Нелинейные продольные волны взаимодействующих полей деформации и концентрации дефектов в германии и кремнии

© Ф.Х. Мирзаде¶

Институт проблем лазерных и информационных технологий Российской академии наук,
140700 Шатура, Россия

(Получена 9 февраля 2005 г. Принята к печати 5 июля 2005 г.)

Сформулирована система уравнений, описывающая самосогласованное поведение полей упругих смещений и концентрации точечных дефектов в облучаемых центросимметричных кристаллах (германий, кремний). В зависимости от значений времени релаксации дефектов получены модельные эволюционные уравнения, описывающие стационарные нелинейные продольные волны с учетом флексоэлектрического эффекта, связанного с возникновением диэлектрической поляризации при неоднородных упругих деформациях решетки. При определенной конкретной связи между коэффициентами этого уравнения, т. е. параметрами подсистемы дефектов и упругой нелинейной среды, получены точные решения, описывающие возникновение как солитонов, так и ударных волн небольшой интенсивности. Оценены вклады в линейную скорость звука и дисперсионные свойства среды, обусловленные дефектно-деформационным взаимодействием и флексоэлектрическим эффектом.

1. Введение

Исследованию процессов генерации и распространения нелинейных (как поверхностных, так и объемных) локализованных волн деформации (солитонов, кноидальных и ударных волн и т. д.) в упругих средах посвящены многочисленные теоретические и экспериментальные работы [1–6]. При изучении физических механизмов формирования этих нелинейных волн в качестве нелинейности рассматриваются ангармонические колебания кристаллической решетки, описывающие отклонение упругих свойств среды от закона Гука. В твердом теле, находящемся под воздействием внешних потоков энергии (в частности, лазерных импульсов), существенную роль могут играть структурные нарушения кристаллической решетки — точечные дефекты (ТД) (вакансии, межузельные атомы), генерирующиеся из узлов решетки. ТД создают в решетке заметную деформацию, обусловленную различием ковалентных радиусов атомов и дефектов. В качестве дефектов могут также выступать: кластеры ТД, образующиеся при высоких концентрациях ТД или имеющиеся в кристалле; отдельные атомы примеси, попавшие в исходный кристалл при росте или внедренные предварительно и их комплексы; комплексы, содержащие вакансии или межузельные атомы исходного кристалла, и примесные атомы.

Исследование динамики нелинейных упругих волн с учетом их взаимодействия с дефектами структуры представляет несомненный теоретический и практических интерес, в частности при анализе механизмов аномального массопереноса, обнаруженного при лазерной и ионной имплантации материалов [7], при изучении процессов механической активации компонентов при твердофазных химических реакциях. Распространяющаяся в конденсированной среде с дефектами волна упругих деформаций несет информацию об искажениях их формы и скорости, потерях энергии, связанных с дефектной структурой, что необходимо для оптико-акустической диагностики различных параметров и структуры твердых тел. В частности, знание зависимости скорости упругих продольных волн от структурных свойств кристалла позволяет использовать эти зависимости для контроля параметров реальной структуры среды.

Локальные проявления дефектов в акустических свойствах кристалла могут быть разнообразными. Все многообразие механизмов взаимодействия упругой волны с полем концентрации дефектов можно разбить на две группы — прямые и косвенные. К первой группе можно относить взаимодействия, в результате которых изменяются собственные характеристики дефектов. Так, деформации в упругой волне вызывают перемещение дефектов в кристалле (деформационно-индуцированный дрейф); модулируют вероятности генерации и рекомбинации термофлуктуационных дефектов путем изменения энергетических параметров подсистемы дефектов: соответственно энергии активации образования и миграции ТД [8,9].

В центросимметричных полупроводниковых кристаллах, таких как германий и кремний, наряду с перечисленными выше нелинейностями определяющую роль может играть флексоэлектрический эффект, связанный с возникновением диэлектрической поляризации решетки, пропорциональной градиенту упругой деформации [10–15]. Флексоэлектрический эффект приводит к появлению дополнительных локальных токов ТД — баротоков, аналогичных деформационным, что сказывается на их кинетике. Кроме того, создается флексоэлектрический потенциал, который влияет на значения энергии активации образования и миграции дефектов, приводя к изменению локальной концентрации дефектов и, как следствие, к их пространственному перераспределению. Флексоэлектрический эффект теоретически был предсказан Толпыго с сотрудниками [10] и впоследствии исследован другими авторами [11–14]. Экспериментально этот эффект исследовался в работе [15]. В от-

¶ E-mail: fmirzade@rambler.ru

личие от пьезоэффекта флексоэлектрический эффект описывает возникновение поляризации в непьезоэлектрическом кристалле под действием неэлектрического воздействия. Учет флексоэлектрического эффекта оказался существенным при исследовании взаимодействия свободных носителей (электронов) с полем деформации в непьезоэлектрических кристаллах. Согласно [13], флексоэлектрический эффект и деформационный потенциал обеспечивают одинаковую энергию взаимодействия между носителями тока и акустической волной. Исследование роли флексоэлектрического эффекта в облучаемых полупроводниках (германий, кремний) показало, что электростатический потенциал, обусловленный этим 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 [14].

