

Самоорганизация локализованных и периодических концентрационно-деформационных структур в твердых телах

Ф. Х. Мирзаде

Выполнен цикл фундаментальных теоретических исследований а) по изучению процессов формирования локализованных и периодических концентрационно - деформационных структур (волны переключения и солитонов или последовательности солитонов) в подсистеме носителей локального беспорядка; б) по моделированию процессов самоорганизации нанодефектов и наночастиц при воздействии внешних потоков энергии (лазерного облучения, пучков высокоэнергетических частиц) на твердые тела. Исследования проводились в целях изучения механизмов генерации и синергетических особенностей распространения волн упругих деформаций (а также спаренных с ними волн носителей беспорядка и температуры). Эти результаты могут служить основой для разработки оптимальных методов микро- и наноструктурирования поверхности твердых тел и тонких пластинок с помощью концентрированных потоков энергии, а также методов прогнозирования поведения материалов оптоэлектроники, эксплуатируемых в экстремальных условиях. Предложенные модели могут быть также использованы для описания прогнозирования механического поведения и деградации (разрушения) проводящих элементов (линий или дорожек металлизации) интегральных микросхем

Основные результаты сотрудников ИПЛИТ РАН

1 По исследованию локализованных концентрационно-деформационных структур

- В рамках термодинамики необратимых процессов сформулирована замкнутая нелинейная система уравнений для описания динамической самоорганизации деформационно-концентрационных микронных и нанометровых структур в упругих твердых телах и слоях (пленках), характеризующихся различными физическими свойствами – генерацией неравновесных носителей локального беспорядка (атомных дефектов и их кластеров), внутренней структурой, термоупругостью, физической и геометрической нелинейностями.
- Выведены новые нелинейные эволюционные диссипативно - дисперсионные уравнения для описания самосогласованного поля продольной деформации в нелинейных твердых телах и проанализированы их точные и приближенные решения. Выявлены режимы, когда генерируются и распространяются локализованные (солитоноподобные или кинковое) и периодические (кноидальные) нелинейные дисперсионные волны деформации (и спаренные с ними волны концентрации локального беспорядка и температуры). Определены вклады в акустические характеристики (линейный и нелинейный модули упругости, коэффициент затухания звука), а также в диссипативные и дисперсионные свойства среды, обусловленные беспорядком – деформационным взаимодействием.
- Предсказан механизм и разработана теория возникновения медленных (со скоростью 0.1-10 см/с) локализованных волн в подсистеме носителей локального беспорядка кристалла при воздействии лазерных импульсов. Установлено, что волны переключения концентрации беспорядка возникают благодаря S – образной концентрационной нелинейности функции генерации беспорядка из узлов решеток, связанной с модуляцией (за счет деформационного потенциала) энергии активации носителей, при учете поля упругой деформации, обусловленного самими носителями. Раскрыт физический механизм твердофазной аморфизации металлов и полупроводников в поле лазерного излучения, как процесса генерации волны переключения концентрации беспорядка. Установлено, что первоначально имеющийся в кристалле нанокластер также может служить источником возбуждения локализованных волн плотности носителей. Определены условия

возбуждения нелинейных волн беспорядка, их профиль, скорость и направление распространения.

2 По исследованию самоорганизации нанокластерных систем

- Предложена синергетическая модель пространственной самоорганизации ансамбля нанокластеров различных видов (дискообразных, сферических, самоподобных (фрактальных)), как открытой неупорядоченной нелинейной диссипативной системы, далекой от термодинамического равновесия. Моделирование самоупорядочения кластеров проведено на основе самосогласованной системы уравнений для функции распределения кластеров и концентрации носителей беспорядка (мономеров), учитывающих движение (как детерминированное, так и флуктуационное) частиц в пространстве размеров и в обычном пространстве, диссоциацию кластеров, истощение пересыщения метастабильной фазы. Показано, что относительно кластеров (активатора) осуществляется положительная обратная связь, приводящая к нарастанию неоднородных флуктуаций их концентрации. Процесс нарастания активатора контролируется локальными носителями беспорядка (ингибитором), по которым осуществляется отрицательная обратная связь. Потеря устойчивости однородного состояния ансамбля мономеров и их кластеров происходит, если кластеры менее подвижны чем мономеры, и ингибитор не может эффективно подавлять локальные флуктуации активатора. Определены порог самоорганизации и период сверхструктур в зависимости от физических свойств среды и внешней накачки.
- Исследовано влияние кластеризованной структуры исходной метастабильной фазы на процессы нанокристаллизации в конденсированных системах. Моделирование кристаллизации проведено с учетом образования в метастабильной фазе нанокластеров, возникновения и роста частиц кристаллической фазы за счет присоединения нанокластеров. Показано, что в таких полидисперсных системах возможно появление самоподдерживающихся связанных колебаний пересыщения кристаллизующегося вещества, плотности нанокластеров и функций распределения частиц новой фазы. Раскрыт физический механизм появления таких автоколебаний и определены их характеристики (амплитуда, период).

По данной теме опубликовано свыше 40 работ в ведущих отечественных и зарубежных журналах

(Успехи физических наук; Журнал технической физики; Письма в ЖТФ; Поверхность; Acoustical Physics; J. Appl. Phys.; J. Nanoscience and Nanotechnology; Phys. B; Phys. Stat. Sol. (b); J. Phys.: Appl. Phys.; J. Phys.: Cond. Matter; J. Phys. Chem. Solids), имеющих высокий Impact Factor.

Список основных публикаций

1. Мирзаде Ф.Х., Панченко В. Я., Шелепин Л. А. Лазерное управление процессами в твердом теле // Успехи физических наук. Т. 166. №1. С.3-33 (1996).
2. Mirzade F. Kh. A model for the propagation of strain solitary wave in solids with relaxing atomic defects // *J. Applied Physics* Vol. 103. No.3. P. 044904 1-8 (2008)
3. Mirzade F. Kh. Strain solitary wave propagation in laser-excited solids // *Phys. Stat. Sol. Basic solid state physics*. Vol 245. No4. P.681-688 (2008)
4. Mirzade F.Kh., Alekverdiev K.R. and Salaeva Z.Yu. Self-organization of nanometer periodic structures of clusters in solids. // *J. Nanoscience and Nanotechnology*, Vol.8. No 3. P. 764-767 (2008)
5. Mirzade F. Kh., Alekverdiev K.R., Baykara T. K. A model for the propagation of non-linear dispersive strain waves in a solid with defect clusters // *J. Phys. Chem. Solids* Vol. 69.No.10. P.2390 – 2395 (2008)

