

Сглаживание макрорельефа на поверхности твердого тела произвольного стехиометрического состава под облучением

© В.В. Слёзов, В.М. Апальков, Ю.И. Бойко*, Х.Д. Карстаньен**

Харьковский физико-технический институт,
310108 Харьков, Украина

* Харьковский государственный университет,
310108 Харьков, Украина

** Институт металловедения им.М.Планка, Штуттгарт, Германия

(Поступила в Редакцию 28 августа 1996 г.)

Сформулирована общая система уравнений, описывающая эволюцию макрорельефа на поверхности твердого тела произвольного стехиометрического состава под облучением. Облучение рассматривается только как дополнительный источник точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов). С учетом реальных условий задачи получена общая формула для сглаживания макрорельефа во времени. Как частный случай рассмотрено двухкомпонентное вещество: по сравнению с однокомпонентным материалом появляются новые виды зависимости скорости сглаживания поверхности от параметров шероховатости. Исследуя экспериментально скорость сглаживания поверхности как функцию шероховатости, можно найти коэффициенты поверхностной и объемной диффузии материала, а также константы, характеризующие взаимодействие облучения с веществом.

Физической причиной сглаживания макрорельефа на поверхности твердого тела является различие в равновесной концентрации точечных дефектов на выпуклостях и вогнутостях поверхности, что приводит к необходимости перераспределения точечных дефектов до термодинамически равновесного состояния, соответствующего плоской поверхности. Задача сглаживания макрорельефа на поверхности под влиянием указанной выше причины была рассмотрена в теоретической работе [1], а также апробирована экспериментально в [2]. В работе [3] рассмотрена задача, в которой сглаживание поверхности инициируется не только кривизной рельефа, но и наличием источников вакансий и межузельных атомов. Такая ситуация возникает при различных типах облучения поверхности твердого тела. В результате облучения образуются точечные дефекты, которые вносят дополнительный вклад в процесс сглаживания.

В указанных выше теоретических работах [1,3] был рассмотрен только случай однокомпонентного вещества (металла). Поэтому обобщение результатов, полученных в [1,3], на твердые тела произвольного стехиометрического состава является важным аспектом проблемы сглаживания неровностей на поверхности материала. Рассмотрению этой задачи посвящена настоящая работа.

1. Основная система уравнений: вакансии

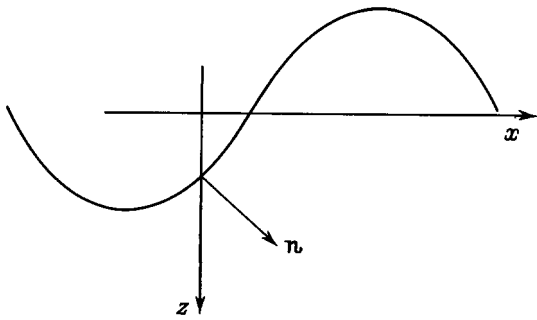
Основная система уравнений [3,4], описывающая сглаживание макрорельефа на поверхности однокомпонентного твердого тела, легко обобщается на случай многокомпонентного вещества путем введения нескольких типов точечных дефектов. Сначала рассмотрим влияние вакансий на процесс сглаживания. Для этого вводим объемную концентрацию c_i и поверхностную концентрацию u_i вакансий сорта i . Концентрации нормированы на один

узел решетки.¹ Система уравнений, описывающая эволюцию поверхности образца вследствие диффузионных потоков, с учетом наличия источников вакансий имеет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} = D_{S,i} \Delta_S u_i - \nu_i \mu \left(\prod_{j=1}^N u_j^{\nu_j} - \mathbf{K}_K \right) + \frac{D_{V,i}}{a} \left. \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} \right|_{z=f(x,y,t)}, \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} = D_{V,i} \Delta c_i + I_i(x, y, z, t), \quad i = 1, \dots, N, \\ \left. \frac{\partial z}{\partial t} \right|_{x=f(x,y,t)} = a \mu \left(\prod_{j=1}^N u_j^{\nu_j} - \mathbf{K}_K \right) \cos(\mathbf{n}, z), \end{cases} \quad (1)$$

где i нумерует разные типы вакансий, N — их полное число, μ — постоянная, представляющая собой скорость образования молекулы на поверхности вещества в единицу времени на один узел решетки, ν_i — стехиометрические коэффициенты соединения, \mathbf{K}_K — постоянная, характеризующая равновесие на поверхности с кривизной K , $\mathbf{K}_K = \mathbf{K}_0 + \mathbf{K}_0 \gamma_S \Omega K / kT$, \mathbf{K}_0 — постоянная, характеризующая равновесие на плоской поверхности, γ_S — коэффициент поверхностного натяжения, $\Omega = a^3$, T — температура образца, $D_{V,i}$, $D_{S,i}$ — объемный и поверхностный коэффициенты диффузии вакансий сорта i , $I_i(z, y, z, t)$ — источник вакансий сорта i , i — число вакансий, генерируемых в единицу времени в расчете на один узел решетки. Ось z направлена в глубь образца; $z = f(x, y, t)$ — уравнение поверхности в момент времени t , \mathbf{n} — нормаль к поверхности, направленная в глубь образца, $\cos(\mathbf{n}, z) > 0$ (см. рисунок).