Косвенными можно называть механизмы, в которых упругая волна деформации взаимодействует не с самими ТД, а с коллективными возбуждениями, фононами, электронами и т.д., существующими в кристаллической среде. Роль дефектов в этих механизмах сводится к изменению параметров этих взаимодействий.

Нелинейности, связанные с этими взаимодействиями, при определенных условиях могут оказаться существенными для распространения упругих нелинейных возмущений в твердых телах и приводить к возникновению качественно новых физических эффектов. Так, обусловленные дефектами физические нелинейности могут приводить к перенормировке решеточных параметров (как линейных, так и нелинейных модулей упругости). Наличие в среде ТД с конечной скоростью рекомбинации может вызывать появление диссипативных слагаемых, отсутствующих в обычных уравнениях для упругих нелинейных волн [16–19].

На динамику волн заметное влияние может оказывать дисперсия, обусловленная конечностью периода кристаллической решетки [20] или толщиной образца, а также дисперсия, связанная с генерационно-рекомбинационными процессами в системе неравновесных дефектов, их движением в поле деформаций [16]. Распространение волны упругой деформации в таких системах может происходить как в виде ударных волн [18,19], так и в виде солитонов (или последовательности солитонов) [16,17]. При этом влияние генерационно-рекомбинационных процессов оказывается аналогичным рассеянию энергии упругих колебаний в среде из вязкоупругого материала с последействием и релаксацией.

В работах [16–19] рассматривалось распространение нелинейных продольных волн в твердом теле с квадратичной упругой нелинейностью с учетом влияния деформационно-индуцированных процессов генерации, рекомбинации и движения ТД. В данной работе предпринята попытка обобщения результатов [16–19] с учетом флексоэлектрического эффекта.

2. Исходные уравнения

Рассмотрим кристалл, в котором под действием лазерных импульсов образуются ТД с объемной концентрацией n_j, $j = V$ соответствует вакансиям, $j = I$ — межузельным атомам. Изучение процессов распространения слабонелинейных возмущений упругой деформации в облучаемых центросимметричных кристаллах предполагает решение связанной системы уравнений, описывающей взаимодействия в нем электромагнитных и упругих колебаний, а также полей концентрации ТД. Такая система включает в себя нелинейное уравнение теории упругости, с учетом сил, действующих на решетку со стороны ТД, и влияния флексоэлектрического эффекта, уравнение Максвелла и уравнение баланса для концентрации ТД.

Уравнения динамики для упругих смещений решетки в приближении анизотропного упругого континуума, с учетом генерации ТД запишем в виде

$$\frac{\partial H_i}{\partial x_i} = 4\pi\rho(\mathbf{r}), \quad \rho_0\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \tag{1}$$

где ρ_0 — плотность недеформированной решетки, u_i — компонента вектора смещений, σ_{ik} — тензор механических напряжений, H_i — компонент вектора электрической индукции, $\rho(\mathbf{r})$ — плотность заряда, x_i — лагранжева координата.

Для определения σ_{ik} и H_i воспользуемся выражением для плотности свободной энергии F системы. Энергия взаимодействия ТД определяется двумя вкладами — энергиями деформационного и электростатического взаимодействий.

Электростатическое взаимодействие ТД, помимо кулоновского притяжения, определяется также взаимодействием через поляризацию среды и может проявиться как при наличии заряда на одном из дефектов, так и вследствие неоднородности полей деформации кристаллической решетки вокруг дефектов.

При неоднородной деформации среды ее электрическая поляризация P_i может быть представлена в виде (пьезоэлектрические полупроводники не рассматриваются)

$$P_i = \frac{1}{2}\mu_{ijkl}\left(\frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l} + \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}\right), \tag{2}$$

где μ_{ijkl} — тензор флексоэлектрических модулей. Соответствующий вклад в свободную энергию рассматриваемой системы можно представить в виде

$$F_{\text{fl}} = \frac{1}{2}P_i\,\mu_{ijkl}\left(\frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l} + \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l}\right).$$

Считая деформации среды достаточно малыми, ограничимся в разложении свободной энергии по инвариантам тензора деформации величинами до 3-го порядка (ангармонизм 3-го порядка). Таким образом, для плотности свободной энергии упругого континуума с учетом генерации ТД и флексоэлектрического эффекта, можно записать следующее выражение:

$$F - F_0 = \frac{1}{2}\lambda_{iklm}u_{ik}u_{lm} + \frac{1}{3}\beta_{klmns}u_{ik}u_{lm}u_{ns}$$
$$+ g_{iklmns}u_{ik}\frac{\partial^2 u_{lm}}{\partial x_n \partial x_s} - \sum_{j=V,I} K\Omega^j_{ik}u_{ik}n_j - \frac{1}{8\pi}\varepsilon_{ij}E_iE_j$$
$$- \frac{1}{2}E_i\left(\mu_{iklm}\frac{\partial u_{kl}}{\partial x_m} + \mu_{ilkm}\frac{\partial u_{lk}}{\partial x_m}\right), \qquad (3)$$

