

Нелинейная многомодовая динамика образования дефектно-деформационных мезоструктур в кристаллах под действием внешних потоков энергии

© В.И. Емельянов, И.М. Панин

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119899 Москва, Россия

(Поступила в окончательном виде 15 декабря 1999 г.)

Рассмотрена двухэтапная динамика самоорганизации трехмерных кластерных и периодических дефектно-деформационных мезоструктур при действии внешних потоков энергии на кубические кристаллы. На основе полученных результатов определены критерии самоорганизации мезоструктур.

В работах [1,2] развита теория образования иерархии стационарных одномерных дефектно-деформационных (ДД)-мезоструктур в кристаллах при их облучении энергетическими пучками. Получен функционал Ландау для свободной энергии ДД-системы, минимизация которого приводит к нелинейному ДД-уравнению для пространственно-неоднородного параметра порядка фазового перехода: самосогласованной продольной деформации кубического кристалла вдоль направления типа [100]. Показано, что в зависимости от превышения контрольным параметром — пространственно-однородной концентрацией дефектов n_{d0} — соответствующих пороговых значений сначала образуются стационарные локализованные ДД-мезоструктуры (нанометровые кластеры), а затем периодические мезоструктуры.

Настоящая работа посвящена исследованию динамики образования трехмерных ДД-мезоструктур в кубических кристаллах. С учетом упругой анизотропии кубического кристалла, нелокальных взаимодействий атомов решетки друг с другом (длина взаимодействия l_0) и дефектов с атомами решетки (длина взаимодействия l_d , причем $l_d > l_0$ [2]), а также решеточного ангармонизма получена система трехмерных кинетических уравнений для фурье-амплитуд самосогласованной деформации, описывающая динамику связанных неустойчивых ДД-мод, состоящую из двух этапов.

На первом этапе происходит коллапс углового спектра ДД-мод с волновыми векторами \mathbf{q} ($|\mathbf{q}| \equiv q = \text{const}$), в результате чего образуются три независимых континуума ДД-мод с волновыми векторами \mathbf{q} , ориентированными вдоль трех направлений типа [100].

Межмодовое взаимодействие внутри каждого из трех независимых континуумов мод определяет динамику второго этапа ДД-самоорганизации, на котором в зависимости от превышения n_{d0} над соответствующими пороговыми значениями происходит либо уширение спектра q -мод, приводящее к генерации локализованных ДД-мезоструктур (кластеров), либо коллапс спектра q -мод в δ -функцию, приводящий к генерации периодических ДД-мезоструктур.

Процессы трансформации распределений ДД-мод в q -пространстве происходят независимо в каждом из

трех континуумов мод самосогласованной продольной деформации вдоль трех направлений типа [100]. Суперпозиция результирующих упорядоченных одномерных ДД-мезоструктур образует трехмерные стационарные кластерные или периодические ДД-мезоструктуры. Таким образом, в настоящей работе показано, что задача описания трехмерных стационарных ДД-мезоструктур в кубических кристаллах сводится к одномерной задаче, решение которой получено в [1,2].

На основе рассмотрения динамики образования ДД-мезоструктур сформулированы критерии самоорганизации кластерных и периодических ДД-мезоструктур.

Предварительные результаты данной работы докладывались на симпозиуме [3].

1. Система кинетических уравнений для фурье-амплитуд самосогласованной деформации в приближении эффективных парных взаимодействий ДД-мод

Интересующую нас деформацию среды и концентрацию дефектов в трехмерном кубическом кристалле можно представить в виде связанных угловых пакетов квазипродольных волн с волновыми векторами \mathbf{q} , лежащими в окрестности одного из направлений типа [100] (совпадающего с осью z)

$$\xi(\mathbf{r}) = \xi_0 + \xi_1(\mathbf{r}), \quad \xi_1(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (1a)$$

$$n_d(\mathbf{r}) = n_{d0} + n_{d1}(\mathbf{r}), \quad n_{d1}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (1b)$$

где n_{d0} и ξ_0 — пространственно-однородные, а $n_{d1}(\mathbf{r})$ и $\xi_1(\mathbf{r})$ — неоднородные части концентрации дефектов и деформации среды.

Уравнение для деформации кубического кристалла, следующее из уравнений для U_x, U_y, U_z [4], при условии $\xi(\mathbf{r}, t) \approx \partial U_z(\mathbf{r}, t) / \partial z$, где U_z — z -компонента вектора

смещения среды, имеет вид

$$\rho \partial^2 \xi / \partial t^2 = c_{11} \Delta \xi + A c_{11} (\Delta \xi - \partial^2 \xi / \partial z^2), \quad (2)$$

где ρ — плотность среды, $A = (c_{12} + 2c_{44} - c_{11}) / c_{11}$ — константа упругой анизотропии; c_{12} , c_{44} , c_{11} — постоянные упругой жесткости кубического кристалла.

Учтем теперь в (2) аналогично одномерному случаю [2] нелокальность взаимодействия атомов в решетке, ангармонизм и взаимодействие деформации с дефектами.

