

МАШИНОСТРОЕНИЕ И МАШИНОВЕДЕНИЕ

УДК 548.232.4

ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ТЕПЛООВОГО ПОЛЯ ПРИ ВЗРЫВНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНЫХ ПЛЕНОК

О. Н. ШАБЛОВСКИЙ, Д. Г. КРОЛЬ, И. А. КОНЦЕВОЙ

*Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого»,
Республика Беларусь*

Ключевые слова: взрывная кристаллизация, температура подложки, толщина пленки, параметрический резонанс.

Введение

Взрывная кристаллизация (ВК) наблюдается в пленках аморфных веществ, напыленных на подложку [1]–[3]. Этот процесс инициируется локальным внешним воздействием – механическим или тепловым: укол пленки иглой, нагрев лазерным или электронным лучом. Экспериментальные наблюдения показывают, что фронт кристаллизации движется скачкообразно, с периодическими остановками [1]. Скорость фронта кристаллизации различных веществ достигает значений от 3 до 30 м/с [1], [2]. Например, в нескольких сериях опытов с аморфными пленками германия [3] эта скорость изменялась от 3,9 до 8,8 м/с. Наблюдаемые в экспериментах границы плоских кристаллических участков имеют периодическую структуру (полосы, кольца, ячейки и др.). Для наиболее распространенных условий проведения опытов характерны полосчатые структуры [3], [4]. Теоретическое исследование некоторых задач ВК выполнено в работах [1]–[3] на основе одномерного параболического уравнения теплопроводности. Тепловая модель периодической кристаллизации, учитывающая волновой механизм теплопереноса, предложена в [5]. В работах [6], [7] представлены физические и морфологические свойства двумерных периодических тепловых структур, формирующихся при ВК аморфных пленок.

Весьма важен вопрос о причинах большой эффективной скорости распространения фронта ВК: эта скорость в несколько раз превышает максимальную линейную скорость роста. В работе [8] указано, что для объяснения данного явления нужно учесть распределенные в объеме аморфной фазы зародышевые (горячие) центры кристаллизации. В экспериментах [8] было установлено, что при возрастании концентрации зародышей в аморфных слоях появляются условия спонтанного возникновения ВК. Теоретическая оценка эффективной скорости движения кристаллизационной волны в аморфной среде с распределенными в ней зародышевыми кристаллами дана в [9]. В работе [10] изучены неустойчивый и устойчивый режимы возбуждения зародышевых центров кристаллизации, распределенных в аморфной фазе. Установлено, что тепловой параметрический резонанс есть причина высокой скорости распространения фронта взрывной кристаллизации. Предложена тепловая модель взаимодействия фазовой границы кристаллизации с горячими зародышевыми центрами, распределенными в аморфной пленке. Для случая стационарно возбужденных горячих центров построены нерезонансное и резонансное решения. Показано, что на конечном удалении от фазовой границы возникает тепловой параметрический резонанс, который и является причиной большой эффективной скорости распространения фронта взрывной кристаллизации.

Настоящая работа имеет своей целью изучить свойства параметрических колебаний теплового поля в системе «фазовая граница – подложка» для различных режимов возбуждения горячих центров кристаллизации.

Стационарно возбужденные горячие центры. Следуя [10], запишем уравнение теплопроводности с объемным источником энергии в системе «фазовая граница – подложка»:

$$c \frac{\partial \tau}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 \tau}{\partial x^2} + (k_v^1 + B)\tau - B\tau_c; \quad (1)$$

$$q_v = (k_v^1 + B)\tau - B\tau_c, \quad \tau = T - T_0, \quad \tau_c = T_c - T_0. \quad (2)$$

Здесь c – объемная теплоемкость, λ – коэффициент теплопроводности, T – температура, x – декартова координата, t – время. Функция источника (2) характеризует два основных процесса: 1) выделение кристаллизационного тепла (теплоты фазового перехода); 2) теплоотдачу в подложку, происходящую при наличии центров кристаллизации в окрестности температуры $T = T_0$; $T = T_c$ есть равновесная температура кристаллизации, температура подложки равна $T_0 \equiv \text{const}$. Функция $B = B(x, t)$ моделирует присутствие горячих центров. Если $B \equiv 0$, то при $T = T_0$ теплоотдача в подложку отсутствует: $q_v(T = T_0, B = 0) = 0$. Кроме того, имеем: $q_v(T = T_c) = Q_0 = k_v^1 \tau_c$. Простая количественная оценка параметра Q_0 имеет вид: $Q_0 = LN/\delta$, где L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; LN – тепловой поток на фронте кристаллизации; δ – толщина аморфной пленки. Наклон функции источника $\partial q_v / \partial T = k_v^1 + B$ характеризует интенсивность теплообмена в системе «фазовая граница – подложка»; величина этого наклона колеблется около постоянного положительного значения $k_v^1 = (\partial q_v / \partial T)_{B=0}$. Численные расчеты проведены для аморфного германия.

