уравнение волны:

$$\nu\frac{d\psi}{d\xi} = D\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \mu\alpha(R_0 - R_*)\psi(1-\psi),$$

где $\psi = \alpha\eta/\nu R_0(R_0 - R_*)$.

Точное решение этого уравнения имеет вид:

$$\psi(\xi) = \left[1 + (\sqrt{2}-1)\exp(-\xi/\delta)\right]^{-2}. \tag{9}$$

Возвращаясь к переменной $n(\xi)$, для профиля УКВ окончательно имеем

$$n(\xi) = A\exp(-\xi/\delta)\left[1 + (\sqrt{2}-1)\exp(-\xi/\delta)\right]^{-3}, \tag{10}$$

где $A = 20\pi(\sqrt{2}-1)(N_0R_0^3/d_0^3)(1 - R_*/R_0)^2$, $\delta = \sqrt{6D/\mu\alpha(R_0 - R_*)}$ — ширина УКВ. Очевидно, что $n(\xi) \to 0$ при $\xi \to \mp\infty$.

Для скорости, соответствующей волновому решению (10), получаем:

$$\nu = 5\sqrt{\mu\alpha(R_0 - R_*)D/2}. \tag{11}$$

Из (7) и (11) следует $\nu = \nu_0(1+\Delta)$, $\Delta \ll 1$. Это позволяет утверждать, что формула (10) удовлетворительно описывает профиль УКВ.

Анализируя (10) и (11), заметим, что условия возникновения УКВ дефектов, ее профиль и скорость распространения существенно зависят от начальных значений размеров кластеров. При более высоком начальном радиусе кластера волна плотности дефектов распространяется с большей скоростью и имеет более резкий максимум, чем волна, распространяющаяся в среде с меньшим начальным радиусом кластера.

В заключение заметим, что распространение УКВ возможно также в рамках модели

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -F(R,M)n + D_R\frac{\partial^2 R}{\partial x^2},$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = S(R)F(R,M)n - \frac{n}{\tau} + D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2},$$

являющейся обобщением модели (1) и (2).

Здесь $F(R,M)$ — монотонная функция R, $\{M\}$ — набор параметров, характеризующих среду, $S(R)$ — площадь поверхности кластера.

Таким образом, показано, что в системе ТД и кластеров, описываемой уравнениями (1) и (2), возможно распространение уединенных концентрационных волн точечных дефектов. Это явление носит пороговый характер и имеет место, когда начальный размер кластера в облучаемом кристалле превышает некоторое критическое значение, определяемое плотностью центров рекомбинации, модулем упругости, дилатационным объемом ТД, а также температурой среды. При значениях параметров, характерных для дефектов вакансионного типа $kT = 0.04\,\mathrm{eV}$, $D = 10^{-6}\,\mathrm{cm}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}$, $K\Omega = 5\,\mathrm{eV}$, $N_0 = 10^{14}\,\mathrm{cm}^{-3}$, $\rho = 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-2}$, для критического радиуса кластера и скорости распространения волны имеем соответственно $R_* = 3 \cdot 10^{-7}\,\mathrm{cm}$ и $\nu = 0.6\,\mathrm{cm/s}$. Количественные выводы данной работы могут быть использованы для планирования экспериментов по управлению процессом накопления дефектов в материалах при интенсивных лазерных воздействиях.

Список литературы

[1] *Бойко В.И., Лукьянчук Б.С., Царев Е.* // Труды ИОФАН. 1991. Т. 30. С. 6–82.

[2] *Мирзоев Ф.Х., Панченко В.Я., Шелепин Л.А.* // УФН. 1996. Т. 165. № 1. С. 3–32.

[3] *Мирзоев Ф.Х., Шелепин Л.А.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 13. С. 28–31.

[4] *Мирзоев Ф.Х.* // ЖТФ. 1998. Т. 68. № 8. С. 73–77.

[5] *Колмогоров А.Н., Петровский И.Г., Пискунов Н.С.* // Бюл. МГУ, Математика и механика. 1937. Т. 1. № 6. С. 1–26.