Краткие сообщения по физике № 10-1988 г.

УДК 539.2

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ОДНОРОДНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В УСЛОВИЯХ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

М.А. Алиева, В.И. Емельянов, Ф.Х. Мирзоев, Л.А. Шелепин

Предложен новый механизм возникновения зародышей пор в кристаллах при лазерном облучении. Найден критический параметр фазового перехода, его зависимость от температуры кристалла.

Эффект образования вакансионных пор хорошо известен в радиационной физике твердого тела /1, 2/. Большое внимание привлекают процессы образования пор и петель при импульсном лазерном воздействии /3/. Механизм их образования имеет специфические особенности, рассмотрение которых составляет цель настоящей работы.

При возникновении в среде в результате флуктуаций неоднородного поля деформации $\epsilon(\mathbf{r}) = \mathrm{div}\,\mathbf{u}$ ($\mathbf{u}$ – вектор смещения среды) благодаря упругому взаимодействию поля деформации с точечными дефектами появляется сила $F = -\,\mathrm{grad}\,E$, приводящая к дрейфу точечных дефектов и соответственно к их пространственному перераспределению. Энергия взаимодействия $E = -K\Omega_\alpha\,\mathrm{div}\,\mathbf{u}$ /4/, где K – модуль всестороннего сжатия, Ω_α – локальное изменение объема кристалла, вызванное образованием точечного дефекта типа α (для вакансии $\Omega_V \approx -d^3 < 0$, для межузельных атомов $\Omega_i \approx d^3$, d – период решетки). Появляющееся неоднородное распределение точечных дефектов, в свою очередь, служит источником силы, деформирующей решетку и усиливающей таким образом исходные флуктуации деформации. Возникающая в результате положительная обратная связь приводит к неустойчивости и, как следствие, к образованию зародышей пор и петель.

Рассмотрим безграничную упругую изотропную среду, в которой со скоростью Q генерируются точечные дефекты. Динамику изменения во времени и в пространстве плотности точечных дефектов $n_\alpha(\mathbf{r}, t)$ с учетом деформационно-индуцированного дрейфа будем описывать нестационарным уравнением диффузии

$$\partial n_\alpha(\mathbf{r}, t)/\partial t = Q - \mathrm{div}\,\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}, t) - n_\alpha(\mathbf{r}, t)/\tau_\alpha, \tag{1}$$

где Q – эффективная скорость генерации точечных дефектов; слагаемое $\mathrm{div}\,\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ характеризует диффузию; τ_α – время жизни точечных дефектов. Поток $\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}, t)$ определяется следующей формулой:

$$\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}, t) = -D_\alpha\,\mathrm{grad}\,n_\alpha(\mathbf{r}, t) + n_\alpha(\mathbf{r}, t)\,\frac{D_\alpha K\Omega_\alpha}{k_B T}\,\mathrm{grad}\,\epsilon(\mathbf{r}), \tag{2}$$

где D_α – коэффициент диффузии; k_B – постоянная Больцмана; T – температура. В уравнении (1) не учитывается изменение плотности точечных дефектов за счет их взаимной рекомбинации.

Уравнение, описывающее деформацию $\epsilon(\mathbf{r}) = \mathrm{div}\,\mathbf{u}$ упругого континуума, имеет вид:

$$\partial^2\epsilon/\partial t^2 = c^2\Delta\epsilon + c^2\beta\Delta\epsilon^3 + (K|\Omega|/\rho)(\Delta n_V - \Delta n_i). \tag{3}$$

Здесь ρ – плотность среды, c – скорость звука, β – константа ангармонизма.

