

Образование нанометровых упорядоченных дефектно-деформационных структур в твердых телах при воздействии на них потоков энергии

© В.И. Емельянов, И.М. Панин

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119899 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 26 марта 1997 г.)

Построена дефектно-деформационная теория иерархии образования нанометровых кластеров и периодических структур точечных дефектов, индуцированных действием энергетического пучка. Проведено сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными результатами по образованию нанометровых решеток пор в металлах под действием пучков частиц и лазерно-индуцированной структурной модификации поверхности полупроводников. Получено хорошее соответствие теории и эксперимента.

Самоорганизация лазерно-индуцированных дефектов (междоузлий, вакансий, электронно-дырочных пар), взаимодействующих друг с другом через поле деформации упругого континуума, исследовалась ранее на поверхности твердых тел (см. обзор [1]). Характерный масштаб периодических поверхностных дефектно-деформационных (ДД) структур, образующихся в результате лазерного воздействия на сильно поглощающие твердые тела (полупроводники и металлы), пропорционален толщине дефектно обогатленного слоя h [1–3], которая составляет обычно величины порядка $10^{-4} - 10^{-5}$ см (крупномасштабные ДД-структуры).

Для целого ряда практически важных эффектов, таких как лазерно-индуцированные аморфизация полупроводников [4–8] и образование в них протяженных дефектов [7], образование нанометрических периодических решеток протяженных дефектов в диэлектрических оптических материалах [9] и металлах [10,11] при их облучении энергетическими пучками и т.п., представляет интерес развитие теории образования малкомасштабных (нанометровых) периодических и локализованных ДД-структур.

В работе [12,13] был предложен и развит механизм образования нанометровых периодических ДД-структур и показано, что период структуры пропорционален характеристической длине взаимодействия дефектов с атомами кристалла l_d . Рассмотрение в [12,13] проведено при учете только ангармонизма четвертого ранга в выражении для свободной энергии ангармонического кристалла.

Настоящая работа посвящена дальнейшей разработке теории образования мелкомасштабных периодических и локализованных ДД-структур. Получено нелинейное ДД-уравнение для самосогласованной деформации твердого тела, вызванной стационарным распределением лазерно-индуцированных точечных дефектов. Помимо ангармонизма четвертого ранга в нем также учтен кубический ангармонизм упругого континуума. В полученном уравнении фигурируют два характерных масштабных параметра: l_0 — длина межатомного взаимодействия и l_d ($l_d > l_0$). Найдено точное ре-

шение нелинейного ДД-уравнения и показано, что в зависимости от превышения внешнего контролируемого параметра (концентрации лазерно-индуцированных дефектов n_{d0}) над пороговыми значениями образуются либо локализованные ДД-структуры (симметричные и антисимметричные кластеры), либо периодические ДД-структуры. Найдены условия образования двух этих типов ДД-структур и определены их характеристики: размеры и формы кластеров, период ДД-структуры, пространственное распределение деформации и концентрации дефектов в ДД-структурах.

Прослежено соответствие установленной иерархии процессов самоорганизации дефектов с экспериментальными результатами по наблюдению последовательности стадий лазерно-индуцированной структурной модификации приповерхностных слоев полупроводников. Проведено сравнение предсказанных теорией зависимостей периода ДД-структуры от температуры и концентрации дефектов с соответствующими экспериментальными зависимостями периода решетки пор, образующейся в металлах при облучении их пучками частиц, и установлено их хорошее соответствие.

Предварительные результаты данного исследования докладывались на международном симпозиуме "Nanostructures: Physics and Technology-96" [14].

1. Связанная система уравнений для деформации среды и концентрации дефектов

Далее мы будем рассматривать случай одномерного кристалла, когда тензор деформации среды u_{ij} имеет единственную x -компоненту: $u_{xx} = \partial u_x(x)/\partial x \equiv \xi(x)$, где u_x — компонента вектора смещения среды, $\xi(x)$ — деформация среды.