Используя (1а), получаем следующее уравнение для фурье-амплитуды квазипродольной деформации:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{q}}}{\partial t^2} = & -q^2 c_l^2(\theta) (1 - q^2 l_0^2) \xi_{\mathbf{q}} + |\alpha| q^2 c_l^2(\theta) \sum_{\mathbf{q}_1} \xi_{\mathbf{q}_1} \xi_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1} \\ & - \beta q^2 c_l^2(\theta) \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \xi_{\mathbf{q}_1} \xi_{\mathbf{q}_2} \xi_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2} + \frac{\theta_d}{\rho} q^2 n_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\alpha < 0$, $\beta > 0$ — константы упругого ангармонизма,

$$c_l^2(\theta) = c_{l0}^2 (1 + A \theta^2), \quad (4)$$

где $\cos \theta = \mathbf{qz} / |\mathbf{q}|$, \mathbf{z} — единичный вектор вдоль оси z , $c_{l0}^2 = c_{11} / \rho$ — скорость продольной звуковой волны в направлении [100], θ_d — потенциал деформации дефекта ($d = i$ для междоузлия и $d = \nu$ для вакансий).

Чтобы замкнуть уравнение (3), получим уравнение для $n_{\mathbf{q}}$. Учитывая деформационно-индуцированный поток дефектов в уравнении непрерывности, получаем уравнение диффузии дефектов с учетом нелокальности взаимодействия дефект-атом (ср. [2])

$$\partial n_d / \partial t = D_d \Delta n_d - (D_d \theta_d / k_B T) \nabla n_d \nabla (\xi + l_d^2 \Delta \xi), \quad (5)$$

где D_d — коэффициент диффузии дефекта типа d , T — температура. Подставляя (1) в (5), получаем искомое уравнение для фурье-амплитуды концентрации дефектов

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} = & -D_d q^2 n_{\mathbf{q}} + \frac{D_d \theta_d}{k_B T} \sum_{\mathbf{q}_1} n_{\mathbf{q}_1} \xi_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1} \\ & \times \mathbf{q}(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1) (1 - l_d^2 (\mathbf{q} - \mathbf{q}_1)^2). \end{aligned} \quad (6)$$

Уравнения (3) и (6) составляют замкнутую систему уравнений для фурье-амплитуд деформации $\xi_{\mathbf{q}}$ и концентрации $n_{\mathbf{q}}$.

Подставляя выражение для $n_{\mathbf{q}}$, следующее в адиабатическом приближении из (3), в (6) получаем после преобразования и редуцирования кинетическое уравнение для фурье-амплитуды самосогласованной деформации, которое в приближении парных взаимодействий ДД-мод имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi_{\mathbf{q}}}{\partial t} = & \lambda_{\mathbf{q}}(\theta) \xi_{\mathbf{q}} + \frac{D_d q^2}{1 - l_0^2 q^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} \xi_{\mathbf{q}_1} \xi_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1} \left\{ |\alpha| - 3\beta \xi_0 \right. \\ & \left. + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \left(1 - \frac{\mathbf{q}\mathbf{q}_1}{q^2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Поскольку неравновесные дефекты в облученном кристалле рождаются парами вакансий ($\theta_d = \theta_v < 0$) и междоузлий ($\theta_d = \theta_i > 0$), причем $|\theta_i| \gg |\theta_d|$ [5], то в (7) $\xi_0 = \theta_i n_{d0} / \rho c_{l0}^2 > 0$.

Инкремент нарастания ДД-мод в (7)

$$\lambda_{\mathbf{q}}(\theta) = D_d q^2 \left(\frac{1 - l_d^2 q^2}{1 - l_0^2 q^2} \frac{\theta_d^2 n_{d0}}{\rho c_l^2(\theta) k_B T} - 1 \right) \approx \lambda_m - \delta_a \theta^2, \quad (8)$$

где максимальное значение инкремента

$$\lambda_m = D_d q^2 \left(\frac{n_{d0}}{n_{dc}} \left(\frac{1 - l_d^2 q^2}{1 - l_0^2 q^2} \right) - 1 \right) \quad (9)$$

и параметр крутизны зависимости $\lambda_{\mathbf{q}}(\theta)$ в точке $\theta = 0$

$$\delta_a = \frac{1}{2} \partial^2 \lambda(\theta) / \partial \theta^2 = D_d q^2 A \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \left(\frac{1 - l_d^2 q^2}{1 - l_0^2 q^2} \right). \quad (10)$$

В (9) введена критическая концентрация дефектов $n_{dc} = \rho c_{l0}^2 k_B T / \theta_d^2$.

Перейдем теперь к рассмотрению первого этапа динамики ДД-самоорганизации.

2. Восходящая угловая диффузия в векторном q -пространстве и коллапс углового спектра ДД-мод

Как видно из (7), межмодовое взаимодействие приводит к преобразованию гармоник $\xi_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1}$ в гармонику $\xi_{\mathbf{q}_1}$. При этом изменяется как направление исходных векторов $\mathbf{q} - \mathbf{q}_1$, так и их модуль.

Сначала рассмотрим первый этап этого процесса, на котором $|\mathbf{q} - \mathbf{q}_1| = |\mathbf{q}| = \text{const}$. На этом этапе концы волновых векторов фурье-гармоник остаются на сфере $|\mathbf{q}| = \text{const}$ в \mathbf{q} -пространстве. Кроме этого, мы ограничимся рассмотрением малых скачков векторов $\mathbf{q} - \mathbf{q}_1$ вдоль меридиального направления $\phi = \text{const}$, при которых изменяется лишь полярный угол θ вблизи одного направления типа [100], для которого $\theta = 0$. Данное рассмотрение справедливо также и для остальных направлений типа [100].