6. Mirzade F. Kh. Finite-amplitude strain waves in laser-excited plates. // *J. Phys.: Condens. Matter*. Vol. 20. No. 27. P.275202 (2008)
7. Мирзаде Ф.Х. Двумерные деформационно-концентрационные структуры в упругих пластинах // *Нелинейный мир*, Т.6. N5/6. С.381-390 (2008)
8. Mirzade F.Kh. Influence of flexoelectricity on the propagation of nonlinear strain waves in solids. // *Phys. Stat. Sol. Basic solid state physics*. Vol. 244. No.2. P.529-554 (2007)
9. Мирзаде Ф.Х., Шелепин Л.А. Нелинейные продольные волны с учетом взаимодействия полей деформации, температуры и неравновесных атомных дефектов // *Акустический журнал*. Т.53. N6. С.766-773 (2007)
10. Mirzade F. Kh. Self-generated Oscillations in Bulk Crystallization Processes, *J. Physics D: Applied Physics*, Vol.39. No.7, P.1437-1441 (2006)
11. Mirzade F. Kh. Non-linear longitudinal strain waves in a non-linearly elastic plate with atomic defect generation, *Physica B: Physics of Condensed Matter*. Vol.271. No 1. P.163-169 (2006).
12. Мирзаде Ф.Х. Нелинейные продольные волны взаимодействующих полей деформации и концентрации атомных дефектов в кремнии и германии, *Физика и техника полупроводников*. Т.40. N3. С. 269-275 (2006)
13. Мирзаде Ф.Х. Самоорганизация пространственно-неоднородных структур в процессах объемной кристаллизации полидисперсных систем // *Журнал технической физики*. Т. 51. No.9. С.1183-1189 (2006)
14. Mirzade F. Kh. Non-linear longitudinal strain waves interacting with atomic defects in metal plates. *J. Applied Physics*. Vol.97. No8. P. 084911 (2005).
15. Mirzade F.Kh. Nonlinear elastic longitudinal strain waves in a plate with non-equilibrium laser-generated point defects, *Physica B: Physics of Condensed Matter*. Vol.368. P.140-153 (2005)
16. Mirzade F.Kh. Non-linear longitudinal strain waves propagating in an elastic plate with non-equilibrium atomic defects, *Phys. Stat. Sol. Basic solid state physics*. Vol. 238. No.11, P.3099-3112 (2005)
17. Мирзоев Ф.Х., Шелепин Л.А. Роль нанокластеров кристаллизующегося компонента в процессах объемной кристаллизации. *Письма в ЖТФ*. Т.28/ N1. С. 15–22 (2002)
18. Мирзаде Ф.Х. Распространение нелинейных продольных волн в твердом теле с учетом взаимодействия полей деформации и концентрации дефектов // *Журнал технической физики*. Т.72. N10. С. 53–57 (2002)
19. Мирзаде Ф.Х., Шелепин Л.А. Нелинейные волны деформации и плотности дефектов в металлических пластинах при воздействии внешних потоков энергии // *Журнал технической физики*. Т.71. № 8.С. 23–26 (2001)
20. Mirzoev F.Kh. and Shelepin L.A. Nonlinear longitudinal strain waves in a solid exposed to pulsed laser radiation // *J. Laser Research*. Vol. 23. No5. P. 409–442 (2002)
21. Mirzoev F.Kh. and Shelepin L.A. Localized States in a System of Defects in Crystals under Laser Exposure // *J. Laser Research*. Vol. 20. No5. P. 404–420 (1999)
22. Мирзаде Ф.Х. Волна переключения плотности дефектов в кристаллах при импульсном лазерном воздействии // *Журнал технической физики*. Т. 68. №8. С. 73–77 (1998)
23. Мирзоев Ф.Х., Шелепин Л.А. Распространение фронта волны генерации дефектов в твердом теле при лазерном воздействии // *Письма в ЖТФ*. Т.22, вып. 13. С. 28–32 (1996)

Исследованию локализованных концентрационно-деформационных структур

Самоорганизация концентрационно-деформационных (локализованных и периодических) структур различной природы является одним из ярких проявлений нелинейного поведения твердых тел при интенсивных внешних воздействиях (лазерное и электронно-лучевое воздействия, ионная имплантация и т.д.). Повышенный интерес к данной проблеме обусловлен, с одной стороны, перспективностью использования этих волновых структур в нелинейной и прикладной акустике, акустической спектроскопии, лазерной оптоакустике, радиационной акустике, а с другой – необходимостью развития общей теории нелинейных динамических деформационных процессов в неравновесных конденсированных системах.

Теория нелинейных деформационных волн в твердых телах является научной базой, как для прогнозирования прочности и долговечности твердотельных элементов конструкций, так и для разработки новых методов и средств измерения, неразрушающего контроля и диагностики.

Высокочастотные акустические волны являются высокоинтенсивным инструментом исследования напряженного и деформированного состояний, микроструктуры и физических параметров кристаллов, горных пород и минералов, а также различных фазовых превращений. Важным свойством нелинейных волн деформаций в твердых телах, как кооперативной формы движения частиц среды, является возможность передачи по среде энергии и импульса без переноса вещества. Нелинейные волны деформации способны распространяться на достаточно большие расстояния с сохранением своей формы и сохранять свою локализованную природу при усилении или ослаблении. Методы акустической диагностики и неразрушающего контроля, базирующиеся на нелинейных эффектах, в настоящее время получили широкое распространение в геофизике, ядерной энергетике, медицине, материаловедении. В последние годы теория волн деформаций в нелинейных твердых телах активно развивалась в работах Энгельбрехта Дж., Самсонова А М, Порубова А В, Ерофеева В И, Потапова А И и других.

Комплексный подход к созданию новых перспективных материалов, современных методов контроля и диагностики свойств элементов конструкций, эксплуатируемых в экстремальных, или близких к экстремальным, условиях (интенсивных импульсных (лазерно-лучевых и радиационных) внешних воздействий, высоких температур и давлений, и т. д.), требует учет структурных явлений и процессов происходящих на микро - и мезоскопическом уровнях в среде. Структурные изменения на микроуровне происходящие на масштабах межатомных расстояний ($10^{-8} - 10^{-7}$) см, могут быть обусловлены генерацией носителей локального беспорядка – атомных дефектов (вакансий (v-дефектов) и междоузельных атомов (i-дефектов)) и их комплексов) кристаллического строения. Структурные изменения на мезоуровне (на масштабах порядка нескольких или десятков нанометров) происходят благодаря динамической самоорганизации носителей беспорядка образованием локализованных (кластерных) и пространственно-периодических сверхструктур нанометрового масштабов. Здесь традиционные линейные методы, основанные, например, на измерении скоростей упругих волн не пригодны для получения определенного результата. Для понимания физической природы процессов, происходящих в среде при интенсивных внешних воздействиях, необходимо детальное изучение особенностей ее нелинейного отклика. В структурно-неоднородных и неупорядоченных средах часто наблюдаются качественно новые нелинейные эффекты, не имеющие аналогов в классической теории упругости.

Изучение макроскопических упругих и акустических свойств во взаимосвязи с локальным беспорядком структуры твердых тел, подвергаемых различным интенсивным внешним воздействиям, является научной основой для обеспечения контроля за эволюцией их внутренней микроструктуры и, несомненно, представляет научный и практический интерес. От решения этой актуальной задачи зависит успешное внедрение нелинейных методов акустодиагностики структурно-неоднородных твердых тел. В твердых телах с релаксирующими неравновесными носителями беспорядка могут проявиться дополнительные дисперсионные и диссипативные эффекты (как линейные, так и нелинейные), вызванные взаимодействием поля деформации в акустической волне с подсистемой носителей. В нелинейном случае наличие диссипативных механизмов могут приводить к существованию новых типов нелинейных (локализованных или периодических) деформационных волн, а также спаренных с ними концентрационных волн (волн генерации или рекомбинации) носителей.

Для лазерной технологии полупроводников исследование нелинейной волны деформации во взаимосвязи с носителями беспорядка представляет интерес в связи с переносом акустическими волнами энергии лазерного излучения на расстояния, существенно превышающие размеры области ее поглощения. Если плотность переносимой энергии достаточно велика, нелинейные акустические волны могут быть одним из источников так называемого “эффекта фотомеханического дальнего действия”, возникающего при лазерном воздействии на полупроводниковые структуры. Генерация волн деформаций (в том числе солитонов деформаций) активно используется также для понимания физических механизмов ионно-лучевого геттерирования, широко применяемого в современной микроэлектронике для улучшения электрофизических характеристик тех или иных приборных слоев.

Упругие напряжения сопровождают создание различных полупроводниковых гетероструктур и формирование инородных фаз при распаде пересыщенных растворов примесей в кристаллах (например, кислорода в кремнии). Деформация в упругой волне изменяет энергетические параметры взаимодействия v(i)-дефектов и примесей, образования нанокристаллов в разупорядоченных слоях кремния. Введение подвижных носителей

беспорядка в напряженные структуры приводит к релаксации напряжений, а значит и к переходу системы кристалл – примесь в более устойчивое состояние.

Распространяющиеся в конденсированной среде нелинейные акустические волны несут информацию об искажениях их формы и скорости, потерях энергии, обусловленных носителями локального беспорядка, что необходимо для диагностики (например, оптико-акустическими методами) внутренней структуры и разнообразных физических свойств твердых тел.

Исследование нелинейной динамики волн деформаций в среде с учетом взаимодействия с подсистемой локального беспорядка и знание механизмов этого взаимодействия представляет теоретический и практический интерес также при изучении процессов механической активации компонентов при твердофазных химических реакциях, при анализе механизмов аномального массопереноса, обнаруженного при лазерной и ионной имплантации металлических материалов.

Локальные нарушения кристаллического порядка, обусловленные присутствием структурных дефектов различного происхождения, наличие в эффективном гамильтониане нескольких типов конкурирующих взаимодействий, характеризующих состояние сложной системы, могут играть важную роль в поведении реальных материалов и физических систем. Эти факторы могут индуцировать распространение новых типов волн, модифицировать физические и механические свойства системы.