¹ $\frac{c_i}{a^3} = n_{i,V}$, $\frac{u_i}{a^2} = n_{i,S}$, $n_{i,V}$ и $n_{i,S}$ — соответственно объемная и поверхностная плотность вакансий сорта i , a — параметр решетки.



Ориентация координатных осей. Ось z направлена в глубь образца, нормаль \mathbf{n} к поверхности образца составляет острый угол с осью z .

Граничные условия к системе (1) имеют вид

$$D_{V,i} \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{z=f(x,y,t)} = \left(\frac{\beta_i D_{V,i}}{a} c_i - \frac{a}{\tau_{S,i}} u_i \right) \Big|_{z=f(x,y,t)}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

где $\beta_i D_{V,i} = D'_i$ (D'_i — определяет последний перескок при выходе вакансии сорта i из объема на свободную поверхность, β_i — безразмерный коэффициент, учитывающий наличие потенциального барьера при выходе вакансии на поверхность образца ($0 < \beta_i \leq 1$)), $\tau_{S,i}$ — время ухода вакансии в объем.

Начальные условия для системы (1), (2) записываем в виде

$$\begin{cases} \prod_i u_j^{v_j}(x, y, f(x, y, 0), t = 0) = \mathbf{K}_K^{(0)}(x, y), \\ f(x, y, t = 0) = f^{(0)}(x, y), \\ D_{V,i} \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{z=f(x,y,0)} = \left(\beta_i \frac{D_{V,i}}{a} c_i - \frac{a}{\tau_{S,i}} u_i \right) \Big|_{z=f(x,y,0)}, \\ c_i(x, y, z, t) \Big|_{t=0} = c_{i,0}, \quad z > f(x, y, 0). \end{cases} \quad (3)$$

Отметим следующее соотношение, вытекающее из (2) для системы без облучения ($I_i = 0$): при равновесии, т.е. для плоской поверхности образца, концентрация вакансий в объеме постоянна: $\partial c_i / \partial \mathbf{n} = 0$. Тогда из (2) следует условие

$$\frac{u_{i,0}}{c_{i,0}} = \beta_i \frac{D_{V,i} \tau_{S,i}}{a^2}, \quad (4)$$

где $u_{i,0}, c_{i,0}$ — равновесные концентрации вакансий сорта i , соответствующие плоской поверхности.

При реальных временах эксперимента $t \gg \tau_{\max} = \max(\lambda^2 / D_{S,i}, l_i^2 / D_{V,i}) \sim 10^2$ s (где l_i — характерная глубина залегания источника вакансий сорта i , λ — расстояние между эквивалентными неровностями на поверхности) и при достаточно большом характерном времени изменения неровностей на поверхности образца $(f/\dot{f}) \gg \tau_{\max}$ (что выполняется в реальных условиях,

так как $(f/\dot{f}) \sim 10^5$ s [2]) можно пренебречь временными производными ($\frac{\partial c_i}{\partial t} \approx \frac{\partial u_i}{\partial t} \approx 0$), и мы получаем квазистационарное состояние с точностью до членов порядка $\sim \tau_{\max}/t$, причем глубина, до которой решение можно считать стационарным, определяется условием $z \ll \sqrt{D_V t}$,

$$\begin{cases} D_{S,i} \Delta_S u_i - \nu_i \mu \left(\prod_{j=1}^N u_j^{v_j} - \mathbf{K}_K \right) + \frac{D_{V,i}}{a} \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{z=f(x,y,t)} = 0, \\ D_{V,i} \Delta c_i + I_i(x, y, z, t) = 0, \\ \frac{\partial z}{\partial t} \Big|_{z=f(x,y,t)} = a \mu \left(\prod_{j=1}^N u_j^{v_j} - \mathbf{K}_K \right) \cos(\mathbf{n}, z), \\ i = 1, \dots, N, \\ D_{V,i} \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{z=f(x,y,t)} = \left(\frac{\beta_i D_{V,i}}{c} c_i - \frac{a}{\tau_{S,i}} u_i \right) \Big|_{z=f(x,y,t)}. \end{cases} \quad (5)$$

На этапе квазистационарности время t является параметром. Другими словами, мы должны определить вначале квазистационарные потоки при данной форме рельефа поверхности, а затем, зная эти потоки, определить замкнутое уравнение, определяющее изменение во времени самой поверхности.

2. Решение основной системы уравнений: вакансии

Форму поверхности возьмем в виде

$$f(x, t) = \sum_n z_n(t) e^{-in\omega x}, \quad \omega = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad z_n \ll \lambda, \quad (6)$$

тогда решение системы уравнений (5) можно представить в виде соответствующего ряда Фурье

$$c_i(x, z) \Big|_{z=f(x,t)} = c_{i,0} + \sum_{n \neq 0} c_{i,n}(t) e^{-in\omega x},$$

$$u_i(x, t) = u_{i,0} + \sum_{n \neq 0} u_{i,n}(t) e^{-in\omega x}, \quad i = 1, \dots, N,$$

$$\frac{\partial c_i(x, z)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{z=f(x,t)} = \sum_{n \neq 0} \eta_{i,n}(t) e^{-in\omega x}. \quad (7)$$

При форме поверхности (6) решение системы (5) не будет зависеть от y , поэтому переменную y в дальнейшем будем опускать.