Разлагая $\xi_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1}$ в ряд по \mathbf{q}_1 ($q_1 \ll q$) в сферической системе координат с точностью до членов второго порядка малости по \mathbf{q}_1 и считая $\phi = \text{const}$, получаем из (7) уравнение диффузии и дрейфа с учетом нарастания амплитуд ДД-мод в θ -пространстве. В пренебрежении угловым дрейфом уравнение угловой диффузии имеет вид

$$\frac{\partial \xi_{\mathbf{q}}(\theta, t)}{\partial t} = \lambda_{\mathbf{q}}(\theta) \xi_{\mathbf{q}}(\theta, t) + D_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{q}}(\theta, t)}{\partial \theta^2}, \quad (11)$$

где коэффициент угловой диффузии в q -пространстве

$$D_{\mathbf{q}} = \frac{9}{2} \frac{D_d}{1 - l_0^2 q^2} \left\{ (|\alpha| - 3\beta \xi_0) + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \right\} \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} \xi_{\mathbf{q}_1} \mathbf{q}_1^2, \quad (11a)$$

инкремент $\lambda_{\mathbf{q}}(\theta)$ задан формулой (8).

При рассмотрении угловой ДД-самоорганизации будем предполагать, что в (11а) длинноволновые ($|\mathbf{q}_1| \ll |\mathbf{q}|$) компоненты спектра заданы ($\xi_{\mathbf{q}_1} \approx \text{const}$) и что $\xi_{\mathbf{q}_1} > 0$ (что соответствует самосогласованной деформации, создаваемой междоузлиями).

Самоорганизация (схлопывание) углового ДД-спектра происходит при $\lambda_{\mathbf{q}}(\theta) > 0$, $D_{\mathbf{q}} < 0$ (см. далее). Рассмотрим, при каких условиях это осуществляется.

Как было показано в [2], имеет место иерархия процессов образования упорядоченных ДД-мезоструктур по мере роста концентрации дефектов n_{d0} : сначала образуются ДД-кластеры, а затем — периодические ДД-мезоструктуры. При этом в q -пространстве кластерам и периодическим ДД-мезоструктурам соответствуют различные области.

Для кластеров вблизи порога их образования (см. [2]) выполняется условие

$$l_d^2 q^2 \gg 1, \quad l_0^2 q^2 \gg 1. \quad (12)$$

В кластерной области q -пространства (12) максимальный инкремент (9) становится положительным при $n_{d0} > n_{dc1} = n_{dc} l_0^2 / l_d^2 < n_{dc}$. В [2] было показано, что значение $n_{d0} = n_{dc1}$ является порогом образования стационарных трехмерных кластерных ДД-мезоструктур.

Из (11а) и (10) следуют выражения для коэффициента угловой диффузии и параметра крутизны в кластерной области (12)

$$D_{\mathbf{q}} = 9D_d \theta_d l_d^2 \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} \xi_{\mathbf{q}_1} q_1^2 / 2k_B T l_0^2 < 0 \text{ при } \theta_d < 0, \quad (13а)$$

$$\delta_a = D_d q^2 A \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \frac{l_d^2}{l_0^2}. \quad (13б)$$

Таким образом, при $\theta_d = \theta_v < 0$ (вакансии) уравнение угловой диффузии (11) описывает схлопывание начального равномерного распределения векторов \mathbf{q} по поверхности сферы $|\mathbf{q}| = \text{const}$ внутрь конуса с осью z (см. далее (16) и рис. 1). Для междоузлий ($\theta_d = \theta_i > 0$) в кластерной области $D_{\mathbf{q}} > 0$, т.е. самоорганизация углового ДД-спектра отсутствует.

Для периодических структур вблизи порога их образования выполняется условие (см. [2])

$$l_d^2 q^2 \ll 1, \quad l_0^2 q^2 \ll 1. \quad (14)$$

Из (9) получаем для максимального значения инкремента $\lambda_m = D_d q^2 (n_{d0} / n_{dc} - 1) > 0$ при $n_{d0} > n_{dc}$. В [2] показано, что значение $n_{d0} = n_{dc}$ совпадает с порогом образования стационарных одномерных периодических ДД-мезоструктур.

Для коэффициента угловой диффузии и параметра крутизны в области образования периодических структур (14) в случае междоузлий ($\theta_d > 0$) из (11а) и (10) при условии $n_{d0} > n_{dc}$ получаем

$$D_{\mathbf{q}} = -27\beta D_d k_B T n_{d0} \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} \xi_{\mathbf{q}_1} q_1^2 / 2\theta_d n_{dc} \equiv -|D_{\mathbf{q}}| < 0, \quad (15а)$$

$$\delta_a = D_d q^2 A n_{d0} / n_{dc}. \quad (15б)$$

При $\lambda_m > 0$ и $D_{\mathbf{q}} \equiv -|D_{\mathbf{q}}| < 0$ решение уравнения (11) имеет вид

$$\xi_{\mathbf{q}}(\theta, t) = \xi_{\mathbf{q}}(\theta, t = 0) \exp(\lambda_m t) \times \exp\{-\theta^2 / (\delta_a t)^{-1} - 4|D_{\mathbf{q}}|t\} / \sqrt{1 - 4|D_{\mathbf{q}}|\delta_a t^2}, \quad (16)$$

где $\xi_{\mathbf{q}}(\theta, t = 0) = \text{const}$ — начальное значение фурье-амплитуды деформации, соответствующее начальному равномерному распределению векторов \mathbf{q} по углу θ в волновом пакете (1). Выражения для δ_a и $|D_{\mathbf{q}}|$ для кластерной области (12) задаются формулами (13), а для периодической области (14) — формулами (15). Доказать справедливость решения (16) можно непосредственной подстановкой в (11).