1 Механизмы взаимодействия акустических волн с носителями локального беспорядка и некоторые их проявления. Нами проанализированы различные механизмы и разработаны теории взаимодействия носителей беспорядка с упругими полями континуума и некоторые их проявления в механических и физических свойствах кристаллических твердых тел. Рассмотрены наиболее универсальные механизмы, проявляющиеся в области высоких температур и пригодные для моделирования роли структурного беспорядка при воздействии высокоинтенсивных потоков энергий на твердые тела. Наличие носителей локального беспорядка в твердом теле, изменение типа или концентрации этих носителей, существенно влияют на процессы, происходящие в среде, и в частности, на характеристики распространения акустических волн. Характер этого влияния определяется, во-первых, величиной взаимодействия локального беспорядка с упругими колебаниями решетки и, во-вторых, параметрами самой подсистемы носителей локального беспорядка (например, временем релаксации беспорядка, коэффициентом диффузии).

Большая концентрация носителей локального беспорядка приводит к возникновению в среде дальнедействующих полей внутренних механических (концентрационных) напряжений. Эти напряжения возникают вследствие искажений (деформации) кристаллической решетки вблизи локального беспорядка, связанных с разрывом межатомных связей. В результате этих локальных искажений беспорядок может взаимодействовать с однородным полем деформаций или напряжений, приложенных к кристаллу или с другим беспорядком, через поле упругого континуума.

В рамках континуальной теории упругости гамильтониан взаимодействия одного локального беспорядка с упругим полем деформации $H_{\text{int}}(\vec{r}, t) = -\mathcal{G}_{ik} u_{ik}(\vec{r}, t)$, где \mathcal{G}_{ik} – тензор деформационного потенциала. Здесь имеется прямая аналогия с взаимодействием электрического диполя с внешним приложенным электрическим полем. Беспорядок, который создает вокруг себя локальные деформации решетки, можно рассматривать как упругий диполь. Однако в отличие от электрического диполя, характеризующегося векторной величиной – дипольным моментом, для описания упругого диполя можно использовать тензор второго ранга, поскольку он взаимодействует с тензорным полем напряжений. Компоненты тензора деформаций при введении носителей локального беспорядка задаются выражением: $u_{ik} - u_{ik}^0 = \sum_{j=i,v} \Omega_{ik}^{(j)} n^{(j)}$, где u_{ik} , u_{ik}^0 – компоненты тензора деформации среды с носителем беспорядка и в их отсутствие; $\Omega_{ik}^{(j)}$ – симметричный тензор, характеризующий деформацию решетки при образовании в ней одного беспорядка. Локальный беспорядок (v-дефекты и i-дефекты) представляется в виде замещающего атома, соответственно, меньшего и большего объема по отношению к атомам матрицы; причем для v-дефектов $\Omega_{ik}^{(v)} = -\delta^{(v)} \Omega < 0$ (коэффициент $\delta^{(v)} = 0.2 - 0.4$, Ω – атомный объем), для i-дефектов $\Omega_{ik}^{(i)} = \delta^{(i)} \Omega > 0$ (коэффициент $\delta^{(i)} = 1.7 - 2.2$).

Все многообразие механизмов БД - взаимодействий можно разбить на две группы – прямые и косвенные.

К первой группе можно относить взаимодействия, происходящие непосредственно, путем уменьшения энергетических характеристик самих единиц локального беспорядка благодаря деформационному потенциалу. Деформации в упругой волне благодаря изменению энергии активации диффузии изменяет характер движения локального беспорядка, то есть, вызывает поток беспорядка: $\vec{J}_{dr} = n\mu_d \nabla u_{ik}$, где μ_d – подвижность беспорядка, имеющая смысл средней скорости направленного движения беспорядка под действием термодинамической силы; $\vartheta_{ik} = K\Omega_{ik}$ – деформационный потенциал; K – объемный модуль упругости

Деформации и изменение температуры в упругой волне модулируют вероятности генерации и рекомбинации термофлуктуационных носителей беспорядка, через изменения их энергетических характеристик (для нетермического беспорядка данный тип взаимодействия отсутствует).

Если $\vartheta_{f,m}^{(j)}$ – деформационные потенциалы активации образования и диффузии локального беспорядка типа j , то энергия взаимодействия с упругим полем: $E_{int}^{(j)} = -\vartheta_{f,m}^{(j)} u_{ii}$. Тогда перенормированные энергии образования и диффузии беспорядка $E_{f,m}^{(j)}(r)$ в деформированном кристалле, в линейном по упругим деформациям приближении, можно представить в виде $E_{f,m}^{(j)}(\vec{r}) = E_{f,m0}^{(j)} + E_{int}^{(j)} = E_{f,m0}^{(j)} - \vartheta_{f,m}^{(j)} u_{ii}$, где $E_{f,m0}^{(j)}$ – энергия образования и миграции беспорядка в недеформированном кристалле (Энергия образования локального беспорядка – это есть энергия, необходимая для переноса какого-либо атома из объема кристалла в положение более низкой энергии на его поверхности. По порядку величины она равна энергии сублимации E_s , поскольку в обоих случаях должно быть разорвано одно и то же число межатомных связей). Изменение энергетических характеристик локального беспорядка в поле деформации изображено на [рис.1](#). При учете нелокального характера взаимодействия беспорядка с полем упругого континуума энергия взаимодействия имеет вид $E_{int} = -\vartheta u_{ll} - \vartheta a_0^2 \Delta u_{ll}$. В этом случае модуляции энергетических характеристик содержат не только однородные части, но неоднородные части, обусловленные градиентом поля деформации.

Деформационно-стимулированная рекомбинация частиц приводит к соответствующей модуляции объемного источника тепла. Эти модуляции могут быть определены с помощью уравнения активационного типа.

В примесных кристаллах энергия, запасенная неравновесными атомными дефектами значительно больше, что обусловлено возможностью накопления дефектов за счет малой подвижности тех из них, которые захвачены примесными атомами. Комплексы дефектов создают значительные искажения решетки и могут взаимодействовать с полем упругих деформаций. С наличием комплексов могут быть связаны различные эффекты и явления (в том числе, волновые деформационные) в твердых телах.

Распространяющаяся волна деформации взаимодействуя с комплексами создает в области взаимодействия локальное уменьшение активационного барьера распада (энергии связи) комплексов. Это приведет к усилению диссоциации комплексов и высвобождению захваченных на ловушки атомных дефектов, которые будут рекомбинировать на центрах в объеме или выйти на поверхность. Процессы рекомбинации в свою очередь сопровождаются локальным тепловыделением и

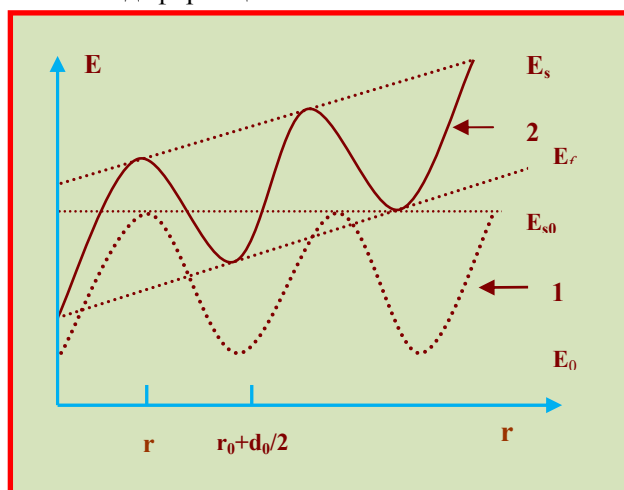


Рис 1. Зависимость межатомной потенциальной энергии локального беспорядка от координаты в недеформированном (1) и деформированном (2) кристалле

деформацией среды. Кроме того, будет возникать деформационно-индуцированный ток комплексов.

В бинарных сплавах, находящихся под воздействием потоков энергий вследствие различия атомов разного сорта вокруг антиструктурного дефекта создаются упругие напряжения, которые приводят к взаимодействию между дефектами. В случае неоднородного распределения дефектов переходы атомов по разным направлениям не являются равновероятными из-за разности концентрации и энергий дефектов с разных сторон от рассматриваемой плоскости. Учет БД взаимодействия здесь приводит к появлению в кинетических уравнениях новых рекомбинационных и диффузионных слагаемых, обусловленных действием поля упругих напряжений.

Модуляции скоростей генерационно-рекомбинационных (ГР) процессов, вызванные изменением энергетических характеристик носителей беспорядка приводят к неоднородным распределениям их концентраций, а также температуры конденсированной среды. В результате появляются силы пропорциональные градиентам этих полей, дополнительно деформирующие решетку.