где F_0 — свободная энергия недеформированного кристалла, u_{ik} — тензор деформации, λ_{iklm} и β_{iklmns} — тензоры линейных и нелинейных модулей упругости, определяемые через константы упругости 2-го и 3-го порядков; g_{iklmns} — тензор дисперсионных постоянных решетки, характеризующий пространственную дисперсию линейных модулей упругости; E_i — компонента вектора электрического поля; ε_{ij} — диэлектрический тензор; Ω^j_{ik} — симметричный тензор, характеризующий деформацию решетки за счет появления в ней единичного ТД типа j ($\Omega^j_{ik} > 0$ — для межузельных атомов, $\Omega^j_{ik} < 0$ — для вакансий). Первые три слагаемых в правой части выражения (3) описывают упругую энергию, четвертое — энергию взаимодействия ТД с полем упругой деформации. Последние два слагаемых учитывают вклад в свободную энергию флексоэлектрического эффекта.

Тензор деформации связан с компонентами упругих смещений соотношением

$$u_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i}\frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right).$$

Так как тензор механических напряжений $\sigma_{ik} = (\partial F/\partial u_{ik})_{E,T,n}$, с учетом (3) получаем

$$\sigma_{ik} = \lambda_{iklm}u_{lm} + \beta_{iklmns}u_{lm}u_{ns} + g_{iklmns}\frac{\partial^2 u_{lm}}{\partial x_n \partial x_s}$$
$$- \frac{1}{2}(\mu_{iklm} + \mu_{ilkm})\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_l \partial x_m} - \sum_{j=V,I} K\Omega^j_{ik}n_j. \qquad (4)$$

В (4) второе слагаемое в правой части учитывает ангармонизм среды, третье — пространственную дисперсию, четвертое — влияние флексоэлектрического эффекта на решетку, а последнее — напряжения, обусловленные ТД; φ — электростатический потенциал, создаваемый флексоэлектрическим эффектом.

Далее, используя соотношение (3), а также связь между H_i и F в виде $H_i = -4\pi(\partial F/\partial E_i)_{u_{kl},T,n}$, для потенциала φ получаем следующее уравнение:

$$-\varepsilon_{ij}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} = 4\pi\left(\rho - \mu_{iklm}\frac{\partial^2 u_{kl}}{\partial x_i \partial x_m}\right). \qquad (5)$$

Правая часть уравнения (5) определяется плотностью носителей заряда и флексоэлектрическим эффектом.

Уравнения (4) и (5) необходимо дополнить уравнением для концентрации ТД. В рамках термофлуктуационной модели образования дефектов, скорость их генерации из узлов кристаллической решетки определяется температурой и упругими напряжениями и поэтому может изменяться под влиянием распространяющейся упругой волны, т. е. дефекты могут возникать и рекомбинировать. Будем рассматривать длинноволновые упругие волны, так что эффекты рассеяния несущественны. Деформация в упругой волне и флексоэлектрическое явление воздействуют на характеристики самих ТД. Так, при прохождении продольных волновых возмущений упругой деформации в областях растяжения и сжатия изменяется энергия образования ТД. Перенормированную за счет деформации и флексоэлектрического эффекта энергию активации образования дефектов ($\tilde{E}^j_f$), в линейном по деформации приближении, можно представить в виде: $\tilde{E}^j_f = E^j_{f0} - \vartheta^j_{ik}\mathbf{u}_{ik} + Z^j\varphi$ (E^j_{f0} — энергия образования ТД типа j в недеформированном кристалле, ϑ^j_{ik} — деформационный потенциал). Модуляция энергии образования приводит к соответствующей модуляции функции источника (Q_j) дефектов

$$Q_j = Q_{j0} + Q_{ju_{ik}}u_{ik} + Q_{j\varphi}\varphi$$

(Q_{j0} — значение функции источника в отсутствие деформации; индекс „u_{ik}“ означает производную по u_{ik}) и, как следствие, к изменению локальной концентрации и соответственно к пространственному перераспределению ТД по кристаллической решетке на макроскопические (порядка длины волны) или микроскопические (порядка постоянной решетки) расстояния [20].

Благодаря взаимодействию с полем упругой деформации и флексоэлектрическому эффекту, кроме модуляции скоростей генерационных процессов, возникает также дрейфовое движение ТД, что приводит к их дополнительному пространственному перераспределению. Если $U_j = K\Omega^j_{ik}u_{ik}$ — энергия взаимодействия ТД типа j с полем деформации [20], то сила, действующая со стороны поля деформации $F_j = -\nabla U_j$, вызывает движение дефектов со скоростью $\mathbf{V}_j = \mathbf{F}_jD_j/kT$ (D_j — коэффициент диффузии ТД типа j, T — температура). Следовательно, суммарный поток дефектов составляет $\mathbf{J}_j = \mathbf{J}_{j1} + \mathbf{J}_{j2} + \mathbf{J}_{j3}$, где $\mathbf{J}_{j1} = -D_j\nabla n_j$ — обычный диффузионный поток, а $\mathbf{J}_{j2} = n_j\mathbf{V}_j$ — деформационно-индуцированный поток дефектов, $\mathbf{J}_{j3} = n_j\mathbf{V}_{j\varphi}$ — поток, обусловленный флексоэлектрическим эффектом.