Отличие концентрации u_i от равновесного значения $u_{i,0}$, соответствующего плоской поверхности, мало в силу малости кривизны поверхности, т.е. в силу малости (z_n/λ) . Тогда произведение $\prod u_j^{v_j}$ в уравнениях системы (5) с точностью до первого ненулевого порядка по

(z_n/λ) принимает вид

$$\prod_j^N u_j^{\nu_j} = \prod_j^N \left(u_{j,0} + \sum_n u_{j,n} e^{-in\omega x} \right)^{\nu_j} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{K}_0 \sum_i \frac{\nu_i}{u_{i,0}} \sum_n u_{i,n} e^{-in\omega x}, \quad (8)$$

где $\mathbf{K}_0 = \prod u_{j,0}^{\nu_j}$.

Рассмотрим случай дельтообразного источника точечных дефектов (вакансий), что соответствует облучению твердого тела ионами

$$I_i(x, z, t) = I_{i,0} \Omega \delta(z - f(x, t) - l_i), \quad (9)$$

где $I_{i,0}$ — число вакансий сорта i , выходящих на единицу площади поверхности за единицу времени.

Для получения дополнительного выражения, связывающего $c_{i,n}$ и $\eta_{i,n}$, необходимо решить второе уравнение системы (5) с граничным условием $c_i|_{z=f(x,t)} = c_{i,0} + \sum c_{i,n} \exp(-in\omega x)$ и дельтообразной формой источника (9)

$$\begin{cases} D_{V,i} \Delta c_i(x, z, t) + I_{i,0} \Omega \delta(z - f(x, t) - l_i) = 0, \\ c_i(x, z = f(x, t), t) = c_{i,0} + \sum_n c_{i,n} e^{-in\omega x}. \end{cases} \quad (10)$$

Для решения уравнения (10) удобно ввести новую функцию V_i и сделать замену переменных

$$c_i(x, z, t) = V_i(\hat{x}, \hat{z}, t) + c_{i,0} + \sum_n c_{i,n} e^{-in\omega x},$$

$$\hat{x} = x, \quad \hat{z} = z - f(x, t), \quad (11)$$

после чего получаем дифференциальное уравнение для V_i с нулевым граничным условием на плоской поверхности

$$\begin{cases} \Delta V_i - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{i,\hat{z}} - 2f_{\hat{x}} V_{i,\hat{x}\hat{z}} \\ = \sum_n c_{i,n} n^2 \omega^2 e^{-in\omega x} - \frac{I_{i,0} \Omega}{D_{V,i}} \delta(\hat{z} - l_i), \\ V_i(\hat{x}, \hat{z} = 0) = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь φ_x означает частную производную от φ по x : $\varphi_x = \partial\varphi/\partial x$, а $\varphi_{xx} = \partial^2\varphi/\partial x^2$.

С точностью до второго порядка по (z_n/λ) решение уравнения (12) имеет вид [3]

$$V_i(\hat{x}, \hat{z}, t) = \frac{I_{i,0} \Omega}{D_{V,i}} \begin{cases} \hat{z} - \sum_n z_n(t) e^{-in\omega \hat{x}} [e^{-n\omega \hat{z}} - 1 + e^{-n\omega l_i} \text{sh}(n\omega \hat{z})], \\ l_i > \hat{z} > 0, \\ \times \begin{cases} l_i - \sum_n z_n(t) e^{-in\omega \hat{x}} [1 - \text{ch}(n\omega l_i)] e^{-n\omega \hat{z}}, \\ \hat{z} > l_i. \end{cases} \end{cases} \quad (13)$$

Тогда, используя (13) и (11), из третьего уравнения системы (7) находим соотношение между $c_{i,n}$ и $\eta_{i,n}$

$$\eta_{i,n}(t) = -c_{i,n}(t) n\omega + \frac{I_{i,0} \Omega}{D_{V,i}} n\omega z_n(t) [1 - e^{-n\omega l_i}], \quad n \neq 0. \quad (14)$$