Если кристалл полупроводника обладает пьезоэлектрическими свойствами, то распространяющаяся звуковая волна будет сопровождаться электрическим полем, возникающим из-за пьезосвойств среды. Здесь основными типами взаимодействия являются: электромагнитная связь, связь через деформационный потенциал и пьезоэлектрическая связь. Электрическое поле, созданное звуковой волной, изменяет также вероятности перемещения заряженных носителей локального беспорядка в направлении поля. В пьезоэлектрических полупроводниках наблюдаются затухание и дисперсия волн деформаций из-за присутствия пространственных зарядов, создаваемых внутренними электрическими полями.

Установлено, что в кристаллах с центром симметрии (например, германий, кремний) определяющую роль может играть флексоэффект (аналог пьезоэффекта), связанный с возникновением электрической поляризации решетки, пропорциональной градиенту деформации. При флексоэффекте возникает дополнительный ток беспорядка, что сказывается на его кинетике. Кроме того, создается дополнительный флексоэлектрический потенциал (к потенциалу, обусловленному зарядом на беспорядке), который влияет и на ток беспорядка, и на значение энергии активации их образования, приводя к соответствующим изменениям локальной концентрации беспорядка, и как следствие, к их пространственному перераспределению.

Учет флексоэлектрического эффекта оказался существенным при исследовании взаимодействия свободных носителей (электронов и дырок) с полем деформации в непьезоэлектрических кристаллах. Флексоэлектрический эффект и деформационный потенциал обеспечивают одинаковую энергию взаимодействия между носителями тока и акустической волной. В облучаемых полупроводниках электростатический потенциал, обусловленный флексоэлектрическим эффектом составляет заметную величину и оказывает сравнимое с потенциалом, обусловленным свободными носителями, влияние на электрофизические свойства областей дефектообразования, а в ряде случаев полностью определяет их свойства.

Безусловно, деформация решетки влияет также на деформационные потенциалы локального беспорядка. Этот эффект легко может быть учтен, но он не приводит к качественным изменениям наших выводов, касающихся взаимодействия акустических волн с подсистемой носителей беспорядка структуры.

Косвенными являются механизмы, в которых упругая волна взаимодействует не с самими носителями локального беспорядка, а существующими в конденсированной среде коллективными возбуждениями, фононами, электронами и т.д. Наличие носителей беспорядка в этих механизмах проявляется в изменении характера движения последних.

Наличие в среде неравновесных носителей беспорядка с большой концентрацией и их взаимосвязь с полями упругой деформации и температуры при сопоставимых скоростях деформационных и ГР - и диффузионных процессов, могут оказаться существенными для эволюции нелинейных упругих возмущений в конденсированных средах. Так, обусловленные носителями локального беспорядка физические нелинейности, могут приводить к появлению релаксационных вкладов в решеточные упругие параметры (как в линейные, так и нелинейные модули упругости). Наличие в среде носителей с конечной скоростью релаксации может вызывать появление диссипативных (как линейных, так и нелинейных) слагаемых, отсутствующих в обычных уравнениях для звуковых волн. В нелинейном случае такие

диссипативные механизмы могут приводить к образованию упругих ударных фронтов малой интенсивности или солитоноподобных и кноидальных (периодических) волновых структур.

2. Кластеризация носителей беспорядка. Концентрационно-упругая неустойчивость.

Одним из важных проявлений кооперативного БД - взаимодействия является явление кластеризации носителей локального беспорядка – атомных дефектов, с образованием нанометровых $i(v)$ - кластеров. В наших работах процесс нанокластеризации трактуется как следствие потери устойчивости однородного распределения носителей беспорядка, взаимодействующих через созданные ими же поля упругой деформации (концентрационно-упругая неустойчивость КУН). КУН возникает, когда внешняя накачка (или средняя концентрация беспорядка) превышает некоторое критическое значение. Механизм возникновения КУН качественно можно объяснить следующим образом. Флуктуации концентрации локального беспорядка, будучи упругими включениями, создают деформацию упругого континуума, что в свою очередь приводит к появлению деформационно-индуцированного дрейфа носителей. За счет перераспределения локального беспорядка появляются силы, пропорциональные градиенту их концентрации и направленные в области сжатия (для v -дефектов с дилатационным объемом $\Omega^{(v)} < 0$), и в области растяжения (для i -дефектов с $\Omega^{(i)} > 0$). При превышении определенной критической концентрации (или скорости генерации беспорядка), эти силы усиливают малые флуктуации концентраций локального беспорядка, возникает неустойчивость концентрационного поля (а также поля упругой деформации среды).

Учет упругой деформации приводит к появлению дополнительного вклада в ток, направленного против обычной диффузии в системе с одним типом беспорядка ($\Omega^{(j)2} > 0$ для $\Omega^{(j)} > 0$ и $\Omega^{(j)} < 0$). Для систем с двумя типами беспорядка ($\Omega^{(i)}\Omega^{(v)} < 0$) дополнительный ток совпадает по направлению с диффузионным. Локальный беспорядок с $\Omega^{(j)} < 0$, например, v -дефекты или примесные атомы малого радиуса, вызывает сжатие кристаллической решетки (уменьшение объема кристалла), причем области сжатия являются притягивающими для беспорядка с $\Omega^{(j)} < 0$ и отталкивающими для беспорядка с $\Omega^{(j)} > 0$. Определены пороговые условия возникновения КУН и характерные масштабы критических неоднородностей.

Рассмотренный механизм формирования $v(i)$ -кластеров имеет определенную аналогию с образованием полярона, представляющего собой автолокализованное состояние электрона в ионных кристаллах. Благодаря КУН атомные дефекты лавинообразно автолокализуются в создаваемых ими же глубоких деформационных потенциальных ямах.

Эффект образования $v(i)$ -кластеров является одним из наиболее распространенных явлений, сопровождающих воздействие интенсивных внешних потоков энергии на конденсированные среды. Являясь важнейшими дефектами кристаллической решетки, $v(i)$ -кластеры могут приводить к изменению внутренней структуры материала. Он становится неоднородным, а это существенно влияет на различные макроскопические свойства. Изменяются прочностные характеристики, например, материал может становиться хрупким или распухать (увеличивать свой объем). Кластерные образования из различных атомных дефектов приводят к модификации свойств материалов: могут меняться их электрические (повышается электросопротивление), оптические (изменяется показатель преломления), магнитные свойства. Явление кластеризации атомных дефектов необходимо учитывать при прогнозировании поведения материалов, эксплуатируемых в экстремальных условиях (воздействия высокоинтенсивных частиц и лазерного облучения, ударных нагрузок, быстрого нагрева и охлаждения и т. д.), при синтезе перспективных материалов с заданными свойствами. Необходимость создания современных технологий, позволяющих управлять процессом образования и роста кластеров, стимулировала в последние годы всплеск интереса к исследованию кинетики кластеризации дефектов в конденсированных средах при различных внешних воздействиях.

Явление кластеризации носителей беспорядка может стать причиной деградации оптоэлектронных приборов (например, “фотоусталость” фоторезисторов и деградация светодиодов и полупроводниковых лазеров) и интегральных микросхем (ИМС), эксплуатируемых в экстремальных условиях. Так, возникновение и рост v - кластеров в результате КУН на границе раздела фаз пленка – субстрат при лазерном синтезе металлической и полупроводниковой пленок может быть причиной ослабления адгезии пленок, приводящем к

их отслоению. Формирование $v(i)$ - кластеров при деформационно-стимулированной и электродиффузии беспорядка в проводящих элементах (дорожках или линиях металлизации) ИМС, является главной причиной их деградации (разрушения). При электродиффузии в проводниках ИМС возникают растягивающие и сжимающие напряжения, обусловленные генерацией и аннигиляцией беспорядка. Градиент механических напряжений, в свою очередь, оказывает тормозящее воздействие на кинетику электропереноса. Результаты моделирование этих процессов и определение критерий возникновения кластеров позволят, рассчитать ресурс и надежность микросхемы в зависимости от физических и структурных параметров проводящих дорожек, а также предсказать оптимальные параметры микросхемы на этапе ее проектирования.

3. Концентрационно-деформационные структуры в твердом теле. При моделировании возникновения нелинейных деформационно-концентрационных структур в облучаемых твердых телах рассматривались нелинейные задачи, описывающие кооперативное динамическое поведение взаимосвязанных и взаимообусловленных полей деформаций, концентрации локального беспорядка и температуры среды. Нами была получена система уравнений для описания кооперативной динамики подсистемы беспорядка и упругой матрицы в континуальном приближении. Она включает в себя уравнение теории нелинейной упругости, с учетом сил действующих на решетку со стороны неоднородных полей носителей беспорядка и температуры, ангармонизма колебаний узлов решетки, дисперсионных и диссипативных эффектов, и диффузионно-кинетические уравнения для энергии и концентрации беспорядка.

