Физика низких температур, 1997, т. 23, № 1, с. 97–109

Сглаживание макрорельефа на поверхности твердого тела под облучением

В. В. Слезов, В. М. Апальков

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1
E-mail:kfti@kfti.kharkov.ua

Ю. И. Бойко

Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Х. Д. Карстаньен

Max-Plank Institute of Metal Science, Heisenbergstrasse, 1, Stuttgart, 70569, Germany

Статья поступила в редакцию 15 мая 1996 г.

Приведена общая система уравнений, описывающая сглаживание макрорельефа на поверхности облучаемого материала. Показано, что в реальных условиях эту систему можно свести к более простому виду, допускающему точное решение. Получена общая формула для сглаживания макрорельефа во времени. Как частный случай из этой формулы получается эволюция (сглаживание) необлученного макрорельефа, связанная с различием кривизны для разных шероховатостей. Физической причиной, приводящей к ускорению сглаживания облученных неровностей, является различие центров тяжестей концентрационных профилей вакансий и межузельных атомов. Учет облучения приводит к новому виду зависимости скорости сглаживания от параметров шероховатостей поверхности, что позволяет экспериментально выделить вклад облучения в сглаживание и одновременно определить некоторые трудно измеримые параметры.

Наведено загальну систему рівнянь, яка описує згладжування макрорельєфу на поверхні матеріалу, який знаходиться під опроміненням. Показано, що у реальних умовах цю систему можна звести до більш простого виду, який допускає точне розв'язання. Одержано загальну формулу для термінового згладжування макрорельєфу. Як окремий випадок із цієї формули одержано еволюцію (згладжування) макрорельєфу без опромінення, яка пов'язана з різницей кривин для різних шорсткостей. Фізична причина, яка приводить до прискорення згладжування нерівностей під опроміненням, є різниця центрів ваги концентраційних профілей вакансій та міжузлових атомів. Урахування опромінення приводить до нового виду залежності швидкості згладжування від параметрів шорсткостей поверхні, що дозволяє експериментально виділити вклад опромінення в згладжування і одночасно визначити деякі важко вимірні параметри.

PACS: 61.72.-y

1. Основная система уравнений

Как известно, диффузионные процессы в твердых телах имеют большое значение как в научном, так и в прикладном отношениях, так как они определяют многие важные свойства твердых тел. В изучении этих процессов основополагающую роль играют работы Ильи Михайловича Лифшица [1,2]. В них соответствующая проблема поставлена в общем виде и дан толчок к развитию целого направления. Предлагаемая нами работа является развитием работ, связанных с именем И. М. Лифшица.

Известно, что эволюция (сглаживание) неровностей на поверхности твердого тела используется для определения таких важных констант материала, как коэффициенты поверхностной и объемной диффузии [3,4]. Эти константы являются необходимыми для описания многих процессов, связанных с переносом вещества в твердых телах (спекание порошков, ползучесть, формирование тонких поверхностных слоев и т.д.). В рассматриваемой задаче чрезвычайно важен учет роли источников точечных дефектов, создаваемых различными типами облучения. Изучению именно этой задачи и посвящена данная работа.

Физической причиной сглаживания макрорельефа на поверхности твердого тела является различие в равновесной концентрации вакансий на выпуклостях и вогнутостях поверхности. Для вакансий на выпуклостях кривизна $K > 0$ и $u_K > u_0$,

© В. В. Слезов, В. М. Апальков, Ю. И. Бойко, Х. Д. Карстаньен, 1997

на вогнутостях $K < 0$ и $u_K < u_0$, где u_K — равновесная поверхностная концентрация вакансий на поверхности с кривизной K; u_0 — равновесная поверхностная концентрация вакансий, соответствующая плоской поверхности ($K = 0$). Таким образом, возникает необходимость перераспределения вакансий на выпуклостях и вогнутостях до термодинамически равновесного состояния, которое соответствует плоской поверхности. Концентрация поверхностных вакансий определяется как перераспределением их на поверхности вследствие неоднородности кривизны поверхности, так и потоком вакансий из объема, так как концентрация вакансий в глубине образца однородна и соответствует равновесному значению c_0, а вблизи поверхности также определяется кривизной K.

Задача сглаживания макрорельефа поверхности под влиянием указанной выше причины была рассмотрена в теоретической работе [3], а также апробирована экспериментально в [4]. В данной работе рассмотрена задача, когда сглаживание поверхности инициируется не только кривизной рельефа, но и наличием источников вакансий и межузельных атомов. Такая ситуация возникает при различных типах облучения поверхности твердого тела. В результате облучения образуются точечные дефекты, которые вносят дополнительный вклад в процесс сглаживания.

Для рассмотрения процесса сглаживания неровностей вводим объемную c и поверхностную u концентрации вакансий. Концентрации нормированны на один узел решетки*. Система уравнений, описывающая изменение поверхности образца вследствие диффузионных потоков, с учетом наличия источника вакансий имеет вид [5]

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D_S \Delta_S u - \nu(u - u_K) + \dfrac{D_V}{a} \dfrac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{z=f(x,y,t)} \\ \dfrac{\partial c}{\partial t} = D_V \Delta c + I(x, y, z, t) \\ \dfrac{\partial z}{\partial t}\Big|_{z=f(x,y,t)} = a\nu(u - u_K)\cos(\mathbf{n}, z) \end{cases}, \qquad (1)$$

где D_V, D_S — объемный и поверхностный коэффициенты диффузии вакансий; ν — частота усвоения вакансии поверхностью; u_K — равновесная поверхностная концентрация вакансий, соответствующая кривизне K: $u_K = u_0 + u_0 \gamma_S \Omega K / kT$; γ_S — коэффициент поверхностного натяжения; $\Omega = a^3$; T — температура образца; $I(x, y, z, t)$ — источник вакансий — число вакансий, генерируемых в единицу времени в расчете на один узел решетки; ось z направлена в глубь образца и $z = f(x, y, t)$ — уравнение поверхности в момент времени t; $\mathbf{n}$ — нормаль к поверхности, направленная в глубь образца, $\cos(\mathbf{n}, z) > 0$ (рис. 1).

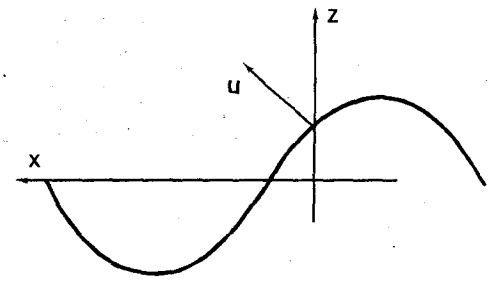

Рис. 1. Ориентация координатных осей. Ось z направлена в глубь образца, нормаль n к поверхности образца составляет острый угол с осью z.

Граничные условия к системе (1) имеют вид

$$D_V \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{z=f(x,y,t)} = \left(\frac{\beta D_V}{a} c - \frac{a}{\tau_S} u\right)\Big|_{z=f(x,y,t)}, \qquad (2)$$

где $\beta D_V = D'$ (D' определяет последний перескок при выходе вакансии из объема на свободную поверхность; β — безразмерный коэффициент, учитывающий наличие потенциального барьера при выходе вакансии на поверхность образца ($0 < \beta \le 1$)); τ_S — время ухода вакансии в объем, $\tau_S = 1/\nu$.