Формула (16) описывает динамику сужения и коллапса исходно равномерного углового спектра ДД-мод с нарастающими во времени амплитудами при фиксированном значении $|\mathbf{q}| = q$. При этом дефектами, участвующими в угловой самоорганизации, в области кластерных структур (12) являются вакансии ($\theta_d < 0$), а в области образования периодических структур (14) — междоузлия ($\theta_d > 0$).

К моменту времени $t = t_{\theta}(q)$ спектр схлопывается в δ -функцию

$$\xi_{\mathbf{q}}(\theta, t = t_{\theta}) = \xi_{\mathbf{q}}(\theta, t = 0) \exp(\lambda_m t_{\theta}(q)) \times (\pi^2 \delta_a / 4|D_{\mathbf{q}}|)^{1/4} \delta(\theta), \quad (17)$$

где время углового схлопывания

$$t_{\theta}(q) = 1 / \sqrt{4|D_{\mathbf{q}}|\delta_a} \quad (18)$$

зависит от значения q .

Аналогичное схлопывание конусов угловых распределений \mathbf{q} имеет место и для двух других направлений типа [100] (рис. 1).

При образовании периодической ДД-мезоструктуры междоузлий характерное значение $q = 2\pi/d$, где d — период структуры (см. [2]). Тогда из (18) получаем характерное время схлопывания углового спектра междоузельно-деформационных мод

$$\tau_{\theta} \equiv t_{\theta}(q = 2\pi/d) = \frac{d^2}{D_d} \frac{n_{dc}}{n_{d0}} C,$$

$$C = (12\pi^2)^{-1} \left(6 \frac{k_B T}{\theta_d} \beta A \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} \xi_{\mathbf{q}_1} (q_1/q)^2 \right)^{-1/2}. \quad (19)$$

В результате рассмотренной угловой самоорганизации ДД-мод образуются три независимых континуума междоузельно-деформационных мод с волновыми векторами \mathbf{q} , ориентированными вдоль трех взаимно ортогональных направлений типа [100].

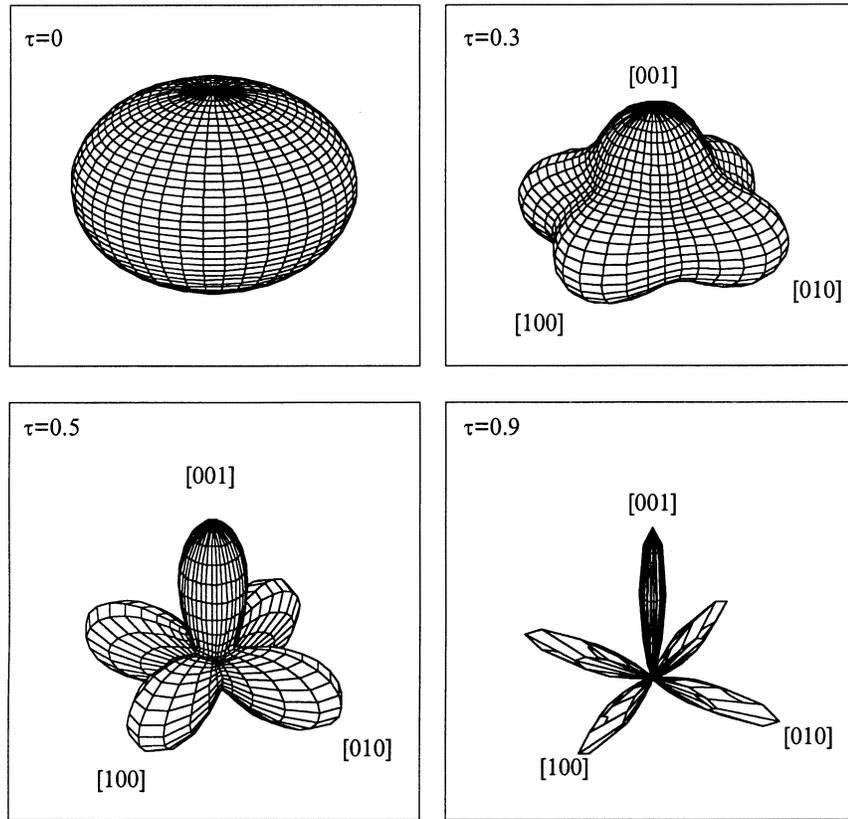


Рис. 1. Динамика коллапса углового спектра ДД-мод. Полярный график зависимости относительной фурье-амплитуды $\xi_q(\theta, \tau)/\xi_q(\theta, \tau = 0) = \exp[\Lambda\tau - (\tau\Delta\theta^2/(1 - \tau^2))]/\sqrt{1 - \tau^2}$ от угла θ , где θ — угол между вектором \mathbf{q} и направлением [001]. По формуле (16) при $\tau = t/t_q$ $\Lambda = \lambda_m t_q = 0.2$, $\Delta = \delta_a t_q = 5$ (второй пик вдоль направления [001] не показан). Аналогичные коллапсы происходят вдоль направлений [100] и [010].

3. Диффузия в скалярном q -пространстве и трансформация пространственного спектра ДД-мод

3.1. Уравнения для амплитуды и фазы фурье-гармоник. Рассмотрим теперь второй этап самоорганизации ДД-мод, на котором благодаря межмодовому взаимодействию происходит преобразование гармоник $\xi_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1}$ в гармонику $\xi_{\mathbf{q}}$.

Рассмотрим континуум мод $\xi_{\mathbf{q}}$ с волновыми векторами \mathbf{q} , направленными вдоль одного из направлений типа [100] в кубическом кристалле (например, оси z), для которого $\xi_{\mathbf{q}} = \xi_{q_z} \equiv \xi_q$ ($-\infty < q < +\infty$). Данное рассмотрение справедливо также и для остальных направлений типа [100].