Подставляя (7) и (8) в (5) и учитывая соотношение (14), получаем систему уравнений

$$\begin{cases} \eta_{i,n} = -c_{i,n} n\omega + \frac{I_{i,0} \Omega}{D_{V,i}} z_n(t) n\omega (1 - e^{-n\omega l_i}), \\ D_{V,i} \eta_{i,n}(t) = \frac{\beta_i D_{V,i}}{a} c_{i,n}(t) - \frac{a}{\tau_{S,i}} u_{i,n}(t), \\ \mu \left(\mathbf{K}_0 \sum_j \nu_j \frac{u_{j,n}(t)}{u_{j,0}} - \frac{\gamma_S \Omega}{kT} \mathbf{K}_0 z_n(t) \omega^2 n^2 \right) \\ = \frac{1}{\nu_1} \left(\frac{D_{V,1}}{a} \eta_{1,n}(t) - D_{S,1} u_{1,n}(t) \omega^2 n^2 \right), \\ \frac{dz_n(t)}{dt} = \frac{a}{\nu_i} \left(\frac{D_{V,i}}{a} \eta_{i,n}(t) - \omega^2 n^2 D_{S,i} u_{i,n}(t) \right) \\ = \frac{a}{\nu_1} \left(\frac{D_{V,1}}{a} \eta_{1,n}(t) - \omega^2 n^2 D_{S,1} u_{1,n}(t) \right), \end{cases} \quad (15)$$

где использовано выражение для кривизны поверхности $K \approx -\partial^2 f / \partial x^2 = \sum_n z_n n^2 \omega^2 \exp(-in\omega x)$ [5]. В третьем и четвертом уравнениях системы (15) выражения, стоящие в правой части, одинаковы для всех i , поэтому мы взяли $i = 1$.

Из первого и второго уравнений системы (15) получаем

$$\eta_{i,n}(t) = -u_{i,n}(t) \frac{a^2 n\omega}{D_{V,i} \tau_{S,i} (\beta_i + a n\omega)} + \frac{I_{i,0} \Omega}{D_{V,i}} z_n(t) \times n\omega (1 - e^{-n\omega l_i}) \left(1 - \frac{a n\omega}{\beta_i + a n\omega} \right). \quad (16)$$

Подставляя (16) в последнее уравнение системы (15), находим выражение для $u_{i,n}$ через $u_{1,n}$ и, решая оставшиеся уравнения относительно $u_{1,n}$ и $z_n(t)$, получаем уравнение, описывающее сглаживание макрорельефа на поверхности твердого тела при дельтообразной форме источников вакансий,

$$\ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)} = -(Q_{1,n} + Q_{2,n}) t, \quad (17)$$

$$Q_{1,n} = \mathbf{K}_0 \frac{\gamma_S \Omega}{kT} \times \frac{\omega^2 n^2 a}{\mu^{-1} + \mathbf{K}_0 \sum_j \nu_j^2 u_{0,j}^{-1} [\tau_{\lambda,j}^{-1} n^2 + \tau_{S,j}^{-1} (1 + \beta_j / na\omega)^{-1}]^{-1}},$$

$$Q_{2,n} = \frac{\mathbf{K}_0 \sum_j \nu_j u_{0,j}^{-1} I_{j,0} l_j \Omega n^2 \omega^2 [\tau_{\lambda,j}^{-1} n^2 (1 + na\omega / \beta_j) + \tau_{S,j}^{-1} (na\omega / \beta_j)]^{-1}}{\mu^{-1} + \mathbf{K}_0 \sum_j \nu_j^2 u_{0,j}^{-1} [\tau_{\lambda,j}^{-1} n^2 + \tau_{S,j}^{-1} (1 + \beta_j / na\omega)^{-1}]^{-1}}, \quad (18)$$

где $\tau_{\lambda,j} = 1/(\omega^2 D_{S,j})$ и использовано условие $n\omega l_j \ll 1$, которое выполнимо для реальных систем, так как $l_j \ll \lambda$ и экспериментально исследуются гармоники с малыми n ($n \sim 1$). Из (17) видно, что дополнительный источник вакансий, как и для однокомпонентного вещества, замедляет сглаживание поверхности ($Q_{2,n} < 0$) [3].

3. Основная система уравнений и ее решение: межузельные атомы

Теперь учтем тот факт, что при облучении образца кроме вакансий создаются и межузельные атомы, потоки которых также могут привести к изменению формы поверхности. Система уравнений (5) для межузельных атомов имеет вид

$$\begin{cases} D_{S,i,\text{In}} \Delta S u_{i,\text{In}} - \nu_i \mu \left(\prod_{j=1}^N u_{j,\text{In}}^{\nu_j} - \mathbf{K}_{K,\text{In}} \right) + \frac{D_{V,i,\text{In}}}{a} \frac{\partial c_{i,\text{In}}}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{z=f(x,y,t)} = 0, \\ D_{V,i,\text{In}} \Delta c_{i,\text{In}} + I_{i,\text{In}}(x, y, z, t) = 0, \\ \frac{\partial z}{\partial t} \Big|_{z=f(x,y,t)} = -a \mu \left(\prod_{j=1}^N u_{j,\text{In}}^{\nu_j} - \mathbf{K}_{K,\text{In}} \right) \cos(\mathbf{n}, z), \\ i = 1, \dots, N, \\ D_{V,i,\text{In}} \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{z=f(x,y,t)} = \left(\frac{\beta_{i,\text{In}} D_{V,i,\text{In}}}{a} c_{i,\text{In}} - \frac{a}{\tau_{S,i,\text{In}}} u_{i,\text{In}} \right) \Big|_{z=f(x,y,t)}, \end{cases} \quad (19)$$