Выражение для плотности свободной энергии одномерного деформированного ангармонического кристалла с дефектами с учетом нелокальности взаимодействия

атомов решетки друг с другом и с дефектами имеет вид

$$F = \frac{1}{2}\rho c_l^2 \xi^2 + \rho c_l^2 l_0^2 \partial^2 \xi(x) / \partial x^2 \xi + \frac{1}{2}\alpha \rho c_l^2 \xi^3(x) + \frac{1}{4}\beta \rho c_l^2 \xi^4(x) - \theta_d n_d \xi - \theta_d n_d l_d^2 \partial^2 \xi(x) / \partial x^2 - TS. \quad (1)$$

Здесь ρ — плотность среды, c_l — продольная скорость звука, α, β — константы упругого ангармонизма, l_0 — характеристическая длина взаимодействия атомов кристалла друг с другом, l_d — характеристическая длина взаимодействия дефектов с атомами кристалла ($l_d > l_0$), n_d — концентрация точечных дефектов, $\theta_d = \Omega_d K_d$ — потенциал деформации (Ω_d — изменение объема кристалла при создании одного дефекта, K_d — модуль упругости), T — температура, S — энтропия системы.

Вывод формулы (1) проведен в [13]. По сравнению с [13] в (1) дополнительно учтен член кубического ангармонизма ($\sim \alpha$). В дальнейшем предполагается, что $\alpha < 0$, $\beta > 0$ (что соответствует разложению потенциала межатомного взаимодействия Морзе) [15].

Из (1) следует выражение для напряжения в ангармоническом кристалле с дефектами $\sigma = \partial F / \partial \xi$

$$\sigma(x) = \rho c_l^2 \xi(x) + \rho c_l^2 l_0^2 \partial^2 \xi(x) / \partial x^2 - |\alpha| \rho c_l^2 \xi^2(x) + \beta \rho c_l^2 \xi^3(x) - \theta_d n_d. \quad (2)$$

Из уравнения для вектора смещения среды $\partial^2 u_x / \partial t^2 = \partial \sigma / \partial x$ и (2) имеем уравнение для $\xi(x)$

$$\partial^2 \xi / \partial t^2 = c_l^2 \partial^2 \xi / \partial x^2 + c_l^2 l_0^2 \partial^4 \xi / \partial x^4 - |\alpha| c_l^2 \partial^2 (\xi^2) / \partial x^2 + \beta c_l^2 \partial^2 (\xi^3) / \partial x^2 - (\theta_d / \rho) (\partial^2 n_d / \partial x^2). \quad (3)$$

Используя выражение для энергии взаимодействия точечного дефекта с упругим континуумом, следующее из (1)

$$H_d(x) = -\theta_d \xi(x) - \theta_d l_d^2 \partial^2 \xi(x) / \partial x^2,$$

получим выражение для x -компоненты нелокальной силы, действующей на дефект,

$$F(x) = -\partial H_d(x) / \partial x = \theta_d \partial \xi(x) / \partial x + \theta_d l_d^2 \partial^3 \xi(x) / \partial x^3. \quad (4)$$

Порождаемый этой силой поток дефектов равен

$$j_d(x) = (D_d \theta_d / k_B T) n_d(x) \times \left[\partial \xi(x) / \partial x + \theta_d l_d^2 \partial^3 \xi(x) / \partial x^3 \right], \quad (5)$$

где D_d — коэффициент диффузии дефекта, k_B — константа Больцмана.

С учетом (5) уравнение для концентрации дефектов запишется в виде

$$\partial n_d / \partial t = D_d \partial^2 n_d / \partial x^2 - (D_d \theta_d / k_B T) \partial / \partial x \times \left[n_d(x) (\partial \xi(x) / \partial x) l_d^2 \partial^3 \xi(x) / \partial x^3 \right] + G_d - n_d / \tau_d, \quad (6)$$

где G_d — скорость генерации точечных дефектов внешним источником, τ_d — время жизни дефекта.

Как видно из (3) и (6), плотность энтропии S , фигурирующая в (1), в рассматриваемом приближении выпадает из уравнений движения.