Рассматривалось деформируемое твердое тело – сплошная среда, в которой под воздействием внешней накачки (лазерное облучение, пучки высокоэнергетических частиц (электронов, нейтронов)) генерируются подвижные нейтральные (электрически) носители локального беспорядка – атомные дефекты. Локальный беспорядок создает значительные искажения – расширение или сжатие кристаллической решетки. В результате этих искажений беспорядок взаимодействует с полем упругих деформаций. Поэтому любые концентрационные неоднородности вызывают в твердом теле появление внутренних концентрационных напряжений. Все виды изменений в упругой матрице и подсистеме локального беспорядка взаимообусловлены из-за связанности любых изменений концентрационных полей и индуцируемых ими полей деформаций (напряжений). Сказанное указывает на синергетическую природу происходящих в этих подсистемах явлений.

Твердое тело под облучением представляет собою открытую нелинейную диссипативную систему, которая эволюционирует в неравновесных условиях. Для описания взаимосвязанных изменений полей концентрации беспорядка, температуры и деформации используется свободная энергия единицы объема системы. В этом случае термодинамический потенциал деформируемого твердого тела характеризуется компонентами тензора деформаций $u_{ik}(\vec{r}, t)$, концентрацией беспорядка $n(\vec{r}, t)$ и температурой среды T .

Исходя из выражения для плотности свободной энергии и используя термодинамику необратимых процессов была получена замкнутая система уравнений для описания динамических кооперативных процессов самоорганизации в системе упругое поле-концентрация – температура с образованием упорядоченных (как периодических (пространственных и временных), так и локализованных) структур микронного и нанометрового масштабов. На основе этой модели (в пренебрежении переносом тепла потоком беспорядка и изменениями температуры, вызванными деформацией) развита теория самоорганизации стационарных концентрационно-деформационных пространственно – периодических структур в облучаемых тонких металлических пластинах (пленках), когда роль упругой деформации играет изгиб пластины. Этот процесс трактуется как диффузионная неустойчивость исходных однородных стационарных распределений беспорядка, возникающая в результате нелинейного взаимодействия беспорядка с полем упругой изгибной деформации пластины, вызывающего диффузионно – дрейфовое движение беспорядка. Получено и проанализировано дисперсионное соотношение неустойчивости. Определены порог самоорганизации, форма, период и амплитуда возникающих упорядоченных структур. Полученное выражение для периода сверхструктуры предсказывает его зависимость, кроме физических свойств конденсированной среды и внешней накачки, от кинетических характеристик системы беспорядка (например, время рекомбинации), что указывает на кинетический характер рассматриваемого фазового перехода из однородного состояния в неоднородное. С единых синергетических позиций исследована также возможность

возникновения стационарных локализованных состояний (структур в виде бегущих фронтов, солитонов) в плотных полях носителей беспорядка кристаллов, находящихся под воздействием лазерных импульсов. Возбуждение нелинейных структур в виде волнового фронта плотности беспорядка происходит благодаря концентрационной нелинейности процесса генерации (рекомбинации) носителей из регулярных узлов кристаллической решетки, связанной с модуляцией энергии активации их образования (миграции) при учете поля упругих деформаций, обусловленного самими носителями (рис.2). Основным типом структуры, характерным для таких бистабильных систем, является волна переключения (переброса) (рис.3). При распространении волны переброса

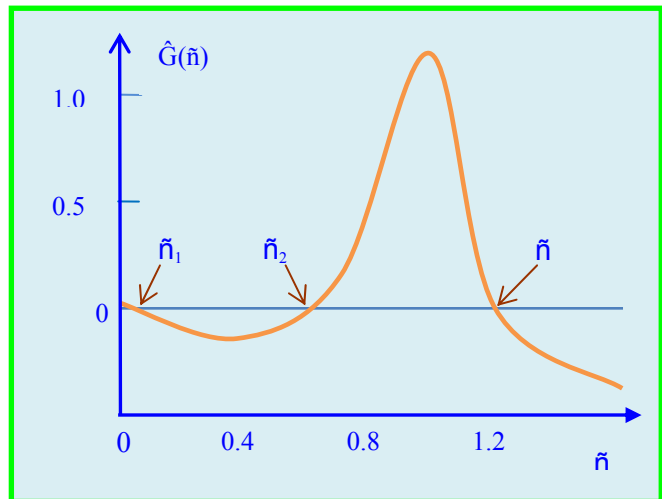


Рис.2. Зависимость безразмерной функции источника $\hat{G}(\tilde{n})$ от концентрации беспорядка ($\tilde{n}=n/\Omega_0$). Корни \tilde{n}_1 и \tilde{n}_3 устойчивы, корень \tilde{n}_2 – неустойчив

элементы среды переключаются из одного устойчивого состояния в другое. Состояние, отвечающее максимальной концентрации беспорядка эквивалентно аморфной фазе. При определении характеристик волны переключения использовалась формальная аналогия с уравнением ангармонического осциллятора. Установлено, что скорость волны переключения и ее профиль определяются собственными характеристиками среды, а также параметрами внешней накачки. С единых позиций, по формальной аналогии с распадом пересыщенных твердых растворов, дано описание кинетики различных стадий формирования плотной (высокодефектной) фазы в облучаемых кристаллах. Получено выражение для скорости роста частиц новой фазы, ее зависимости от температуры и параметров подсистемы дефектов среды.

На основе системы эволюционных уравнений для концентрации беспорядка и радиуса кластеров, показано, что первоначально имеющийся в кристалле (или генерирующийся в процессе внешнего воздействия) кластер определенного типа может служить источником возбуждения медленных (со скоростью 0.1-10 см/с) уединенных волн – солитонов, представляющих собой локализованные в пространстве движущиеся неоднородные распределения (сгустки) носителей. Это явление носит пороговый характер и имеет место, когда начальный радиус кластера в облучаемом кристалле превышает некоторое критическое значение, определяемое плотностью центров рекомбинации, модулем упругости,

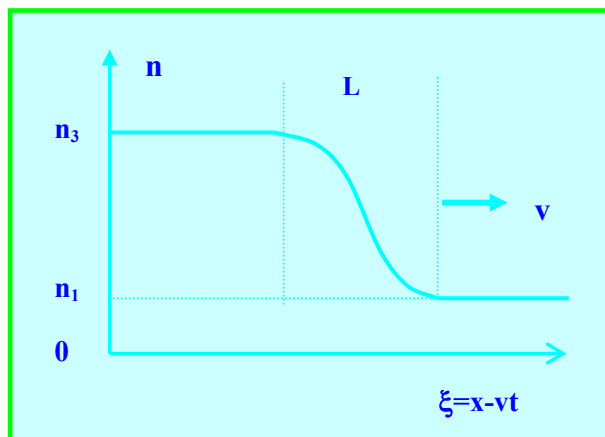


Рис.3. Распределение концентрации носителей беспорядка в волне переключения

дилатационным объемом беспорядка, а также температурой среды. Условия возникновения солитонов беспорядка, а также их профиль и скорость распространения существенно зависят от начальных значений радиусов кластеров. При более высоком значении начального радиуса кластера, волна плотности беспорядка распространяется с большей скоростью и имеет более резкий максимум, чем волна, распространяющаяся в среде с меньшим начальным радиусом кластера.

В целях изучения кооперативных эффектов самоорганизации упорядоченных концентрационно-деформационных структур решена динамическая задача о распространении продольных нелинейных волн в твердом теле с квадратичной и

кубической упругой нелинейностью, с учетом взаимодействия полей беспорядка и упругих смещений сплошной среды, а также дисперсии и диссипации. Взаимодействие упругих полей и подсистем беспорядка происходит по прямому механизму, т.е. благодаря модуляции энергий

активации образования и миграции беспорядка за счет их деформационного потенциала. Учет БД взаимодействия приводит к появлению в волновых уравнениях высших производных или интегральных операторов вольтерровского типа. Последнее обусловлено интегральной формой уравнения состояния. Полученные интегро-дифференциальные уравнения характерны для сред с релаксацией или памятью. В зависимости от значений параметра релаксации получены новые модельные дисперсно-диссипативные нелинейные эволюционные уравнения (НЭУ) для описания распространения нелинейной продольной волны упругих смещений.