Сначала рассмотрим стационарный вариант и запишем уравнение (1) в безразмерном виде:

$$\frac{d^2 \tau}{dx^2} + \Omega^2 (k_v^1 + B)\tau = A_1 B,$$

где $B = B(x)$ – заданная функция; например, $B = B_1 \sin(\bar{p}rx)$. Параметры задачи:

$$A_1 = \frac{Q_0 x_b^2}{T_c \lambda_b}, \quad Q_0 = \frac{LN_b}{\delta}, \quad \tau_b = T_c, \quad x_b = 10^{-2} \text{ м}, \quad \lambda_b = 25,15 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{град}}, \quad c_b = 3,97 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \cdot \text{град}},$$

$$L = 2,703 \cdot 10^9 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3}, \quad T_c = 1210 \text{ °К}, \quad p_b = 10^6 \text{ м}^{-1}, \quad \bar{p} = p_b x_b, \quad k_v^1 = 1, \quad p > 0, \quad 0 < B_1 < 1,$$

$$\Omega^2 = \frac{Q_0 x_b^2}{T_c \lambda_b}. \text{ Нижним индексом } b \text{ отмечены масштабы величин, применяемые при}$$

обезразмеривании. Выбор безразмерного числа p означает выбор частоты колебаний по безразмерной координате x . Параметры δ , N_b , T_0 задаем для каждого отдельного варианта расчета.

Начальные условия:

$$x = 0, \quad \tau = 0, \quad d\tau/dx = -q_0.$$

Физический смысл имеют значения функции $\tau(x)$ в интервале $(\tau_{\min}, \tau_{\max})$, где $\tau_{\min} = -T_0/T_c$, $\tau_{\max} = (T_c - T_0)/T_c$. Для уравнения с постоянными коэффициен-

тами ($B_1 = 0$) собственная частота равна Ω , поэтому далее различаем три режима: колебания малой частоты, $0 < p\bar{p} < \Omega$; резонансный случай $p\bar{p} = \Omega$; колебания большой частоты, $p\bar{p} > \Omega$. Ясно, что для уравнения с переменными коэффициентами ($B_1 \neq 0$) такое разделение режимов условное и применяется только для наглядности.

Результаты расчетов представлены на рис. 1 и 2. Вычисления проведены для трех характерных толщин аморфной пленки германия: $\delta = 0,45 \cdot 10^{-6}$ м, $\delta = 0,89 \cdot 10^{-6}$ м, $\delta = 1,8 \cdot 10^{-6}$ м. Кроме того, были рассмотрены шесть значений скорости фазовой границы кристаллизации: $N_b = 2,9856$ м/с, $N_b = 4,504$ м/с, $N_b = 5,732$ м/с, $N_b = 7,7166$ м/с, $N_b = 8,608$ м/с, $N_b = 8,872$ м/с. Подробности, относящиеся к обоснованному выбору параметров δ и N_b , изложены в [7].