Введем пространственно усредненные величины

$$\xi_0 = \frac{1}{L} \int \xi(x) dx, \quad n_{d0} = \frac{1}{L} \int n_0(x) dx,$$

где L — размер кристалла, и представим деформацию и концентрацию дефектов в виде

$$\xi(x) = \xi_0 + \xi_I(x), \quad n_0(x) = n_{d0} + n_{dI}(x), \quad (7)$$

где $\xi_I(x)$ и $n_{dI}(x)$ — пространственно неоднородные части деформации и концентрации дефектов. Пространственно однородная деформация и концентрация дефектов связаны соотношением

$$\xi_0 = \frac{\theta_d}{K_d} n_{d0}. \quad (7a)$$

Система уравнений (3) и (6) имеет пространственно однородное стационарное решение $n_{d0} = G_d \tau_d$, $\xi = \xi_0$. Как показано далее, это пространственно однородное решение оказывается неустойчивым при превышении определенной критической концентрации дефектов, и возникает новое, пространственно неоднородное стационарное состояние. В этом состоянии ξ и n_d задаются формулой (7). Из (6) и (7) в пренебрежении рекомбинации дефектов ($\tau_d^{-1} = 0$) и в приближении $n_{dI} \ll n_{d0}$ получаем уравнение для n_{dI}

$$\partial n_{dI} / \partial t = D_d \partial^2 n_{dI} / \partial x^2 - (D_d \theta_d n_{d0} / k_B T) \times (\partial^2 \xi_I / \partial x^2 + l_d^2 \partial^4 \xi_I / \partial x^4). \quad (8)$$

Из (3), (7) и (7a) имеем уравнение для ξ_I

$$\partial^2 \xi_I / \partial t^2 = c_l^2 \partial^2 \xi_I / \partial x^2 + c_l^2 l_0^2 \partial^4 \xi_I / \partial x^4 - |\alpha| c_l^2 \partial^2 (\xi_I^2) / \partial x^2 + \beta c_l^2 \partial^2 (\xi_I^3) / \partial x^2 - (\theta_d / \rho) \partial^2 n_{dI} / \partial x^2. \quad (9)$$

Из (9) следует, что

$$\text{sign } \xi_I = \text{sign } \theta_d. \quad (9a)$$

Далее показано, что система уравнений (8), (9) описывает процессы самоорганизации дефектов, взаимодействующих через деформацию упругого континуума, приводящие к образованию стационарных кластерных и периодических дефектно-деформационных структур.

2. Образование стационарных кластерных и периодических дефектно-деформационных структур

Рассмотрим систему уравнений (8), (9) в стационарном случае, когда $\partial n_{dI}/\partial t = 0$, $\partial^2 \xi_I/\partial t^2 = 0$. Интегрируя (8), имеем для пространственно неоднородной концентрации дефектов

$$n_{dI} = (\theta_d n_{d0}/k_B T)(\xi_I + l_d^2 \partial^2 \xi_I/\partial x^2), \quad (10)$$

где мы положили две константы интегрирования равными нулю (см. обсуждение после формулы (13)). Подставляя (10) в (9), получаем уравнение для пространственно неоднородной деформации среды

$$\begin{aligned} \partial^2 \xi_I/\partial x^2 + l_0^2 \partial^4 \xi_I/\partial x^4 - |\alpha| \partial^2 (\xi_I^2)/\partial x^2 \\ + \beta \partial^2 (\xi_I^3)/\partial x^2 - (\theta_d^2 n_{d0}/\rho c_l^2 k_B T) \\ \times (\partial^2 \xi_I/\partial x + l_0^2 \partial^4 \xi_I/\partial x^4) = 0. \end{aligned}$$

Интегрируя его, имеем следующее уравнение:

$$\partial^2 \xi_I/\partial x^2 - a \xi_I + f \xi_I^2 - c \xi_I^3 + b_I x + b_0 = 0, \quad (11)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} a &= (1 - n_{d0}/n_{dc})/(l_d^2 n_{d0}/n_{dc} - l_0^2), \\ f &= |\alpha|/(l_d^2 n_{d0}/n_{dc} - l_0^2), \\ c &= \beta/(l_d^2 n_{d0}/n_{dc} - l_0^2), \end{aligned} \quad (12)$$

а также введены критическая концентрация дефектов

$$n_{dc} = \rho c_l^2 k_B T/\theta_d^2 \quad (13)$$

и коэффициенты

$$\begin{aligned} b_I &= B_I/(l_d^2 n_{d0}/n_{dc} - l_0^2), \\ b_0 &= B_0/(l_d^2 n_{d0}/n_{dc} - l_0^2) \end{aligned}$$

(B_0, B_I — постоянные интегрирования).