где величины с индексом In относятся к межузельным атомам. Основное отличие системы (19) от системы (5) состоит в наличии знака – в третьем уравнении системы (19). Поэтому решение системы (19) будет иметь вид (17), но с положительным $Q_{2,n,\text{In}}$. Для межузельных атомов равновесные концентрации $c_{0,i,\text{In}}$ на несколько порядков меньше соответствующих концентраций для вакансий, поэтому в решении (17) для межузельных атомов будем учитывать только вклад, связанный с облучением образца (т.е. будем считать, что $Q_{1,n,\text{In}} = 0$),

$$\ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)} = -Q_{2,n,\text{In}} t, \quad (20)$$

$$Q_{2,n,\text{In}} =$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{K}_{0,\text{In}} \sum_j \nu_j u_{0,j,\text{In}}^{-1} I_{j,0} l_{j,\text{In}} \Omega n^2 \omega^2 \times \\ & \frac{\times \left[\tau_{\lambda,j,\text{In}}^{-1} n^2 (1 + n a \omega / \beta_{j,\text{In}}) + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (n a \omega / \beta_{j,\text{In}}) \right]^{-1}}{\mu^{-1} + \mathbf{K}_{0,\text{In}} \sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{In}}^{-1} \times} \\ & \times \left[\tau_{\lambda,j,\text{In}}^{-1} n^2 + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (1 + \beta_{j,\text{In}} / n a \omega)^{-1} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (21)$$

Суммируя (17) и (20), находим полное выражение для скорости сглаживания макрорельефа на поверхности с учетом температурного фактора и облучения

$$\ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)} = - (Q_{1,n} + Q_{2,n}) t, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} Q_{1,n} &= \mathbf{K}_{0,\text{Vac}} \frac{\gamma_S \Omega}{kT} \\ & \times \frac{\omega^2 n^2 a}{\mu^{-1} + \mathbf{K}_{0,\text{Vac}} \sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} \left[\tau_{\lambda,j,\text{Vac}}^{-1} n^2 + \right.} \\ & \left. + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (1 + \beta_{j,\text{Vac}} / n a \omega)^{-1} \right]^{-1}} \end{aligned} \quad (23)$$

$$Q_{2,n} =$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{K}_{0,\text{In}} \sum_j \nu_j u_{0,j,\text{In}}^{-1} I_{j,0} l_{j,\text{In}} \Omega n^2 \omega^2 \\ & \times \left[\tau_{\lambda,j,\text{In}}^{-1} n^2 (1 + n a \omega / \beta_{j,\text{In}}) + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (n a \omega / \beta_{j,\text{In}}) \right]^{-1} \\ & \frac{\times \left[\tau_{\lambda,j,\text{In}}^{-1} n^2 + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (1 + \beta_{j,\text{In}} / n a \omega)^{-1} \right]^{-1}}{\mu^{-1} + \mathbf{K}_{0,\text{In}} \sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{In}}^{-1} \times} \\ & \times \left[\tau_{\lambda,j,\text{In}}^{-1} n^2 + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (1 + \beta_{j,\text{In}} / n a \omega)^{-1} \right]^{-1} \\ & - \frac{\mathbf{K}_{0,\text{Vac}} \sum_j \nu_j u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} I_{j,0} l_{j,\text{Vac}} \Omega n^2 \omega^2 \left[\tau_{\lambda,j,\text{Vac}}^{-1} n^2 \times \right.} \\ & \left. \times (1 + n a \omega / \beta_{j,\text{Vac}}) + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (n a \omega / \beta_{j,\text{Vac}}) \right]^{-1}}{\mu^{-1} + \mathbf{K}_{0,\text{Vac}} \sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} \times} \\ & \times \left[\tau_{\lambda,j,\text{Vac}}^{-1} n^2 + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (1 + \beta_{j,\text{Vac}} / n a \omega)^{-1} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (24)$$

где величины с индексами In и Vac относятся соответственно к межузельным атомам и вакансиям. При достаточно большой частоте усвоения точечных дефектов поверхностью $\mu \gg (\tau_{\lambda,j}^{-1}, \tau_{S,j}^{-1})$ и при условии $(n a \omega / \beta_j) \ll 1$ выражения (23) и (24) упрощаются

$$\begin{aligned} Q_{1,n} &= \frac{\gamma_S \Omega}{kT} \\ & \times \frac{\omega^3 n^3 a}{\sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} \left[n \omega D_{S,j,\text{Vac}} + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (a / \beta_{j,\text{Vac}}) \right]^{-1}} \end{aligned} \quad (25)$$

$$Q_{2,n} = \Omega n^2 \omega^2$$

$$\begin{aligned} & \times \left[\frac{\sum_j \nu_j u_{0,j,\text{In}}^{-1} I_{j,0} l_{j,\text{In}} \left[n \omega D_{S,j,\text{In}} + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (a / \beta_{j,\text{In}}) \right]^{-1}}{\sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{In}}^{-1} \left[n \omega D_{S,j,\text{In}} + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (a / \beta_{j,\text{In}}) \right]^{-1}} \right. \\ & \left. - \frac{\sum_j \nu_j u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} I_{j,0} l_{j,\text{Vac}} \left[n \omega D_{S,j,\text{Vac}} + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (a / \beta_{j,\text{Vac}}) \right]^{-1}}{\sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} \left[n \omega D_{S,j,\text{Vac}} + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (a / \beta_{j,\text{Vac}}) \right]^{-1}} \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