Коэффициенты в (2) связаны следующим условием: при равновесии концентрация вакансий в объеме постоянна, т. е. $\partial c / \partial \mathbf{n} = 0$, тогда из (2) следует $u_K / c_K = \beta D_V \tau_S / a^2$, где c_K — равновесная объемная концентрация вакансий, соответствующая кривизне K: $c_K = c_0 + c_0 \gamma_S \Omega K / kT$; c_0 — равновесная объемная концентрация вакансий, соответствующая плоской поверхности. Для слабых растворов вакансий в приповерхностной области из равенства их химических потенциалов следует

$$\mu_S = \psi_S + kT \ln u_K = \mu_V = \psi_V + kT \ln c_K,$$

$$\frac{u_K}{c_K} = \exp\left(\frac{\psi_V - \psi_S}{kT}\right) = \beta \frac{D_V \tau_S}{a^2}. \qquad (3)$$

* $c/a^3 = n_V$, $u/a^2 = n_S$, n_V и n_S — соответственно объемная и поверхностная плотности вакансий, a — параметр решетки.

Начальные условия для системы (1),(2) имеют вид

$$\begin{cases} u(x, y, f(x, y, 0), t = 0) = u_K(x, y, f(x, y, 0)) \\ f(x, y, t = 0) = f^{(0)}(x, y) \\ D_V \dfrac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{z=f(x,y,0)} = \left(\beta \dfrac{D_V}{a} c - \dfrac{a}{\tau_S} u\right)\Big|_{z=f(x,y,0)} \\ c(x, y, z, t)|_{t=0} = c_0 \quad , z > f(x, y, 0) \ . \end{cases}$$

В данной задаче имеются два характерных временных масштаба: малое время (время усвоения) $\tau_S = 1/\nu \sim a^2/(\beta D_V)$ (приведенное выражение для τ_S следует из (3)) и большое время (время релаксации) $\tau_{\text{rel}} \sim \lambda^2/D_S$, где λ — расстояние между эквивалентными неровностями на поверхности. Например, при $D_V \sim 10^{-12}$ см^2/с , $D_S \sim 10^{-8}$ см^2/с , $\lambda \sim 10^{-3}$ см , $a \sim 10^{-8}$ см получаем $\tau_S \sim 10^{-4}$с и $\tau_{\text{rel}} \sim 10^2$ с. Поскольку $a \ll \lambda$, то $\tau_{\text{rel}} \gg \tau_S$ (при $\beta \sim 1$). В силу этих неравенств и при временах $t \gg \tau_S$ из первого уравнения системы (1) и граничного условия (2), записанного с учетом (3) в виде

$$D_V \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{z=f(x,y,t)} = \left(\frac{\beta D_V}{a} c - \frac{a}{\tau_S} u\right)\Big|_{z=f(x,y,t)} =$$

$$= \left(\frac{\beta D_V}{a}(c - c_K) - \frac{a}{\tau_S}(u - u_K)\right)\Big|_{z=f(x,y,t)},$$

получаем, что отличие концентрации вакансий u от u_K и $c|_{z=f(x,y,t)}$ от c_K мало:

$$\left|u - u_K\right| = \frac{1}{\nu}\left|D_S \Delta_S u + \frac{D_V}{a}\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{z=f(x,y,t)} - \frac{\partial u}{\partial t}\right| \sim \frac{1}{\nu}\left|D_S \frac{u_K}{\lambda^2} + \frac{D_V}{a}\frac{c_K}{\lambda} + I_0 a^2 + \frac{u_K}{t}\right| \sim$$

$$\sim \frac{u_K}{\nu \tau_{\text{rel}}} + \left(\frac{a}{\lambda}\right)\frac{u_K}{\beta \tau_S \nu} + \frac{u_K}{t\nu} + \frac{I_0 a^2}{\nu} \ll u_K ;$$

$$\left|c|_{z=f(x,y,t)} - c_K\right| = \left|\frac{a^2(u - u_K)}{\beta D_V \tau_S} + \frac{a}{\beta}\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{z=f(x,y,t)}\right| \sim \left|\frac{u - u_K}{u_K} c_K + \frac{a}{\lambda}\frac{c_K}{\beta} + I_0 a^2 \tau_S\right| \ll c_K ,$$

где были использованы оценка $\dfrac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} \sim \dfrac{c_K}{\lambda} + \dfrac{I_0 \Omega}{D_V}$ (I_0 — число вакансий, выходящих на единицу площади поверхности образца в единицу времени) и условие $I_0 a^2 \tau_S \ll u_K$ (что означает, что количество вакансий, выходящих за время $\sim \tau_S$ на единицу площади поверхности образца, гораздо меньше равновесной плотности). То есть за малое время τ_S происходит подстройка концентрации u к u_K и $c|_{z=f(x,y,t)}$ к c_K . Это формально можно получить из (1),(2) при $\nu \to \infty$ во всех членах, кроме $\nu(u - u_K)$. Используя уравнения системы (1), (2), можно найти следующие поправки по $1/\nu$ к интересующим нас величинам. Например, из первого уравнения системы (1) и граничного условия (2) легко найти поправку к $c|_{z=f(x,y,t)}$:

$$c\Big|_{z=f(x,y,t)} = c_K + \frac{a^2 D_S}{\beta D_V}\Delta_S u_K = c_K + \frac{D_S}{\nu}\Delta_S c_K .$$

Отсюда видно, что разложение фактически идет по степеням $D_S/\lambda^2\nu$. С учетом сказанного исходная система уравнений (1), (2) с точностью до первого ненулевого приближения по $D_S/\lambda^2\nu$ имеет вид

$$\begin{cases} D_V \Delta c + I(x, y, z, t) = 0 \\ \dfrac{\partial z}{\partial t}\Big|_{z=f(x,y,t)} = \left(D_S a \Delta_S u_K + D_V \dfrac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\Big|_{z=f(x,y,t)}\right) \cos(\mathbf{n}, z) \end{cases} \qquad (4)$$

с начальными и граничными условиями

$$\begin{cases} c(x, y, z, t)\big|_{z=f(x,y,t)} = c_K(x, y, t) \\ f(x, y, t=0) = f^{(0)}(x, y) \end{cases}.$$

В записанной системе уравнений (4) учтено, что при реальных временах эксперимента ($t \gg \tau_{\max} = \max(l^2/D_S, l^2/D_V) \sim 10^2$ с, где l — характерная глубина залегания источника вакансий) и при достаточно большом характерном времени изменения неровностей поверхности образца ($(f/\dot{f}) \gg \tau_{\max}$, что выполняется в реальных условиях, так как $(f/\dot{f}) \sim 10^5$ с [4]) можно пренебречь временными производными ($\partial c/\partial t \approx \partial u/\partial t \approx 0$) и мы получаем квазистационарное состояние с точностью до членов $\sim \tau_{\max}/t$, причем глубина, до которой решение можно считать стационарным, определяется условием $z \ll \sqrt{D_V t}$. Таким образом, на этапе квазистационарности время t является параметром. Другими словами, мы должны определить вначале квазистационарные потоки при данной форме рельефа поверхности, а затем, зная эти потоки, определить замкнутое уравнение, определяющее изменение во времени самой поверхности. Как следует из второго уравнения системы (4), нам необходимо определить только поток вакансий из объема на поверхность $\partial c/\partial n\big|_{z=f(x,y,t)}$. Для этого нам нужно решить первое уравнение системы (4) с указанной выше точностью и с граничным условием $c\big|_{z=f(x,y,t)} = c_K$.