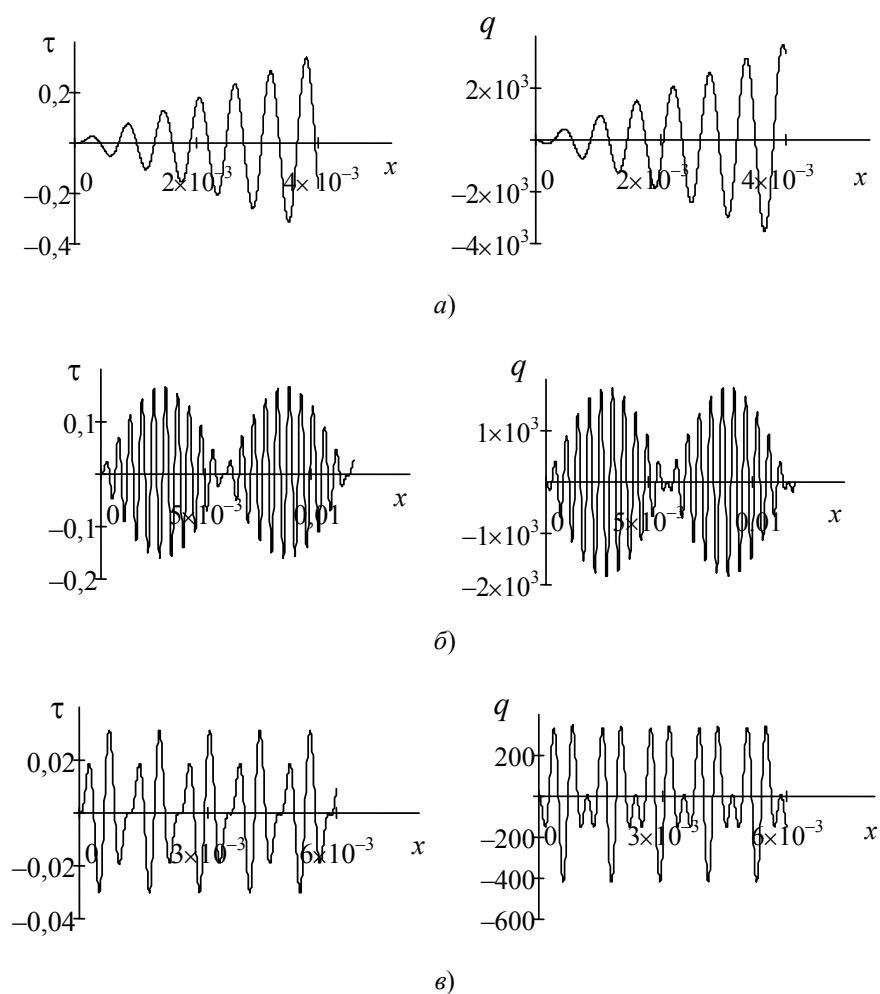


Рис. 1. Возникновение резонансной ситуации и влияние частоты расположения центров кристаллизации на параметрические колебания теплового поля:

$$\delta = 1,8 \cdot 10^{-6} \text{ м}; T_w = 810 \text{ °К}; N_b = 7,7166 \text{ м/с}; B_1 = 0,05; q_0 = 10;$$

$$a - p\bar{p} = \Omega; б - p\bar{p} = 1,1\Omega; в - p\bar{p} = 1,5\Omega$$

Типичный пример колебаний показан на рис. 1. Резонансная ситуация (рис. 1, а) возникает при частотах, близких к Ω . Обращает на себя внимание режим биений, который наблюдается в левой и правой конечных окрестностях пороговой частоты $p\bar{p} = \Omega$ (рис. 1, б). Для больших частот типичным является немонотонное поведение амплитуды колебаний температуры и теплового потока (рис. 1, в).

