

УДК 517.925.5, 537.611.44, 51-73

Модель роста когерентных структур в среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией*

Морозов В.М.^{1,2}, Журавлев В.М.³

Самарский национальный исследовательский университет¹,
Ульяновское конструкторское бюро приборостроения²,
Ульяновский государственный университет³

Аннотация: В работе предлагается модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллической среде, основанная на уравнениях нелинейной диффузии точечных дефектов. Выявлены возможные режимы роста сверхрешеток и получены распределения концентраций и концентрационные профили по глубине материала.

Ключевые слова: нелинейная диффузия, когерентные структуры, метод много-масштабных разложений.

1. Модель «Быстрая релаксация-медленная диффузия»

Предлагаемая модель роста когерентных структур [1–3] основана на системе уравнений диффузии точечных дефектов (вакансии, междоузлия) [4, 5]:

$$\frac{\partial n_v}{\partial \tau} = \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g + \tilde{\lambda}_i(N_c - n_v)n_i - \tilde{\gamma}n_vn_i - \tilde{\mu}_vn_v + \nabla [D_v(n_i, n_v)\nabla n_v], \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial \tau} = -\tilde{\sigma}_i\frac{\partial n_i}{\partial z_3} + \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g + \tilde{\lambda}_i(N_c - n_v)n_i - \tilde{\gamma}n_vn_i - \tilde{\mu}_in_i + \nabla [D_i(n_i, n_v)\nabla n_i], \quad (3)$$

с коэффициентами диффузии $D_{v,i}(n_i, n_v)$, зависящими от концентраций, и переменным источником $J = \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g + \tilde{\lambda}_i(N_c - n_v)n_i$.

Налетающие частицы с концентрацией $g(\mathbf{x}, \mathbf{t})$, рассматриваются как часть динамической системы. Концентрация $g(\mathbf{x}, \mathbf{t})$ удовлетворяет такому уравнению переноса:

$$g_\tau = -\sigma_r\frac{\partial g}{\partial z_3} - \tilde{\lambda}_c(N_c - n_v)g - \tilde{\lambda}_rn_ig - \tilde{\kappa}g, \quad (4)$$

Решение задачи ищется в виде разложений безразмерных концентраций по малому параметру ε вида:

$$u(t, \vec{X}, T, \varepsilon) = u^{(0)}(t, \vec{X}, T) + u^{(1)}(t, \vec{X}, T)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \quad (5)$$

Коэффициенты разложения $u^{(k)}$ зависят от медленных координат $\vec{X} = \sqrt{\varepsilon}\vec{x}$ и медленного времени $T = \varepsilon t$.

*Работа выполнена в рамках проекта 0777-2020-0018, финансируемого из средств государственного задания победителям конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования, подведомственных Минобрнауки России.

Малый параметр ε имеет следующий вид:

$$\varepsilon^4 = \frac{D_0 \tilde{\lambda}_c N_c}{\sigma_r^2} = \frac{D_0}{\sigma_r} \frac{1}{\sigma_r \tau_d} \frac{\tau_d (\dot{g})_{abs}}{I/\sigma_r} = e_0 \frac{\langle v \rangle}{\sigma_r} \frac{\langle l \rangle}{\langle l_i \rangle} \frac{(\delta g)_{abs}}{g_{irr}} \ll 1.$$

Здесь τ_d – характерное время диффузии в необлученном кристалле, $\langle v \rangle$ – средняя «тепловая» скорость частиц вещества, e_0 – числовой коэффициент, зависящий от типа кристаллической решетки, $\langle l \rangle$ – длина свободного пробега частиц вещества в необлученном кристалле, $\langle l_i \rangle = \sigma_r \tau_d$ – расстояние, которое проходят без столкновения частицы излучения за то же время.

Разделение пространственных и временных масштабов приводит к тому, что исходная система уравнений распадается на две – уравнения релаксации и уравнения, описывающие рост крупномасштабной структуры.