2. Решение основной системы уравнений

В дальнейшем будем рассматривать периодическую по x форму поверхности

$$z = f(x, t) = \sum_n z_n(t)\, e^{-in\omega x}, \quad \omega = \frac{2\pi}{\lambda}, \qquad (5)$$

где λ — характерное расстояние между эквивалентными неровностями (период по x). При данной форме поверхности зависимости от y нет и переменную y в дальнейшем будем опускать. Используя (5), для c_K получаем

$$c_K(x, t) = c_0 + c_0 \frac{\gamma_S \Omega K}{kT} =$$

$$= c_0 + \frac{c_0}{kT}\gamma_S \Omega \sum_n z_n(t) n^2 \omega^2 e^{-in\omega x} =$$

$$= c_0 + B \sum_n z_n(t) n^2 \omega^2 e^{-in\omega x}, \qquad (6)$$

где $B = c_0 \gamma_S \Omega/(kT)$ и мы учли, что при малом z_n/λ справедливо [6]

$$K \approx -\partial^2 z/\partial x^2 = \sum_n z_n n^2 \omega^2 e^{-in\omega x}.$$

Таким образом, нам необходимо решить следующее уравнение для c:

$$\begin{cases} D_V \Delta c(x, z, t) + I(x, z, t) = 0 \\ c(x, z = f(x, t), t) = c_K(x, t) \end{cases}, \qquad (7)$$

где t, как было отмечено выше, входит через $z_n(t)$ только как параметр.

Для решения уравнения (7) введем новую функцию $V(\hat{x}, \hat{z})$ и сделаем замену переменных:

$$c(x, z, t) = V(\hat{x}, \hat{z}, t) + c_K(\hat{x}, t), \qquad (8)$$

где $\hat{x} = x$; $\hat{z} = z - f(x, t)$. После подстановки (8) в (7) получаем неоднородное уравнение для V с нулевыми граничными условиями на плоской поверхности $\hat{z} = 0$

$$\begin{cases} \Delta V - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{\hat{z}} - 2 f_{\hat{x}} V_{\hat{x}\hat{z}} = -c_{K,\hat{x}\hat{x}} - \dfrac{I(\hat{x}, \hat{z})}{D_V} \\ V(\hat{x}, \hat{z} = 0) = 0 \end{cases}, \qquad (9)$$

где φ_x означает частную производную от φ по x: $\varphi_x = \partial\varphi/\partial x$, а $\varphi_{xx} = \partial^2\varphi/\partial x^2$.

Дифференциальное уравнение (9) содержит два неоднородных члена: $c_{K,\hat{x}\hat{x}}$ и I/D_V. В силу линейности однородной части уравнения (9) мы можем рассмотреть две отдельные задачи:

$$\begin{cases} \Delta V_C - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{C,\hat{z}} - 2 f_{\hat{x}} V_{C,\hat{x}\hat{z}} = -c_{K,\hat{x}\hat{x}} \\ V_C(\hat{x}, \hat{z} = 0) = 0 \end{cases} \qquad (10)$$

и

$$\begin{cases} \Delta V_I - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{I,\hat{z}} - 2 f_{\hat{x}} V_{I,\hat{x}\hat{z}} = -\dfrac{I(\hat{x}, \hat{z})}{D_V} \\ V_I(\hat{x}, \hat{z} = 0) = 0 \end{cases}. \qquad (11)$$

При этом решение уравнения (9) будет равно сумме решений уравнений (10) и (11): $V = (V_C + V_I)$ (принцип суперпозиции). Тогда концентрация $c(x, z, t)$, согласно (8), равна

$$c(x, z, t) = c_C(x, z, t) + c_I(x, z, t),$$

где мы ввели следующие обозначения:

$$c_C(x, z, t) = V_C(\hat{x}, \hat{z}, t) - c_K(\hat{x}, t)$$
$$c_I(x, z, t) = V_I(\hat{x}, \hat{z}, t). \qquad (12)$$

2.1. Роль поверхностной и объемной диффузии в сглаживании макрорельефа на поверхности твердого тела

Сначала рассмотрим уравнение (10). Будем искать решение в виде ряда по степеням z_n/λ с точностью до членов первого порядка по z_n/λ: $V_C = V_C^{(0)} + V_C^{(1)}$, где $V_C^{(0)}$ обозначает нулевой порядок по z_n/λ, а $V_C^{(1)}$ — первый. Из (7) следует, что

$$f_{\hat{x}} = -i\sum 2\pi(z_n/\lambda)n \exp(-in\omega\hat{x})$$

имеет первый порядок по z_n/λ, тогда уравнение (10) с точностью до z_n/λ переписываем в виде

$$\begin{cases} \Delta V_C^{(0)} + \Delta V_C^{(1)} - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{C,\hat{z}}^{(0)} - 2f_{\hat{x}} V_{C,\hat{x}\hat{z}}^{(0)} = -c_{K,\hat{x}\hat{x}} \\ V_C^{(0)}(\hat{x}, \hat{z}=0) + V_C^{(1)}(\hat{x}, \hat{z}=0) = 0 \,. \end{cases} \qquad (13)$$

Поскольку $c_K \propto z_n/\lambda$ (согласно (6)), уравнение (13) распадается на следующую систему уравнений, каждое из которых соответствует своему порядку малости по z_n/λ:

$$\begin{cases} \begin{cases} \Delta V_C^{(0)} = 0 \\ V_C^{(0)}(\hat{x}, \hat{z}=0) = 0 \end{cases} \\ \begin{cases} \Delta V_C^{(1)} - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{C,\hat{z}}^{(0)} - 2f_{\hat{x}} V_{C,\hat{x}\hat{z}}^{(0)} = -c_{K,\hat{x}\hat{x}} \\ V_C^{(1)}(\hat{x}, \hat{z}=0) = 0 \,. \end{cases} \end{cases} \qquad (14)$$

Из первого уравнения системы (14) следует, что $V_C^{(0)} = 0$. Тогда, подставляя этот результат во второе уравнение системы (14), получаем для $V_C^{(1)}$ двумерное уравнение Пуассона:

$$\begin{cases} \Delta V_C^{(1)} = -c_{K,\hat{x}\hat{x}} \\ V_C^{(1)}(\hat{x}, \hat{z}=0) = 0 \,. \end{cases} \qquad (15)$$

Как известно [7], решение уравнения (15) удобно выразить через функцию Грина двумерного оператора Лапласа: $G_2(\hat{x}, \hat{z}) = 1/(4\pi) \times \ln[(\hat{x}^2 + \hat{z}^2)/L^2]$, где L — размер образца ($L \to \infty$); $G_2(\hat{x}, \hat{z})$ удовлетворяет уравнению $\Delta G_2(\hat{x}, \hat{z}) = \delta(\hat{x})\delta(\hat{z})$, где $\delta(\hat{x})$ — дельта-функция Дирака. Следует напомнить, что так как зависимости от переменной y нет, то фактически в уравнениях (7)–(15) стоит двумерный оператор Лапласа: $\Delta = \partial_{\hat{x}}^2 + \partial_{\hat{z}}^2$. Граничное условие $V_C^{(1)}|_{\hat{z}=0} = 0$ учитывается путем зеркального продолжения источника на все пространство (стандартный прием в электростатике для задачи с зарядом, находящимся вблизи металлической поверхности). После подстановки явного выражения для $c_{K,\hat{x}\hat{x}}(\hat{x}, t)$, взятого из (6), $V_C^{(1)}$ выражается через табличные интегралы:

$$V_C^{(1)}(\hat{x}, \hat{z}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} dz' \frac{1}{4\pi} c_{K,x'x'}(x', t)\left\{ \ln\left[(\hat{x}-x')^2 + (\hat{z}-z')^2\right] - \ln\left[(\hat{x}-x')^2 + (\hat{z}+z')^2\right]\right\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} dz' \frac{B}{4\pi} \sum_n z_n(t) n^4 \omega^4 e^{-in\omega x'}\left\{ \ln\left[(\hat{x}-x')^2 + (\hat{z}-z')^2\right] - \ln\left[(\hat{x}-x')^2 + (\hat{z}+z')^2\right]\right\} =$$

$$= B\sum_n z_n(t) n^2 \omega^2 e^{-in\omega\hat{x}}\left(e^{-n\omega\hat{z}} - 1\right) .$$