С учетом вышесказанного для концентрации n_j, в линейном по деформациям приближении, можно записать следующее диффузионно-кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial n_j}{\partial t} + \operatorname{div} J^j_\alpha = Q_{j0}\left(\frac{\vartheta^j_{ik}u_{ik}}{kT} - \frac{Z^j\varphi}{kT}\right) - \frac{n_j}{\tau_j}, \qquad (6)$$

$$J^j_\alpha = -D^j_{\alpha m}\nabla_m n - \frac{Zn_{j0}D^j_{\alpha m}}{kT}\nabla_m\varphi + \frac{n_{j0}D^j_{\alpha m}K\Omega^j_{ik}}{kT}\nabla_m u_{ik}. \qquad (7)$$

Здесь $D^j_{\alpha m}$ — тензор коэффициента диффузии дефекта типа j, τ_j — время релаксации дефектов типа j, T —

температура, k — постоянная Больцмана, $n_{j0} = Q_{j0}\tau_j$ — стационарное пространственно-однородное значение концентрации ТД. В правой части уравнения (6) первое слагаемое в круглых скобках учитывает деформационную добавку в генерацию, связанную с деформационным потенциалом (ϑ_{ik}); второе слагаемое — вклад в генерацию за счет флексоэлектрического эффекта. Последнее слагаемое в выражении (6) учитывает релаксацию дефектов, определяемую рекомбинацией на нейтральных стоках. Выражение (7) определяет α-компонент потока J^j_α дефектов типа j, в котором первое слагаемое описывает обычную диффузию, второе — деформационно-индуцированный дрейф, третье — влияние флексоэлектрического эффекта. Объемная взаимная рекомбинация разноименных ТД не учитывается.

С целью упрощения дальнейшего изложения рассмотрим далее случай изотропных кристаллов с кубической симметрией. Дополнительно положим, что в кристалле имеется только один тип подвижных дефектов, например, вакансии, и положим в (3)–(7) $n_j = n$, $D^j_{\alpha m} = D_{\alpha m}$, $\Omega^j_{ik} = \Omega_{ik}$. В системе кристаллических осей тензор диэлектрической проницаемости диагонален $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0\delta_{ij}$. Также диагональны тензоры диффузии и дилатации: $D_{\alpha m} = D\delta_{\alpha m}$, $\Omega_{ik} = \Omega\delta_{ik}$. Тогда из (1)–(7) получаем следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c_\tau^2\Delta\mathbf{u} + (c_l^2 - c_\tau^2)\nabla\operatorname{div}\mathbf{u} + N(\mathbf{u}) + g\nabla(\Delta\operatorname{div}\mathbf{u}) - \mu\nabla(\Delta\varphi) - \frac{K\Omega}{\rho}\nabla n, \qquad (8)$$

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi}{\varepsilon_0}\big(\rho(r) - \mu\Delta\operatorname{div}\mathbf{u}\big), \qquad (9)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = Q_e\operatorname{div}\mathbf{u} + Q_\varphi\varphi - \frac{nDK\Omega}{kT}\Delta\operatorname{div}\mathbf{u} + \frac{nZD}{kT}\Delta\varphi + D\Delta n - \frac{n}{\tau}. \qquad (10)$$

Здесь c_l, c_τ — продольная и поперечная скорости линейного звука в кристалле [21], $g = Kd_0^2/\rho$ (d_0 — период решетки), $N(\mathbf{u})$ — плотность сил, обусловленных ангармонизмом упругих смещений. Для продольных волн $N(u) = (\beta/2\rho)\nabla(u_{ll})^2$ [21], где $\beta = 3\rho c_l^2 + 2(A + 3B + C)$, $(A, B, C$ — константы упругости 3-го порядка), $\operatorname{div}\mathbf{u} = u_{ll} = e$ — деформация среды.

При получении системы (8)–(10) учитывалось, что для изотропных сред [14]

$$\lambda_{iklm} = \lambda\delta_{ik}\delta_{lm} + G(\delta_{il}\delta_{mk} + \delta_{im}\delta_{kl}),$$

$$\mu_{iklm} = \mu_1\delta_{ik}\delta_{lm} + \mu_2(\delta_{il}\delta_{mk} + \delta_{im}\delta_{kl}),$$

где δ_{ij} — символ Кронекера; λ, G — упругие модули Ламе; μ_1 и μ_2 — флексоэлектрические модули, $\mu = \mu_1 + 2\mu_2$.

Система уравнений (8)–(10) замкнута и полностью определяет взаимообусловленное поведение полей упругих смещений, флексоэлектрического потенциала и концентрации ТД в нелинейных упругих средах.

3. Одномерные стационарные нелинейные продольные волны

В случае продольных одномерных волн система (8)–(10) принимает вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c_l^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\beta}{\rho}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\frac{\partial u}{\partial x} - g\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{K\Omega}{\rho}\frac{\partial n}{\partial x} + \mu\frac{\partial^3\varphi}{\partial x^3} = 0, \qquad (11)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} - D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{n}{\tau} = Q_e\frac{\partial u}{\partial x} + Q_\varphi\varphi - q_D\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + q_F\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}, \qquad (12)$$

$$\varepsilon_0\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = -4\pi\rho(x) + 4\pi\mu\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}, \qquad (13)$$

где $u = u_x$ — проекция вектора смещений на ось x, $q_F = DZn_0/kT$, $q_D = Dn_0K\Omega/kT$.