Выражение (26) легко обобщить на источники произвольной формы [3]. Так, в случае облучения нейтронами источник имеет вид ступени длиной d : $I(\hat{z}) = i_0(\Omega/d)$

при $0 < \hat{z} \leq d$ и $I(\hat{z}) = 0$ при $d < \hat{z}$. Тогда выражение (26) принимает вид

$$Q_{2,n} = \frac{1}{2} \Omega n^2 \omega^2 \times \left[\frac{\sum_j \nu_j u_{0,j,\text{In}}^{-1} I_{j,0} d_{j,\text{In}} \left[n\omega D_{S,j,\text{In}} + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (a/\beta_{j,\text{In}}) \right]^{-1}}{\sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{In}}^{-1} \left[n\omega D_{S,j,\text{In}} + \tau_{S,j,\text{In}}^{-1} (a/\beta_{j,\text{In}}) \right]^{-1}} - \frac{\sum_j \nu_j u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} I_{j,0} d_{j,\text{Vac}} \left[n\omega D_{S,j,\text{Vac}} + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (a/\beta_{j,\text{Vac}}) \right]^{-1}}{\sum_j \nu_j^2 u_{0,j,\text{Vac}}^{-1} \left[n\omega D_{S,j,\text{Vac}} + \tau_{S,j,\text{Vac}}^{-1} (a/\beta_{j,\text{Vac}}) \right]^{-1}} \right].$$

Из (24) легко получить и другой предельный случай, когда усвоение точечных дефектов поверхностью слабое ($\beta \rightarrow 0$).

4. Случай двухкомпонентного вещества

Из выражений (22), (25), (26) при $n = 2$ (двухкомпонентное вещество) после элементарных преобразований получаем

$$Q_{1,n} = \frac{\gamma_S \Omega}{kT} \frac{a D_{S,1,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}} \tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}}}{\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} + \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}}} \times \left\{ \left(\frac{2\pi n}{\lambda} \right)^4 + \left(\frac{2\pi n}{\lambda} \right)^3 \frac{a}{\lambda_{1,\text{Vac}}^2 \lambda_{2,\text{Vac}}^2} \times \frac{\lambda_{1,\text{Vac}}^2 \tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} + \lambda_{2,\text{Vac}}^2 \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}}}{\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} + \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}}} - \left(\frac{2\pi n}{\lambda} \right)^2 \times \frac{n\lambda_{0,\text{Vac}}}{\lambda + n\lambda_{0,\text{Vac}}} a^2 \frac{\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}}}{(\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} + \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}})^2} \times (\lambda_{1,\text{Vac}}^{-2} - \lambda_{2,\text{Vac}}^{-2})^2 \right\}, \quad (27)$$

$$Q_{2,n} = \Omega \frac{\tilde{I}_{1,0} l_{1,\text{In}} \tilde{u}_{0,2,\text{In}} D_{S,2,\text{In}} + \tilde{I}_{2,0} l_{2,\text{In}} \tilde{u}_{0,1,\text{In}} D_{S,2,\text{In}}}{\tilde{u}_{0,2,\text{In}} D_{S,2,\text{In}} + \tilde{u}_{0,1,\text{In}} D_{S,1,\text{In}}} \times \left(\frac{2\pi n}{\lambda} \right)^2 + \Omega \frac{2\pi n}{\lambda} \frac{an\lambda_{0,\text{In}}}{\lambda + n\lambda_{0,\text{In}}} (\tilde{I}_{1,0} l_{1,\text{In}} - \tilde{I}_{2,0} l_{2,\text{In}}) \times (\lambda_{2,\text{In}}^{-2} - \lambda_{1,\text{In}}^{-2}) \frac{\tilde{u}_{0,2,\text{In}} D_{S,2,\text{In}} \tilde{u}_{0,1,\text{In}} D_{S,1,\text{In}}}{(\tilde{u}_{0,2,\text{In}} D_{S,2,\text{In}} + \tilde{u}_{0,1,\text{In}} D_{S,1,\text{In}})^2} - (\text{In} \rightarrow \text{Vac}), \quad (28)$$

