Письма в ЖЭТФ, том 59, вып.7, стр.451 - 454

О ВОЗМОЖНОСТИ ДИФФУЗИОННО-РЕКОМБИНАЦИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ С ДВУМЯ ТИПАМИ ДЕФЕКТОВ

В.Ф.Елесин

Московский инженерно-физический институт
115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 декабря 1993 г.

В условиях диффузионной неустойчивости изучены пространственно неоднородные и нестационарные распределения дефектов, рождаемых стационарным однородным источником и испытывающих взаимную рекомбинацию. Показано, что возможно появление новой неустойчивости, при которой идет непрерывный экспоненциальный рост полного числа дефектов за счет их пространственного перераспределения рекомбинации.

Известно, что в неравновесных системах диффузионный ток возбуждений (дефектов) может иметь направление, противоположное градиенту (восходящая диффузия [1]), что приводит к так называемой диффузионной неустойчивости (см., например, [2]), когда пространственно однородное распределение становится неустойчивым и образуются скопления. Механизмы диффузионной неустойчивости обсуждались в сверхпроводниках (см., например, [2]), в экситонном диэлектрике [3], в системе вакансий и междоузлий [4].

Развитие диффузионной неустойчивости во времени и получающиеся неоднородные структуры теоретически изучены весьма слабо, хотя имеется большой экспериментальный материал, особенно для скоплений радиационных дефектов (см., например, [5]). Анализ данных показывает, что под действием стационарного однородного источника дефекты образуют скопления, структура которых непрерывно меняется со временем.

В настоящей работе на примере системы междоузлий и вакансий изучаются неоднородные стационарные и нестационарные решения кинетических уравнений. Обращается внимание на возможность новой неустойчивости, которая приводит не только к пространственному перераспределению дефектов (как при диффузионной неустойчивости), но и к непрерывному росту их полного числа.

Вначале рассмотрим систему с одним типом дефектов, когда уравнение для концентрации дефектов $n(\mathbf{r},t)$ имеет вид [4]

$$\frac{\partial n}{\partial t} = Q - \alpha n + \operatorname{div}\left[D\frac{\partial n}{\partial r}\left(1 - \frac{\Omega^2 K n}{T}\right)\right], \tag{1}$$

где Q – однородный по пространству источник дефектов, αn – член, описывающий рекомбинацию, D – коэффициент диффузии, K – приведенный модуль всестороннего сжатия, Ω – дилатационный объем, T – температура. Второе слагаемое при производной в (1), приводящее к аномальной диффузии, описывает движение в упругом поле напряжений, возникающих из-за дефектов. Физически это означает, что дефекты, например, междоузлия с $\Omega > 0$, вызывают растяжение решетки в некоторой области (см. [1]), которая является притягательной для дефектов с $\Omega > 0$ и отталкивательной для $\Omega < 0$.

Как было показано ранее автором [4], однородное стационарное решение n_0 уравнения (1) является неустойчивым относительно возмущений:

$$n(\mathrm{r},t) = n_0 + n_1(\mathrm{r},t), \qquad n_0 = Q/\alpha, \qquad n_1 = \tilde{n}\exp(\lambda_\mathrm{q} t + i\mathrm{qr}) \tag{2}$$

при выполнении условий

$$\lambda_\mathrm{q} = -\mathrm{q}^2 D(1 - n/n_c) - \alpha > 0, \qquad n_0 > n_c = T/\Omega^2 K. \tag{3}$$

Для исследования неоднородных состояний (1) перейдем к безразмерной форме и рассмотрим одномерный случай

$$\frac{\partial f(xt)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial f}{\partial x}(1-f)\right] - f + \beta, \qquad \left[\frac{\partial f}{\partial x}(1-f)\right]_{x=\pm 1} = 0\,, \tag{4}$$

где $f = n/n_c$, $\beta = Q/\alpha n_c$, длина и время изменяется в $(D/\alpha)^{1/2}$ и α^{-1}, соответственно; граничное условие в (4) означает обращение тока частиц в нуль на границах образца.