Рассмотрим стационарные решения системы (11)–(13). Для одномерных плавных возмущений, распространяющихся в направлении оси x со скоростью $v = \mathrm{const}$, система уравнений (11)–(13) записывается в виде

$$(v^2 - c_l^2)\frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{\beta}{\rho}\frac{d^2u}{d\xi^2}\frac{du}{d\xi} - g\frac{d^4u}{d\xi^4} = -\frac{K\Omega}{\rho}\frac{dn_1}{d\xi} - \mu\frac{d^3\varphi}{d\xi^3}, \qquad (14)$$

$$-v\frac{dn_1}{d\xi} - D\frac{d^2n_1}{d\xi^2} + \frac{n_1}{\tau} = Q_e\frac{du}{d\xi} + Q_\varphi\varphi - q_D\frac{d^3u}{d\xi^3} + q_F\frac{d^2\varphi}{d\xi^2}, \qquad (15)$$

$$\varepsilon_0\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = -4\pi\rho(\xi) + 4\pi\mu\frac{d^3u}{d\xi^3}, \qquad (16)$$

где $\xi = x - vt$.

При получении выражения для потенциала из уравнения (16), потенциалом, обусловленным зарядом, локализованным на свободных носителях и дефектах, можно пренебречь по сравнению с флексоэлектрическим потенциалом (соответствующие оценки имеются в [14]). Тогда для связи флексоэлектрического поля φ с полем деформации имеем следующее выражение:

$$\varphi = \frac{4\pi\mu}{\varepsilon_0}\frac{du}{d\xi}.$$

Исключая потенциал φ с помощью этого выражения, уравнения (14) и (15) представим в виде

$$(v^2 - c_l^2)\frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{\beta}{\rho}\frac{d^2u}{d\xi^2}\frac{du}{d\xi} - \left(g - \frac{4\pi}{\varepsilon_0}\mu^2\right)\frac{d^4u}{d\xi^4} = -\frac{K\Omega}{\rho}\frac{dn}{d\xi}, \qquad (17)$$

$$-v\frac{dn}{d\xi} - D\frac{d^2n_1}{d\xi^2} + \frac{n}{\tau} = \tilde{Q}_e\frac{du}{d\xi} - \tilde{q}_D\frac{d^3u}{d\xi^3}, \qquad (18)$$

где $\tilde{Q}_e = Q_e - 4\pi\mu Q_\varphi/\varepsilon_0$, $\tilde{q}_D = q_D - 4\pi\mu q_F/\varepsilon_0$.

Решение (18), удовлетворяющее граничным условиям ($n(\pm\infty) = 0$), запишем в виде

$$n(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi' z_{DF}(\xi')\, S(\xi - \xi'), \tag{19}$$

$$S(\xi - \xi') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, \frac{\exp[ik(\xi - \xi')]}{ikv - Dk^2 - \tau^{-1}},$$

$$z_{DF}(\xi) = \tilde{Q}_e \frac{du}{d\xi} - \tilde{q}_D \frac{d^3u}{d\xi^3}.$$

Случай малых времен релаксации. При малых временах релаксации дефектов $\tau \ll t_0$, $t_0 = \Lambda/c_l$ — характерное время распространения волновых возмущений (Λ — характерная длина волны возмущений), из (19) получаем

$$n \approx \tau \tilde{Q}_e \frac{du}{d\xi} + v\tau^2 \tilde{Q}_e \frac{d^2u}{d\xi^2} + \tau \left(\tilde{Q}_e \tau D - \tilde{q}_D\right) \frac{d^3u}{d\xi^3} - v\tau^2 \tilde{q}_D \frac{d^4u}{d\xi^4} - D\tau^2 \tilde{q}_D \frac{d^5u}{d\xi^5}. \tag{20}$$

Комбинируя (17) и (20), для нелинейной волны смещений получаем следующее уравнение:

$$(v^2 - \tilde{c}_l^2) \frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{\beta}{\rho} \frac{d^2u}{d\xi^2} \frac{du}{d\xi} - \gamma \frac{d^3u}{d\xi^3} - \tilde{g} \frac{d^4u}{d\xi^4} - \sigma \frac{d^5u}{d\xi^5} = 0, \tag{21}$$

где

$$\tilde{c}_l^2 = c_l^2 - \frac{K\Omega}{\rho} \tau Q_e + \frac{4\pi\tau\mu Z K\Omega}{\varepsilon_0 \rho kT},$$

$$\tilde{g} = g + g_D + g_Q + g_F,$$

$$g_D = q_D \frac{K\Omega\tau}{\rho}, \quad g_Q = -Q_e \frac{K\Omega\tau^2 D}{\rho},$$

$$g_F = -\frac{4\pi\mu^2}{\varepsilon_0} + \frac{4\pi\mu K\Omega\tau^2 DZ}{\rho\varepsilon_0 kT} - \frac{4\pi\mu K\Omega\tau q_F}{\rho\varepsilon_0},$$

$$\gamma = \gamma_Q + \gamma_F, \quad \gamma_Q = \frac{K\Omega}{\rho} v\tau^2 Q_e, \quad \gamma_F = \frac{v\tau^2 4\pi K\Omega Z}{\rho\varepsilon_0 kT},$$

$$\sigma = \tilde{q}_D \frac{\tau^2 K\Omega v}{\rho}, \quad \delta = v^2 - \tilde{c}_l^2.$$