Используя (12), получаем

$$c_C(x, z, t) = V_C(\hat{x}, \hat{z}, t) + c_K(\hat{x}, t) =$$

$$= c_0 + B\sum z_n(t) n^2 \omega^2 e^{-in\omega\hat{x}} e^{-n\omega\hat{z}}, \qquad (16)$$

где $\hat{x}, \hat{z}$ и x, z связаны соотношением (8). Из (8) легко найти выражение для производной по нормали $\mathbf{n}$ в новых координатах с точностью до $f_{\hat{x}} \sim z_n/\lambda$:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial}{\partial \hat{z}} - f_{\hat{x}} \frac{\partial}{\partial \hat{x}} . \qquad (17)$$

Используя связь (3) между u_K и c_K и тот факт, что $\cos(\mathbf{n}, z) \cong 1$ с точностью до $(z_n/\lambda)^2$, подставляем (6), (16) и (17) во второе уравнение системы (4) и получаем уравнение, описывающее сглаживание поверхности твердого тела без учета облучения:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -\left\{ D_V \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} \sum_n z_n(t) \omega^3 n^3 e^{-in\omega x} + \right.$$

$$\left. + D_S a\left(\frac{\beta D_V \tau_S}{a^2}\right) \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} \sum_n z_n(t)\, \omega^4 n^4 e^{-in\omega x} \right\} ,$$

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = -z_n(t)\left\{D_V \frac{c_0\gamma_S\Omega}{kT}\omega^3 n^3 + \right.$$
$$\left. + D_S a\left(\frac{\beta D_V \tau_S}{a^2}\right)\frac{c_0\gamma_S\Omega}{kT}\omega^4 n^4\right\}, \qquad (18)$$

где было использовано явное выражение (5) для $f(x, t)$.

Полученное уравнение (18) совпадает с точностью до множителя 2 с суммой уравнений (9) и (14) работы [4] при условии $(\beta D_V \tau_S)/a^2 = 1$ (записанное условие означает, что $c|_{z=f(x,t)} = u$) и замене концентрации вакансий значением плотности: $c \to c/a^3$ и $u \to u/a^2$ и точно соответствует решению, полученному в [3]. Отметим, что авторы работы [4] в уравнении (6) дважды учли одну и ту же причину, обусловливающую перераспределение вакансий.

2.2. *Источник вакансий и увеличение неровности на поверхности твердого тела*

Рассмотрим теперь уравнение (11), которое дает добавку к (18), связанную с дополнительным источником вакансий. Источник возьмем в виде δ-функции: $I(\hat{x}, \hat{z}) = I_0\Omega\delta(\hat{z} - l)$, где I_0 — число вакансий, выходящих на поверхность в единицу времени на единицу площади. Отсутствие зависимости I от $\hat{x}$ означает, что источник полностью повторяет форму поверхности образца. Учитывая данный вид источника вакансий, уравнение (11) переписываем в виде

$$\begin{cases}\Delta V_I - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{I,\hat{z}} - 2f_{\hat{x}} V_{I,\hat{x}\hat{z}} = -\dfrac{I_0\Omega}{D_V}\delta(\hat{z} - l) \\ V_I(\hat{x}, \hat{z} = 0, t) = 0\ . \end{cases} \qquad (19)$$

Ищем решение (19) в виде ряда по степеням z_n/λ. Подставляя $V_I = V_I^{(0)} + V_I^{(1)}$ в уравнение (19) (где $V_I^{(0)}$ имеет нулевой, а $V_I^{(1)}$ — первый порядок по z_n/λ), с точностью до z_n/λ получаем

$$\begin{cases}\Delta V_I^{(0)} + \Delta V_I^{(1)} - f_{\hat{x}\hat{x}} V_{I,\hat{z}}^{(0)} - 2f_{\hat{x}} V_{I,\hat{x}\hat{z}}^{(0)} = -\dfrac{I_0\Omega}{D_V}\delta(\hat{z} - l) \\ V_I^{(0)}(\hat{x}, \hat{z} = 0, t) + V_I^{(1)}(\hat{x}, \hat{z} = 0, t) = 0)\ . \end{cases} \qquad (20)$$

Используя тот факт, что $f_x \sim z_n/\lambda$, для нулевого порядка $V_I^{(0)}$ получаем уравнение

$$\begin{cases}\Delta V_I^{(0)} = -\dfrac{I_0\Omega}{D_V}\delta(\hat{z} - l) \\ V_I^{(0)}(\hat{x}, \hat{z} = 0, t) = 0\ . \end{cases}$$

Решение, как и выше (уравнение (15)), можно выразить через функцию Грина с учетом зеркального продолжения. Интегралы легко берутся, и мы получаем:

$$V_I^{(0)}(\hat{x}, \hat{z}) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} dz' \frac{I_0\Omega}{4\pi D_V}\delta(z' - l)\left\{\ln\left[(\hat{x} - x')^2 + (\hat{z} - z')^2\right] - \ln\left[(\hat{x} - x')^2 + (\hat{z} + z')^2\right]\right\} =$$
$$= \frac{I_0\Omega}{D_V}\begin{cases}\hat{z}, & l > \hat{z} > 0 \\ l, & \hat{z} > l\end{cases}.$$

Как мы видим, результат точно соответствует электростатической аналогии (положительно заряженная плоскость вблизи металлической поверхности). Заметим, что приведенный ответ для $V_I^{(0)}$ не применим для достаточно больших $\hat{z} > \sqrt{D_V t}$, где решение исходной системы (1), естественно, будет нестационарным, но для нахождения объемных потоков на поверхность образца нам необходимо знать поведение концентрации вакансий только вблизи поверхности $\hat{z} \approx 0$, где задача стационарна, и записанный выше ответ для $V_I^{(0)}$ применим. Учитывая, что решение $V_I^{(0)}$ — функция только от $\hat{z}$, из (20) находим уравнение для первого порядка $V_I^{(1)}$ по z_n/λ:

$$\begin{cases}\Delta V_I^{(1)} = f_{\hat{x}\hat{x}} V_{I,\hat{z}}^{(0)} \\ V_I^{(1)}(\hat{x}, \hat{z} = 0, t) = 0\ . \end{cases}$$

Решение уравнения выражается, как и выше, через табличные интегралы:

$$V^{(1)}(\hat{x}, \hat{z}, t) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{l} dz' \frac{I_0\Omega}{4\pi D_V}\sum_n z_n(t) n^2\omega^2 e^{-in\omega x'} \times$$
$$\times\left\{\ln\left[(\hat{x} - x')^2 + (\hat{z} - z')^2\right] - \ln\left[(\hat{x} - x')^2 + (\hat{z} + z')^2\right]\right\} =$$

$$= -\frac{I_0\Omega}{D_V}\begin{cases}\sum\limits_n z_{(t)}\, e^{-in\omega\hat{x}}\left[e^{-n\omega\hat{z}} - 1 + e^{-n\omega l}\,\mathrm{sh}\,(n\omega\,\hat{z})\right], & l > \hat{z} > 0\\ \sum\limits_n z_n(t)\, e^{-in\omega\hat{x}}\left[1 - \mathrm{ch}\,(n\omega l)\right] e^{-n\omega\hat{z}}, & \hat{z} > l\,.\end{cases}$$

