

В этом случае и при $\epsilon E \ll neh$ (что выполняется практически всегда) можно показать, что возникает неустойчивость. С точностью до членов порядка

$$\pi^2 \left(\frac{eEh}{T} \right)^2 \left(\frac{\epsilon T}{4\pi e^2 h^2 n} \right)^2 \ll 1 \quad (9)$$

критерий возникновения неустойчивости имеет вид

$$\epsilon = \frac{h\beta}{n} \frac{eEh}{T} \frac{\epsilon E^2}{4\pi n T} \geq \frac{k^2}{k_z^2}, \quad (10)$$

при этом частота осцилляций

$$\omega = \frac{h\beta}{n} \left(\frac{eEh}{T} \right)^2 \frac{\pi D}{2h^2}. \quad (11)$$

При условиях (9), (10) линеаризованная система имеет пространственно-периодические, осциллирующие с частотой (11) решения. Так как такой вид имеют также E' и v , то получаемые волны, с одной стороны, подобны структурам полей в твердых телах [1], а с другой — структурам осциллирующей конвекции [2].

5. Проанализируем условия существования неустойчивости. Из симметрии в плоскости xoy $k_x = 2\pi/l_x$, $k_y = 2\pi/l_y$. Границы структур $x = \pm l_x/2$, $y = \pm l_y/2$. Структуры появляются, как только ϵ достигает критического значения. $\epsilon_{\min} = 1$, при этом $k_1^2 \ll k_z^2$, т. е. $l_x \gg h$ и $l_y \gg h$. Электролит расслаивается на тонкие слои, перпендикулярные оси z . Оценим минимальную толщину слоя, при которой это будет происходить

$$h_{\min} = \left(\frac{4\pi n^2 T^2}{\epsilon e E^3 \beta} \right)^{1/2}.$$

При $T \approx 300$ К, $E \approx 10^2$ В/см, $\epsilon \approx 10^2$, $n \approx 10^{17}$ см $^{-3}$ и $|\nabla \ln n| \approx 0.1$ см $^{-1}$ найдем $h_{\min} \approx 2$ мм, $\omega \approx 10^2$ 1/с.

Автор благодарит И. В. Иоффе за доброжелательное обсуждение.

Литература

- [1] Гуревич Л. Э., Иоффе И. В. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. Вып. 4. С. 1133—1139.
[2] Бодога М. К., Гросу Ф. П., Кожухарь И. А. Электроконвекция и теплообмен. Кишинев: Штиинница, 1977. 320 с.
- Ленинградский политехнический институт им. М. И. Калинина

Поступило в Редакцию
7 апреля 1988 г.

ДИНАМИКА ОДНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ ДИПОЛЬНОГО ВОЛЧКА В НЕОДНОРОДНОМ СИЛЬНОМ ПОЛЕ

B. M. Суслопаров

Вблизи поверхности сегнетоэлектрика электрическое поле может быть достаточно большим $\sim kT/p \sim 10^6 - 10^7$ В/см, где p — дипольный момент молекул газовой фазы [1]. Характерный радиус R действия этого поля определяется размерами доменов и составляет $\sim 10^{-6} - 10^{-7}$ см, что по порядку величины меньше длины свободного пробега молекул газа при нормальных условиях $L \sim 10^{-5}$ см. Поэтому при описании динамики движения на микроскопически малых расстояниях $z \leq L$ от поверхности твердого тела можно использовать классическую механику, справедливую для молекул в широкой области температур $kT \gg \hbar^2/I$ [2], где I — момент инерции диполя. Поскольку величина межчастичного взаимодействия намного меньше энергии взаимодействия дипольных молекул с сильным приповерхностным полем, то задача изучения их движения на таких расстояниях сводится к одиночастичной. Актуальность данной работы обусловлена необходимостью объяснения адсорционной способности материалов типа BaTiO₃ [3], являющихся источником сильного поля.