Неоднородное стационарное решение (4) является периодическим (период равен $(24\delta)^{1/2}$), причем поведение на одном периоде описывается функцией

$$f(x) = 1 + \delta - x^2/6, \qquad -1 < x < 1, \qquad \delta = 3/2(\beta - 1) \tag{5}$$

с максимумом (при $x = 0$) и достигающей критического значения 1 на краях. Исследование устойчивости распределения (5) приводит к гипергеометрическому уравнению. Решения в виде гипергеометрической функции $\Gamma(\alpha,\beta,\gamma,x)$, а также $(1-x^2)^{-1}$, $(1+x)^{-1}$, $(1-x)^{-1}$ не нарушают устойчивости (5).

Важно отметить, что при развитии диффузионной неустойчивости полное число частиц не меняется. Действительно, интегрируя (5) по x и используя граничные условия, получаем

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial t} = -\overline{f} + \beta, \qquad \overline{f}(t) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} dx\, f(xt) = \beta + (\tilde{n} - \beta)\exp(-t), \tag{6}$$

то есть концентрация дефектов быстро возвращается к исходной β.

Существенно другое поведение проявляет система с двумя типами дефектов, описываемая следующими уравнениями для междоузлий $f_i(xt)$ [4]:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial f_i}{\partial x}(1-f_i) + f_i\frac{\partial f_v}{\partial x}\right] - f_i f_v + \beta, \qquad \left[\frac{\partial f_i}{\partial x}(1-f_i) + f_i\frac{\partial f_v}{\partial x}\right]_{x=0;1} = 0 \tag{7}$$

и вакансий $f_v(x,t)$ с заменой $i \rightleftarrows v$. Для простоты все параметры вакансий и междоузлий предполагаются одинаковыми.

Согласно [4] однородное решение (7) $f_i = f_v = f_0 = \sqrt{\beta}$ неустойчиво, если

$$2f_0 - 1 > 0. \tag{8}$$

Отметим, что в (8) выпадает вклад рекомбинации и вдвое (по сравнению с (3)) уменьшается критическая концентрация. Эти обстоятельства, связанные с противофазностью растущих возмущений вакансий и междоузлий, играют определяющую роль в диффузионно-рекомбинационной неустойчивости.

Прежде всего отметим отсутствие стационарного неоднородного решения системы (7). Действительно, вычитая из первого уравнения (7) второе, получим соотношение $\partial f_i/\partial x = \partial f_v/\partial x$, приводящее к исчезновению аномального диффузионного вклада и, следовательно, неоднородных решений с однородным источником. Точные решения системы (7) получить вряд ли возможно, и мы, используя теорию возмущений, будем искать их в виде функций

$$f_{i,v}(x,t) = f_0 + \sum_{k=1} f_{i,v}^{(k)}(x,t); \qquad f_{i,v}^{(k)}(x,0) = 0, \qquad k \geq 2,$$

$$f_{i,v}^{(1)}(x,0) = \pm \tilde{f} \cos \pi x, \qquad \tilde{f} \ll 1, \qquad f_{i,v}^{(k)} \ll f_0 = \sqrt{\beta}, \tag{9}$$

удовлетворяющих системе (7) на отрезке $0 < x < 1$. Выбор $f_i^{(1)}(x,0) = -f_v^{(1)}(x,0)$ связан с тем, что неустойчивость возникает только при противофазности.

Ввиду громоздкости мы не приводим полученные вплоть до $k = 5$ решения, а только опишем их структуру и дадим выражения для полного числа частиц, содержащие основной результат. Функции $f^{(k)}(xt)$ представляют собой растущие во времени гармоники $\cos(k\pi x)\exp(k\lambda t)$ $(\lambda = \pi^2(2f_0 - 1))$, причем гармоники с нечетными k находятся в противофазе ($f_i^{2n+1} = -f_v^{2n+1}$), а с четными – в фазе $(f_i^{2n} = +f_v^{2n},\ \ n = 0, 1 \ldots)$.

