УДК 621.539

СОЛИТОНЫ ПЛОТНОСТИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

Ф. Мирзоев, Л. А. Шелепин

Предложена модель возбуждения солитонов плотности точечных дефектов в кристалле при импульсном лазерном воздействии. Показано, что солитоны возникают благодаря нелинейности процесса генерации дефектов, связанной с уменьшением энергии дефектообразования вблизи кластеров при учете поля упругих напряжений. Получены условия возбуждения нелинейной волны и ее основные характеристики (профиль, скорость распространения).

Известно, что воздействие мощных лазерных импульсов на твердое тело может привести к генерации точечных дефектов (ТД) (вакансий, междоузлий) с плотностью, значительно превышающей термодинамически равновесную. В процессе эволюции неравновесные ТД интенсивно взаимодействуют между собой и характер этого взаимодействия управляется параметрами излучения, а также состоянием облучаемой поверхности и другими внутренними параметрами, такими как температура, наличие исходной примеси и ее концентрация, плотность дислокаций и кластеров ТД (пор и дислокационных петель) в кристалле и т.д. При определенных критических значениях внешних и внутренних параметров (например, плотности потока излучения или температуры среды, плотность стоков и т.п.), поле концентрации ТД может претерпевать сложные динамические превращения, приводящие к самоорганизации различного рода локализованных структур: кластеров ТД или сверхрешеток плотности ТД (а также статической деформации решетки) [1 – 4]. В достаточно плотных полях ТД благодаря s-образной концентрационной зависимости функции генерации ТД из узлов кристаллической решетки может наблюдаться распространение волны переключения плотности дефектов, переводящей систему из состояния с некоторым минимальным значением плотности

n_{min} в состояние с максимальным значением n_{max} [3, 4]. Теория бистабильной кинетики системы ТД позволила интерпретировать фазовый переход из кристаллического состояния в аморфное в лазерных полях, не вызывающих плавления решетки (твердофазная аморфизация) [3, 4].

Эффекты динамического упорядочения и самоорганизация различных локализованных структур ТД проявляются и в более неравновесных ситуациях, в системах с большей начальной концентрацией макроскопических дефектов.

В настоящей работе предложена модель возбуждения нелинейных уединенных концентрационных волн (УКВ) – солитонов точечных дефектов в кристалле, первоначально содержащем кластеры ТД. Получены критические условия возбуждения нелинейной волны и ее основные характеристики (профиль, скорость распространения).

Поверхности различных макроскопических дефектов (пор, границ зерен, дислокационных петель и т.д.), как имеющихся в кристалле, так и генерирующихся в процессе лазерного воздействия, служат эффективными источниками ТД в кристалле. При возникновении флуктуации поля упругой деформации вблизи кластеров происходит их деформационное "испарение", в результате которого плотность ТД в матрице увеличивается. Интенсивность генерации ТД пропорциональна скорости изменения размеров кластеров R, которая, в свою очередь, зависит от плотности дефектов. Размер кластера быстро подстраивается к мгновенному изменению плотности ТД, так что функция $R(n)$ представляет собой некоторую убывающую функцию от плотности ТД.

Исследование возбуждения нелинейной волны дефектов проведем на основе системы уравнений, описывающих совместное поведение ТД и их кластеров. Учитывая, что основными процессами, контролирующими динамику плотности дефектов, являются генерация, рекомбинация и диффузия, в одномерном случае (для простоты) имеем

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

В (1) первое слагаемое описывает 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

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

где D_R – коэффициент диффузии кластера. Так как $D_R << D$, в дальнейшем подвижностью кластеров будем пренебрегать.

Система уравнений (1) и (2) замкнута и описывает динамику распространения нелинейных волн в ансамбле ТД. Она может иметь решение в виде уединенных волн для плотности точечных дефектов (солитонное решение).

Переходя к автомодельной переменной $\xi = x + vt$, из (1) и (2) получаем

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

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

Интегрируя (3) и (4) и вводя функцию $\eta(\xi) = \int\limits_{-\infty}^{\xi} n d\xi$, после несложных преобразований получаем

$$v\frac{\partial \eta}{\partial \xi} = D\frac{\partial^2 \eta}{\partial \xi^2} + \varphi(R, \eta), \tag{5}$$

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

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 $\alpha R_0 > \beta/3\mu$. Кроме того $\varphi'_\eta(\eta) < \varphi'_\eta(0)$, так как функция $R(\eta, v, R_0)$ с ростом η убывает.