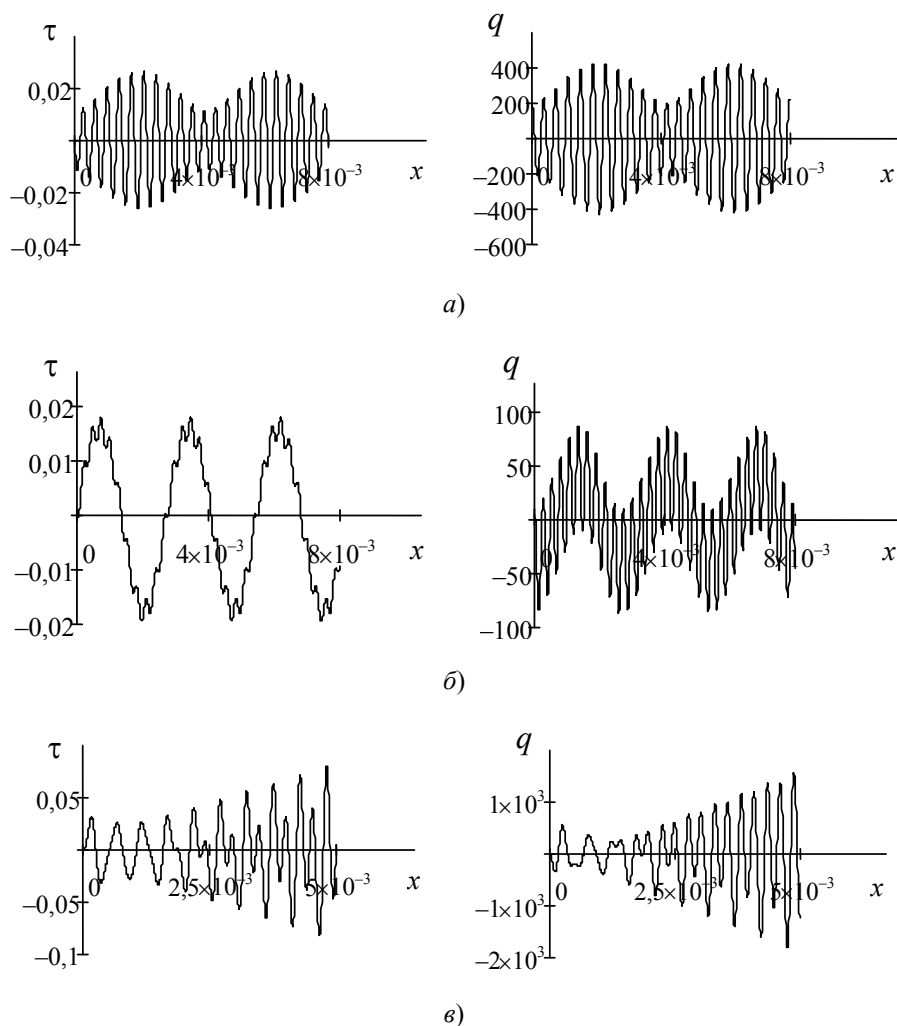


Рис. 2. Примеры параметрических колебаний теплового поля в системе «пленка – подложка»:

a – $\delta = 0,89 \cdot 10^{-6}$ м; $T_w = 970$ °К; $N_b = 4,504$ м/с; $B_1 = 0,02$; $q_0 = 200$; $\bar{p}p = 1,1\Omega$;

б – $\delta = 0,45 \cdot 10^{-6}$ м; $T_w = 810$ °К; $N_b = 8,872$ м/с; $B_1 = 0,05$; $q_0 = 10$; $\bar{p}p = 0,1\Omega$;

в – $\delta = 0,45 \cdot 10^{-6}$ м; $T_w = 970$ °К; $N_b = 5,732$ м/с; $B_1 = 0,1$; $q_0 = 10$; $\bar{p}p = 0,5\Omega$

Рисунок 2 демонстрирует многовариантный характер поведения амплитуды колебаний в широком интервале частот расположения горячих центров кристаллизации. Для теплового процесса (рис. 2, *a*) амплитуды колебаний температуры и теплового потока ведут себя одинаково в качественном отношении. Вместе с тем возможны ситуации (рис. 2, *б*), когда закономерности поведения этих амплитуд существенно различаются. Рисунок 2, *в* дает, в дополнение к рис. 1, *a*, еще один пример возникновения резонансной ситуации. Результаты этой серии расчетов позволяют утверждать, что главными факторами воздействия на параметрические колебания теплового поля являются толщина пленки, температура подложки, скорость фазовой границы кристаллизации.

Волна возбуждения горячих центров. Будем применять волновую координату $\beta = x - Nt \geq 0$, где N – скорость фазовой границы, которая возбуждает горячие центры перед своим фронтом: $\beta_j = 0$, $x_j = Nt \geq 0$. В автомодельном режиме $\tau = \tau(\beta)$ уравнение теплопроводности (1), (2) запишем в безразмерном виде:

$$\frac{d^2\tau}{d\beta^2} + n_1 \frac{d\tau}{d\beta} + \Omega^2(k_v^1 + B)\tau = A_1 B.$$

Здесь все обозначения прежние. В математическом отношении данное уравнение отличается от стационарного варианта наличием диссипативного слагаемого $n_1 d\tau/d\beta$, где $n_1 = N_b c_b x_b / \lambda_b$ – коэффициент затухания.

Начальные условия:

$$\beta = 0, \quad \tau = (T_c - T_0)/T_c; \quad \frac{d\tau}{d\beta} = -LN_b x_b / (\lambda_b T_c).$$

Интегрирование выполняется в сторону значений $\beta \geq 0$; $n = n_1/2$, $k_1 = \sqrt{\Omega^2 - n^2}$. Результаты расчетов представлены на рис. 3. Сопоставление с данными на рис. 1 и 2 показывает, что влияние затухания проявляется здесь в конечной окрестности фронта $\beta_j = 0$; по мере роста волновой координаты β происходит стабилизация режима возбуждения горячих центров кристаллизации.