Рассмотрим динамику дипольного молекулярного волчка движущегося вдоль оси z , ориентированной по напряженности сильного поля $E(z)$. Запишем сохраняющуюся функцию Гамильтона системы [4]

$$H = \frac{m\dot{z}^2}{2} + \frac{M_3^2}{2I_0} + \frac{M_\theta^2}{2I} + \frac{(M_z - M_3 \cos \theta)^2}{2I \sin^2 \theta} - pE(z) \cos \theta. \quad (1)$$

Здесь M_3 и M_z — интегралы движения; m — масса; I_0 — момент инерции волчка относительно его собственной оси, параллельной и жестко связанной с \mathbf{p} ; θ — один из углов Эйлера, задающий ориентацию вектора \mathbf{p} по отношению к z .

Используя адиабатическое приближение [4] медленного изменения за период прецессии τ координаты частицы $\tau\ddot{z} \ll \dot{z}$ и поля $\tau E(z) \ll E(z)$, имеем сохранение адиабатического инварианта

$$J = \frac{1}{\pi} \int_{\theta_2}^{\theta_1} \sqrt{2I \left(H' - \frac{m\dot{z}^2}{2} - U_{\text{эфф}} \right)} d\theta, \quad (2)$$

где

$$H' = H - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I_0} - \frac{1}{I} \right) M_3^2, \quad U_{\text{эфф}}(\theta, z) = -pE(z) \cos \theta + \frac{M_3^2 + M_z^2 - 2M_3 M_z \cos \theta}{2I \sin^2 \theta},$$

$\overline{m\dot{z}^2}/2$ — средняя кинетическая энергия поступательного движения волчка.

В безразмерных переменных $y = \overline{m\dot{z}^2}/2H'$, $x = pE/H'$, $\gamma_1^2 = M_z^2/2IH'$, $\gamma_2^2 = M_3^2/2IH'$ инвариант (2) примет вид

$$J(x, y, \gamma_1, \gamma_2) = \frac{\sqrt{2IH'}}{\pi} \int_{t_2}^{t_1} \frac{[(1-y+xt)(1-t^2) - (\gamma_1^2 + \gamma_2^2 - 2\gamma_1\gamma_2 t)]^{1/2}}{1-t^2} dt, \quad (3)$$

где $t = \cos \theta$, $t_1 \geq t_2 \geq t_3$ — нули подынтегрального выражения в числителе (3).

Принимая за начальный момент движения местонахождение частицы в области, где $E(z > R) = 0$, $x = 0$, $y = y_0$, получим относительно простые выражения для γ_i^2 ($i=1, 2$) и J через ориентации вектора полного момента \mathbf{M} волчка по отношению к осям z и \mathbf{p} соответственно

$$\gamma_i^2 = (1 - y_0) \alpha_i^2, \quad \alpha_i = \cos \theta_i,$$

$$J_0 = J(0, y_0, \alpha_1, \alpha_2) = \sqrt{2IH'(1-y_0)} \left[1 + \frac{1}{2} (|\alpha_1 - \alpha_2| - |\alpha_1 + \alpha_2|) \right]. \quad (4)$$

Интегральное соотношение $J = J_0$ приводит к неявной зависимости $y = y(x, y_0, \alpha_1, \alpha_2)$, которую проще найти из уравнения

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{(\partial J/\partial x)}{(\partial J/\partial y)} = (t_1 - t_3) \frac{E(k)}{K(k)} + t_3, \quad (5)$$

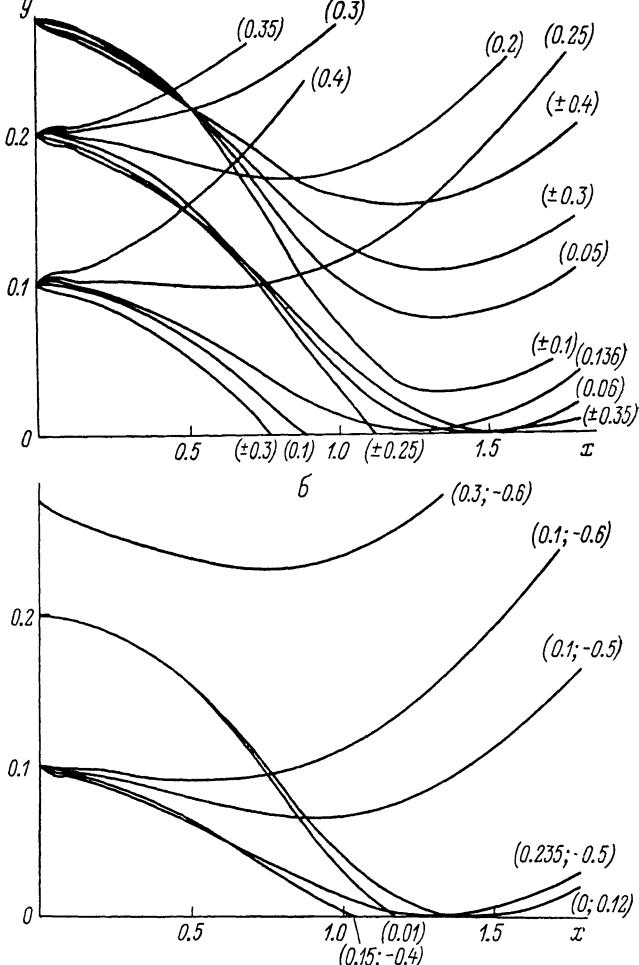
где $K(k)$ и $E(k)$ — полные эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно, $k = [(t_1 - t_2)/(t_1 - t_3)]^{1/2}$.