В (21) добавки к скорости звука и коэффициенту дисперсии обусловлены дефектно-деформационным взаимодействием и флексоэлектрическим эффектом. Появление диссипативного слагаемого связано с конечностью скорости релаксации дефектов, причем коэффициент диссипации содержит два вклада: вклад γ_Q, связанный с модуляцией скорости генерации дефектов за счет их деформационного потенциала, и вклад γ_F, обусловленный флексоэлектрическим эффектом. При характерных значениях параметров $K|\Omega_m| = 10^{-11}$ эрг, $\varepsilon_0 = 6$, $d_0 = 5 \cdot 10^{-8}$ см получаем оценку $\gamma_F/\gamma_Q = 4\pi Z^2/\varepsilon_0 K|\Omega_m| d_0 \approx 10$, т. е. вклад от флексоэлектрического эффекта оказывается доминирующим.

После однократного интегрирования по ξ и использования граничных условий $du/d\xi|_{\xi\to\pm\infty} = 0$ получаем следующее уравнение для волны деформации:

$$\sigma \frac{d^3e}{d\xi^3} - \tilde{g} \frac{d^2e}{d\xi^2} + \gamma \frac{de}{d\xi} + \frac{\beta}{\rho} e^2 - \delta e = 0. \tag{22}$$

Здесь первое слагаемое ответственно за подкачку энергии к волне, второе — за дисперсию волны, а третье учитывает диссипативные процессы. Уравнения типа (22) характерны для нелинейных волн в диссипативно-дисперсионных средах с неустойчивостью, например, для волны при стекании тонких пленок жидкости по наклонной поверхности [22], для концентрационных волн при химических реакциях [23]. Оно обладает точными частными аналитическими решениями. Для их нахождения, как правило, используется метод [24], базирующийся на определении преобразования Бэклунда.

С помощью преобразования Бэклунда

$$e(\xi) = \frac{15}{76}\left(\frac{\tilde{g}^2}{\sigma} - 16\gamma\right) \frac{\partial}{\partial\xi} \ln F + 15\tilde{g} \frac{\partial^2}{\partial\xi^2} \ln F - 60\sigma \frac{\partial^3}{\partial\xi^3} \ln F$$

могут быть получены точные аналитические решения уравнения (22) типа уединенных волн [24], которые представляются в следующем виде:

$$e(\xi) = 15k^2 \left(\frac{\tilde{g}}{4} + \sigma k U(\xi)\right) \mathrm{ch}^{-2}\left[\frac{k\xi}{2}\right] + \frac{15k}{152}\left(\frac{\tilde{g}^2}{\sigma} - 16\gamma\right)\left[1 + \Sigma(\xi)\right],$$

$$\Sigma(\xi) = \mathrm{th}\left(\frac{k}{2}\xi\right).$$

Эти решения существуют при выполнении следующих трех случаев:

а) $\tilde{g}^2 = 16\gamma\sigma, \quad k^2 = \dfrac{\gamma}{\sigma}, \quad \delta = 6\gamma\sqrt{\dfrac{\gamma}{\sigma}};$ (23)

б) $7\tilde{g}^2 = 144\gamma\sigma, \quad k^2 = \dfrac{\gamma}{47\sigma}, \quad \delta = -\dfrac{60}{47}\gamma\sqrt{\dfrac{\gamma}{47\sigma}};$ (24)

в) $73\tilde{g}^2 = 256\gamma\sigma, \quad k^2 = \dfrac{\gamma}{73\sigma}, \quad \delta = \dfrac{90}{73}\gamma\sqrt{\dfrac{\gamma}{73\sigma}}.$ (25)

В случае а) решение уравнения (21) представляет собой уединенную волну

$$e(\xi) = a\, \mathrm{ch}^{-2}\left(\frac{k}{2}\xi\right)\left[1 + \mathrm{th}\left(\frac{k}{2}\xi\right)\right]. \tag{26}$$

Здесь $a = -15\beta^{-1}\rho\gamma\sqrt{\gamma/\sigma}$ — амплитуда нелинейной волны.