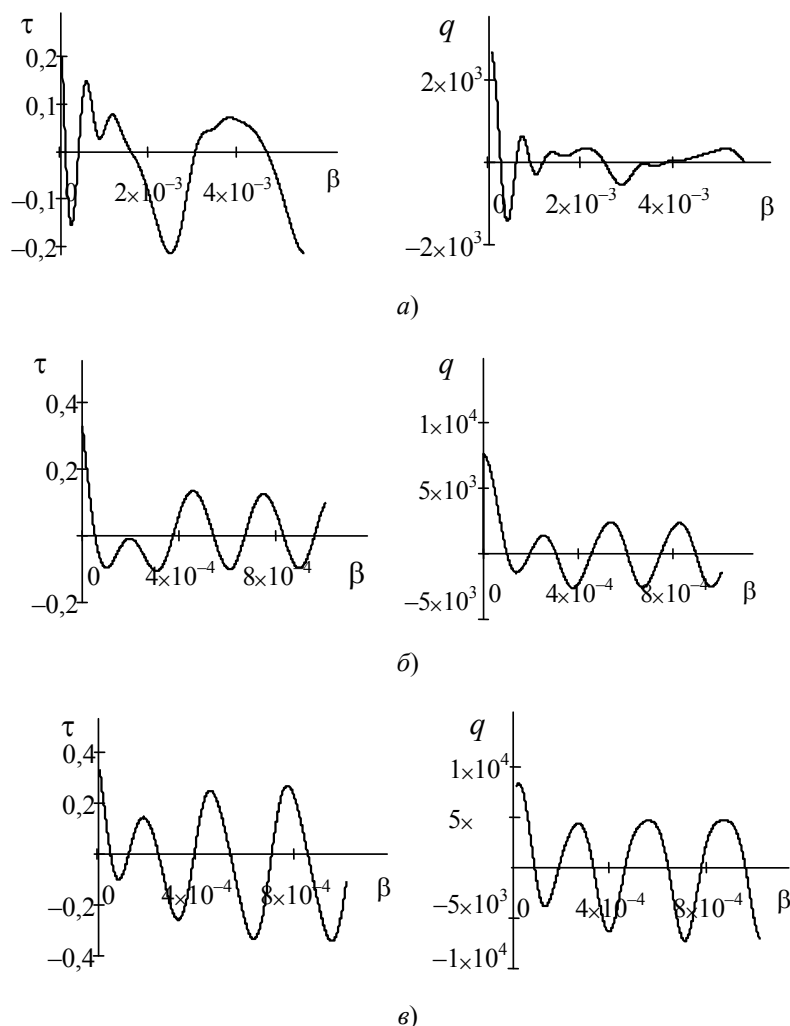


Рис. 3. Волновой механизм возбуждения: влияние частоты расположения горячих центров на параметрические колебания теплового поля:

- a* – $\delta = 1,8 \cdot 10^{-6}$ м; $T_w = 970$ °К; $N_b = 2,9856$ м/с; $B_1 = 0,5$; $k_1 = 8290$ м⁻¹; $\bar{p}p = 0,25k_1$;
- б* – $\delta = 0,89 \cdot 10^{-6}$ м; $T_w = 810$ °К; $N_b = 8,608$ м/с; $B_1 = 0,5$; $k_1 = 14620$ м⁻¹; $\bar{p}p = 1,5k_1$;
- в* – $\delta = 0,45 \cdot 10^{-6}$ м; $T_w = 810$ °К; $N_b = 8,872$ м/с; $B_1 = 0,5$; $k_1 = 21920$ м⁻¹; $\bar{p}p = 0,9k_1$

Параметрические колебания в режиме биений внешнего воздействия. Рассмотрим модельный пример параметрической системы

$$\frac{d^2\tau}{dx^2} + Q^2\tau = R,$$

для которой

$$Q(x) = a_0 + a_1 \sin px, \quad a_0 > 0, \quad a_1 > 0.$$

$$R = -\tau_0 \sin\left(a_0 x - \frac{a_1}{p} \cos px\right) \frac{dQ}{dx}, \quad \tau(x) = \tau_0 \cos\left(a_0 x - \frac{a_1}{p} \cos px\right),$$

$$a_0, a_1, \tau_0, p - \text{const.}$$

Здесь функция $R(x)$ определяет внешнее воздействие на систему, собственная частота которой характеризуется выражением $Q(x)$. Своеобразие данного примера в том, что фаза колебаний температуры $\tau(x)$ – периодическая функция. Нетрудно видеть, что при больших p внешнее воздействие происходит в режиме биений: $R(x) \sim \sin a_0 x \cdot \cos px$, $p \gg 1$. Все расчеты выполнены в безразмерных переменных. Было принято $\tau_0 = 1$. Влияние частоты p на параметрические колебания показано на рис. 4 и 5.