Таким образом, мы свели задачу (1) и (2) к задаче Колмогорова – Петровского – Пискунова [5]. Используя аналогию с этой задачей, можно утверждать, что в системе кластер – ТД может возбуждаться волна, и спектр возможных скоростей распространения этой волны ограничен снизу значением

$$v_0 = 2\sqrt{D(3\mu\alpha R_0 - \beta)}. \tag{6}$$

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.

Из формулы (6) 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: $R^2 = R_0^2 - 2\alpha\eta/v$. Далее представим $R(\eta)$ в виде разложения $R \approx R_0 - \alpha\eta/vR_0 + ...$ и подставим в уравнение (5). Сохраняя слагаемые порядка α^2, получаем следующее уравнение волны

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

где $\psi = \alpha\eta/vR_0(R_0 - R_*)$.

Точное решение этого уравнения имеет вид

$$\psi(\xi) = [1 + (\sqrt{2} - 1)\exp(-\xi/\delta)]^{-2}. \tag{7}$$

Следовательно, для профиля УКВ получаем

$$n(\xi) = A\exp(-\xi/\delta)[1 + (\sqrt{2} - 1)\exp(-\xi/\delta)]^{-3}, \tag{8}$$

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 солитона.

Для скорости, соответствующей волновому решению (8), имеем

$$v = 5\sqrt{\mu\alpha(R_0 - R_*)D/2}. \tag{9}$$

Из (6) и (9) следует $v = v_0(1 + \epsilon)$, $\epsilon << 1$. Это позволяет утверждать, что формула (8) удовлетворительно описывает профиль волны.

Анализируя (8) и (9), 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.

Заметим, что распространение УКВ возможно также в рамках модели

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -F(R,M)n + \frac{\partial}{\partial x}\left(D(R)\frac{\partial R}{\partial x}\right),$$

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

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 возбуждение солитонов плотности точечных дефектов. Скорость такой нелинейной волны однозначно определяется свойствами самой среды. Это явление носит пороговый характер и имеет место, когда начальный размер кластера в облучаемом кристалле превышает некоторое критическое значение. Критические значения размеров кластеров определяются плотностью центров рекомбинации, модулем упругости, дилатационным объемом образования ТД, а также температурой среды. При значениях параметров, характерных для дефектов вакансионного типа $kT = 0.04\,эВ$, $D = 10^{-6}\,см^2 с^{-1}$, $K\Omega = 5\,эВ$, $N_0 = 10^{14}\,см^{-3}$, $\rho = 10^{10}\,см^{-2}$ для критического радиуса кластера и скорости распространения волны имеем соответственно $R = 3 \cdot 10^{-7}\,см$ и $v = 0.6\,см/с$. Движение УКВ может сопровождаться локальным изменением различных физических свойств среды. Соответствующие процессы достаточно медленные (скорость волны несколько миллиметров в секунду) и могут легко наблюдаться. В сильно ангармонических кристаллах могут возбуждаться солитоны плотности дефектов, распространяющиеся со звуковыми или сверхзвуковыми скоростями.

В заключение отметим, что рассматриваемые в данной работе нелинейные концентрационные волны дефектов во многом похожи на популяционные волны в экологических системах типа ресурс (кластеры) – потребитель (точечные дефекты) [6]. Уединенные концентрационные волны несут информацию о дефектной подсистеме твердых тел и могут быть использованы для ее неразрушающей диагностики.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Бойко В. И., Лукьянчук Б. С., Царев Е. Труды ИОФАН, **30**, 6 (1991).

[2] Мирзоев Ф. Х., Панченко В. Я., Шелепин Л. А. УФН, **165**, N 1, 3 (1996).

[3] Мирзоев Ф. Х., Шелепин Л. А. Письма в ЖТФ, **22**, вып. 13, 28 (1996).

[4] Мирзоев Ф. Х. ЖТФ, **68**, N 8, 73 (1998).

[5] Колмогоров А. Н., Петровский И. Г., Пискунов Н. С. Бюлл. МГУ, Математика и механика, **1**, N 6, 1 (1937).

[6] Гигаури А. А., Свирежев Ю. М. ДАН СССР, **258**, N 5, 1274 (1981).

Поступила в редакцию 22 апреля 1999 г.