Кинетическое уравнение для ξ_q следует из (7), где $|\mathbf{q}| = q$, $|\mathbf{q}_1| = q_1$, $\mathbf{q} \uparrow\uparrow \mathbf{q}_1$

$$\frac{\partial \xi_q}{\partial t} = \lambda(q)\xi_q + \frac{D_d q^2}{1 - l_0^2 q^2} \sum_{q_1 \neq 0} \xi_{q_1} \xi_{q-q_1} \left\{ |\alpha| - 3\beta\xi_0 + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \left(1 - \frac{q_1}{q}\right) \right\}, \quad (20)$$

где инкремент

$$\lambda(q) = D_d q^2 \left[(1 - l_d^2 q^2) n_{d0} / (1 - l_0^2 q^2) n_{dc} - 1 \right]. \quad (21)$$

Представим комплексную фурье-амплитуду в виде

$$\xi_q = A_q \exp(i\varphi_q), \quad (22)$$

где A_q и φ_q — соответственно действительные амплитуда и фаза. Подставляя (22) в (20) и разделяя действительные и мнимые части, получаем систему связанных кинетических уравнений для действительных амплитуд A_q и фаз φ_q

$$\frac{\partial A_q}{\partial t} = \lambda(q)A_q + \frac{D_d q^2}{1 - l_0^2 q^2} \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} A_{q-q_1} \left\{ |\alpha| - 3\beta\xi_0 + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \left(1 - \frac{q_1}{q}\right) \right\} \cos(\Delta\varphi(q, q_1)), \quad (23)$$

$$\frac{\partial \varphi_q}{\partial t} = \frac{D_d q^2}{1 - l_0^2 q^2} \sum_{q_1 \neq 0} \frac{A_{q_1} A_{q-q_1}}{A_q} \left\{ |\alpha| - 3\beta\xi_0 + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \left(1 - \frac{q_1}{q}\right) \right\} \sin(\Delta\varphi(q, q_1)), \quad (24)$$

где $\Delta\varphi(q, q_1) = \varphi_{q_1} + \varphi_{q-q_1} - \varphi_q$.

Упростим систему (23), (24). Как и ранее, предполагаем, что существует набор длинноволновых гармоник с волновыми векторами $q_1 \ll q_m$, где q_m — характерное волновое число ДД-мезоструктур, которые можно считать заданными и положить $\varphi_{q_1} = 0$. Кроме этого, учтем, что, как это будет видно из дальнейшего, на характерных временах τ_{phase} , много меньших характерного времени изменения спектра амплитуд A_q , происходит синхронизация фаз: $\varphi_{q_1} = \varphi_q$ (см. (28)). Поэтому на временах $t > \tau_{\text{phase}}$ из (23), положив $\cos(\Delta\varphi(q, q_1)) = 1$, получаем кинетическое уравнение для A_q . Раскладывая в нем A_{q-q_1} в ряд по q_1 с точностью до членов второго порядка по q_1 , получаем для амплитуд фурье-гармоник $A_q = A(q, t)$ уравнение диффузии с учетом усиления и дрейфа в q -пространстве

$$\frac{\partial A(q, t)}{\partial t} = \lambda(q)A(q, t) + K(q)\frac{\partial A(q, t)}{\partial q} + D(q)\frac{\partial^2 A(q, t)}{\partial q^2}, \quad (25)$$

где $\lambda(q)$ задается формулой (21) и введены обозначения для коэффициентов дрейфа

$$K(q) = D_d q \left((1 - l_d^2 q^2) / (1 - l_0^2 q^2) \right) (\theta_d / k_B T) \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} q_1^2 \quad (26a)$$

и диффузии в q -пространстве

$$D(q) = \frac{1}{2} \frac{D_d q^2}{1 - l_0^2 q^2} \left\{ |\alpha| - 3\beta\xi_0 + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \right\} \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} q_1^2. \quad (26b)$$

В приближении $\varphi_{q_1} = 0$, $A_{q-q_1} \cong A_q$, $\sin(\varphi_{q-q_1} - \varphi_q) \approx \varphi_{q-q_1} - \varphi_q$ из (24) получаем кинетическое уравнение для φ_q

$$\frac{\partial \varphi_q}{\partial t} = \frac{D_d q^2}{1 - l_0^2 q^2} \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} \left\{ |\alpha| - 3\beta\xi_0 + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \left(1 - \frac{q_1}{q} \right) \right\} (\varphi_{q-q_1} - \varphi_q). \quad (27)$$

В дальнейшем на основе (25), (27) рассмотрим динамику ДД-самоорганизации в двух областях q -пространства, в которых происходит образование кластерных и периодических ДД-мезоструктур.