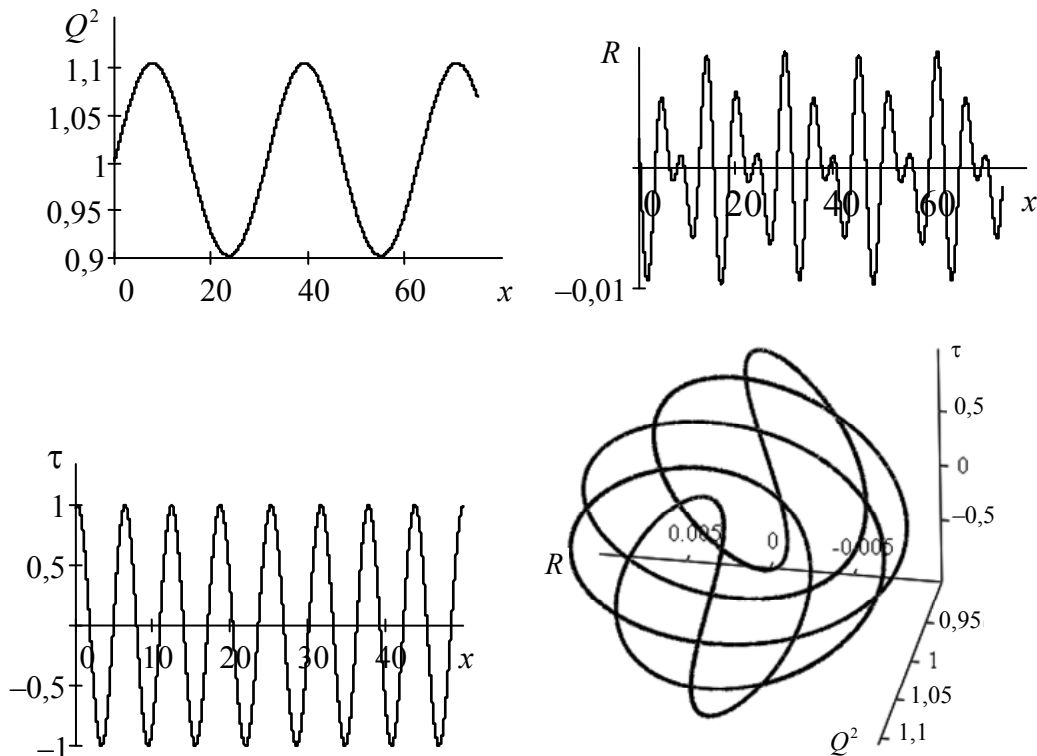


Рис. 4. Параметрические колебания при малой частоте внешнего воздействия: пример замкнутой фазовой траектории: $\tau_0 = 1$; $a_0 = 1$; $a_1 = 0,05$; $p = 0,2$

