

01;05.3;07

©1993

ВОЗДЕЙСТВИЕ СВЕТОВОГО ПОТОКА НА ПОГЛОЩАЮЩИЙ ЗАРОДЫШ НОВОЙ ФАЗЫ В ПРОЗРАЧНОЙ СРЕДЕ

Э.М.Энштейн

В настоящей работе рассматривается влияние светового потока на эволюцию зародыша новой фазы. При этом предполагается, что зародыш поглощает некоторую часть падающего на него светового потока, а окружающая среда прозрачна. Такую ситуацию можно создать, например, в случае кристаллизации $a - \text{Si} : \text{H}$, так как оптическая ширина запрещенной зоны этого материала существенно превышает ширину запрещенной зоны кристаллического Si и растет по мере увеличения содержания водорода [1]. Поскольку критический размер зародыша зависит от температуры, а температура зародыша, нагреваемого световым потоком, зависит от его размера (сечения поглощения), присутствие светового потока, как будет показано ниже, существенным образом модифицирует эволюцию зародыша.

В общем случае рассматриваемая система неравновесна и понятие критического размера зародыша, определяемого из условия экстремума свободной энергии, к ней неприменимо. Возможно, однако, квазиравновесная ситуация, когда состояние зародыша описывается свободной энергией, зависящей от температуры зародыша, определяемой его размером и величиной светового потока. Будем считать, что процессы теплопроводности протекают гораздо быстрее диффузионных процессов, определяющих изменение размера зародыша. Для этого температуропроводность среды a и коэффициент самодиффузии D должны удовлетворять условию $D/a \ll \delta/R_0$, где δ — характерная длина диффузионного скачка (порядка постоянной решетки), R_0 — критический радиус зародыша в отсутствие светового потока (см. ниже); для конденсированных сред это условие обычно выполняется. Тогда в каждый момент времени распределение температуры в системе можно считать стационарным, соответствующим размеру зародыша в данный момент, т.е. процесс установления температуры успевает следить за процессом роста (или уменьшения) зародыша. Предположим также, что теплопроводность вещества зародыша K_0 существенно больше теплопроводности окружающей среды K (в случае кристаллизации аморфной фазы это условие обычно выполняется), тогда температура внутри зародыша выравнивается за время установления стационарного распределения температуры, и весь зародыш характеризуется одной-единственной температурой T . При сделанных предположениях поведение зародыша описывается свободной энергией, отличающейся от равновесной [2] тем, что температура зародыша $T = T(R, W)$ зависит от его радиуса R (зародыш, как обычно, предполагается сферическим) и плотности

светового потока W :

$$F(R, W) = 4\pi\gamma R^2 - \frac{4}{3}\pi R^3 Q \left[1 - \frac{T(R, W)}{T_c} \right]. \quad (1)$$

Здесь γ — поверхностное натяжение на границе фаз, Q — теплота фазового перехода в расчете на единицу объема, T_c — точка фазового перехода; свободная энергия отсчитывается от значения, соответствующего $R = 0$.

Из условия баланса энергии легко найти стационарную температуру нагреваемого светом зародыша:

$$T(R, W) = T_0 + \frac{W\sigma(R)}{4\pi K R}, \quad (2)$$

где T_0 — температура окружающей среды в отсутствие светового потока, $\sigma(R)$ — эффективное сечение поглощения света зародышем. Формулу (2) можно также получить, переходя к пределу $t \rightarrow \infty$ в решении соответствующей нестационарной задачи [3].

Явный вид зависимости $\sigma(R)$ определяется соотношением между радиусом зародыша R , длиной волны света λ и коэффициентом поглощения света в веществе зародыша α . В случае малого зародыша ($R \ll \lambda$, $\alpha R \ll 1$), показатель преломления которого мало отличается от показателя преломления окружающей среды, имеем [4]:

$$\sigma(R) = \frac{4}{3}\pi\alpha R^3. \quad (3)$$

Подстановка (2) и (3) в (1) дает для свободной энергии

$$F(R, W) = \frac{8\pi\gamma}{R_0} \left(\frac{1}{2}R_0 R^2 - \frac{1}{3}R^3 + \frac{1}{5}\beta R^5 \right), \quad (4)$$

где $R_0 = 2\gamma T_c / Q(T_c - T_0)$ — критический радиус зародыша в отсутствие светового потока [2], $\beta = 5\alpha W / 9K(T_c - T_0)$.