3.2. Синхронизация фаз и уширение спектра ДД-мод: образование кластеров. В коротковолновой (кластерной) области (12) из (27) получаем релаксационное уравнение для φ_q

$$\frac{\partial \varphi_q}{\partial t} = D_d q^2 \frac{\theta_d}{k_B T} \frac{l_d^2}{l_0^2} \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} (\varphi_{q-q_1} - \varphi_q). \quad (28)$$

Как следует из (28), процесс релаксации фазы φ_q заканчивается ($\partial \varphi_q / \partial t = 0$), когда фазы гармоник выравниваются: $\varphi_q = \varphi_{q-q_1}$. Это происходит за время

синхронизации фаз τ_{phase} , выражение для которого следует из (28)

$$\tau_{\text{phase}} = \left(D_d \frac{\theta_d}{k_B T} \frac{l_d^2}{l_0^2} \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} \right)^{-1}. \quad (29)$$

При условии (12) из (21) получаем для инкремента

$$\lambda(q) = D_d q^2 (n_{d0} l_d^2 / n_{dc} l_0^2 - 1) \equiv D_d q^2 (n_{d0} / n_{dc} - 1). \quad (30)$$

Из (30) видно, что $\lambda(q) > 0$ при $n_{d0} > n_{dc} = l_0^2 / l_d^2 n_{dc}$, т. е. происходит рост всех гармоник ξ_q . В [2] было показано, что в области $n_{d0} > n_{dc}$ образуются стационарные кластерные ДД-мезоструктуры.

Для коэффициента диффузии в кластерной области (12) из (26b) получаем

$$D(q) = \frac{1}{2} D_d q^2 \frac{l_d^2}{l_0^2} \frac{\theta_d}{k_B T} \sum_{q_1 \neq 0} q_1^2 A_{q_1}. \quad (31)$$

Как следует из п.2, в результате угловой самоорганизации в кластерной области происходит коллапс углового спектра вакансионно-деформационных мод в направлении типа [100]. Таким образом, дефектами, ответственными за самоорганизацию в $|q|$ -пространстве ДД-мод с волновыми векторами вдоль этих направлений, в данном случае являются вакансии. Поэтому предполагаем, что в (29) и (31) $A_{q_1} \approx \text{const}$ и $A_{q_1} < 0$ (что соответствует самосогласованной деформации, создаваемой вакансиями). Учитывая, что для вакансий $\theta_d = \theta_v < 0$, из (31) получаем, что в кластерной области $D(q) > 0$ (можно показать, исходя из (26a), что здесь и $K(q) > 0$). Уравнение диффузии (25) с положительными инкрементом (30), коэффициентами дрейфа (26a) и диффузии (31) описывает нарастание на временах λ^{-1} и уширение спектра фурье-компонент ξ_q с синхронизованными фазами φ_q . Оценим характерные времена этих процессов.

Характерное время τ_b уширения спектра определим по формуле

$$\tau_b = q_0^2 / D(q), \quad (32)$$

где $q_0 = l_{\text{min}}^{-1}$, l_{min} — минимальный размер образующегося кластера. Используя (30) и (31), получаем, что по крайней мере вблизи порога образования локализованных структур выполняется неравенство

$$\tau_b(q) / \lambda^{-1}(q) = 2(n_{d0} / n_{dc} - 1) / (\theta_d / k_B T) (l_d / l_0)^2 \times \sum_{q_1 \neq 0} q_1^2 / q_0^2 A_{q_1} < 1. \quad (33)$$

Таким образом, до того как амплитуды успевают нарасти, происходит диффузионное расплывание амплитудного спектра, приводящее к выравниванию амплитуд A_q . При этом фазы гармоник ξ_q остаются синхронизованы, так как из (29) и (32) следует, что

$$\tau_{\text{phase}} / \tau_b = \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} (q_1 / q_0)^2 / 2 \sum_{q_1 \neq 0} A_{q_1} \ll 1, \quad (34)$$

так как $q_1 \ll q_0$.

Из (33) и (34) получаем следующую иерархию характерных времен ДД-самоорганизации в коротковолновой области (12):

$$\tau_{\text{phase}} \ll \tau_b < \lambda^{-1}(q). \quad (35)$$

Таким образом, в коротковолновой области происходит рост гармоник ξ_q с одинаковыми фазами и выравненными за счет спектральной диффузии амплитудами. Образование плоского спектра гармоник с синхронизованными фазами соответствует образованию локализованной (кластерной) ДД-мезоструктуры. Стационарные характеристики одномерного ДД-кластера определены в [2]. Трехмерные ДД-кластеры строятся суперпозицией одномерных.

3.3. Коллапс q -спектра ДД-мод: образование периодических мезоструктур. Для описания образования периодических ДД-структур в длинноволновой области (14) достаточно рассмотреть динамику фурье-амплитуды ξ_q , уравнение для которой получается из (20) аналогично тому, как это было сделано при выводе (25) из (23). В результате получаем уравнение спектральной диффузии

$$\frac{\partial \xi(q, t)}{\partial t} = \lambda(q)\xi(q, t) + K_1(q) \frac{\partial \xi(q, t)}{\partial q} + D_1(q) \frac{\partial^2 \xi(q, t)}{\partial q^2}, \quad (36)$$

где инкремент

$$\lambda(q) = D_d q^2 \left(\frac{n_{d0}}{n_{dc}} (1 - l_d^2 q^2) - 1 \right), \quad (37)$$

коэффициент дрейфа

$$K_1(q) = D_d q (1 - l_d^2 q^2) (\theta_d / k_B T) \sum_{q_1 \neq 0} \xi_{q_1} q_1^2 \quad (38)$$

и коэффициент спектральной диффузии

$$D_1(q) = \frac{1}{2} D_d q^2 \left\{ |\alpha| - 3\beta \xi_0 + \frac{\theta_d}{k_B T} (1 - l_d^2 q^2) \right\} \sum_{q_1 \neq 0} \xi_{q_1} q_1^2. \quad (39)$$

Поскольку в области (14) коллапс углового спектра имеет место для междоузельно-деформационных мод, то $\xi_{q_1} > 0$ и при $n_{d0} = n_{dc}$ из (39) имеем для коэффициента диффузии

$$D_1(q) = -3\beta D_d q^2 (k_B T / 2\theta_d) (n_{d0} / n_{dc}) \sum_{q_1 \neq 0} \xi_{q_1} q_1^2 \equiv -|D(q)| < 0. \quad (40)$$