Уравнения (1)–(3) составляют замкнутую нелинейную систему уравнений, описывающую кинетику накопления точечных дефектов в твердом теле при импульсном лазерном воздействии. Система имеет стационарное пространственно-однородное решение (n^0_α, ϵ_1), определяемое соотношениями: $n^0_\alpha = Q\tau_\alpha$, $\epsilon_0 \equiv \equiv \operatorname{div} \mathbf{u}_0 = 0$. Исследуем это решение на устойчивость. Полагая $n_\alpha = n^0_\alpha + n^1_\alpha$, $\epsilon = \epsilon_0 + \epsilon_1$, $|n^1_\alpha| \ll n^0_\alpha$, $|\epsilon_1| \ll \epsilon_0$ $(n^1_\alpha,\ \epsilon_1 \sim \exp\ (\lambda t + i\mathbf{qr}))$ и линеаризуя полученную систему по малым отклонениям n^1_α и ϵ_1, находим дисперсионное уравнение в предположении адиабатичности поля деформации $(\partial^2 \epsilon_1/\partial t^2 \equiv 0)$:

$$\lambda_{1,2} = -a/2 \pm \sqrt{a^2/4 - b},$$

$$a = q^2 D_V(1 - dn^0_V) + q^2 D_i(1 - dn^0_i) + 1/\tau_V + 1/\tau_i, \tag{4}$$

$$b = [q^2 D_V(1 - dn^0_V) + 1/\tau_V]\,[q^2 D_i(1 - dn^0_i) + 1/\tau_i] - n^0_V n^0_i D_V D_i d^2 q^4, \quad d = K\Omega^2/k_B T.$$

Анализируя (4), заметим, что $\lambda > 0$, если

$$n^0_V > n_c = k_B T/K\Omega^2, \tag{5}$$

$$q^2 > q^2_c = \rho_d k_B T/(K\Omega^2 n^0_V - k_B T), \tag{6}$$

где ρ_d – плотность дислокаций $(\tau_V = 1/\rho_d D_V)$. Отметим, что при получении условий (5), (6) учтены неравенства $D_V \ll D_i$, $n^0_V \gg n^0_i$, соответствующие реальной ситуации.

Физически выполнение условия (5) эквивалентно локальному изменению знака эффективного коэффициента диффузии точечных дефектов. Это означает, что однородное распределение точечных дефектов становится неустойчивым: возникают направленные потоки вакансий и межузельных атомов соответственно в области сжатия и растяжения. Собираясь в областях сжатия и растяжения, точечные дефекты создают пересыщения, необходимые для образования зародышей пор и петель. Неравенство (6) определяет область значений волновых векторов критических флуктуаций, при которых происходит потеря устойчивости однородного распределения точечных дефектов.

Таким образом, при низких значениях плотности точечных дефектов имеет место обычный механизм диффузии, то есть из области повышенной концентрации точечных дефектов в область низкой концентрации. Здесь образование зародышей описывается классической теорией зарождения новой фазы. При достижении некоторого критического значения плотности точечных дефектов n_c, являющегося функцией температуры, дилатационного объема дефекта и модуля всестороннего сжатия, возникает другой канал образования зародышей (пор и петель), связанный с восходящей диффузией точечных дефектов в неоднородном поле деформации. Если воспользоваться характерными значениями $\Omega \sim 3\cdot 10^{-23}$ см^3, $K \sim 5\cdot 10^{11}$ дин/см^2, $\rho_d \sim 10^8$ см$^{-2}$, то при $T = 500$ K имеем: $n_c = 10^{20}$ см$^{-3}$, $q^2_c = 5\cdot 10^7$ см$^{-2}$. Заметим, что величина n_c значительно меньше концентрации атомов, что говорит о практической реализуемости рассмотренного механизма. Для количественного анализа наблюдающихся диссипативных структур из пор и петель следует дополнительно учесть ряд факторов, в частности, границы среды.

Авторы признательны Д.С. Чернавскому за ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мирзоев Ф.Х., Решетняк С.А., Шелепин Л.А. Металлофизика, 8, № 4, 86 (1986).
2. Мирзоев Ф.Х., Фетисов Е.П., Шелепин Л.А. Письма в ЖТФ, 12, № 24, 1489 (1986).
3. Маркевич М.И., Чапланов А.М. Металлофизика, 7, № 3, 100 (1985).
4. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев, Наукова Думка, 1981.

Поступила в редакцию 22 июня 1988 г.