В отсутствие светового потока ($\beta = 0$) функция $F(R, 0)$, как известно, имеет максимум, соответствующий критическому размеру зародыша R_0 . При $\beta \neq 0$ присутствие в (4) положительного слагаемого, пропорционального R^5 , приводит к возможности появления у функции $F(R, W)$ также и минимума (при не слишком больших β), что соответствует устойчивому равновесию. При малых $\beta \neq 0$ этому минимуму соответствует отрицательное значение свободной энергии, т.е. соответствующее состояние выгоднее, чем однородное состояние без зародышей ($R = 0$). Таким образом, освещаемая система с поглощающими зародышами в прозрачной среде имеет тенденцию становиться монодисперсной. Стационарный размер зародыша определяется бóльшим из положительных корней (R_+) кубического уравнения

$$\beta R^3 - R + R_0 = 0. \quad (5)$$

Положительные корни этого уравнения имеют вид

$$R_{\pm} = \frac{2}{\sqrt{3\beta}} \cos \left[\frac{\pi}{3} \mp \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{3}{2} R_0 \sqrt{3\beta} \right) \right]; \quad (6)$$

непосредственно из уравнения (5) следует $R_{\pm} > R_0$.

При $\beta > 80/729r_0^2 \equiv \beta_1$ (значению $\beta = \beta_1$ соответствует $R_+(\beta_1) = 9R_0/4$, $R_-(\beta_1) = 9(\sqrt{105} - 5)R_0/40$) $F(R_+) > 0$, т.е. состояние устойчивого равновесия становится метастабильным. Наконец, при $\beta = 4/27R_0^2 \equiv \beta_2$ максимум и минимум функции $F(R)$ в области $R > 0$, сливаются в точку перегиба (при этом $R_+(\beta_2) = R_-(\beta_2) = 3R_0/2$), и при $\beta > \beta_2$ функция $F(R)$ монотонно возрастает. Это означает, что при $\beta > \beta_2$ зародыш любого размера, возникший флуктуационным путем, должен исчезнуть, т.е. фазовый переход путем гомогенного зародышеобразования невозможен. Это явление имеет простое объяснение. Увеличение размеров поглощающего зародыша сопровождается повышением его (стационарной) температуры и, следовательно, уменьшением степени переохлаждения. При достаточно большом значении светового потока ($\beta > \beta_2$) последний фактор становится доминирующим и увеличение размера зародыша становится невыгодным ни при каких значениях R .

Изложенные результаты имеют смысл лишь при условии, что температура зародыша вплоть до достижения им стационарного размера не превышает температуры фазового перехода T_c (в случае кристаллизации аморфной фазы — точки плавления). Легко убедиться, что это условие выполняется. Действительно, из (2), (3) и (5) следует $T_+ \equiv T(R_+) = T_0 + (3/5)(1 - R_0/R_+)(T_c - T_0)$, так что $T_+ - T_0 < (3/5)(T_c - T_0)$. В частности, температура, соответствующая исчезновению состояния устойчивого равновесия с $R \neq 0$, равна

$$T(\beta_2) = T_0 + \frac{1}{5}(T_c - T_0). \quad (7)$$

Таким образом, мощность светового потока, необходимая для реализации обсуждаемого эффекта, имеет тот же порядок величины, что и в процессах фототермического (в частности, лазерного) отжига.

Список литературы

- [1] Меден А., Шо М. Физика и применение аморфных полупроводников. М.: Мир, 1991. 672 с.
- [2] Вайнгард У. Введение в физику кристаллизации металлов. М.: Мир, 1967. 160 с.
- [3] Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 488 с.
- [4] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: ГИТТЛ, 1957. 532 с.

Поступило в Редакцию
20 апреля 1993 г.