В асимптотике при $t \rightarrow \infty$ распределение концентраций определяется функцией медленных переменных $A(\vec{X}, T)$, удовлетворяющей уравнению такого вида:

$$\left(1 + \frac{\nu^2}{A^2}\right) A_T + \sigma_i \frac{\nu^2}{A^2} A_Z = \nabla (\mathcal{D}_{\downarrow f}(A) \nabla A) - S(A), \quad (6)$$

где $S(A) = \mu_v A + \mu_i \nu^2 - \mu_i \frac{\nu^2}{A} + \frac{\lambda_i \mu_v}{\gamma}$, а эффективный коэффициент диффузии имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\downarrow f}(A) = & \frac{\nu^\varepsilon}{A^\varepsilon} \mathcal{D}_\triangleright \left(\frac{\mathcal{N}_J \alpha_\infty \nu^\varepsilon}{A} - \mathcal{N}_J \alpha_\infty \nu^\varepsilon, \mathcal{N}_J \alpha_l + \mathcal{N}_J \alpha_\infty A \right) + \\ & + \mathcal{D}_\sqsubseteq \left(\frac{\mathcal{N}_J \alpha_\infty \nu^\varepsilon}{A} - \mathcal{N}_J \alpha_\infty \nu^\varepsilon, \mathcal{N}_J \alpha_l + \mathcal{N}_J \alpha_\infty A \right). \end{aligned} \quad (7)$$

При некоторых значениях параметра $\nu = \sqrt{\frac{g_0}{\gamma}}$ (интенсивности падающего излучения), функция $\mathcal{D}_{\downarrow f}(A)$ может принимать отрицательные значения, что соответствует росту упорядоченной структуры.

Литература

1. Peruani F. A kinetic model and scaling properties of non-equilibrium clustering of self-propelled particles [Текст] / F. Peruani, M. Baer // New Journal of Physics. 2013. Т. 15. No 6. – P. 15 - 30.
2. Ghoniem N.M. Theory and experiment of nanostructure self-organization in irradiated materials [Текст] / N.M. Ghoniem, D. Walgraef, S.J. Zinkle // Journal of computer-aided materials design. 2001. Т. 8. No 1. P. 1 - 38.
3. Alsabbagh A. Microstructure and mechanical behavior of neutron irradiated ultrafine grained ferritic steel [Текст] / A. Alsabbagh, A. Sarkar, B. Miller, J. Burns, L. Squires, D. Porter, J.I. Cole, K.L. Murty // Materials Science and Engineering: A. 2014. Т. 615. P. 128 - 138.
4. Журавлев В.М. Лазерно-индуцированная генерация поверхностных периодических структур в средах с нелинейной диффузией [Текст] / В.М. Журавлев, И.О. Золотовский, Д.А. Коробко, В.М. Морозов, В.В. Светухин, И.О. Явтушенко, М.С. Явтушенко // ФТТ. 2017. No 12. P. 2291 - 2998.

5. Морозов В.М. Модель радиационно-стимулированного роста когерентных структур в кристаллической среде с быстрой релаксацией и медленной диффузией [Текст] / В.М. Морозов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2022. No 2. P. 78 – 104.

MSC 34D20

Model of growth of coherent structures in a medium with fast relaxation and slow diffusion

V.M. Morozov^{1,2}, V.M. Zhuravlev³

Samara National Research University¹,
Ulyanovsk instrument manufacturing design bureau²,
Ulyanovsk State University³

Abstract: The paper proposes a model of radiation-stimulated growth of coherent structures in a crystalline medium based on the equations of nonlinear diffusion of point defects. Possible modes of growth of superlattices are revealed, and concentration distributions and concentration profiles over the depth of the material are obtained.

Keywords: nonlinear diffusion, coherent structures, multiscale expansion method.

References

1. Peruani F., Baer M. A kinetic model and scaling properties of non-equilibrium clustering of self-propelled particles // *New Journal of Physics*. 2013. T.15. P.15-30.
2. Ghoniem N.M., Walgraef D., Zinkle S.J. Theory and experiment of nanostructure self-organization in irradiated materials // *Journal of computer-aided materials design*. 2001. T.8. No.1. P. 1-38.
3. Alsabbagh A., Sarkar A., Miller B., Burns J., Squires L., Porter D., Cole J.A., Murty K.L. Microstructure and mechanical behavior of neutron irradiated ultrafine grained ferritic steel // *Materials Science and Engineering: A*. 2014. T.615. P. 128-138.
4. Zhuravlev V. M. Et al. Laser-induced generation of surface periodic structures in media with nonlinear diffusion // *Physics of the Solid State*. 2017. T.59. P. 2313-2320.
5. Morozov V.M. Model of radiation-stimulated growth of coherent structures in a crystalline medium with fast relaxation and slow diffusion. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2022. P. 99–133. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2022-2-7