При $\xi \to \pm\infty$ оно убывает и имеет максимум при $\xi = 0$, равный $(160/9)\gamma\sqrt{\gamma/\sigma}$. Ширина уединенной волны пропорциональна коэффициенту диссипации (γ) и определяется выражением

$$\Delta_0 = \frac{12\gamma}{\tilde{c}_l^2 - v^2}.$$

Уединенная волна, описываемая формулой (26), упруго взаимодействует с другими возмущениями [24], следовательно, является солитоном. Согласно (23), скорость нелинейной волны с ее амплитудой связана следующим выражением:

$$v^2 = \tilde{c}_l^2 - 6\gamma\sqrt{\frac{\gamma}{\sigma}} = -\frac{2\beta}{5\rho}\,a. \qquad (27)$$

В двух других случаях решение представляет собой кинк. Если коэффициенты уравнения (21) связаны соотношениями (24), то прямой подстановкой можно убедиться, что выражение

$$e(\xi) = \frac{120}{47}\,\frac{\rho\gamma}{\beta}\sqrt{\frac{\gamma}{47\sigma}}\,\big(1 + \exp(-k\xi)\big)^{-3} \qquad (28)$$

является точным решением уравнения (22). Приведенное решение описывает структуру ударной волны, поскольку непрерывным образом связывает два асимптотических однородных состояния, характеризуемые значениями

$$e(\infty) = \frac{120}{47}\,\frac{\gamma}{\beta}\sqrt{\frac{\gamma}{47\sigma}}, \quad e(-\infty) = 0.$$

Рассмотрим поведение решения (28) за фронтом волны. Полагая $e = e(\infty) + \varepsilon_1$, $|e_1| \ll 1$, для возмущения деформации получаем дифференциальное уравнение 3-го порядка. Вычисляя дискриминант (Δ) соответствующего характеристического уравнения, находим, что $\Delta < 0$, т.е. его корни являются действительными величинами. Поэтому возмущение e_1 не может быть осциллирующей величиной, а это означает, что ударная волна, описываемая выражением (28), имеет монотонную структуру.

Ширина фронта ударной волны определяется формулой

$$\Delta_0 = \sqrt{\frac{47\sigma}{\gamma}} = -\frac{60\gamma}{47(\tilde{c}_l^2 - v^2)},$$

а ее скорость

$$v^2 = \tilde{c}_l^2 + \frac{60}{47}\,\gamma\sqrt{\frac{\gamma}{47\sigma}} = \frac{\beta}{2\rho}\,a. \qquad (29)$$

Если коэффициенты уравнения (21) связаны соотношениями (в), то точное решение уравнения имеет вид

$$e(\xi) = -\frac{60\gamma}{73\beta}\sqrt{\frac{\gamma}{73\sigma}}\,\frac{3 + \exp(-k\xi)}{(1 + \exp(-k\xi))^3}. \qquad (30)$$

Вдали от фронта волны ($\xi = 0$), из (30) имеем асимптотические значения

$$e(\infty) = -\frac{60}{73}\,\frac{\gamma}{\beta}\sqrt{\frac{\gamma}{73\sigma}}, \quad e(-\infty) = 0.$$

Ширина фронта ударной волны и ее скорость согласно (28) и (30) определяются формулами

$$\Delta_0 = \frac{90\gamma}{73(\tilde{c}_l^2 - v^2)}, \;\; v^2 = \tilde{c}_l^2 + \frac{90}{73}\,\gamma\sqrt{\frac{\gamma}{73\sigma}} = \frac{3\beta}{2\rho}\,a. \quad (31)$$

Соответствующие кинковым решениям (29) и (31) решения уравнения (18) могут быть найдены с помощью формулы (20).

Полученные профили ударной волны указывают на отсутствие осцилляций впереди и позади фронтов, т.е. структуры волн монотонны. Из формулы (29) следует, что дефектно-деформационные уединенные волны достаточно медленны и их скорость не превышает продольную скорость линейного звука. Ударные же волны распространяются со сверхзвуковой скоростью (см. формулы (29) и (31)). Ширины фронтов обеих волн пропорциональны коэффициенту диссипации. Волны с большей амплитудой распространяются с большей скоростью.

Случай больших времен релаксации. В случае больших времен релаксации, т.е. $\tau \gg t_0$, путем интегрирования по частям, интеграл в (19) представляем в виде разложения по степеням τ^{-1}. Ограничиваясь главными членами в этом разложении и подставляя в (17), приходим к уравнению

$$\big(v^2 - \tilde{c}_l^2\big)\,\frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{\beta}{\rho}\,\frac{d^2u}{d\xi^2}\,\frac{du}{d\xi} - \tilde{g}_F\,\frac{d^4u}{d\xi^4} = -\eta_1 u + \eta_2\,\frac{du}{d\xi}.$$

Здесь $\tilde{c}_l = c_l(1 - \tilde{q}_D K\Omega/D\rho c_l^2)^{1/2}$ — скорость звука, перенормированная за счет взаимодействия ТД с полем упругой деформации; $\tilde{g}_F = g(1 - 4\pi\mu^2/g\varepsilon_0)$ — перенормированный за счет флексоэлектрического эффекта коэффициент дисперсии; $\eta_1 = \tilde{Q}_e K\Omega/\rho D$, $\eta_2 = \tilde{q}_D K\Omega v/\rho D^2$ — коэффициенты диссипации волны, обусловленные соответственно генерационно-рекомбинационными процессами и деформационно-индуцированным дрейфом дефектов.

В этом случае ударные волны в среде не образуются, а возмущения деформации распространяются в виде уединенных волн (солитонов) или последовательности солитонов (движущихся периодических структур) [16]. Наличие деформационно-индуцированного дрейфа дефектов и флексоэлектрического эффекта при этом приводит к перенормировке скорости продольной звуковой волны и дисперсионных свойств среды. Отметим, что в этом случае перенормировка скорости звука не содержит вклада, связанного конечностью скорости рекомбинации дефектов.