где выражение (In \rightarrow Vac) означает замену межузельных атомов на вакансии во всех предыдущих слагаемых в $Q_{2,n}$, а также введены обозначения $\tilde{u}_{0,i,\text{Vac}} = u_{0,i,\text{Vac}}/\nu_i^2$,

$$\tilde{I}_{i,0} = I_{i,0}/\nu_i,$$

$$\lambda_{i,\text{Vac}}^2 = \beta_i D_{S,i,\text{Vac}} \tau_{S,i,\text{Vac}} = a^2 \left(D_{S,i,\text{Vac}} / D_{V,i,\text{Vac}} \right) \left(\tilde{u}_{0,i,\text{Vac}} / \tilde{c}_{0,i,\text{Vac}} \right),$$

$$\lambda_{0,\text{Vac}} = \frac{2\pi}{a} \frac{\tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}} + \tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}}}{\tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}} \lambda_{2,\text{Vac}}^{-2} + \tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} \lambda_{1,\text{Vac}}^{-2}}$$

и соответствующие величины для межузельных атомов. При отсутствии дефектов (примесей) в веществе между концентрациями вакансий существует связь в силу стехиометрии: $\nu_1 u_{0,1,\text{Vac}} = \nu_2 u_{0,2,\text{Vac}}$. Тогда, используя соотношение $\mathbf{K}_0 = u_{0,1,\text{Vac}}^{\nu_1} u_{0,2,\text{Vac}}^{\nu_2}$, находим равновесные концентрации вакансий

$$u_{0,1,\text{Vac}} = \mathbf{K}_0^{1/(\nu_1+\nu_2)} \left(\frac{\nu_2}{\nu_1} \right)^{\nu_2/(\nu_1+\nu_2)},$$

$$u_{0,2,\text{Vac}} = \mathbf{K}_0^{1/(\nu_1+\nu_2)} \left(\frac{\nu_1}{\nu_2} \right)^{\nu_1/(\nu_1+\nu_2)}.$$

Без облучения ($Q_{2,n} = 0$) из (22) и (27) следует

$$\left(\frac{\lambda}{2\pi} \right)^4 \ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)} = - \left[B_n + C_n \left(\frac{\lambda}{2\pi} \right) - P_n \left(\frac{\lambda}{2\pi} \right)^2 \right] \times \frac{n\lambda_{0,\text{Vac}}}{\lambda + n\lambda_{0,\text{Vac}}} t, \quad (29)$$

где

$$B_n = \frac{\gamma_S \Omega}{kT} a \frac{n^4}{[\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}}]^{-1} + [\tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}}]^{-1}},$$

$$C_n = \frac{\gamma_S \Omega}{kT} D_{V,1,\text{Vac}} D_{V,2,\text{Vac}} \tilde{c}_{0,1,\text{Vac}} \tilde{c}_{0,2,\text{Vac}} a^{-2} \times \frac{\lambda_{1,\text{Vac}}^2 \tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} + \lambda_{2,\text{Vac}}^2 \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}}}{(\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} + \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}})^2} n^3,$$

$$P_n = \frac{\gamma_S \Omega}{kT} a^3 \frac{\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}}^2 D_{S,1,\text{Vac}}^2 \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}}^2 D_{S,2,\text{Vac}}^2}{(\tilde{u}_{0,1,\text{Vac}} D_{S,1,\text{Vac}} + \tilde{u}_{0,2,\text{Vac}} D_{S,2,\text{Vac}})^3} \times (\lambda_{1,\text{Vac}}^{-2} - \lambda_{2,\text{Vac}}^{-2})^2 n^2.$$

Третье слагаемое в уравнении (29) отсутствует в случае однокомпонентного вещества. Как видно из выражения для P_n , это слагаемое определяет меру различия двух типов вакансий (т.е. отличие $\lambda_{1,\text{Vac}}$ от $\lambda_{2,\text{Vac}}$). Третье слагаемое в (29) приводит к квадратичной при $\lambda \ll \lambda_{0,\text{Vac}}$ и к линейной при $\lambda \gg \lambda_{0,\text{Vac}}$ зависимостям от λ . Анализируя экспериментально $\left(\frac{\lambda}{2\pi} \right)^4 \ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)}$ как функцию λ и используя в качестве подгоночной зависимости правую часть в уравнении (29), можно найти коэффициенты B_n , C_n , P_n , $\lambda_{0,\text{Vac}}$ и, зная равновесные концентрации вакансий, определить поверхностные и объемные коэффициенты диффузии.

Рассмотрим случай, когда вакансии одного типа более подвижны, чем вакансии другого типа, т.е. $D_{S,1,Vac} \gg D_{S,2,Vac}$; тогда для коэффициентов B_n , C_n , P_n , $\lambda_{0,Vac}$ с использованием (4) получим

$$B_n = \frac{\gamma_S \Omega}{kT} a D_{S,2,Vac} \tilde{u}_{0,2,Vac} n^4, \quad C_n = \frac{\gamma_S \Omega}{kT} D_{V,2,Vac} \tilde{c}_{0,2,Vac} n^3,$$

$$P_n = \frac{\gamma_S \Omega}{kT} a^{-1} \frac{\tilde{c}_{0,2,Vac}^2 D_{V,2,Vac}^2}{\tilde{u}_{0,1,Vac} D_{S,1,Vac}} n^2,$$

$$\lambda_{0,Vac} = \frac{2\pi}{a} \lambda_{1,Vac}^2 = 2\pi a \frac{D_{S,1,Vac} \tilde{u}_{0,1,Vac}}{D_{V,1,Vac} \tilde{c}_{0,1,Vac}}. \quad (30)$$

Как видно из записанных выше выражений, коэффициенты B_n , C_n зависят только от констант медленных вакансий и имеют такой же вид, как и для однокомпонентного вещества. Из соотношений (30) легко найти коэффициенты диффузии $D_{S,2,Vac}$, $D_{V,2,Vac}$, $D_{S,1,Vac}$, $D_{V,1,Vac}$, получив экспериментально величины B_n , C_n , P_n , $\lambda_{0,Vac}$ из (29).