Далее рассмотрим решения уравнения (11), соответствующие случаю $B_0 = 0$, $B_I = 0$ (т.е. $b_I = 0$, $b_0 = 0$), которые удовлетворяют условиям локализованности (кластерное решение) $\xi_I(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$ и условию трансляционной инвариантности (периодическая структура) $\xi_I(x) = \xi_I(x + m)$, где m — период трансляции.

Тогда из (11) имеем следующее нелинейное уравнение для самосогласованной деформации:

$$\partial^2 \xi_I/\partial x^2 - a \xi_I + f \xi_I^2 - c \xi_I^3 = 0, \quad (11a)$$

где коэффициенты a , f и c задаются в (11); с учетом (9a) $\text{sign } \xi_I = \text{sign } \theta_d$.

Решение уравнения (11a) в виде неявной функции выражается через интеграл

$$x = \int d\xi_I / \left[a \xi_I^2 - \frac{2}{3} f \xi_I^3 + \frac{c}{2} \xi_I^4 + d \right]^{1/2}, \quad (14)$$

где d — постоянная интегрирования. При $d \neq 0$ решение уравнения (14) выражается через эллиптические интегралы.

Рассмотрим класс решений, соответствующий случаю $d = 0$. Из (14) мы имеем

$$x = \int d\xi_I \left[a \xi_I^2 - \frac{2}{3} f \xi_I^3 + \frac{c}{2} \xi_I^4 \right]^{1/2}. \quad (14a)$$

Интеграл (14a) выражается через аналитические функции, тип которых определяется знаками коэффициента a и Δ , через Δ обозначено

$$\Delta = \frac{c}{2} - \frac{f^2}{9a}. \quad (15)$$

Используя (12), запишем Δ в виде

$$\Delta = \frac{\beta \left[\left(1 - \frac{2\sigma^2}{9\beta} \right) - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right]}{2l_d \left(\frac{n_{d0}}{n_{dc}} - \left(\frac{l_0}{l_d} \right)^2 \right) \left(1 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right)}. \quad (16)$$

Используя связь между α и β из [16], имеем $2\alpha^2/9\beta = 4/9 < 1$. Можно полагать, что в реальных ситуациях (ср. подпись к рис. 5) имеет место неравенство

$$(l_0/l_d)^2 < 1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta} < 1. \quad (17)$$

Предполагая выполнение неравенства (17), разобьем область изменения n_{d0} на четыре интервала, в которых знаки a и Δ различны

$$n_{d0}/n_{dc} < (l_0/l_d)^2, \quad (l_0/l_d)^2 < n_{d0}/n_{dc} < \left(1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta} \right),$$

$$\left(1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta} \right) < n_{d0}/n_{dc} < 1, \quad n_{d0}/n_{dc} > 1.$$

Рассмотрим каждый из этих интервалов по отдельности.

а) При концентрациях дефектов ниже пороговой, когда

$$n_{d0}/n_{dc} < (l_0/l_d)^2 \quad (a < 0, \quad \Delta < 0)$$

интеграл (14a) не выражается в действительных функциях, так что $\xi_I = 0$ и $\partial^2 \xi_I/\partial x^2 = 0$, из (10) имеем $n_{dI} = 0$, т.е. процессов самоорганизации дефектов не происходит.

б) При превышении первого порога по концентрации дефектов в области

$$(l_0/l_d)^2 < n_{d0}/n_{dc} < 1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta} \quad (a > 0, \quad \Delta > 0)$$

из (14а) получаем для самосогласованной деформации

$$\xi_I(x) = \text{sign } \theta_d \frac{A}{B + \text{sh}(-a^{1/2}x)}, \quad (18)$$

где $A = 3\sqrt{2}a(9ca - 2f^2)^{-1/2}$, $B = f\sqrt{2}(9ca - 2f^2)^{-1/2}$.