Тогда полное значение для $V_I(\hat{x}, \hat{z}, t)$ равно

$$V_I(\hat{x}, \hat{z}, t) = V_I^{(0)}(\hat{x}, \hat{z}) + V_I^{(1)}(\hat{x}, \hat{z}, t) = \frac{I_0\Omega}{D_V}\begin{cases}\hat{z} - \sum\limits_n z_n(t)\, e^{-i\omega n\hat{x}}\left[e^{-n\omega\hat{z}} - 1 + e^{-n\omega l}\,\mathrm{sh}\,(n\omega\hat{z})\right], & l > \hat{z} > 0\\ l - \sum\limits_n z_n(t)\, e^{-in\omega\hat{x}}\left[1 - \mathrm{ch}\,(n\omega l)\right] e^{-n\omega\hat{z}}, & \hat{z} > l\,.\end{cases}$$

Используя (4), (12), (17) и (21), находим добавку к скорости изменения поверхности, связанную с наличием источника вакансий:

$$\left.\frac{\partial z}{\partial t}\right|_{z=f(x,t)} = D_V \left.\frac{\partial c_I(x, z, t)}{\partial \mathbf{n}}\right|_{z=f(x,t)} = D_V \left.\frac{\partial V_I(\hat{x}, \hat{z}, t)}{\partial \mathbf{n}}\right|_{\hat{z}=0} = D_V\left(\left.\frac{\partial V_I(\hat{x}, \hat{z}, t)}{\partial \hat{z}}\right|_{\hat{z}=0} - f_x \left.\frac{\partial V_I(\hat{x}, \hat{z}, t)}{\partial \hat{x}}\right|_{\hat{z}=0}\right);$$

$$\left.\frac{\partial z}{\partial t}\right|_{z=f(x,t)} = I_0\Omega + I_0\Omega \sum_n z_n n\omega\, e^{-in\omega x}\left[1 - e^{-n\omega l}\right].$$

Используя (5), получаем

$$\frac{dz_0(t)}{dt} = I_0\Omega\,, \tag{22}$$

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = I_0\Omega\, z_n(t) n\omega\left[1 - e^{-n\omega l}\right], \quad n \neq 0\,. \tag{23}$$

Уравнение (22) описывает сдвиг поверхности без изменения формы, а (23) — видоизменение поверхности образца, и, как видно из (23), наличие источника вакансий обусловливает нарастание неровностей ($(dz_n/dt) > 0$).

Рассматривая уравнение для V_I в исходной системе координат x, z, можно в общих чертах понять, почему внешний источник вакансий приводит к увеличению неровностей на поверхности.

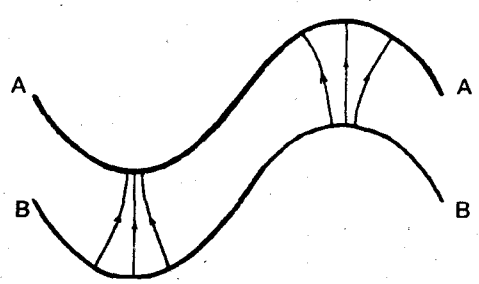

Рис. 2. Линии тока точечных дефектов, созданных облучением. Линия АА — линия поверхности образца. Линия ВВ показывает положение дельтообразного источника точечных дефектов.

Действительно, уравнение (11) для V_I в исходной системе координат имеет вид

$$\begin{cases}\Delta V_I(x, z, t) = -\dfrac{I_0\Omega}{D_V}\,\delta\left(z - l - f(x, t)\right)\\ V_I(x, z = f(x), t) = 0\,.\end{cases}$$

Поскольку концентрация V_I на поверхности тождественно равна нулю, поток вакансий, пропорциональный градиенту V_I, направлен перпендикулярно поверхности образца: $\partial V_I/\partial\vec{\tau}\,|_{z=f(x,t)} = 0$, где $\vec{\tau}$ — вектор касательной к поверхности (аналогично поведению электрического поля вблизи металла). Как видно из простого геометрического построения (рис. 2), потоки вакансий вблизи вогнутостей идут гуще, чем вблизи выпуклостей. А это означает, что вакансий на вогнутость выходит больше, чем на выпуклость, что и приводит к увеличению неровностей на поверхности.

3. Источник межузельных атомов и сглаживание неровности на поверхности твердого тела

Теперь учтем тот факт, что при облучении образца создаются кроме вакансий и межузельные атомы, потоки которых также могут привести к изменению формы поверхности. Для межузельных атомов в отсутствие облучения равновесная концентрация c_0^{at} на несколько порядков меньше соответствующей концентрации для вакансий, по-

этому в уравнении (4) мы не будем учитывать члены, связанные с кривизной, т.е. полагаем $u_K^{at} = c_K^{at} = 0$.

Тогда система уравнений (4) для межузельных атомов примет вид

$$\begin{cases} D_V^{at}\Delta c_{at} + I_{at}(x, y, z, t) = 0 \\ \left.\dfrac{\partial z}{\partial t}\right|_{z=f(x,y,t)} = -\left(D_V^{at}\left.\dfrac{\partial c_{at}}{\partial \mathbf{n}}\right|_{z=f(x,y,t)}\right)\cos(\mathbf{n}, z) \end{cases} \tag{24}$$

с граничным условием

$$c_{at}(x, y, z, t)\Big|_{z=f(x,y,t)} = 0 .$$

Индекс «at» указывает на то, что величины относятся к межузельным атомам. Следует отметить, что основное отличие системы (24) от системы (4) состоит в том, что во втором уравнении системы (24) стоит знак « − » перед объемным потоком (для вакансий знак « + »).

Решение первого уравнения системы (24) с дельтообразным источником приводит к результату (21), и тогда для dz_n/dt мы получаем

$$\left.\frac{\partial z}{\partial t}\right|_{z=f(x,t)} =$$

$$= -I_0^{at}\Omega - I_0\Omega\sum_n z_n(t)n\omega\, e^{-in\omega x}\left[1 - e^{-n\omega l_{at}}\right],$$

$$\frac{dz_0(t)}{dt} = -I_0^{at}\Omega ; \tag{25}$$

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = -I_0^{at}\Omega z_n(t)n\omega\left[1 - e^{-n\omega l_{at}}\right], \quad n \neq 0 . \tag{26}$$

Из записанных выше уравнений видно, что дополнительный источник межузельных атомов, в отличие от источника вакансий, обусловливает уменьшение неровностей на поверхности. Это видно из рис. 2. Число межузельных атомов, выходящих на вогнутую поверхность, больше, чем на выпуклую, что и обусловливает сглаживание неровности образца.

