

Каденова Б.А.

## ДИНАМИКА КОНЦЕНТРАЦИОННО-ДЕФОРМАЦИОННО-ТЕПЛОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

*B.A. Kadenova*

## DYNAMICS OF CONCENTRATION-DEFORMATION-THERMAL INSTABILITIES

УДК.-622/89.23.5

*При моделировании возникновения нелинейных деформационно-концентрационных структур в облучаемых твердых телах рассматривались нелинейные задачи. Получена система уравнений для описания кооперативной динамики подсистемы беспорядка и упругой в континуальном приближении. Она включают в себя стороны неоднородных полей носителей беспорядка и температуры, ангармонизма колебаний узлов решетки, дисперсионных и диссипативных эффектов и диффузионно-кинетические уравнения для энергии и концентрации беспорядка.*

*In the modeling of nonlinear strain-concentration structures in irradiated solids there have been considered non-linear tasks. A system of equations to describe the cooperative dynamics of the subsystem of disorder and the elastic continuous approximation has been received. It includes part of inhomogeneous fields, the carriers of disorder and temperature, anharmonicity of vibration of the lattice sites, dispersive and dissipative effects and the diffusion-kinetic equations for the energy and concentration disorder.*

Для управления образованием структур в твердом теле необходимо знание механизмов соответствующих неустойчивостей, разработка их моделей и расчет условий возникновения.

Неустойчивости, возникающие в твердом теле при радиационном воздействии, могут быть классифицированы по соответствующим нелинейным взаимодействиям, приводящим к образованию обратных связей. На ранней стадии рассматривался ряд конкретных механизмов; нелинейное взаимодействие при рекомбинации дефектов на центрах типа комплексов дефект-примесь [1]; потеря устойчивости однородного состояния системы точечных дефектов, связанная с их восходящей диффузией по градиенту концентрации примеси замещения [2]; механизм, обусловленной эффектом вакансионного "ветра" отклонением от локальной нейтральности при возникновении флуктуаций концентраций примесей [3]. Хотя отмеченные механизмы неустойчивостей имели вполне определенные условия реализации, они носили весьма частный характер.

В работах Емельянова с сотрудниками [4,5] была предпринята попытка анализа проблемы с более общих позиций. Для различных ситуаций рассматривалось развитие поверхностных неустойчивостей в системе взаимодействующих полей деформации, температуры и концентрации дефектов. Эти неустойчивости получили название концентрационно-деформационно-тепловых неустойчивостей (КДТН). При КДТН флуктуацион-

ная гармоника поля упругих деформацией среды модулирует какой-либо параметр, контролирующей пространственно-временное распределение концентрации дефектов и температуры (энергию миграции дефектов, скорость дрейфа, скорости генерации и рекомбинации дефектов). Модуляция этих величин приводит к образованию периодических пространственно-временных полей концентрации дефектов и температуры. Эти силы при определенных критических условиях приводят к нарастанию флуктуаций исходной деформации и развитию КДТН с экспоненциально-временным ростом амплитуд Фурье-гармоник полей возмущения температуры и концентраций. Развитие теории КДТН с образованием периодических структур началось с рассмотрения электронно-деформационно-тепловой неустойчивости при межзонных переходах в полупроводниках, приводящей к фазовому переходу полупроводник-металл с образованием периодических структур разных фаз [5]. В этом случае роль подсистемы дефектов играют электронно-дырочные пары.

Общая модель КДТН была предложена в [4, б] помимо того, что она охватывает довольно широкий класс неустойчивостей, возникающих под действием радиационного излучения. Ряд ее аспектов может быть перенесен и на другие типы неустойчивостей.

Нами в [7,8] рассмотрено моделирование процессов образования дефектов и упорядоченных структур при радиационном облучении ЦГК.

В данной работе рассмотрены процессы, развивающиеся в твердом теле при взаимодействии его с ионизирующим излучением, математическое описание этих процессов и образования упорядоченной структуры мелких скоплений дефектов в твердом теле под действием радиационного облучения на основе модели концентрационно-деформационно-тепловых неустойчивостей (КДТН) в ионных кристаллах.