График функции (18) изображен на рис. 1. Расходимость решения при $x \rightarrow x_{\text{break}} = a^{-1/2} \times \text{Arsh}(f/(9ac/2 - f^2)^{1/2})$ обусловлена пренебрежением высшими производными в разложениях операторов межатомных взаимодействий (см. [13]). При их учете решение должно описывать антисимметричную деформационную яму, полученную интерполяцией решения (18). В соответствии с (10) в ней самосогласованно захватывается антисимметричный кластер дефектов, причем если $\theta_d > 0$, то дефекты локализуются в области $\xi_I(x) > 0$;

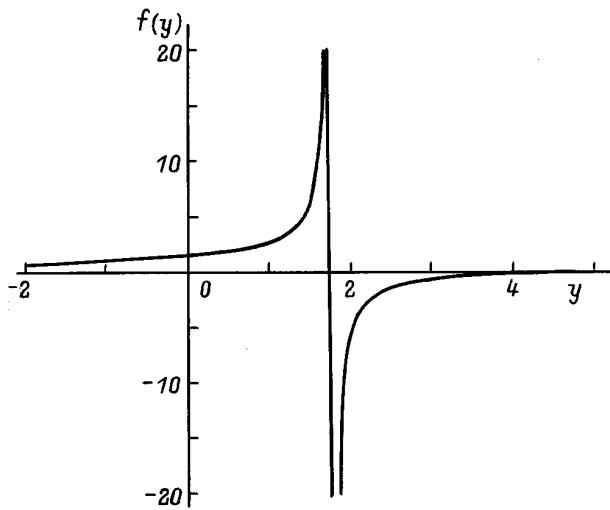


Рис. 1. Зависимость деформации от пространственной координаты в случае антисимметричного кластера. $f(y) = \xi_I(y)A^{-1}$, где $\xi_I(y)$ задается (18), $y = a^{-1/2}x$, $\text{sign } \theta_d = +1$, $(l_0/l_d)^2 = 0.04$, $\alpha^2/\beta = 2$ [16], $n_{d0} = n_{dc}(1 + (l_0/l_d)^2)/2$.

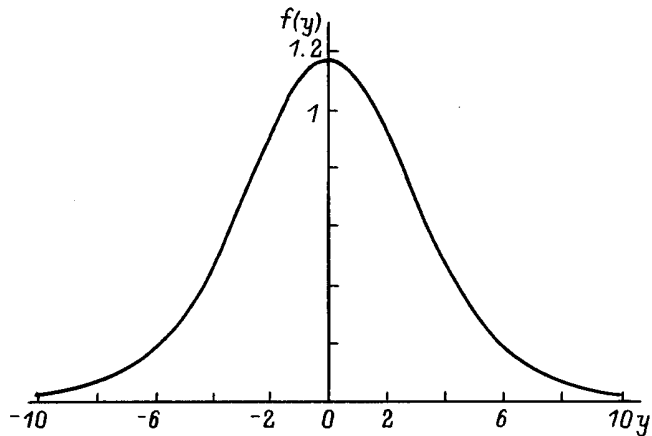


Рис. 2. Зависимость деформации от пространственной координаты в случае симметричного кластера. $f(y) = \xi_I(y)A^{-1}$, где $\xi_I(y)$ задается (20), $n_{d0} = n_{dc}(1 - \alpha^2/9\beta)$, остальные значения те же, что и на рис. 1.

если $\theta_d < 0$, то дефекты локализуются в области $\xi_I(x) < 0$. Характерный размер этого кластера d_{clust} , как видно из (18), равен

$$d_{\text{clust}} = [(l_d^2 n_{d0}/n_{dc} - l_0^2)/(1 - n_{d0}/n_{dc})]^{1/2}. \quad (19)$$

Исходная формула (1) справедлива при условии $d_{\text{clust}} > l_d$ [13], что с учетом (19) приводит к условию

$$[(l_0/l_d)^2 + 1]/2 < n_{d0}/n_{dc} < 1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta}.$$

с) При превышении второго порога по концентрации дефектов в области

$$1 - \frac{2\alpha^2}{9\beta} < n_d/n_{dc} < 1 \quad (a > 0, \quad \Delta < 0)$$

из (14а) получаем для самосогласованной деформации

$$\xi_I(x) = \text{sign } \theta_d \frac{A}{B - \text{ch}(a^{1/2}x)}. \quad (20)$$

График функции (20) изображен на рис. 2.