Показано, что при малых временах релаксации беспорядка, НЭУ содержит, кроме линейного диссипативного слагаемого, также нелинейный диссипативный член, обусловленный квадратичной зависимостью функции источника от деформации. В отсутствие последнего, распространение упругой деформации может происходить только в форме ударных волн небольшой интенсивности. Существование таких деформационных структур определяется диссипативными процессами генерации (рекомбинации) беспорядка (интенсивность генерации беспорядка, время рекомбинации), дисперсией среды, а также упругими свойствами решетки и подсистемы носителей. Качественно и количественно исследована структура таких волновых решений и определены их основные характеристики (скорость распространения, амплитуда, ширина). Показано существование ударных волн как с осцилляционным профилем, так и монотонным. Схематическая структура деформационных волн изображена на [рис. 4](#). Критическое значение амплитуды деформации e_* , отделяющее ударные волны с осцилляционной структурой от монотонных ударных волн, может быть записано в виде $e_* = e_n e_g$. Здесь e_n представляет собой отношение энергии запасенной на решеточном беспорядке к кинетической энергии связанной с распространением звуковой волны в кристалле. Параметр e_g характеризует отношение разностей деформационных потенциалов к тепловой энергии. Очевидно, что ударная волна с монотонным профилем будет генерироваться эффективнее, если значения e_n или e_g велики. Экспериментально, это может быть достигнуто

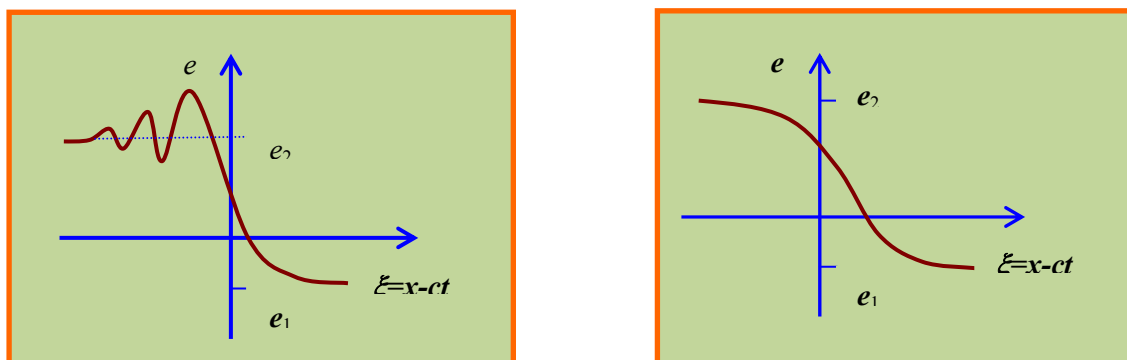


Рис. 4. Структура нелинейной волны продольной деформации. При параметрах диссипации $\gamma < \gamma_*$ волна имеет осциллирующую структуру (случай а), а при $\gamma > \gamma_*$ – монотонную структуру (случай б)

путем увеличения мощности лазерного пучка (контролирующего значения концентрации беспорядка (n_0) в e_n). Для характерных значений параметров (для i -дефектов) критическая амплитуда составляет величину $e_* = 5 \times 10^{-2}$, что превышает предел упругости металлов (для большинства металлов $e_{\max} \approx 7 \times 10^{-3}$). Следовательно, для упругих деформаций, $|e_0| \ll e_*$. В этом случае можно пренебречь дисперсией и ударная волна имеет монотонный профиль. Следует заметить, что современные экспериментальные установки позволяют генерировать волны деформации с амплитудой $e_0 = 10^{-5}$. Для ударных волн с такой амплитудой оценка ширины фронта волны составляет $l = 10^{-4}$ см.

В твердых телах с отрицательной дисперсией (параметр дисперсии $g > 0$) осциллирующая структура находится перед фронтом нелинейной волны. А в средах с положительной дисперсией ($g < 0$), наоборот, осциллирующий “след” остается позади фронта.

Разработаны аналитические теории и предложены механизмы трансформации (селекции) в процессе эволюции нелинейных дисперсионных волн деформаций в нелинейные - диссипативные солитоны, обусловленные генерационно-рекомбинационными процессами в подсистеме беспорядка кристалла. Определены режимы, когда реализуются такие структуры.

В случае больших времен релаксаций имеем НЭУ носящего название уравнения Кортевега де Фриза (КдФ) со слабо диссипативным возмущением. Физически это отвечает распространению локализованных волн в среде с медленно меняющимися параметрами. Характерной особенностью решений этих уравнений является возникновение, из-за диссипативного члена, полочки за возмущенным солитоном. В этом случае ударно-волновые структуры не возникают, и распространение возмущений деформации происходит в форме уединенных волн (солитонов) или последовательности солитонов (периодических волн). В одноволновом приближении выведено уравнение, описывающее эволюцию амплитуды таких структур и их инкременты затухания с учетом низкочастотных и высокочастотных потерь.

Определены вклады в линейные и нелинейные модули упругости, и в диссипацию и пространственную дисперсию, обусловленные конечностью скорости рекомбинации носителей беспорядка. Получены критические концентрации беспорядка, когда их влияние на эволюцию волн деформации значительно. В частности, показано, что поправка за счет неравновесных носителей к дисперсионным параметрам важна, если их концентрация $n_d \geq 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Проанализировано влияние деформационно – индуцированного дрейфа беспорядка на характер распространения нелинейных волн деформаций. Полученное при этом НЭУ содержит производную третьего порядка от деформации. Показано, что при малых временах релаксации беспорядка, распространение деформации может происходить как в форме ударных фронтов (кинков), так и уединенных волн, свойства которых определяется как упругими параметрами среды, так и характеристиками подсистемы носителей кристалла. В зависимости от вида конкретных связей между коэффициентами уравнения, приведены точные частные решения, описывающие структуры нелинейных деформационных структур. Полученные профили деформационных структур указывают на отсутствие осцилляций впереди и позади фронтов, то есть структуры волн монотонны. Скорость концентрационно - деформационных уединенных волн не превышает скорость линейного звука. Ударные же волны распространяются со сверхзвуковой скоростью. Ширины фронтов обеих волн пропорциональны коэффициенту диссипации. Волны с большей амплитудой распространяются с большей скоростью.

Исследовано распространение нелинейной волны деформации в среде, взаимодействующей с носителями, генерирующимися с поверхности кластеров, имеющих в кристалле или образующихся в процессе внешнего воздействия. Исходная модель задачи дополнительно учитывает уравнение кинетики для относительного объема кластеров активационного типа:

Полученное НЭУ по своей структуре является "конгломератами" нестационарных уравнений Бюргерса и КдФ. В слабо-диссипативном пределе и для больших скоростей ($c^2 > c_{lp}^2$), решение НЭУ изображено на [рис. 5](#). Сплошная кривая на рисунке описывает невозмущенное решение, соответствующее бездиссипативному приближению, пунктирная кривая описывает решение НЭУ. Видно, что влияние БД – взаимодействия приводит к несимметричному искажению геометрии уединенной волны: передний фронт становится положе, а задний, наоборот, – круче. Структура деформационной волны имеет характерную ассиметричную форму “акульего плавника”. Это решение отличается от солитоноподобных решений наличием расщепления асимптотик: $e(\xi \rightarrow \infty) = e(\xi \rightarrow -\infty) - \Delta$.

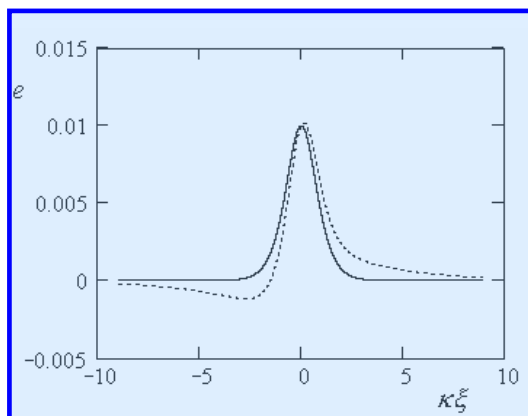


Рис. 5. Асимметричное искажение профиля нелинейной волны деформации за счет взаимодействия с нанокластерами (сплошная кривая – с учетом взаимодействия, пунктирная – без него).