Максимум инкремента (37) достигается при $q = q_m$, где

$$q_m = l_d^{-1} ((n_{d0} / n_{dc} - 1) / 2(n_{d0} / n_{dc}))^{1/2}. \quad (41)$$

Вблизи $q = q_m$ инкремент $\lambda(q) = \lambda_m - \delta_m (q - q_m)^2$, где максимальное значение инкремента $\lambda_m = \lambda(q_m) = D_d (n_{d0} / n_{dc} - 1)^2 / 4l_d^2 n_{d0} / n_{dc}$ и параметр крутизны

зависимости $\lambda(q)$ в точке $q = q_m$ $\delta_m = 2D_d (n_{d0} / n_{dc} - 1)$. Уравнение диффузии (36) в окрестности $q = q_m$ имеет вид

$$\frac{\partial \xi(q, t)}{\partial t} = (\lambda_m - \delta_m (q - q_m)^2) \xi(q, t) + K_m \frac{\partial \xi(q, t)}{\partial q} - |D_m| \frac{\partial^2 \xi(q, t)}{\partial q^2}, \quad (42)$$

где коэффициенты K_m и $|D_m|$ задаются соответственно формулами (38) и (40) при $q = q_m$. Начальное и граничное условия задаются в форме $\xi_q(t)|_{t=0} = \xi(q, 0) = \text{const}$, $\xi_q(t)|_{q \rightarrow \pm\infty} = 0$. При этом решение уравнения (42) имеет вид

$$\xi_q(t) = \xi(q, 0) \frac{\exp(\lambda_m t)}{\sqrt{1 - 4|D_m| \delta_m t^2}} \exp \left\{ - \frac{(q - q_m + K_m t)^2}{\frac{1}{\delta_m t} - 4|D_m| t} \right\}. \quad (43)$$

Формула (43) описывает динамику сужения пространственного спектра ДД-мод с нарастающими во времени амплитудами (рис. 2). К моменту времени спектральной монохроматизации

$$t = \tau_m = 1 / \sqrt{4|D_m| \delta_m} \quad (44)$$

спектр ДД-мод в q -пространстве превращается в δ -функцию

$$\xi(q, t_m) = \xi(q, 0) \exp(\lambda_m \tau_m) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{\delta_m}{|D_m|}} \delta(q - q_m + K_m \tau_m), \quad (45)$$

что соответствует генерации одной ДД-моды ξ_{q_s} с волновым вектором $q_s = q_m - K_m t_m$, т.е. образованию периодической ДД-мезоструктуры с периодом $d = 2\pi / q_s$.

Из (44) получаем характерное время монохроматизации пространственного спектра ДД-мод в явном виде

$$\tau_m = \frac{l_d^2}{D_d} \frac{(n_{d0} / n_{dc})^{1/2}}{(n_{d0} / n_{dc} - 1)^{3/2}} C_1, \quad C_1 = \left(\frac{k_B T}{\theta_d} \beta \sum_{q_1 \neq 0} \xi_{q_1} \frac{q_1^2}{q_m^2} \right)^{-1/2}. \quad (46)$$

Критерий самоорганизации (схлопывания) пространственного спектра ДД-мод можно определить неравенством

$$\tau_m / \lambda_m^{-1} = C_1 ((n_{d0} / n_{dc} - 1) / (n_{d0} / n_{dc}))^{1/2} / 4 < 1, \quad (47)$$

которое по крайней мере вблизи порога образования периодических ДД-мезоструктур выполнено.

При выполнении условия (47) происходит генерация одной ДД-моды, т.е. образуется периодическая одномерная ДД-мезоструктура, стационарные характеристики которой определены в [2]. Аналогичные периодические ДД-мезоструктуры (сверхрешетки) одновременно