Таким образом, при $1 - 2\alpha^2/9\beta < n_{d0}/n_{dc} < 1$ решение (20) описывает симметричную деформационную яму. В соответствии с (10) в ней самосогласованно захватывается симметричный кластер дефектов. Характерный размер кластера d_{clust} , как видно из (20), равен

$$d_{\text{clust}} = [(l_d^2 n_{d0}/n_{dc} - l_0^2)/(1 - n_{d0}/n_{dc})]^{1/2}.$$

Из условия применимости формулы (1) $d_{\text{clust}} > l_d$ следует, что выражение (20) справедливо во всей области $1 - 2\alpha^2/9\beta < n_{d0}/n_{dc} < 1$.

д) При превышении третьего порога по концентрации дефектов в области

$$n_{d0}/n_{dc} > 1 \quad (a < 0, \quad \Delta > 0)$$

из (14а) получаем для самосогласованной деформации

$$\xi_I(x) = -\text{sign } \theta_d \frac{A_1}{B + \text{sin}(|a|^{1/2}x)}, \quad (21)$$

где $A_1 = 3\sqrt{2}|a|(9ca - 2f^2)^{-1/2}$.

График периодической функции (21) изображен на рис. 3. Видно, что в области $n_{d0}/n_{dc} > 1$ решение уравнения (11) описывает сильно ангармоническую периодическую деформационную структуру. В соответствии с (10) согласованно с ней образуется периодическая структура дефектов, причем если $\theta_d > 0$, то дефекты локализуются в области $\xi_I(x) > 0$; если $\theta_d < 0$, то дефекты локализуются в области $\xi_I(x) < 0$.

Период образующейся ДЦ-структуры равен

$$d = 2\pi [(l_d^2(n_{d0}/n_{dc} - l_0^2)/(n_{dc} - 1))]^{1/2}. \quad (22)$$

Исходная формула (1) справедлива при условии $d > l_d$, что с учетом (22) приводит к условию $n_{d0}/n_{dc} > 1$.

3. Сравнение с экспериментом и обсуждение результатов

Проведенное в настоящей работе рассмотрение предсказывает следующую иерархию процессов мелкомасштабной (на нанометровых расстояниях) самоорганизации точечных дефектов, "накачиваемых" в твердое тело внешним энергетическим (лазерным) пучком. С ростом интенсивности (дозы) облучения в кристалле растет пространственно однородная концентрация дефектов n_{d0} , которая является, таким образом, внешним контролируемым параметром. Имеются три пороговых значения контрольного параметра $n_{dc1} = n_{dc}(l_0/l_d)^2$, $n_{dc2} = n_{dc}1 - (2\alpha^2/9\beta)$ и $n_{dc3} = n_{dc}$ (13), при достижении которых в системе дефектов, взаимодействующих через поле упругих смещений, происходят качественно различные процессы самоорганизации. При малых концентрациях дефектов, когда $n_{d0} < n_{dc1}$, процессов самоорганизации не происходит и пространственное распределение дефектов остается однородным. После превышения первого порога, в области $n_{dc1} < n_{d0} < n_{dc2}$, образуются антисимметричные кластеры дефектов, захваченных в самосогласованные антисимметричные деформационные ямы. После превышения второго порога, в области $n_{dc2} < n_{d0} < n_{dc3}$, образуются симметричные кластеры дефектов, захваченных в самосогласованные симметричные деформационные ямы. Характерные размеры этих кластеров d_{clast} (19) лежат в нанометровом диапазоне, так как $l_0, l_d \sim 10^{-7}$ см. При дальнейшем росте концентрации дефектов n_{d0} , после превышения третьего порога, $n_{d0} > n_{dc3}$, образуется сильно ангармоническая пери-