4. Ускорение сглаживания неровности на поверхности при облучении

Суммируя (22) и (25), (23) и (26), находим полный вклад в ψ_n, связанный с облучением, т.е. с наличием источника вакансий и межузельных атомов:

$$\frac{dz_0(t)}{dt} = \left(I_0^{vac} - I_0^{at}\right)\Omega ,$$

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = -z_n(t)\Omega n\omega\times$$

$$\times\left[I_0^{at}(1 - e^{-n\omega l_{at}}) - I_0^{vac}(1 - e^{-n\omega l_{vac}})\right], \quad n \neq 0 ,$$

где величины с индексом «vac» относятся к вакансиям. Если $I_0^{at} = I_0^{vac} = I_0$ (т.е. число выходящих на поверхность вакансий равно числу выходящих межузельных атомов), то записанные выше уравнения примут вид

$$\frac{dz_0(t)}{dt} = 0 , \tag{27}$$

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = -z_n(t)\Omega n\omega I_0\left[e^{-n\omega l_{vac}} - e^{-n\omega l_{at}}\right],$$

$$n \neq 0 . \tag{28}$$

Из уравнения (27) видно, что при учете источников вакансий и межузельных атомов поверхность как целое не смещается. При $n\omega l_{vac,at} \ll 1$ из (28) получаем

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = -z_n(t)\Omega n^2\omega^2 I_0\left[l_{at} - l_{vac}\right] . \tag{29}$$

Поскольку межузельный атом по сравнению с вакансиями при облучении получает дополнительный импульс, направленный в глубь образца, то $l_{at} > l_{vac}$ и тогда $\dot{z}_n < 0$ (неровности на поверхности уменьшаются). Для оценки возьмем $I_0 \approx$ $\approx 10^{15}$ [с·см^2]$^{-1}$, $\Omega \approx 10^{-23}$ см^3, $l_{at} - l_{vac} \approx$ $\approx 10^{-5}$ см, $\lambda \approx 10^{-3}$ см, тогда из (29) следует

$$\frac{dz_1}{dt} \approx -z_1 \cdot 10^{-5}\left(c^{-1}\right) ,$$

что по порядку величины совпадает с температурным вкладом для температур $T \sim 1000$ K [4].

При облучении образца ионами профиль рождаемых точечных дефектов имеет Гауссову форму и для достаточно узкого распределения дефектов дельтообразная форма источника является хорошим приближением. Если источники имеют не дельтообразную, а произвольную форму $I^{at}(\hat{z})$, $I^{vac}(\hat{z})$, (например, при облучении нейтронами), то в силу линейности системы (11), используя принцип суперпозиции, для скорости сглаживания легко получить

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = - z_n(t) n\omega \times$$

$$\times \int_0^\infty d\xi \left[I^{at}(\xi) - I^{vac}(\xi) \right] \left(1 - e^{-n\omega\xi} \right) .$$

Или, если $I_0^{at} = \int d\xi I^{at}(\xi) = I_0^{vac} = \int d\xi I^{vac}(\xi)$, то

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = - z_n(t) n\omega \int_0^\infty d\xi \left[I^{vac}(\xi) - I^{at}(\xi) \right] e^{-n\omega\xi} . \quad (30)$$

При облучении нейтронами профиль рожденных точечных дефектов имеет вид ступени длиной d: $I(\hat{z}) = I_0(\Omega/d)\,\theta\,(d - \hat{z})$. Тогда, используя (30), для скорости сглаживания неровности на поверхности получаем (при $dn\omega << 1$):

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = - z_n(t) \Omega n^2 \omega^2 \frac{I_0}{2} \left[d_{at} - d_{vac} \right] . \quad (31)$$

Учитывая (18), (28) и (31), находим общее уравнение, описывающее скорость сглаживания поверхности образца с учетом температурного фактора и облучения:

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = - z_n(t) \left(D_V \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} \omega^3 n^3 + D_S a \left[\frac{\beta D_V \tau_S}{a^2} \right] \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} \omega^4 n^4 + I_0 \Omega (l_{at} - l_{vac}) \omega^2 n^2 \right) \quad (32)$$

при дельтообразном профиле рождаемых облучением точечных дефектов, что соответствует облучению ионами или

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = - z_n(t) \left(D_V \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} \omega^3 n^3 + D_S a \left[\frac{\beta D_V \tau_S}{a^2} \right] \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} \omega^4 n^4 + \frac{I_0}{2} \Omega (d_{at} - d_{vac}) \omega^2 n^2 \right) \quad (33)$$

при профиле рождаемых точечных дефектов типа ступень, что соответствует нейтронному типу облучения. Или после интегрирования

$$\left(\frac{\lambda}{2\pi} \right)^4 \ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)} = - \left[B_n + C_n \left(\frac{\lambda}{2\pi} \right) + P_n \left(\frac{\lambda}{2\pi} \right)^2 \right] t , \quad (34)$$

где

$$B_n = D_S a \left(\frac{\beta D_V \tau_S}{a^2} \right) \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} n^4 ; \; C_n = D_V \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT} n^3 ; \; P_n = I_0 \Omega (l_{at} - l_{vac}) n^2$$

(дельтообразный профиль рождаемых облучением точечных дефектов — облучение ионами) или $P_n = (I_0/2)\Omega(d_{at} - d_{vac})n^2$ (ступенчатый профиль рождаемых точечных дефектов — облучение нейтронами). Как видно из (34), первые два слагаемые, стоящие в правой части, описывают роль поверхностной и объемной диффузий в процессе нивелировки неровностей на поверхности, а третье слагаемое описывает роль облучения. Все три слагаемые имеют разную зависимость от λ. Таким образом, исследуя уравнение (34), по экспериментально найденным зависимостям $z_n(t)/z_n(0)$ (при разных значениях λ) можно выделить роль каждого фактора в изучаемом процессе. В частности, можно получить информацию о величинах D_V, D_S, а также физических параметрах, характеризующих облучение (например, $l_{at} - l_{vac}$).

Проанализируем более подробно выражение (34) на примере дельтообразного профиля источников:

$$\ln \frac{z_n(t)}{z_n(0)} = - \left(\frac{(2\pi n)^4}{\tau_S} \beta \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kTa} \frac{D_S \tau_S D_V \tau_S}{\lambda^4} + \frac{(2\pi n)^3}{\tau_S} \times \right.$$

$$\left. \times \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kTa} \frac{D_V \tau_S a}{\lambda^3} + \frac{(2\pi n)^2}{\tau_S} I_0 a^2 \tau_S \frac{(l_{at} - l_{vac}) a}{\lambda^2} \right) t .$$

Из уравнения (35) видно, что имеется два характерных значения λ:

$$\lambda_1 \sim a \frac{D_S}{D_V} \frac{\beta D_V \tau_S}{a^2} ,$$

при котором сравниваются первое и второе слагаемые в правой части уравнения (35), и

$$\lambda_2 \sim a \frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT(l_{at} - l_{vac})} \frac{1}{I_0 a^2 \left(a^2/D_V\right)},$$

при котором равны второе и третье слагаемые, где

$$\frac{c_0 \gamma_S \Omega}{kT(l_{at} - l_{vac})}$$

— отличие равновесной концентрации вакансий вблизи поверхности с кривизной $K \sim (l_{at} - l_{vac})^{-1}$ от равновесной концентрации вблизи плоской поверхности; $I_0 a^2 (a^2/D_V)$ — концентрация выходящих на поверхность точечных дефектов, рожденных облучением за время $\sim a^2/D_V$. В зависимости от величины λ и соотношения между λ_1 и λ_2 будут важны разные слагаемые в уравнении (35). Например, рассматривая правую часть в уравнении (35) как функцию λ, можно наблюдать участок с зависимостью $1/\lambda^3$ только при относительно малой интенсивности облучения, такой, что $\lambda_1 < \lambda_2$, т. е.

$$\frac{I_0 a^2 \tau_S}{c_0 \gamma_S \Omega \left(kT(l_{at} - l_{vac})\right)^{-1}} < \frac{1}{\beta} \frac{D_V}{D_S},$$

где $I_0 a^2 \tau_S$ — концентрация выходящих на поверхность точечных дефектов, рожденных облучением за время $\sim \tau_S$. При этом условии переход в правой части (35) от зависимости $1/\lambda^4$ к зависимости $1/\lambda^3$ происходит при $\lambda \sim \lambda_1$, а к зависимости $1/\lambda^2$ — при $\lambda \sim \lambda_2$. Если же интенсивность облучения достаточно велика, то второе слагаемое в правой части (35) будет проявляться слабо и переход будет происходить практически сразу от зависимости $1/\lambda^4$ к зависимости $1/\lambda^2$.