4. Заключение

Таким образом, распространение нелинейных возмущений упругой деформации в центросимметричных кристаллах, где вследствие модуляции вероятностей генерации, движения дефектов и возникновения флексоэлектрического эффекта за счет деформации в упругой волне происходит взаимодействие поля деформации с подсистемой ТД, описывается модифицированным уравнением Кортевега де-Фриза и Бюргерса, характерного для сред с диссипацией и дисперсией. При определенной конкретной связи между коэффициентами этого уравнения, т.е. параметрами подсистемы дефектов и упругой нелинейной среды, может иметь место возникновение как солитонов, так и упругих ударных волн небольшой интенсивности. Оценены вклады в линейную скорость звука и дисперсионные свойства среды, обусловленные дефектно-деформационным взаимодействием и флексоэлектрическим эффектом. Амплитуда и скорость рассматриваемых нелинейных волн зависят от упругих констант и температуры, а также свойств подсистемы дефектов среды. Следовательно, аналитические предсказания данной работы открывают возможность для независимого экспериментального измерения упругих и флексоэлектрических модулей решетки и параметров дефектной подсистемы (например, скорости рекомбинации, энергий миграции и образования ТД и т.д.) твердых тел по нелинейным искажениям продольных волн деформации.

Список литературы

[1] Ю.К. Энгельбрехт, У.К. Нигул. *Нелинейные волны деформаций* (М., Наука, 1981).
[2] А.М. Самсонов, Г.В. Дрейден, А.В. Порубов, И.В. Семенова. Письма ЖТФ, **22** (21), 61 (1996).
[3] Г.В. Дрейден, Ю.И. Островский, А.М. Самсонов. ЖТФ, **58** (10), 2040 (1988).
[4] A.M. Samsonov, G.V. Dreiden, A.V. Porubov, I.V. Semenova. Phys. Rev. B, **57** (10), 5778 (1998).
[5] A.M. Samsonov. Appl. Analysis, **57**, 85 (1995).
[6] A.V. Porubov, M.G. Velarde. Waves Motion, **35**, 189 (2002).
[7] Ю.А. Быковский, В.Н. Неволин, А.Ю. Фоминский. *Ионная и лазерная имплантация металлических материалов* (М., Энергоатомиздат, 1991).
[8] Ф.Х. Мирзаде, В.Я. Панченко, Л.А. Шелепин. УФН. **166** (1), 3 (1996).
[9] V.I. Emel'yanov. Laser Phys., **2** (4), 389 (1992).
[10] В.С. Машкевич, К.Б. Толпыго. ЖЭТФ, **32** (3), 520 (1957).
[11] А.К. Таганцев. ЖЭТФ, **88** (6), 2108 (1985).
[12] В.Л. Инденбом, Е.Б. Логинов, М.А. Осипов. Кристаллография, **26** (6), 1157 (1981).
[13] Ш.М. Каган. ФТТ, **5**, 2829 (1963).
[14] В.В. Емцев, Т.В. Машовец, В.В. Михнович. ФТП, **26** (1), 22 (1992).
[15] И.С. Желудев. Кристаллография, **14**, 514 (1969).
[16] Ф.Х. Мирзаде, Л.А. Шелепин. ЖТФ, **71** (8), 23 (2001).
[17] Ф.Х. Мирзаде, Л.А. Шелепин. Кратк. сообщ. по физике ФИАН, № 12, 40 (1999); № 9, 38 (2001); № 5, 42 (2002).
[18] Ф.Х. Мирзаде. ЖТФ, **72** (10), 53 (2002).
[19] F.Kh. Mirzade. J. Appl. Phys., **97** (8), 084 911 (2005).
[20] А.М. Косевич. *Основы механики кристаллической решетки* (М., Наука, 1972).
[21] Л.Д. Ландау. *Теория упругости* (М., Наука, 1985).
[22] В.Я. Шкадов. Изв. АН СССР. МЖГ, № 1, 63 (1977).
[23] Y. Kuromoto, T. Tsuzuki. Progr. Theor. Phys., **55** (2), 356 (1976).
[24] Н.В. Кудряшов. Прикл. математика и механика, **52** (3), 465 (1988).

Редактор Л.В. Беляков

Non-linear longitudinal waves of interacting fields of deformation and concentration of defects in germanium and silicon

F.Kh. Mirzade

The Institute for Laser and Information Technologies,
Russian Academy of Sciences,
140700 Shatura, Russia

Abstract Formulated has been a system of equations describing the joint dynamics of elastic displacements in the medium and the concentration of point defects in irradiated crystals with a center of symmetry (germanium and silicon). Depending on values of defect-relaxation times, the model evolutionary equations describing stationary nonlinear longitudinal waves were derived with the account of the flexoelectricity effect. Exact solutions depending on the type of relation between the coefficient in the equation and describing both the shock-wave structures and the evolution of solitary waves are presented. The contributions of the finiteness of the defect-recombination rate and the flexoelectricity to linear elastic moduli and spatial dispersion are determined.