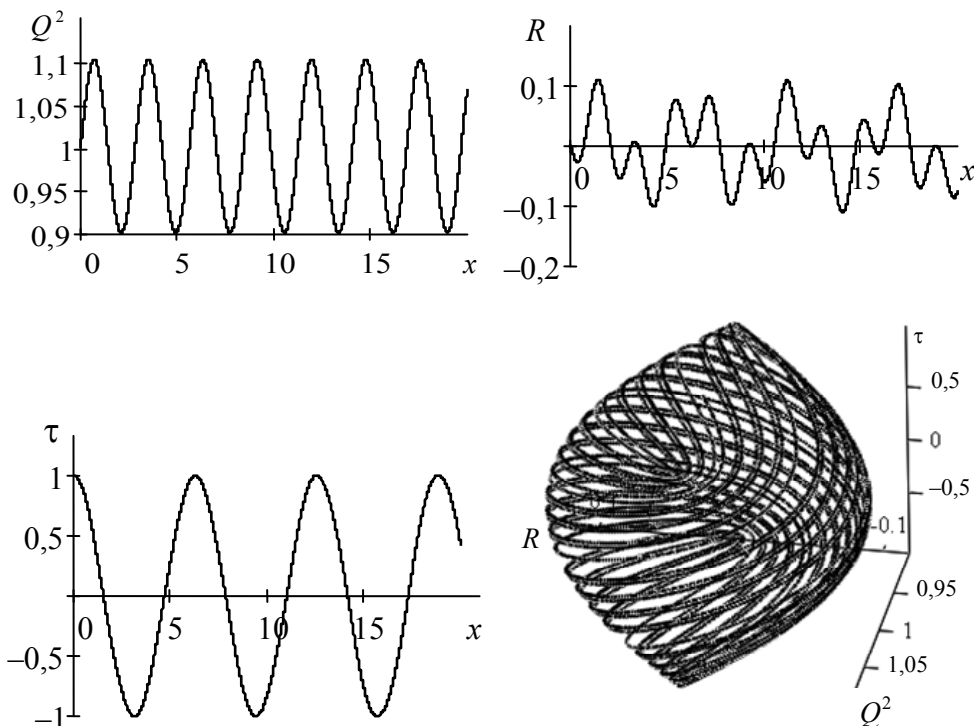


Рис. 5. Параметрические колебания при иррациональном числовом значении частоты внешнего воздействия: незамкнутая фазовая траектория: $\tau_0 = 1; a_0 = 1; a_1 = 0,05; p = \sqrt{5}$

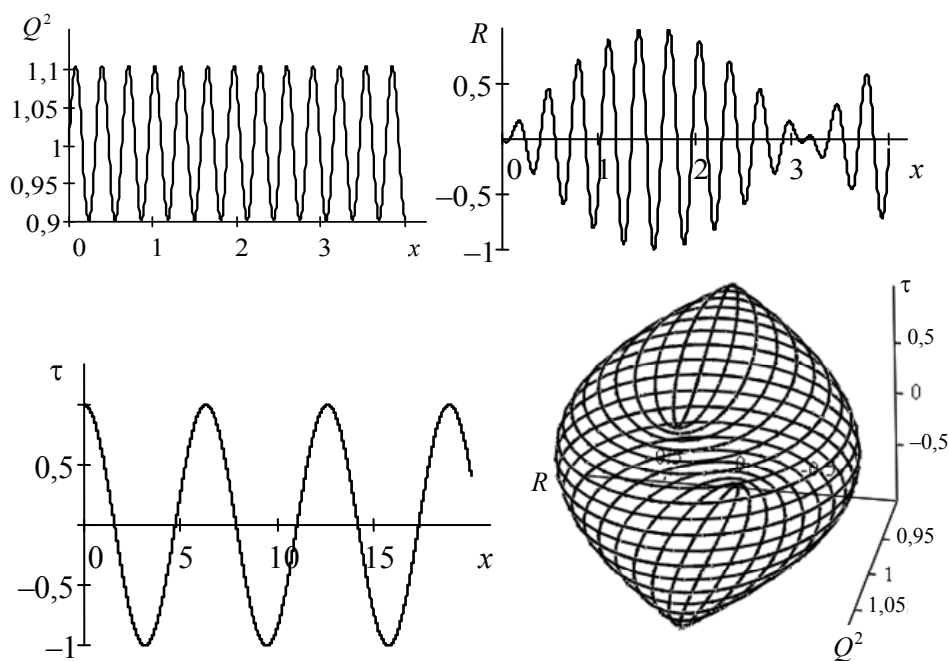


Рис. 6. Параметрические колебания в режиме биений внешнего воздействия: $\tau_0 = 1; a_0 = 1; a_1 = 0,05; p = 20$

Отметим еще, что в количественном отношении изучаемая система ощутимо реагирует на изменение амплитуды a_1 .

Выход на режим биений при наличии спектра частот демонстрирует рис. 7.