Рассмотрим изотропное твердое тело, в котором под воздействием концентрированного потока энергии (ионного облучение, поток высокоэнергетических частиц) генерируются подвижные точечные дефекты.

Пусть  $n(r, t)$  - концентрация дефектов типа  $j$  ( $J = \&$  для вакансий,  $j = I$  для межузлий,  $I = r$  для примесей) в точке  $r = (x, y, z)$  в момент времени  $t$ . Основными процессами, управляющими поведением во времени системы дефектов, являются диффузия, дрейфовое движения, взаимная аннигиляция и, наконец, поглощение на стоках. С учетом этих

процессов уравнения, описывающие кинетику дефектов, можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial n_j(r, t)}{\partial t} + \text{div} j_j(r, t) = \Theta_j(r, t) - L_j(r, t),$$

$$j_j(r, t) = -D_j \nabla n_j(r, t) + I_j n_j(r, t),$$

где  $\theta_j = \theta_j(T, \varepsilon)$  ( $T$ - температура среды,  $\varepsilon = dIu$  - упругая деформация среды,  $u$ - вектор смещения) - скорость генерации дефектов (для примесей  $\theta=0$ ). Уравнения (2) задают поток дефектов  $j_j(r, t)$ . Первое слагаемое характеризует диффузию с коэффициентом  $D_j = D_{j0} \exp(-E_{mj} / kT)$ ,  $E_{mj}$  - энергия активации диффузии. Второе слагаемое описывает дрейфовое движение дефектов со скоростью  $I_j = (D_j / kT) F_j$  под влиянием силы  $F_j = -U$ , обусловленной взаимодействием дефектов с неоднородным полем деформации.  $U = -K \Omega_j dIu$  - энергия взаимодействия одного дефекта с полем деформации,  $K$  - модуль всестороннего сжатия,  $\Omega_j$  - параметр, характеризующий изменение объема кристалла при образовании в нем одного дефекта: для вакансий или примесей малого радиуса  $\Omega_j < 0$ , для межузлий или примесей большого радиуса  $\Omega_j > 0$  ( $\Omega_j \approx d^3_0$ ,  $d_0$  - период решетки). В (1) последнее слагаемое описывает потери дефектов за счет процессов взаимной рекомбинации и поглощения на стоках  $L_j = L(\varepsilon, T)$ .

Дефекты в кристалле вызывают деформацию среды. Эти деформации можно найти из уравнения равновесия упругого изотропного тела [4].

$$p \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial x_k},$$

где  $u_i$ - компоненты вектора смещения,  $p$  - плотность среды. Связь между  $u_j$  и тензором деформации  $u_{jk}$  имеет вид:  $u_{jk} = (ju_k + ku_j) / 2$ .

Для определение тензора механических напряжений  $i_{jk}$  выпишем выражение для плотности свободной энергии упругого континуума [3];

$$F = K \frac{u_i^2}{2} + \mu (u_{jk} - \delta_{jk} \frac{u_{ii}}{2})^2 + \sum_j K \Omega_j u_{ii} n_j - K \alpha_T T u_{ii},$$

(4)

где  $\mu$ - модуль сдвига,  $\alpha_T$  - коэффициент теплового расширения. При записи (4) центры дилатации выбирались изотропными, т.е.  $\Omega_{kl} = \Omega_j \delta_{kl}$ . Тогда для  $i_{jk}$  согласно формуле  $i_{jk} = \partial F / \partial x_k$  имеем

$$\sigma_{jk} = K u_{ii} \delta_{jk} + 2\mu (u_{jk} - \delta_{jk} \frac{u_{ii}}{2}) + \sum_j K \Omega_j n_j - K \alpha_T T.$$

Подставляя выражения для  $i_{jk}$  в (3), получим следующее уравнение для вектора смещения  $u$ :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c_l^2 \Delta u + (c_l^2 - c_t^2) \text{grad}(\text{div} u) + \sum_j \frac{k}{p} \Omega_j \text{grad} n_j,$$

где  $c_l, c_t$  - продольная и поперечная составляющие скорости звука. Третье слагаемое в правой части уравнения (5) описывает концентрационные напряжения, обусловленные дефектами, а четвертое - термоупругие напряжения, связанные с неодно-

родным полем температуры. Функция  $G_N(u)$  учитывает ангармонизм упругой среды.