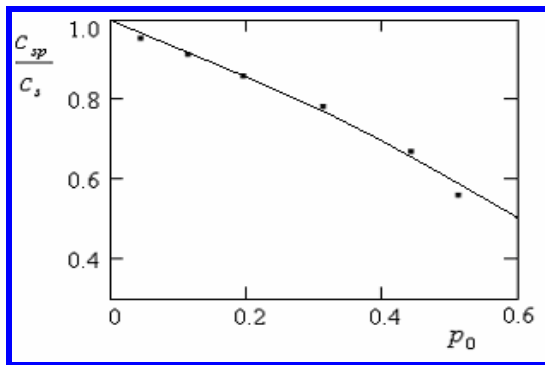


Рис. 6. Скорость звука (c_{sp}) как функция объемной доли кластеров (p_0). Сплошная линия – теория, точки – эксперимент [V.V. Polyakov, A.V. Golovin, Phys. V.34 P.32-35 (1993)]

Показано, что деформационно – стимулированная генерация беспорядка с поверхности кластеров приводит к вкладам в дисперсионные и диссипативные свойства, а также к перенормировке скорости звука $c_{sp} = c_s(1 - Ap_0)^{1/2}$ (A – константа, определяемая упругими свойствами среды). Кластерный вклад в дисперсионный параметр важен, если относительный объем (p_0) кластеров превышает критическое значение $p_0 > p_* = 7.10^{-2}$.

На **рис. 6** представлена зависимость скорости звука от объемной доли кластеров. Сплошная кривая описывает теоретические результаты, а точки обозначают экспериментальные данные для Fe из работы [V.V. Polyakov, A.V. Golovin, Tech. Phys. **34** 32 (1993)]. Как следует из **рис. 6** с ростом объемной доли кластеров скорость линейного звука монотонно уменьшается. Аналогичная зависимость имеет место и для пористого кремния (pore-Si). Распространение ультразвуковых волн возбуждаемых в *pore-Si* под воздействием наносекундных лазерных импульсов экспериментально исследовалось в [S.M. Zharky et al. *Semiconductors*. **37** (4) 485 (2003)]. Образцы изготавливались в виде слоев с толщиной $h = (0.5 - 4) \times 10^{-3}$ см и пористостью $p = 0.7$. При $h = 2.4 \times 10^{-3}$ см, $p = 0.5$, $c_l(Si) = 8.43 \times 10^5$ см с⁻¹ из формулы для скорости получаем оценку $c_{lp} = 3.5 \times 10^5$ см с⁻¹, которая хорошо согласуется с экспериментом ($c_{lp} = 3.1 \times 10^5$ см с⁻¹).

В кристаллах с центром симметрии (таких как германий, кремний) определяющую роль в кинетике ансамбля неравновесных носителей может играть флексоэлектрический эффект, связанный с возникновением электрической поляризации решетки, пропорциональной градиенту деформации. При флексоэлектрическом эффекте создается дополнительный флексоэлектрический потенциал (к потенциалу, обусловленному зарядом на носителях беспорядка), который влияет и на дрейф носителей, и на значение энергии активации образования носителей, приводя к соответствующим изменениям локальной концентрации носителей, и как следствие к их пространственному перераспределению.

Предложена и развита модель кинетики накопления носителей в облученных centrosymmetrical кристаллических полупроводниках, с учетом флексоэлектрического эффекта. Исходя из плотности свободной энергии упругого континуума, учитывающей генерацию носителей и флексоэлектрический эффект, выведена замкнутая система уравнений, описывающая распространение самосогласованных полей упругих полей, концентрации носителей и электрической поляризации в среде с квадратичной упругой нелинейностью. В линейном приближении получены дисперсионные соотношения связанных линейных волн упругих смещений, концентрации носителей и диэлектрической поляризации. Дисперсионное уравнение имеет три решения: одно из них характеризует диффузионную моду с перенормированным за счет дефектно-деформационного взаимодействия и флексоэлектрического эффекта, коэффициентом диффузии, а остальные два – описывают дисперсию упругих волн, распространяющихся вдоль и против оси x .

Рассмотрена задача распространения стационарных нелинейных волн смещений, концентрации носителей беспорядка и флексоэлектрического потенциала с учетом квадратичной нелинейности упругой среды. Получены модельные уравнения, описывающие распространение нелинейных волн упругих смещений в виде ударных волн и солитонов. Существование таких волн определяется конкуренцией упругой нелинейности и дисперсии, а их параметры зависят от упругих и флексоэлектрических модулей, а также от параметров подсистемы носителей.

Установлен доминирующий вклад флексоэлектрического эффекта по сравнению с деформационным потенциалом в линейные модули упругости среды, дисперсионные и диссипативные характеристики среды.

Исследованы деформационно-концентрационные структуры в 2D постановке.

Используя принцип Гамильтона–Остроградского $\delta[\mathcal{L}] = \delta \left[\int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-h}^h dz \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} L dx dy \right] = 0$ (L –

плотность Лагранжиана единицы объема, $L = W - \Phi$, W – плотность кинетической энергии) выведена замкнутая система управляющих динамических 2D уравнений для компонент вектора поля смещений с учетом его взаимодействия с подсистемой носителей локального беспорядка. Асимптотическим методом данная система уравнений редуцируется к НЭУ Кадомцева–Петвиашвили–Бюргера для продольной компоненты самосогласованного поля упругой деформации. Найдено точное локализованное решение эволюционного уравнения и показано, что при соответствующем выборе физических параметров среды и подсистемы локального беспорядка, возбуждаемая волна деформации будет волной растяжения или сжатия. Найденное точное ударно-волновое решение эволюционного уравнения описывает как волны растяжения, так и волны сжатия. Существование и условия возникновения таких деформационных структур определяются диссипативными процессами, обусловленными генерацией (рекомбинацией) носителей, дисперсией среды, а также упругими свойствами решетки и подсистемы беспорядка. Характерный вид деформационной структуры изображен на [рис 7](#)

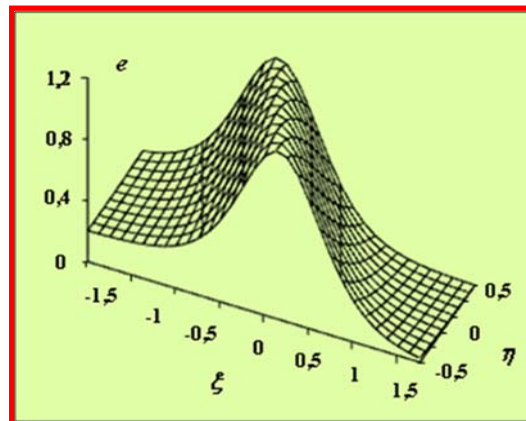


Рис 7. 2D деформационная структура в тонкой Si пластинке

Одновременно с деформационными структурами в среде будут возбуждаться концентрационные структуры – волны генерации (рекомбинации) носителей беспорядка.

Исследовано распространение нелинейных продольных волн в упругой пластине при учете взаимодействия продольной компоненты смещений среды с полями температуры и концентрации неравновесных носителей. Выведено нелинейное эволюционное уравнение для описания термоупругих продольных самосогласованных полей деформаций. Показано, что влияние термоупругого эффекта на волны деформации сказывается в виде появления диссипативных членов, обусловленных процессами теплопередачи и термоупругим взаимодействием, возникающим благодаря деформационно-стимулированному тепловыделению при рекомбинации неравновесных носителей. Изучены периодические и локализованные (солитонные) решения полученного уравнения и характерные особенности поведения амплитуды этих решений с учетом низкочастотных и высокочастотных потерь.

2. Исследование самоорганизации нанокластерных систем и наночастиц

Исследован процесс пространственного упорядочения кластеров атомных дефектов наблюдаемый при их достаточно больших концентрациях. Это явление, интерпретируется как синергетический процесс самоорганизации диссипативной открытой системы, находящейся вдали от состояния термодинамического равновесия, которую представляет собой облучаемый кристалл с неравновесными концентрациями носителей и их кластеров. Эффект самоорганизации в ансамбле кластеров происходит благодаря диффузионно – кинетической неустойчивости, развивающейся за счет нелинейного динамического взаимодействия диффундирующих в пространстве носителей беспорядка и растущих кластеров. Необходимым условием возникновения неустойчивости в такой системе является значительное различие коэффициентов диффузии беспорядка (D_d) и их кластеров (D_{cl}) в координатном пространстве. Для изучения механизма и условий образования сверхрешеток кластеров предложена модель,

рассматривающая атомные дефекты и их кластеры как единую пространственно–распределенную систему. Данная модель учитывает следующие основные процессы, происходящие при пространственно – временной эволюции самосогласованной системы носителей и их кластеров: рост кластеров за счет объемной диффузии носителей (диффузионный рост), испарение кластеров, движение (детерминированное и диффузионное) кластеров в пространстве, генерацию носителей и их потери, связанные с образованием кластеров и аннигиляцией на нейтральных центрах. Она состоит из двух (в общем случае из трех) уравнений: одно из них описывает эволюцию во времени функции распределения кластеров по размерам и в координатном пространстве, а другое – диффузионно – кинетическое уравнение для концентрации носителей беспорядка.

