

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,  $\lambda$  – 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;  $\delta$  – 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,  $B = B_1 \sin(\bar{p}px)$ . Параметры задачи:

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

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

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

обезразмеривании. Выбор безразмерного числа  $p$  означает выбор частоты колебаний по безразмерной координате  $x$ . Параметры  $\delta$ ,  $N_b$ ,  $T_0$  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  $\Omega$ , 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  $\delta$  и  $N_b$ , изложены в [7].

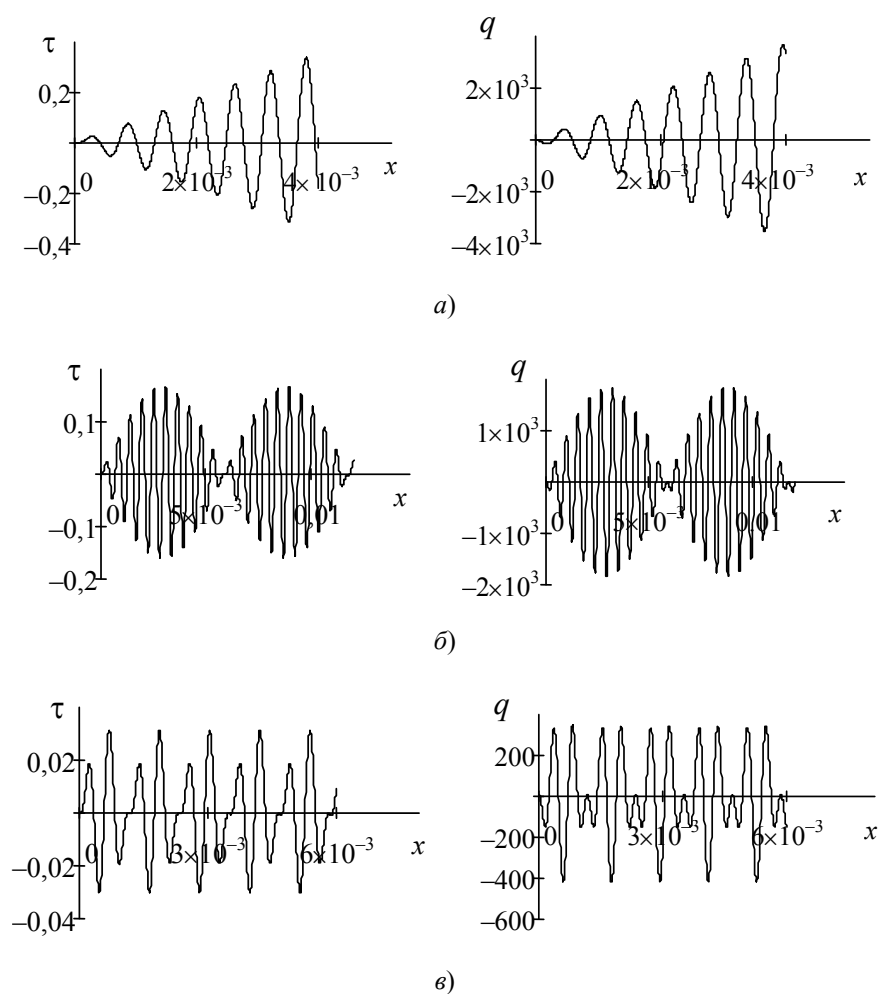


Рис. 1. Возникновение резонансной ситуации и влияние частоты расположения центров кристаллизации на параметрические колебания теплового поля:

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

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

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

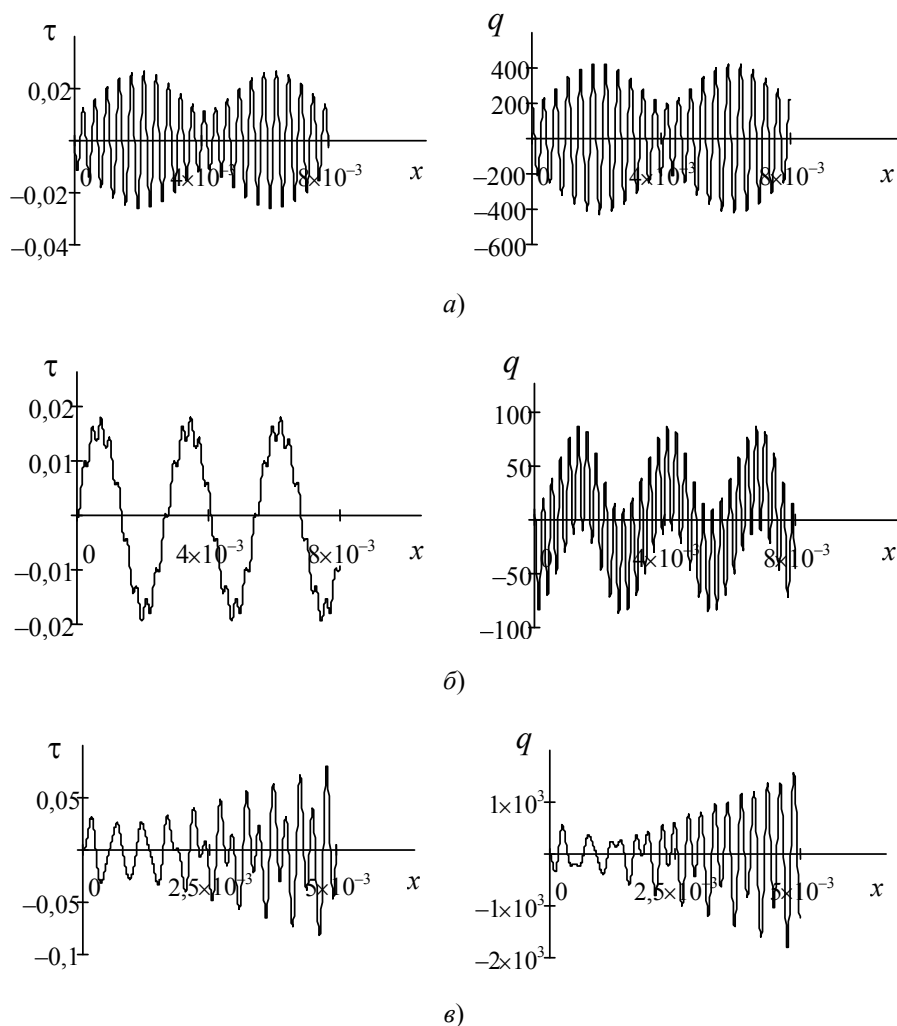


Рис. 2. Примеры параметрических колебаний теплового поля в системе «пленка – подложка»:

*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  $\beta$  происходит стабилизация режима возбуждения горячих центров кристаллизации.

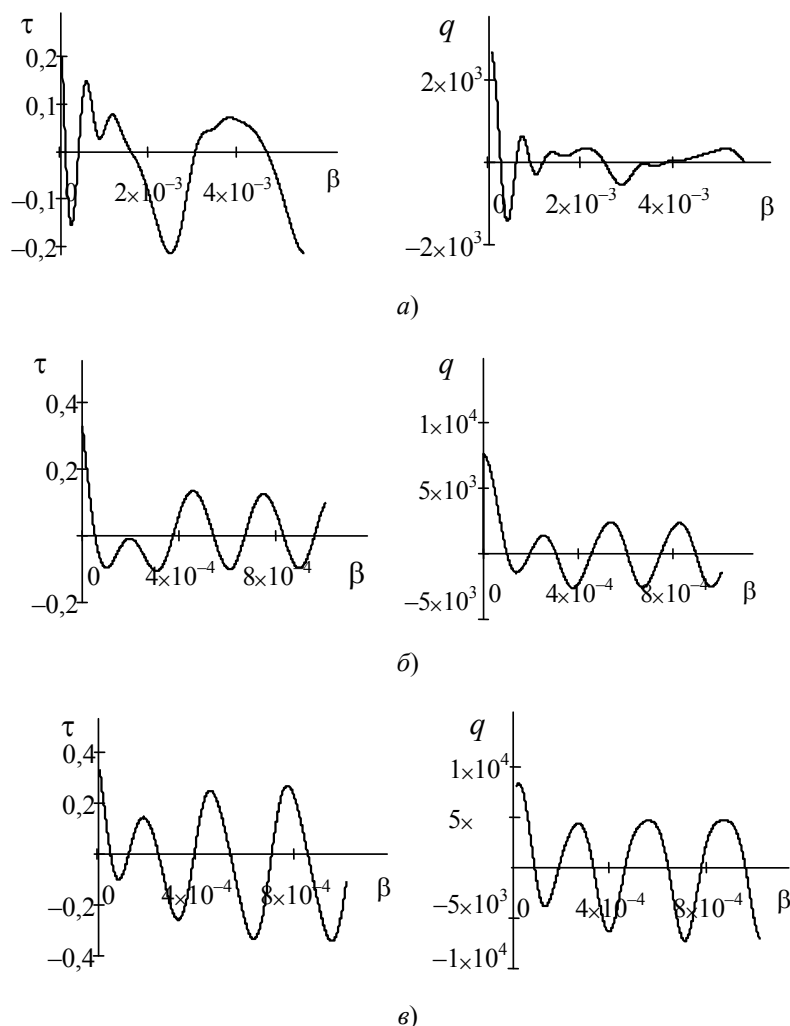


Рис. 3. Волновой механизм возбуждения: влияние частоты расположения горячих центров на параметрические колебания теплового поля:

- 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<sup>-1</sup>;  $\bar{p}p = 0,25k_1$ ;
- 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<sup>-1</sup>;  $\bar{p}p = 1,5k_1$ ;
- 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<sup>-1</sup>;  $\bar{p}p = 0,9k_1$

**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.

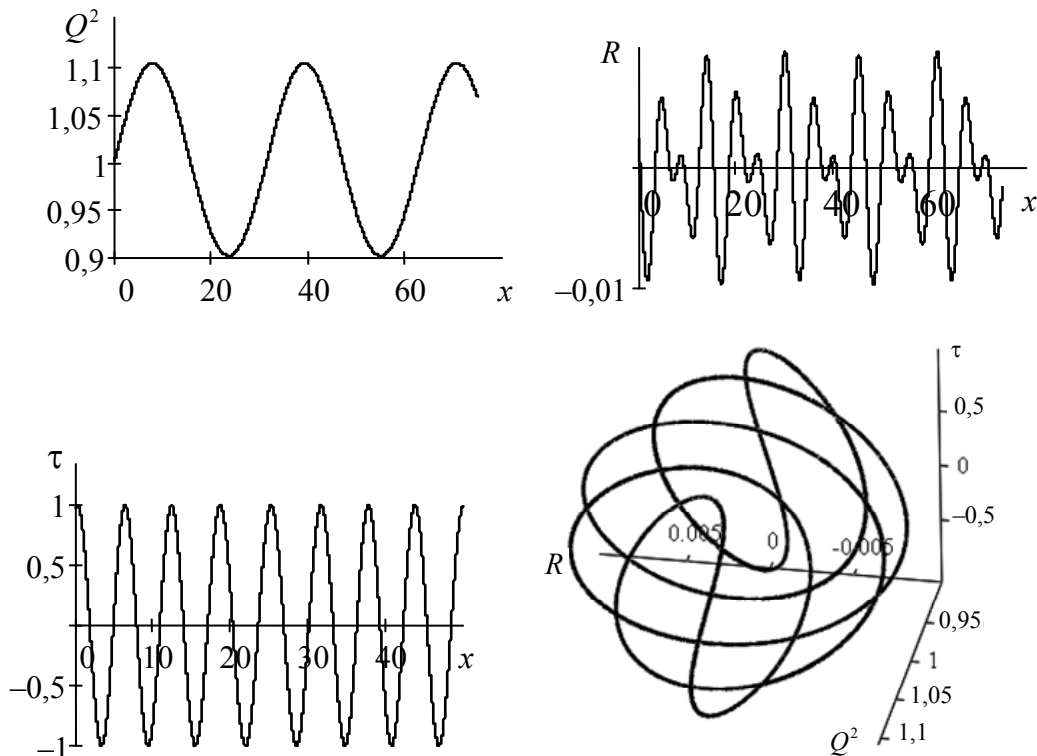


Рис. 4. Параметрические колебания при малой частоте внешнего воздействия: пример замкнутой фазовой траектории:  $\tau_0 = 1$ ;  $a_0 = 1$ ;  $a_1 = 0,05$ ;  $p = 0,2$