Уравнение для температуры среды запишем в виде

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \chi \Delta T = Q + \sum_{j=l,v} \theta_j \beta_j n_j + \Theta_{iv} \mu_R n_v n_i.$$

Первый член в правой части (6)  $Q=Q(T, n_j, \varepsilon)$  описывает нагрев среды внешним потоком энергии, а остальные два слагаемых характеризуют разогрев кристалла за счет тепловыделения при поглощении на стоках ( $\beta_j$  - скорость поглощения) и взаимной рекомбинации точечных дефектов ( $\mu_R$  - вероятность рекомбинации);  $\theta_l, \theta_{ll}$  - соответствующие энергии, выделяемые в единичном объеме. По порядку величины ( $\theta_j \approx E_{ff}$  - энергия образования дефекта типа  $j$ ),  $\theta_l + \theta_{ll} < \theta_{ll}$ .

При рассмотрении КДТН на поверхности уравнения (1-6) необходимо дополнить соответствующими начальными и граничными условиями. На свободной поверхности ( $z=0$ ) имеем

$$D_j \frac{\partial n_j}{\partial z} - K \Omega_j n_j \frac{D_j \partial^2 u_z}{kT \partial z^2} = S_j n_j, \quad \chi \frac{\partial T}{\partial z} = \sum_{j=l} \Omega_j n_j S_j,$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} = 0,$$

$$-\frac{K \alpha_T}{\rho_1^2} T + \frac{K}{\rho c_1^2} \sum_{j=v,l,p} \Omega_j n + \frac{\partial u_z}{\partial z} + (1 - 2\beta_c) \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = 0,$$

А для  $z=\infty$

$$n_j(x, y, \infty, t) = T(x, y, \infty, t) = n_j(r, 0) = T(r, 0) = 0,$$

где  $S_j$  - скорость поверхностной рекомбинации дефектов, ось  $z$  направлена в глубь среды;  $\beta_c = c_r^2 / c_l^2$ .

Уравнения (1)-(6) совместно с условиями (7) и (8) представляют собой замкнутую систему уравнений, единым образом описывающую динамику развития КДТН как на поверхности, так и объеме твердого тела, находящегося под действием внешних потоков энергии.

#### Литература:

1. Вернер И.В., Цуканов В.В. ЖТФ. 1985. №55,- С.22-36.
2. Девятко Ю.Н, Тронин В.Н. Письма в ЖЭТФ. 1983. №37,- С.278-281.
3. Васильевский М.И., Ершов С.Н., Пантеев В.А. ФТТ. 1985. № 27, -С.22-27, №27-0.82-85.
4. Мирзоев Ф.Х., Емельянов В.И., Шелепин Л.А. Квант.электрон. 1994. №21, -С.769-772.
5. Емельянов В.И., И.Ф. Уваров ЖЭТФ. 1988. № 94,- С. 255-258.
6. Mirzoei F.Kh, Panchenko I Ya, ShelepIn L A J. Lazer Retarch. 1989. №10, - С. 404-406.
7. Каденова Б.А. «Моделирование процессов радиационного дефектообразования в щелочно-галоидных кристалла». Известия КГТУ, Б., 2011. №24, -С. 134-136.
8. Каденова Б.А. «Моделирование процессов упорядоченных структур радиационных дефектов в ЦГК». Наука и новые технологии. Б., 2011, №5, - С.3-5.

Рецензент: д.ф.-м.н., профессор Арапов Б.