На основе анализа на устойчивость стационарного пространственно–однородного решения системы нелинейных уравнений, показано, что при превышении некоторого критического пересыщения, однородное распределение кластеров становится неустойчивым и переходит в неоднородное состояние. Причина возникновения такого состояния связана с тем, что благодаря пространственному диффузионному перемещению кластеров дисперсионная зависимость $\lambda(k^2)$ приобретает вид кривой, имеющий резкий максимум. Характерные значения этого максимума находятся в диапазоне длин волн $10\text{нм} < \Lambda_b < 200\text{нм}$. В системе первоначально хаотически распределенных кластеров на фоне однородных флуктуаций возникают неоднородные флуктуации с волновыми векторами $\sim \vec{k}_m$, и нарастающие с максимальной скоростью $\propto \lambda_m$. При этом скорость нарастания неоднородных флуктуаций значительно (на несколько порядков) превышает скорость роста однородных флуктуаций. В результате в среде формируется пространственно - периодическая структура из кластеров с характерным волновым числом $k_m \approx |\vec{k}_m|$.

Скорость развития неоднородностей испытывает наиболее значительные изменения для волновых чисел из интервала $2 \cdot 10^5 < k < 5 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$. Развитие флуктуаций с волновыми числами $k \gg 5 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$, рассматриваемая модель не объясняет ввиду неприменимости понятий концентрация беспорядка, градиентов их концентрации и т. п. на таких пространственных масштабах. Для возмущений с волновыми числами $k \ll 2 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$, скорость роста неоднородностей достаточно мала и они не развиваются.

В рамках традиционных терминологий синергетики, кластеры можно рассматривать как активаторы. Относительно кластеров осуществляется положительная обратная связь, приводящая к нарастанию флуктуаций их концентрации. Процесс нарастания активатора контролируется носителями локального беспорядка (ингибитором), по которым осуществляется отрицательная обратная связь. Потеря устойчивости однородного состояния ансамбля носителей беспорядка и их кластеров происходит, если $D_{cl} \ll D_d$, и ингибитор не может эффективно подавлять локальные флуктуации активатора.

Рассмотрение формирования решетки кластеров, как стадийного процесса самоорганизации открытой неупорядоченной нелинейной динамической системы в условиях, значительно удаленных от термодинамического равновесия, позволило получить параметр сверхструктуры, его зависимости от температуры среды (*рис.8*) и накачки, хорошо согласующиеся с экспериментом [Sikka V.K., Moteff J. J. Nucl. Mater. **54(2)** 325 (1974)].

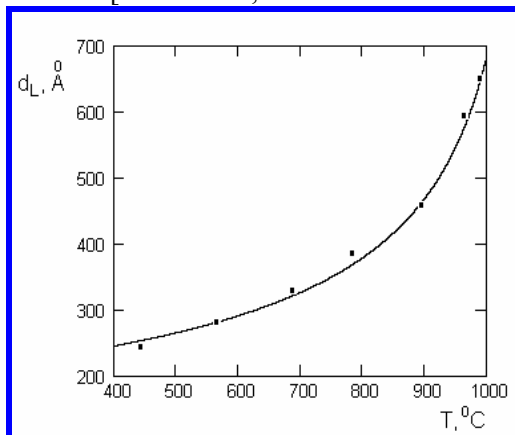


Рис.8 Зависимость периода (d_L) сверхрешетки V – кластеров от температуры в молибдене. Точки эксперимент, сплошная кривая – теория

Предсказаны эффекты временной и пространственной самоорганизации полидисперсной системы частиц (кластеров) новой фазы в результате кинетических неустойчивостей в классической теории нуклеации метастабильных (переохлажденных или пересыщенных) многокомпонентных неоднородных конденсированных систем.

Пространственная самоорганизация структур в ансамбле частиц изучена в рамках модели, включающей в себя кинетическое уравнение для функции распределения частиц твердой фазы по размерам и в координатном пространстве, и диффузионные уравнения для температуры и концентрации растворенных компонентов (примесей). Она учитывает зависимость температуры ФП от кривизны частиц и концентрации компонентов, диффузионную подвижность частиц новой фазы в пространстве, диффузию примесей и тепла, уход частиц из зоны нуклеации, выделение теплоты кристаллизации, увлечение примесей растущими частицами. Частицы рассматриваются как бесструктурные сферические образования. Показано, что процесс формирования пространственно – периодических структур частиц в процессе кристаллизации в переохлажденном расплаве носит стадийный характер. На начальной стадии процесса формирования сверхструктур, частицы новой фазы распределены хаотически и периодическая структура отсутствует. Когда параметр накачки (или переохлаждение) превышает некоторое критическое значение, то в системе происходит ФП: однородное распределение частиц переходит в неоднородное, которое представляет собой пространственно – организованную структуру.

Развитие пространственной неустойчивости в системе частиц новой фазы сопровождается также ростом пространственных возмущений температуры и концентрации примесей в объеме расплава с тем же пространственным масштабом. В результате после кристаллизации в твердой фазе фиксируются периодические структуры полей концентрации примесей и температуры. Установлено, что возникновению периодических структур способствует увеличение поверхностного натяжения и времени жизни частиц, а также скрытой теплоты кристаллизации. Стабилизирующее же влияние на развитие кинетической неустойчивости оказывает диффузионная подвижность частиц в координатном пространстве. Определены дисперсионные зависимости, границы области существования рассматриваемой кинетической неустойчивости и параметр формирующихся упорядоченных структур.

При моделировании процессов автоколебательных неустойчивостей при ФП в переохлажденных бинарных расплавах дополнительно учитывается нелинейность процесса генерации частиц на стадии интенсивного роста новой фазы. Рассматривалась нелинейность, обусловленная экспоненциальной зависимостью скорости возникновения частиц новой фазы от переохлаждения (формула Зельдовича), определяемого полями температуры и концентрации примесей. Физической причиной возникновения колебательной неустойчивости в такой системе, служит конкуренция между процессами нуклеации и роста закритических частиц новой фазы, зависящих от концентрационного переохлаждения, и стремлением этих частиц удалиться из зоны нуклеации. Развитие неустойчивости вызывает самоподдерживающиеся колебания функции распределения частиц по размерам, а также полей концентрации примесей и температуры. Получено и проанализировано дисперсионное уравнение автоколебательной неустойчивости. Показано, что возникновению неустойчивости способствуют сильнонелинейная зависимость скорости нуклеации частиц от температуры и концентрации растворенных компонентов и большие времена жизни частиц. Период автоколебаний, кроме теплофизических свойств, зависит также от характеристик процесса нуклеации и скорости выноса частиц из области нуклеации.

Автоколебания температуры и концентрации компонентов вызывают связанные периодические колебания среднего радиуса растущих частиц и их концентраций, а также поверхности и объема растущей фазы. Изучено влияние кластеризованной структуры исходной метастабильной фазы на процессы нанокристаллизации в конденсированных системах. Моделирование кристаллизации

проведено с учетом образования в метастабильной фазе нанокластеров, возникновения и роста частиц кристаллической фазы за счет присоединения нанокластеров. Исходными уравнениями модели задачи являются: уравнения баланса для концентрации кристаллизующегося компонента и их кластеров нанометрового масштаба, уравнение неразрывности для функции распределения агрегатов по числу входящих в них нанокластеров. Показано, что в таких полидисперсных системах возможно появление самоподдерживающихся связанных колебаний пересыщения кристаллизующегося вещества, плотности нанокластеров и функций распределения частиц новой фазы. Природа возникновения осцилляций связана с конкуренцией между источником образования нанокластеров кристаллизующегося компонента и их потерей на формирование и рост частиц кристаллической фазы, и стремлением этих частиц под влиянием диффузии (или дрейфа в поле внешних сил) уйти из зоны нуклеации. Аналитически определены условия появления автоколебательных структур и их характеристики.