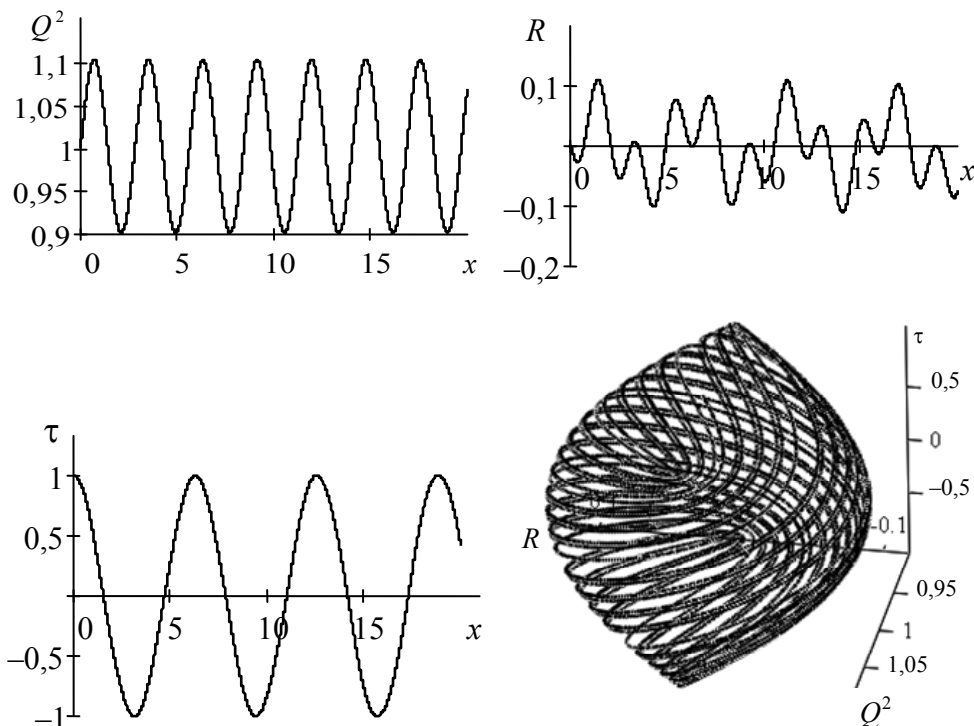


Рис. 5. Параметрические колебания при иррациональном числовом значении частоты внешнего воздействия: незамкнутая фазовая траектория:  $\tau_0 = 1; a_0 = 1; a_1 = 0,05; p = \sqrt{5}$

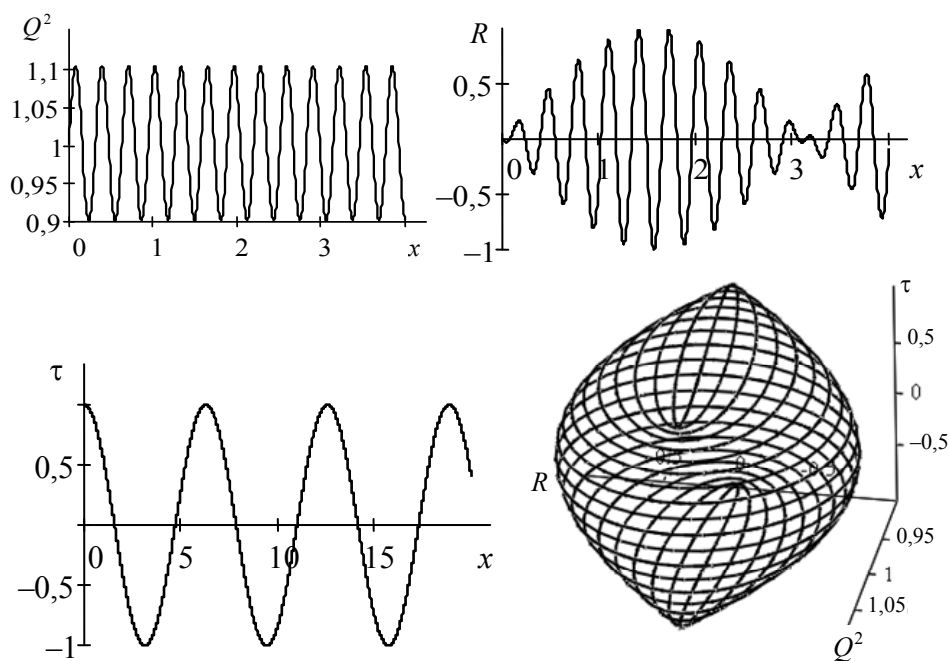


Рис. 6. Параметрические колебания в режиме биений внешнего воздействия:  $\tau_0 = 1; a_0 = 1; a_1 = 0,05; p = 20$

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.

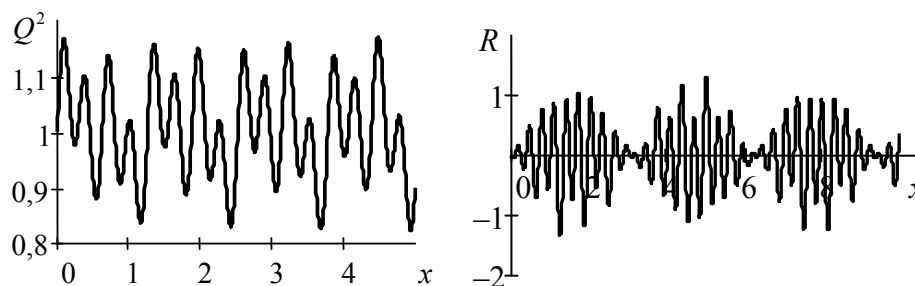


Рис. 7. Спектр частот: режим биений внешнего воздействия:

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

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  $(R, Q^2, \tau)$  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.*