5. Скорость сглаживания макрорельефа при конечном времени усвоения поверхностью точечных дефектов

В предыдущих разделах был рассмотрен случай достаточно быстрого усвоения точечных дефектов поверхностью, когда поверхностную концентрацию точечных дефектов можно считать равной равновесному значению. Однако в некоторых случаях этого приближения недостаточно, и необходимо более точное рассмотрение основной системы уравнений (1), (2). При условии квазистационарности $t >> \tau_{max} = \max(\lambda^2/D_S, l^2/d_V)$ систему уравнений (1), (2) переписываем в виде

$$\begin{cases} D_S \Delta_S u - \nu(u - u_K) + \dfrac{D_V}{a} \dfrac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\bigg|_{z=f(x,y,t)} = 0 \\ D_V \Delta c + I(x, y, z, t) = 0 \\ \dfrac{\partial z}{\partial t}\bigg|_{z=f(x,y,t)} = a\nu(u - u_K) \cos(\mathbf{n}, z), \end{cases} \tag{36}$$

$$D_V \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\bigg|_{z=f(x,y,t)} = \left(\frac{\beta D_V}{a} c - \frac{a}{\tau_S} u\right)\bigg|_{z=f(x,y,t)}. \tag{37}$$

Как и выше, форму поверхности возьмем в виде (5), тогда решение системы (36), (37) не будет зависеть от y, и на поверхности образца решение можно представить в виде соответствующих рядов Фурье по x:

$$\begin{cases} c\big|_{z=f(x,t)} = c_0 + \sum\limits_{n \neq 0} c_n(t)\, e^{-in\omega x} \\ u(x, t) = u_0 + \sum\limits_{n \neq 0} u_n(t)\, e^{-in\omega x} \\ \dfrac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}\bigg|_{z=f(x,t)} = \sum\limits_{n \neq 0} \eta_n(t)\, e^{-in\omega x}, \end{cases} \tag{38}$$

где c_0, u_0 — равновесные концентрации вакансий, соответствующие плоской поверхности, зависимость от времени входит только через $z_n(t)$ и при суммировании по n исключено слагаемое с $n = 0$. Подставляя (38) в (36),(37) и учитывая то, что $\cos(\mathbf{n}, z) \approx 1$, с точностью $(z_n/\lambda)^2$ получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} D_V \Delta c\,(x, z, t) + I(x, z, t) = 0, \quad c\big|_{z=f(x,t)} = c_0 + \sum\limits_{n \neq 0} c_n(t)\, e^{-in\omega x} \\ D_S u_n(t) \omega^2 n^2 + \nu\left(u_n(t) - \dfrac{\gamma_S \Omega}{kT} u_0 z_n(t) \omega^2 n^2\right) - \dfrac{D_V}{a} \eta_n(t) = 0 \\ D_V \eta_n(t) = \dfrac{\beta D_V}{a} c_n(t) - \dfrac{a}{\tau_S} u_n(t) \\ \dfrac{dz_n(t)}{dt} = -aD_S u_n(t) \omega^2 n^2 + D_V \eta_n(t), \end{cases} \tag{39}$$

где $n \neq 0$ и было использовано выражение для u_K через кривизну: $u_K = u_0 + u_0 \gamma_S \Omega K/kT$, $K \approx -d^2f(x, t)/dx^2$. Для нахождения решения первого уравнения системы (39) используем метод замены переменных, описанный в разд. 2. В результате для дельтообразной формы источника вакансий с точностью до $(z_n/\lambda)^2$ получаем результат:

$$c(x, z, t) = c_0 + \sum_n c_n(t)\, e^{-in\omega\hat{x}} e^{-n\omega\hat{z}} + \frac{I_0\Omega}{D_V}\hat{z} - \frac{I_0\Omega}{D_V}\sum_n z_n(t)\, e^{-in\omega\hat{x}}\left[e^{-n\omega\hat{z}} - 1 + e^{-n\omega l}\,\mathrm{sh}\,(n\omega\hat{z})\right], \quad \hat{z} < l,$$

где $\hat{x} = x$, $\hat{z} = z - f(x, t)$. Подставляя (40) в последнее уравнение системы (38), находим уравнение, связывающее $\eta_n(t)$ и $c_n(t)$:

$$\eta_n(t) = -c_n(t)n\omega + \frac{I_0\Omega}{D_V} n\omega z_n(t)\left[1 - e^{-n\omega l}\right], \quad n \neq 0. \tag{41}$$

Тогда, с учетом (39), получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} D_S u_n(t)\omega^2 n^2 + \nu\left(u_n(t) - \dfrac{\gamma_S\Omega}{kT} u_0 z_n(t)\omega^2 n^2\right) - \dfrac{D_V}{a}\eta_n(t) = 0 \\ D_V \eta_n(t) = \dfrac{\beta D_V}{a} c_n(t) - \dfrac{a}{\tau_S} u_n(t) \\ \eta_n(t) = -c_n(t)n\omega + \dfrac{I_0\Omega}{D_V} n\omega z_n(t)\left[1 - e^{-n\omega l}\right] \\ \dfrac{dz_n(t)}{dt} = -aD_S u_n(t)\omega^2 n^2 + D_V \eta_n(t) \end{cases} \qquad n \neq 0. \tag{42}$$

Из первых трех уравнений системы (42) выражаем $u_n(t)$, $c_n(t)$, $\eta_n(t)$ через $z_n(t)$:

$$u_n(t) = \frac{\left(1 + n\omega a\beta^{-1}\right)\gamma_S\Omega(kT)^{-1} u_0 z_n(t)\omega^2 n^2 + I_0\Omega(a\nu)^{-1} n\omega\, z_n(t)\left[1 - e^{-n\omega l}\right]}{\left(1 + D_S\omega^2 n^2\nu^{-1}\right)\left(1 + n\omega a\beta^{-1}\right) + n\omega a\beta^{-1}};$$

$$c_n(t) = \frac{a^2}{\beta D_V \tau_S} \frac{\gamma_S\Omega(kT)^{-1} u_0 z_n(t)\omega^2 n^2 + I_0\Omega(a\nu)^{-1} n\omega\, z_n(t)\left[1 - e^{-n\omega l}\right]\left\{1 + \tau_S\left(\nu + D_S\omega^2 n^2\right)\right\}}{\left(1 + D_S\omega^2 n^2\nu^{-1}\right)\left(1 + n\omega a\beta^{-1}\right) + n\omega a\beta^{-1}}; \tag{43}$$

$$\eta_n(t) = -c_n(t)n\omega + \frac{I_0\Omega}{D_V} n\omega z_n(t)\left[1 - e^{-n\omega l}\right],$$