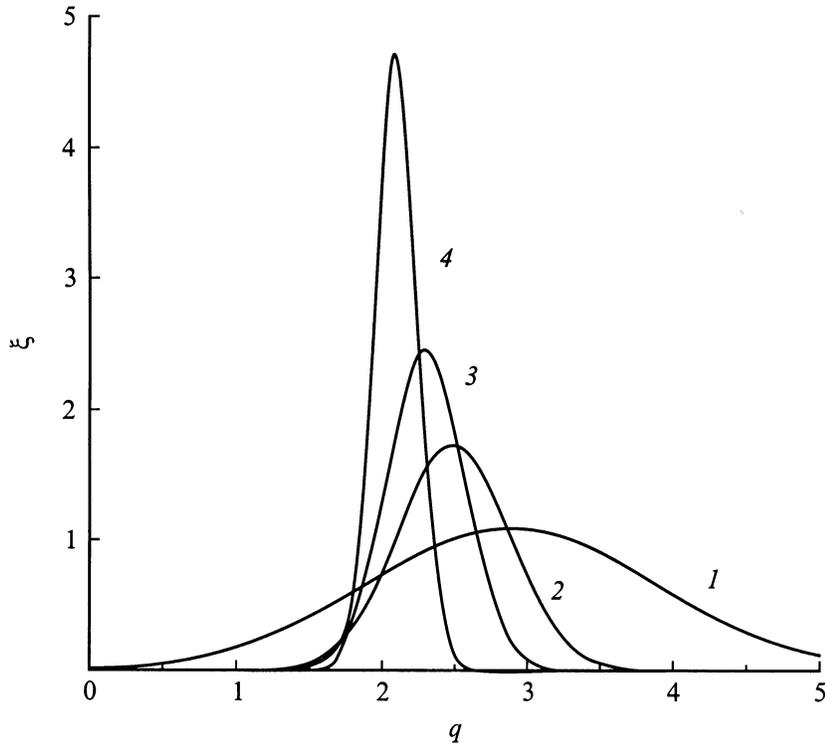


Рис. 2. Динамика коллапса пространственного q -спектра ДД-мод. График зависимости относительной фурье-амплитуды $\xi(q, \tau)/\xi(q, \tau = 0) = \exp[\Lambda\tau - (\tau\Delta(q - q_m + K\tau)^2/(1 - \tau^2))]/\sqrt{1 - \tau^2}$ от q . По формуле (43) при $\Lambda = \lambda_m t_q = 0.2$, $\Delta = \delta_{mtq} = 5$, $q_m = 3$, $K = 1$, значения $\tau = t/t_q = 0.1$ (1), 0.5 (2), 0.7 (3), 0.9 (4).

образуются и по двум другим направлениям типа [100]. Суперпозиция трех ДД-сверхрешеток с волновыми векторами вдоль направлений типа [100] приводит к образованию трехмерной ячеистой ДД-мезоструктуры.

Проведенное в настоящей работе рассмотрение многомодовой динамики самоорганизации трехмерных ДД-мезоструктур позволяет сформулировать следующие критерии самоорганизации в ДД-системе, в которой внешний поток энергии генерирует точечные дефекты.

При превышении первого порога по концентрации генерируемых дефектов $n_{d0} = n_{dc} l_0^2 / l_d^2 < n_{dc}$ в коротковолновой области q -пространства (12) происходит ДД-самоорганизация, приводящая к образованию вакансионно-деформационных кластеров при выполнении условий $\tau_\theta < \tau_{\text{phase}} < \tau_b < \lambda_m^{-1}$, где τ_θ , τ_{phase} , τ_b , λ_m^{-1} — соответственно характерные времена схлопывания углового спектра, синхронизации фаз, времени уширения спектра и времени нарастания амплитуд спектра вакансионно-деформационных мод.

При повышении второго порога по концентрации дефектов $n_{d0} = n_{dc} \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [2] в длинноволновой области q -пространства происходит ДД-самоорганизация, приводящая к образованию междуузельно-деформационных периодических ДД-мезоструктур при выполнении условий $\tau_\theta < \tau_m < \lambda_m^{-1}$, где τ_θ , τ_m и λ_m^{-1} — соответственно характерные времена схлопывания углового спектра, времени монохроматизации

пространственного спектра мод и времени нарастания амплитуд спектра междуузельно-деформационных мод.

Динамика нанометровой ДД-самоорганизации в векторном \mathbf{q} -пространстве (схлопывания углового спектра ДД-мод вдоль кристаллографических направлений типа [100] с последующим расплыванием или монохроматизацией спектра мод в скалярном $|\mathbf{q}|$ -пространстве), рассмотренная в настоящей работе, вполне аналогична исследованной ранее теоретически [6] динамике самоорганизации крупномасштабных (микронных) поверхностных ДД-структур. Результаты [6] находятся в соответствии с результатами экспериментов [7] по изучению с временным разрешением дифракции пробного излучения от поверхности кристаллического Si(100), облучаемого мощным миллисекундным лазерным импульсом. В [7] прослежена динамика угловой селекции ДД-мод с последующим схлопыванием спектра мод в $|\mathbf{q}|$ -пространстве, приводящим к образованию поверхностных ДД-решеток с периодами порядка микрона (см. обзоры [8,9]).

Предсказываемая в настоящей работе аналогичная динамика самоорганизации ДД-мезоструктур (наноструктур) может быть прослежена с помощью дифракции рентгеновского излучения с временным разрешением. Отметим в связи с этим, что в работе [10] с использованием синхротронного излучения изучена с временным разрешением динамика образования нанометровых решеток рельефа поверхности в Si. Предсказываемые в на-

стоящей работе особенности динамики самоорганизации (нарастание амплитуд с одновременным сужением спектра и его сдвигом в длинноволновую сторону (рис. 2)) находятся в соответствии с экспериментальными данными [10].

Список литературы

- [1] V.I. Emel'yanov. *Laser Physics* **6**, 2, 423 (1996).
- [2] В.И. Емельянов, И.М. Панин. *ФТТ* **39**, 11, 2029 (1997).
- [3] V.I. Emel'yanov, I.M. Panin. In: *Nanostructures: Physics and Technology-97. International Symposium. Abstracts of invited lectures and contributed papers. Saint-Petersburg, Russia (1997)*.
- [4] Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела*. Наука, М. (1978).
- [5] С.Т. Конобеевский. *Действие облучения на материалы*. Атомиздат, М. (1967).
- [6] V.I. Emel'yanov, Yu.G. Shlykov. *Laser Physics* **4**, 1, 1 (1994).
- [7] В.П. Вейко, Я.А. Имас, М.Н. Либенсон и др. *Изв. АН СССР* **49**, 6, 1236 (1985).
- [8] V.I. Emel'yanov. *Laser Physics* **2**, 389 (1992).
- [9] В.И. Емельянов. *Квантовая электроника* **28**, 2 (1999).
- [10] S. Song, S.G.J. Mochrie, G.B. Stephenson. *Faceting kinetics of stepped Si surfaces, Researches in Materials, Annual Reports of Massachusetts Technological Institute, USA (1995)*. P. 309.