

## ОБРАЗОВАНИЕ СВЕРХРЕШЕТОК ВАКАНСИЙ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ

М.А. Алиева, Ф.Х. Мирзоев, Л.А. Шелепин

*На основе модели, включающей уравнения для полей деформации, температуры и концентраций точечных дефектов, создаваемых лазерными импульсами, рассматривается процесс их пространственного упорядочения. Обсуждаются условия образования сверхрешеток вакансий и их характеристики.*

За последние годы все большее внимание привлекают процессы самоорганизации, приводящие к образованию различных диссипативных структур в системах, далеких от термодинамического равновесия [1-3]. Одним из характерных примеров является возникновение периодических распределений концентрации дефектов в кристаллах при облучении лазерными импульсами.

Цель настоящей работы — исследование механизма и условий образования сверхрешеток плотности вакансий. Суть данного механизма определяется следующей цепочкой процессов. Под действием лазерных импульсов генерируются дефекты, возникают деформационные и термические флуктуации в среде и, как следствие, деформационные и термодиффузионные потоки вакансий, что приводит к пространственному перераспределению полей концентрации вакансий и температур. При этом появляются силы ( $F_n \sim \text{grad } n$ ,  $F_T \sim \text{grad } T$ ), усиливающие исходные флуктуации. За счет положительной обратной связи происходит потеря устойчивости однородного распределения, и в конечном результате возникают связанные диссипативные периодические структуры — распределения плотности вакансий и температуры.

Рассмотрим полуограниченную изотропную среду, однородно облучаемую лазерными импульсами, в которой со скоростью  $q_v$  генерируются вакансии. С учетом основных процессов, управляющих их поведением (диффузии, термодиффузии, дрейфового движения в поле деформации, рекомбинации на стоках), кинетическое уравнение, описывающее динамику плотности вакансий  $n(r, t)$ , можно представить в виде

$$\frac{\partial n(r, t)}{\partial t} = q_v - \text{div } j(r, t) - \frac{n(r, t)}{\tau(T)}, \quad (1)$$

где  $\tau(T)$  — время жизни вакансий по отношению к захвату стоками. При наличии дислокаций  $\tau = (\rho_d D)^{-1}$ , где  $\rho_d$  — плотность дислокаций;  $D = D_0 \exp(-E_m/kT)$  — коэффициент диффузии;  $D_0$  — предэкспоненциальный множитель;  $E_m$  — энергия миграции вакансии;  $k$  — постоянная Больцмана. В общем случае источник  $q_v$  зависит от температуры, интенсивности облучения и деформации. В дальнейшем будем считать, что  $q_v = \text{const}$ . Поток вакансий определяется следующим выражением:

$$j(r, t) = -D \text{grad } n(r, t) + n(r, t) \frac{D}{kT} \left( \frac{E_f}{T} \text{grad } T + K\Omega \text{grad } \xi \right). \quad (2)$$

Первое слагаемое в (2) описывает обычную диффузию, второе — термодиффузию в поле градиента температуры, третье — движение вакансий в поле деформации  $\xi(r) = \text{div } u$  ( $u$  — вектор смещения,  $K$  — модуль всестороннего сжатия,  $\Omega$  — дилатационный объем,  $\Omega \approx -d^3$ ,  $d$  — период решетки);  $E_f$  — энергия образования дефекта.

Уравнение, описывающее деформацию  $\xi(r)$  упругого континуума, имеет вид:

$$G\Delta u + (K + (G/3)) \text{grad } (\text{div } u) = K\alpha_T \text{grad } T + K\Omega \text{grad } n. \quad (3)$$

Здесь  $\rho$  — плотность среды,  $G$  — модуль сдвига,  $\alpha_T$  — коэффициент теплового расширения. Слагаемое  $K\alpha_T \text{ grad } T$  характеризует термоупругие напряжения,  $K\Omega \text{ grad } n$  — концентрационные напряжения. Температурное поле, возникающее в среде при лазерном облучении, определяется уравнением

$$C\rho \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} = \lambda \Delta T(r, t) + Q_T - W, \quad Q_T = E_f \frac{n(r, t)}{\tau(T)} + aI(r, t), \quad (4)$$

где  $C$  — удельная теплоемкость,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности,  $Q_T(r, t)$  характеризует суммарную теплоту, выделяемую в среде при рекомбинации вакансий на стоках и при поглощении энергии лазерного излучения.  $E_f$  по порядку величины соответствует энергии образования вакансии,  $a_T$  — коэффициент поглощения,  $I(r, t)$  — интенсивность излучения. В дальнейшем влияние  $aI(r, t)$  на формирование температурного поля не будем принимать во внимание. Будем считать, что потери на границе отсутствуют ( $W = 0$ ).

Уравнения (1) — (4) составляют замкнутую систему, описывающую процесс образования пространственных структур точечных дефектов в твердом теле при импульсном лазерном воздействии. Данная система имеет стационарное пространственно-однородное решение  $(n_0, T_0, \xi_0)$ , определяемое соотношениями  $n_0 = q_v \tau_0$ ,  $\xi_0 = \text{div } u_0$ ,  $T = T_0$ .