Решения интегродифференциального уравнения (5) вблизи ($x \ll 1$) и вдали ($x/(1-y_0) \gg 1$) от начала координат имеют вид

$$y(x, y_0, \alpha_1, \alpha_2) = \begin{cases} \alpha_1 \alpha_2 x - [1 - 3(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)] \frac{x^2}{8(1-y_0)}, & x \ll 1, \\ 0.457x, & x/(1-y_0) \gg 1. \end{cases} \quad (6)$$

Для изучения поведения функции $y(x)$ в промежуточной области ($x \sim 1$) необходим численный расчет, представленный на рисунке. Здесь в зависимости от заданных значений y_0 , α_1, α_2 график функции 1) пересекает ось x ($y_0 < y_{0c}$ ($\alpha_1, \alpha_2 < y_{0c}(0) = 0.275$)), 2) лежит выше оси x ($y_0 > y_{0c}$ (α_1, α_2)) или 3) касается ее в некоторой точке x_c ($y_0 = y_{0c}$ (α_1, α_2))). Поскольку тангенс угла наклона кривой $y(x)$ определяет среднее значение косинуса силы, действующей на дипольный волчок со стороны поля, то каждое решение приобретает физическую интерпретацию. Решения типа 1 означают, что частица успевает затормозиться до изменения знака силы и поэтому выталкивается полем. В случае 2 волчок втягивается полем. Наконец, кривые вида 3 отвечают критическому режиму движения, когда торможение до полной остановки частицы происходит со сменой направления действия силы и последующим па-

дением на силовой центр. Как видно из (6), торможение поступательного движения волчка возникает при $\alpha_1 \alpha_2 < 0$ (особый случай $\alpha_1 \alpha_2 = 0$ рассмотрен в работе [5]) или при $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 < 1/3$ для любых $|\alpha_1 \alpha_2| \ll 1$ и $y_0 < 1$. Критические значения параметров y_0 (α_1, α_2) и поля x_c (α_1, α_2) в режиме З определяются из следующей системы интегральных уравнений:



Зависимость безразмерной кинетической энергии у поступательного движения дипольного волчка от безразмерных параметров начального состояния движения y_0 , α_1, α_2 ($y_0 \leq 0.275$) и поля x .

$$\alpha - |\alpha_1| = |\alpha_2|, \quad 6 - |\alpha_1| \neq |\alpha_2|.$$

$$(t_1 - t_3) E(k) + t_3 K(k) = 0, \quad 2K(k) + (1 - y_{c0}) \left[\frac{(\alpha_1 - \alpha_2)^2}{t_1 - 1} \Pi\left(\frac{t_2 - t_1}{t_1 - 1}, k\right) - \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)^2}{t_1 + 1} \Pi\left(\frac{t_2 - t_1}{t_1 + 1}, k\right) \right] = \pi \sqrt{(1 - y_{c0})(t_1 - t_3)} x_c \left[1 + \frac{1}{2} (|\alpha_1 - \alpha_2| - |\alpha_1 + \alpha_2|) \right], \quad (7)$$

где $\Pi(n, k)$ — полный эллиптический интеграл третьего рода.