где использовано соотношение $\tau_S = 1/\nu$. Подставляя (42) в последнее уравнение системы (41), получаем скорость сглаживания неровностей на поверхности твердого тела:

$$\frac{dz_n(t)}{dt} = -z_n(t)P_1 - z_n(t)P_2 + z_n(t)P_3, \quad \ln\left(\frac{z_n(t)}{z_n(0)}\right) = -(P_1 + P_2 + P_3)\, t. \tag{44}$$

$$P_1 = \frac{\gamma_S\Omega\,(kT)^{-1}\omega^3 n^3 c_0 D_V}{\left(1 + n^2(\tau_\lambda\nu)^{-1}\right)\left(1 + n\omega a\beta^{-1}\right) + n\omega a\beta^{-1}}; \qquad P_2 = \frac{\gamma_S\Omega(kT)^{-1}\beta D_V\tau_S a^{-2}\omega^4 n^4 c_0 a D_S}{1 + n^2(\tau_\lambda\nu)^{-1} + \left(1 + \beta/(n\omega a)\right)^{-1}};$$

$$P_3 = -\frac{I_0\,\Omega\,\omega^2 n^2 l}{\left(1 + n^2(\tau_\lambda\nu)^{-1}\right)\left(1 + n\omega a\beta^{-1}\right) + n\omega a\beta^{-1}}, \tag{45}$$

где $\tau_\lambda = (\omega^2 D_S)^{-1} = \lambda^2/4\pi D_S$ и использованы соотношение $u_0 = c_0(\beta D_V\tau_S/a^2)$ и условие $l\omega n << 1$.

Уравнение (44) легко обобщается на случай учета кроме источника вакансий и источника межузельных атомов: слагаемые P_1, P_2 не изменяются в силу малости равновесной концентрации межузельных атомов по сравнению с равновесной концентрацией вакансий (разд. 3), а выражение для слагаемого P_3, связанного с источниками точечных дефектов, принимает вид:

$$P_3 = \frac{I_0\Omega\omega^2 n^2 l_{\text{at}}}{\left(1 + n^2/(\tau_\lambda^{\text{at}}\nu^{\text{at}})\right)\left(1 + n\omega a/\beta^{\text{at}}\right) + n\omega a/\beta^{\text{at}}} - \frac{I_0\Omega\omega^2 n^2 l_{\text{vac}}}{\left(1 + n^2/(\tau_\lambda^{\text{vac}}\nu^{\text{vac}})\right)\left(1 + n\omega a/\beta^{\text{vac}}\right) + n\omega a/\beta^{\text{vac}}}, \tag{46}$$

в выражении (46) было использовано условие: $I_0^{\text{at}} = I_0^{\text{vac}} = I_0$. Из уравнений (44), (46) видно, что при $\omega n a/\beta << 1$ и $(\tau_\lambda^{\text{vac}}\nu^{\text{vac}})^{-1} << 1$, $(\tau_\lambda^{\text{at}}\nu^{\text{at}})^{-1} << 1$ в качестве нулевого приближения по этим малым параметрам воспроизводится результат (32).

Если источники имеют форму ступени (при облучении нейтронами), то, аналогично (33), выражение (46) принимает вид

$$P_3 = \frac{1}{2}\frac{I_0\Omega\omega^2 n^2 d_{\text{at}}}{\left(1 + n^2/(\tau_\lambda^{\text{at}}\nu^{\text{at}})\right)\left(1 + n\omega a/\beta^{\text{at}}\right) + n\omega a/\beta^{\text{at}}} - \frac{1}{2}\frac{I_0\Omega\omega^2 n^2 d_{\text{vac}}}{\left(1 + n^2/(\tau_\lambda^{\text{vac}}\nu^{\text{vac}})\right)\left(1 + n\omega a/\beta^{\text{vac}}\right) + n\omega a/\beta^{\text{vac}}}. \tag{47}$$

При достаточно медленном поглощении точечных дефектов поверхностью ($\tau_\lambda\nu << 1$) и при условии $n\omega a/\beta << 1$ из уравнений (44), (46) получаем (для дельтообразного профиля источников точечных дефектов)

$$\ln\left(\frac{z_n(t)}{z_n(0)}\right) = -\left[\frac{2\pi}{\lambda} n \frac{c_0\gamma_S\Omega}{kT}\frac{D_V^{\text{vac}}}{D_S^{\text{vac}}}\nu^{\text{vac}} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 n^2 \frac{c_0\gamma_S\Omega}{kT}\left(\frac{\beta D_V \tau_S}{a^2}\right)\nu^{\text{vac}} + I_0\Omega\left(\frac{l_{\text{at}}\nu^{\text{at}}}{D_S^{\text{at}}} - \frac{l_{\text{vac}}\nu^{\text{vac}}}{D_S^{\text{vac}}}\right)\right] t. \tag{48}$$

Из (48) видно, что при $\tau_\lambda^{\text{vac,at}}\nu^{\text{vac,at}} \to 0$ нет сглаживания поверхности ($\dot{z}_n \to 0$), что и понятно, так как при этом условии точечные дефекты, выходящие на поверхность образца, успевают до поглощения перераспределиться по всей поверхности равномерно.

Зная коэффициенты диффузии и другие константы и анализируя экспериментально уравнения (44)–(47) как функции λ, можно найти трудно измеримые величины $\nu^{\text{vac,at}}$, $\beta^{\text{vac,at}}$.

Таким образом, в данной работе показано, что учет влияния точечных дефектов, создаваемых при облучении, приводит к более быстрому сглаживанию неровностей на поверхности твердого тела. Обнаруженный эффект имеет важное значение для многих прикладных задач. Следует отметить, что в приведенном рассмотрении не учитывались эффекты, связанные с испарением вещества при облучении, что может привести в зависимости от глубины залегания источника точечных дефектов и величины упругости паров вещества либо к ухудшению поверхности (увеличению неровностей), либо к ускорению сглаживания макрорельефа на поверхности.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Международной соросовской программы поддержки образования в области точных наук (грант ISSEPSPU № 042062).

1. Е. М. Лифшиц, В.В. Слезов, *ЖЭТФ* **35**, 479 (1958).
2. Е. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **44**, 1349 (1963).
3. W. W. Mullins, *J. Appl. Phys.* **30**, 77 (1959).
4. K. Hoehne and R. Sizmann, *Phys. Status Solidi* **5**, 577 (1971).
5. В. В. Слезов, Л.В. Танатаров, *Металлофизика* **10**, 90 (1988); V. V. Slezov, *Soviet Scientific Reviews*, sec. A (I. M. Khalatnikov (ed.), v. 17, part 3 (1995).
6. А. В. Погорелов, *Дифференциальная геометрия*, Наука, Москва (1969).
7. В. С. Владимиров, *Уравнения математической физики*, Наука, Москва (1967).

The smoothing of surface structure in solids under radiation

V. V. Slezov, V. M. Apalkov, Yu. I. Boiko, and H. D. Carstranjen

The system of equations describing the smoothing of the surface structure in solids under radiation is formulated. It is shown that under the real condition this system can be reduced to a more simple form, which has the exact solution. The general formula for surface smoothing is derived. As a particular case, this formula gives the evolution (smoothing) of the surface structure without radiation, which is related to the differences in curvatures for different roughness. The physical origin of the intensification of the surface smoothing under radiation is the difference between the positions of the concentration profiles of vacancies and interstitials. The radiation gives rise to a new type of dependence of the surface smoothing on the parameters of the roughness of the surface, which permits us to separate the contribution of radiation experimentally and simultaneously to find some hard-measurable parameters.