Если обозначить

$$a_k(t) = \int_0^1 [f_i^{(k)}(xt) + f_v^{(k)}(xt)]dx,$$

то скорость изменения полного числа частиц в системе может быть представлена в виде

$$\frac{da}{dt} = \frac{d}{dt}\int_0^1 [f_i + f_v]dx = 2\beta - 2\int_0^1 f_i f_v dx = \sum_{k=1} \frac{da_k}{dt}. \tag{10}$$

В пространственно однородном случае $da/dt = 0$, так как $f_i = f_v = f_0 = \beta^{1/2}$. Найдем da/dt после начала неустойчивости при $t > 0$. Подставляя (9) в (7) и интегрируя по координате, получаем уравнения для $a_k(t)$:

$$\frac{da_1}{dt} = -2f_0 a_1, \qquad \frac{da_3}{dt} = -2f_0 a_3,$$

$$\frac{da_2}{dt} = -2f_0 a_2 - \int_0^1 f_i^{(1)} f_v^{(1)} dx, \qquad a_k(0) = 0,$$

$$\frac{da_4}{dt} = -2f_0 a_4 - \int_0^1 dx[f_i^{(2)} f_v^{(2)} + f_i^{(1)} f_v^{(3)} + f_v^{(1)} f_i^{(3)}]. \tag{11}$$

Решения (11) найдены точно. Мы приведем их для случая большого превышения над порогом:

$$a_1 = a_3 = a_5 = 0,$$

$$a_2(t) = \frac{\tilde{f}^2}{4(\lambda + f_0)}[\exp(2\lambda t) - \exp(-2f_0 t)],$$

$$a_4(t) = \frac{\pi^2 \tilde{f}^4}{2(2\lambda + f_0)(\lambda + f_0 + 2\pi^2)}[\exp(4\lambda t) - \exp(-2f_0 t)]. \qquad (12)$$

Следует ожидать, что результаты (12) качественно справедливы для всех k.

Используя (12), из (10) находим, опуская члены $\sim \exp(-2f_0 t)$

$$\frac{da}{dt} \simeq \tilde{f}^2 \exp(2\lambda t)\left[\frac{\lambda}{2(\lambda + f_0)} + \frac{\tilde{f}^2 \exp(2\lambda t) 2\pi^2 \lambda}{(2\lambda + f_0)(\lambda + f_0 + 2\pi^2)}\right]. \qquad (13)$$

Из (13) видно, что полное число частиц экспоненциально растет со временем. Такое поведение нельзя объяснить только диффузионной неустойчивостью, так как для одного сорта частиц (см. (6)) нарастания числа частиц не происходит. Следовательно, причиной являются процессы разделения вакансий и междоузлий в разные области и уменьшения из-за этого взаимной рекомбинации, что в свою очередь приводит к росту числа частиц при стационарном источнике β. Следует отметить, что (13) справедливо для промежутка времени, удовлетворяющего, согласно (9), неравенству $\tilde{f}^2 \exp(2\lambda t) < \beta$. Имея в виду, что $\tilde{f}$ мало, а $\beta \sim 1$, формула (13) применима для

$$(2\lambda)^{-1} \ll t < (2\lambda)^{-1} \ln \beta / \tilde{f}^2.$$

Таким образом, неустойчивость, которую можно назвать диффузионно-рекомбинационной, позволяет качественно объяснить наблюдаемое на эксперименте непрерывное изменение структуры и рост числа радиационных дефектов.

Автор благодарен Ю.В.Копаеву и В.В.Кирсанову за полезное обсуждение работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных иссследований в рамках проекта (93-02-14220).

1. А.М.Косевич. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка, 1981, с.327.
2. В.Ф.Елесин, Ю.В.Копаев, УФН **133**, 259 (1981).
3. В.Ф.Елесин, ФТТ **21**, 108 (1980).
4. В.Ф.Елесин, ДАН **298**, 1377 (1988).
5. М.Киритани. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений **1**(29), 74 (1984).