Исследуем устойчивость этого решения по отношению к пространственно-временным флуктуациям  $(\delta n, \delta T, \delta \xi)$ . Полагая  $n = n_0 + \delta n$ ,  $T = T_0 + \delta T$ ,  $\xi = \xi_0 + \delta \xi$ , где  $|\delta n| \ll n_0$ ,  $|\delta T| \ll T_0$ ,  $|\delta \xi| \ll \xi_0$  ( $\delta n, \delta T, \delta \xi \sim \exp(\omega t + iqr)$ ), и линеаризуя полученную систему по малым отклонениям  $\delta n, \delta T, \delta \xi$ , находим дисперсионное уравнение:

$$\omega_{1,2} = -b_q/2 \pm \sqrt{b_q^2/4 - c_q} \quad (5)$$

где  $b_q = q^2(D - g\Omega A) + \kappa q^2 + \tau^{-1} + E_f' l$ ,  $c_q = q^2[\kappa q^2(D - g\Omega A) + \kappa \tau^{-1} + E_f' \tau^{-1}(g\alpha_T A - m) - E_f' l] \times (D - g\Omega A)$ ,  $g = n_0 DK\Omega(kT_0)^{-1}$ ,  $\kappa = \lambda(c\rho)^{-1}$ ,  $m = n_0 DE_f(kT_0^2)^{-1}$ ,  $A = 3K(3K + 4G)^{-1}$ ,  $E_f' = E_f(C\rho)^{-1}$ ,  $l = -n_0 E_m(\tau_0 kT_0^2)^{-1}$ .

Из (5) при  $q^2 = 0$  имеем  $\omega_1 = -1/\tau$ ,  $\omega_2 = 0$ , поэтому решение  $(n_0, \xi_0, T_0)$  всегда устойчиво. Неустойчивость возникает в том случае, когда хотя бы один из корней дисперсионного уравнения имеет действительную положительную часть  $\text{Re } \omega > 0$ . Анализируя (5), заметим, что  $\text{Re } \omega > 0$ , если

$$0 < q^2 < q_0^2 = \frac{(m - g\alpha_T A)E_f' - \kappa + E_f' l(D - g\Omega A)}{\kappa \tau(D - g\Omega A)}, \quad m > g\alpha_T A.$$

Таким образом, существует интервал значений волнового вектора критических флуктуаций  $0 < q^2 < q_0^2$ , при которых происходит потеря устойчивости пространственно-однородного состояния системы точечных дефектов. Образуется их периодическая диссипативная структура. Причиной возникновения таких структур является неустойчивость, связанная с дрейфовым движением точечных дефектов в поле упругой деформации, которое, в свою очередь, зависит от поля концентрации дефектов. Период  $d_0$  возникающей диссипативной структуры определяется волновым вектором  $q_{\text{max}}$  неоднородных флуктуаций, обладающих наибольшей скоростью нарастания инкремента  $\omega_{\text{max}}$

$$d_0 = 2\pi/|q_{\text{max}}| = 2\sqrt{2} \pi/|q_0|.$$

Для проверки адекватности рассмотренного механизма образования периодической структуры вакансий сделаем некоторые численные оценки. При характерных значениях констант  $K = 5 \cdot 10^{11}$  дин/см<sup>2</sup>,  $E_f = 1$  эВ,  $\alpha_T \approx 2 \cdot 10^{-5}$  К<sup>-1</sup>,  $\rho_a = 10^{10}$  см<sup>-2</sup>,  $\Omega = 3 \cdot 10^{-23}$  см<sup>3</sup>,  $\kappa \approx 0,1$  см<sup>2</sup>/с,  $T = 600$  К,  $D \approx 10^{-7}$  см<sup>2</sup>/с получим  $d_0 = 300$  нм. Из (5) для максимального значения инкремента неустойчивости имеем  $\omega_{\text{max}} = \omega(q_{\text{max}}^2) = 2 \cdot 10^3$  с. Таким образом, для экспериментального наблюдения рассмотренной диссипативной

периодической структуры из вакансий необходимо пользоваться лазерными импульсами длительностью  $\tau_u < 10^{-3}$  с.

Генерация дефектов при облучении миллисекундными лазерными импульсами неоднократно наблюдалась в ряде металлов и полупроводников /4/. Кроме того, предложенный механизм возникновения периодических структур концентраций вакансий при определенных условиях может дополнительно приводить к образованию периодического поверхностного рельефа. Это обусловлено уменьшением температуры плавления кристалла при повышении концентрации неравновесных вакансий под действием лазерного облучения /4/. В результате при возникновении сверхрешетки в местах, где концентрация вакансий максимальна, происходит значительное снижение температуры плавления. Условия ряда экспериментов, где наблюдалось образование периодически повторяющихся областей расплавления при облучении их лазерными импульсами (например, /5/), находятся в качественном соответствии с рассматриваемым механизмом.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Сугаков В. И., Селищев П. А. ФТТ, 30, №9, 2611 (1988).
2. Мирзоев Ф. Х., Фетисов Е. П., Шелепин Л. А. Письма в ЖТФ, 12, №24, 1489 (1986).
3. Мирзоев Ф. Х., Панченко В. Я., Шелепин Л. А. Препринт ФИАН №88, М., 1989.
4. Боберев В. А. и др. Изв. АН СССР, сер. физическая, 51, №6, 1180 (1987).
5. Меркулова С. П., Шелепин Л. А., Шубин А. А. Труды ФИАН, 177, 133 (1987).

Поступила в редакцию 3 ноября 1989 г.