В приближении $|\alpha_i| \ll 1$ из (7) находим зависимость $y_{c0}(\alpha_1, \alpha_2) = y_{c0}(0) - (1 - y_{c0}(0)) \times |\alpha_1 - \alpha_2| / |\alpha_1 + \alpha_2|$ для дипольного волчка.

Выпишем в заключение вычисленные на УВК СМ-3 некоторые критические значения $(y_{c0}; x_c; \alpha_1; \alpha_2) = (y_{c0}; x_c; \alpha_2; \alpha_1)$: $(0.1; 1.3; 0.273; 0)$, $(0.1; 1.3; 0.235; -0.5)$, $(0.1; 1.3; 0.128; -0.4)$, $(0.2; 1.4; 0.12; 0)$, $(0.2; 1.4; 0.06; 0.06)$, $(0.2; 1.5; 0.35; -0.35)$, $(0.275; 1.5; 0; 0)$.

Полученные результаты могут быть использованы также при изучении самих приповерхностных полей с помощью ориентированных пучков молекул-волчков.

Автор выражает благодарность участникам семинара В. П. Широковского за ценные советы и полезные замечания.

Литература

- [1] Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М.: Мир, 1981. 736 с.
- [2] Ландau Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [3] Суслопаров В. М. // Тез. докл. XI Всесоюзн. конф. по физике сегнетоэлектриков. Киев, 1986. Ч. 1. С. 1—52.
- [4] Ландau Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М.: Наука, 1973. 207 с.
- [5] Розенбаум В. М., Артамонова Е. В., Огенько В. М. // УФЖ. 1985. Т. 30. № 10. С. 1574—1578.

Физико-технический институт
Уральское отделение АН СССР

Поступило в Редакцию
22 сентября 1987 г.
В окончательной редакции
10 апреля 1988 г.

03; 06; 11

Журнал технической физики, т. 59, в. 4, 1989

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ НЕСТАЦИОНАРНОГО МАССОПЕРЕНОСА В ОБЪЕМЕ ГАЗОЭПИТАКСИАЛЬНОГО РЕАКТОРА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ СТРУКТУР МОС-ГИДРИДНЫМ МЕТОДОМ

А. И. Жмакин, О. В. Коваленков, И. А. Кузьмин, Ю. Н. Макаров,
А. А. Фурсенко, Б. С. Явич

В работе на основе специально выполненных экспериментов и анализа опытных данных других авторов построена математическая модель для описания процесса формирования переходных областей при выращивании структур в системе триметилгаллий (ТМГ)—три-метилалюминий (ТМА)—арсин—водород. Выращивание эпитаксиальных слоев GaAs и твердых растворов $Al_xGa_{1-x}As$ проводилось при атмосферном давлении в реакторе вертикального типа с ВЧ нагревом подложкодержателя [1].

1. Рост эпитаксиальных слоев в описанной системе протекает в диффузионных режимах, когда скорость роста лимитируется массопереносом соединений, содержащих элемент III группы, к растущему на подложке слою [2]. Следовательно, процессы нестационарного массопереноса на фоне течения смеси в реакторе определяют ширину переходных областей между слоями различного состава.

В силу малости концентраций реагентов в несущем газе влияние физико-химических превращений в смеси на газодинамику течения незначительно. Это позволяет отдельно рассчитать стационарные поля скоростей и температур смеси в объеме реактора без учета химических реакций, а затем на основе этих полей изучать процессы нестационарного массопереноса соединений, содержащих элемент III группы. Для расчета газодинамики использована модель гипозвукового течения, уравнения которой и численные алгоритмы для ее решения приведены в [3, 4].

Модель процессов роста эпитаксиальных слоев твердых растворов $Al_xGa_{1-x}As$ основывается на следующих предположениях.

- 1) Пиролиз ТМГ и ТМА происходит независимо.
- 2) Основными продуктами разложения этих соединений при температурах подложкодержателя $T_s \geq 900$ К в объеме и у поверхности подложек являются Ga, GaAs, Al, AlAs.

3) ТМА присутствует в исходной парогазовой смеси в форме димеров.

Ввиду незначительного отличия коэффициентов диффузии в водороде Ga и GaAs (Al и AlAs) от коэффициента диффузии ТМГ (ТМА) можно не детализировать механизм пиролиза.