Учет облучения, как следует из (28), приводит к дополнительным слагаемым в уравнении (29)

$$\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^4 \ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)} = - \left[B_n + C_n \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right) + M_n \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2 - P_n \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^2 \frac{n\lambda_{0,Vac}}{\lambda + n\lambda_{0,Vac}} + L_{n,In} \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^3 \frac{n\lambda_{0,In}}{\lambda + n\lambda_{0,In}} - L_{n,Vac} \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^3 \frac{n\lambda_{0,Vac}}{\lambda + n\lambda_{0,Vac}} \right] t, \quad (31)$$

где

$$M_n = \Omega \frac{\tilde{I}_{1,0} l_{1,In} \tilde{u}_{0,2,In} D_{S,2,In} + \tilde{I}_{2,0} l_{2,In} \tilde{u}_{0,1,In} D_{S,1,In}}{\tilde{u}_{0,2,In} D_{S,2,In} + \tilde{u}_{0,1,In} D_{S,1,In}} n^2 - (In \rightarrow Vac),$$

$$I_{n,In} = \Omega n a \left(\tilde{I}_{1,0} l_{1,In} - \tilde{I}_{2,0} l_{2,In} \right) \left(\lambda_{2,In}^{-2} - \lambda_{1,In}^{-2} \right) \times \frac{\tilde{u}_{0,2,In} D_{S,2,In} \tilde{u}_{0,1,In} D_{S,1,In}}{\left(\tilde{u}_{0,2,In} D_{S,2,In} + \tilde{u}_{0,1,In} D_{S,1,In} \right)^2},$$

$$I_{n,Vac} = \Omega n a \left(\tilde{I}_{1,0} l_{1,Vac} - \tilde{I}_{2,0} l_{2,Vac} \right) \left(\lambda_{2,Vac}^{-2} - \lambda_{1,Vac}^{-2} \right) \times \frac{\tilde{u}_{0,2,Vac} D_{S,2,Vac} \tilde{u}_{0,1,Vac} D_{S,1,Vac}}{\left(\tilde{u}_{0,2,Vac} D_{S,2,Vac} + \tilde{u}_{0,1,Vac} D_{S,1,Vac} \right)^2}.$$

В уравнении (31) появляется дополнительная квадратичная зависимость от λ , и при малых λ ($\lambda \ll \lambda_{0,In,Vac}$) возможно появление слагаемого λ^3 . Отметим, что если $\tilde{I}_{1,0} = I_{1,0}/\nu_1 = \tilde{I}_{2,0} = I_{2,0}/\nu_2$ и глубина рождения различных видов вакансий (межузельных атомов) одинакова ($l_1 = l_2$), то получается такой же результат, как и для однокомпонентного вещества [3], $M_n = \Omega \tilde{I}_0 (l_{In} - l_{Vac}) n^2$ и $L_{n,Vac} = 0 = L_{n,In}$. В этом случае из (31) легко выделить слагаемое M_n , связанное с облучением, и из

него найти физические параметры, характеризующие облучение (например, $(l_{In} - l_{Vac})$).

Таким образом, в настоящей работе получена система уравнений, описывающая сглаживание неровностей на поверхности твердого тела произвольного стехиометрического состава под облучением. Отличие от однокомпонентного вещества состоит в появлении новых видов зависимостей скорости сглаживания от параметров шероховатости поверхности, из которых можно экспериментально получить информацию о коэффициентах диффузии, а также о величинах, характеризующих взаимодействие облучения с материалом. Как видно из представленных выше результатов, облучение ускоряет процесс сглаживания поверхности материала, что может быть использовано для получения более гладких поверхностей.

Работа выполнена при частичной финансовой помощи международной Соросовской программы поддержки образования в области точных наук (грант ISSEPSPU № 042062).

Список литературы

- [1] W.W. Mullins. J. Appl. Phys. **30**, 77 (1959).
- [2] К. Хоэне, Р. Сизманн. Phys. Stat. Sol. **5**, 577 (1971).
- [3] В.В. Слѐзов, Ю.И. Бойко, В.М. Апальков, Х.Д. Карстаньен. ФНТ. В печати.
- [4] В.В. Слѐзов, Л.В. Танатаров. Металлофизика **10**, 90 (1988); V.V. Slezov. Soviet Scientific Reviews. Sec. A/Ed. I.M. Khalatnikov. **17**, Pt. 3 (1995).
- [5] А.В. Погорелов. Дифференциальная геометрия. Наука, М. (1969).