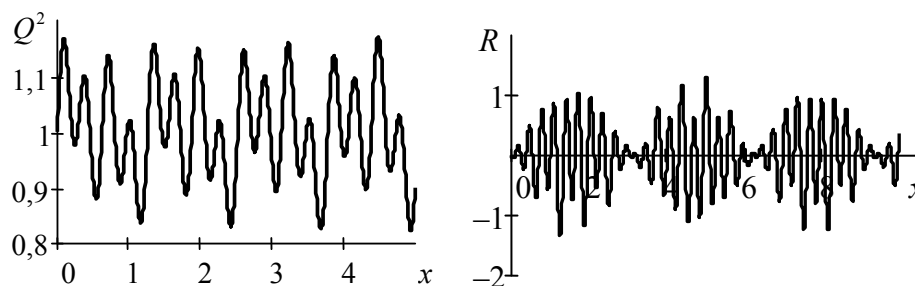


Рис. 7. Спектр частот: режим биений внешнего воздействия:

$$\tau_0 = 1; a_0 = 1; a_1 = 0,05; p = 20; a_2 = 0,03; p_2 = 10; a_3 = 0,02; p_3 = \sqrt{23}$$

Для этой серии расчетов было принято:

$$Q(x) = a_0 + a_1 \sin p_1 x + a_2 \sin p_2 x + a_3 \sin p_3 x,$$

$$a_0 > 0, 0 < a_1 < 1, 0 < a_2 < 1, 0 \leq a_3 < 1; p_1 = p > p_2 > p_3 > 0.$$

Структура фазовых траекторий в пространстве (R, Q^2, τ) в основном аналогична варианту колебаний на одной частоте.

Возможно еще одно физическое истолкование представленных зависимостей: решение $\tau(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 \tau}{dx^2} - \left(\frac{1}{Q} \frac{dQ}{dx} \right) \frac{d\tau}{dx} + Q^2 \tau = 0,$$

которое описывает параметрические колебания системы «среда – внешний источник» в условиях знакопеременного диссипативного процесса, для которого $n_1 = (-dQ/dx)/Q$; результаты расчетов этого варианта здесь не приводятся.

Заключение

Представлены результаты численного моделирования параметрических колебаний теплового поля в системе «фазовая граница – подложка». Рассмотрены стационарный и волновой режимы возбуждения горячих центров кристаллизации. Расчеты выполнены для аморфной пленки германия. Установлены основные физические факторы, определяющие амплитудно-частотные свойства данного процесса: толщина пленки, температура подложки и скорость фазовой границы кристаллизации. Указаны примеры возникновения резонансных ситуаций. Рассмотрены колебания параметрической системы, которая испытывает внешнее воздействие в режиме биений. Для этой системы построен трехмерный фазовый портрет, демонстрирующий ее динамические свойства.

Литература

1. Александров, Л. Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок / Л. Н. Александров. – Новосибирск : Наука, 1985. – 224 с.
2. Шкловский, В. А. Взрывная кристаллизация аморфных веществ / В. А. Шкловский, В. М. Кузьменко // Успехи физ. наук. – 1989. – Т. 157, вып. 2. – С. 311–338.
3. Explosive crystallization in the presence of melting / C. Grigoropoulos [et al.] // Physical Review B. – 2006. – Vol. 73. – P. 184125-1–184125-15.

4. Жарков, С. М. Кристаллизация пленок железо-углерод, инициированная электронным пучком / С. М. Жарков, Л. И. Квеглис // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, вып. 5. – С. 938–943.
5. Shablovsky, O. N. A Thermal Model of Periodic Crystallization / O. N. Shablovsky // Crystallography Reports. – 2005. – Vol. 50, suppl. 1. – P. 62–67.
6. Шабловский, О. Н. Феноменологическая оценка времени тепловой релаксации при взрывной кристаллизации аморфных пленок германия / О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль // Тепловые процессы в технике. – 2010. – № 5. – С. 203–208.
7. Шабловский, О. Н. Неравновесные тепловые структуры в средах с источниками энергии / О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2013. – 208 с.
8. Богданов, Н. М. Спонтанная кристаллизация ультрадисперсных порошков аморфного германия / Н. М. Богданов, В. П. Коверда, В. Н. Скоков, А. А. Дик, В. П. Скрипов // Докл. АН СССР. – 1987. – Т. 293, № 3. – С. 595–598.
9. Коверда, В. П. Движение кристаллизационной волны в аморфной среде с зародышевыми кристаллами / В. П. Коверда // Журн. техн. физики. – 1994. – Т. 64, вып. 3. – С. 62–72.
10. Шабловский, О. Н. Тепловой параметрический резонанс при взрывной кристаллизации аморфных пленок / О. Н. Шабловский // Тепловые процессы в технике. – 2016. – № 6. – С. 242–248.

Получено 22.05.2019 г.