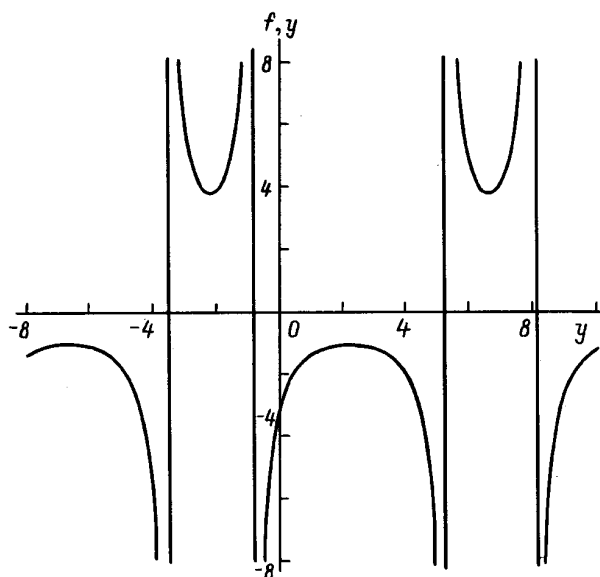


Рис. 3. Зависимость периодической деформации от пространственной координаты в случае периодической ДД-структуры. $f(y) = \xi_I(y)A_I^{-1}$, где $\xi_I(y)$ задается (21), $y = |a|^{-1/2}x$, $n_{d0} = 2n_{dc}$, остальные значения те же, что и на рис. 1. Междоузлия образуют самосогласованные периодические скопления в областях $\xi_I > 0$. Вакансии скапливаются в областях $\xi_I < 0$. Образуются двойные междоузельно-вакансионные стенки.

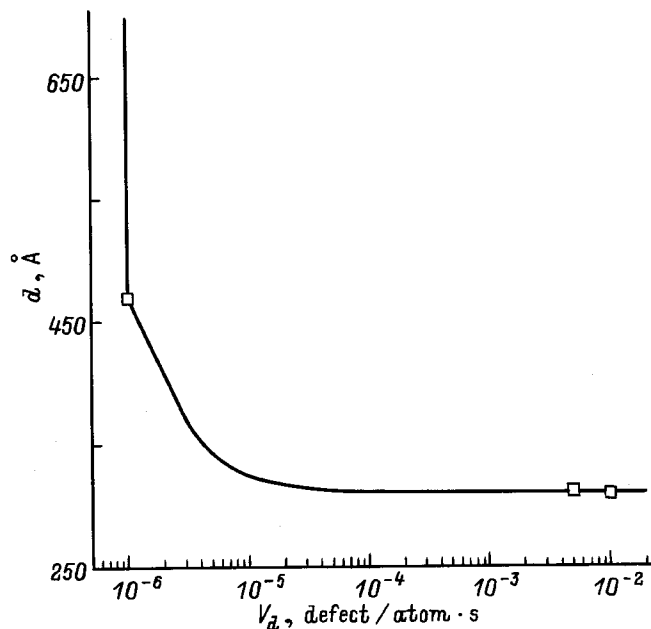


Рис. 4. Зависимость периода решетки пор d от скорости V_d генерации дефектов при облучении Мо-пучком частиц. Точки — экспериментальные данные, приведенные в [11], кривая построена по формуле (23) при $2\pi l_d = 310 \text{ \AA}$, $G_{dc} = 5.65 \cdot 10^5 \text{ defect} \cdot \text{atom}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

одическая ДД-структура, описываемая формулой (21) и изображенная на рис. 3. Период этой структуры d (формула (22)) лежит также в нанометровом диапазоне.

Мы рассмотрели самоорганизацию дефектов одного типа "d" за счет взаимодействия их друг с другом через поле самосогласованной деформации. При облучении материалов дефекты рождаются парами междоузлий ($d = i$) и вакансий ($d = \nu$), при этом обычно $\theta_i \gg \theta_\nu$ [17]. Поэтому в уравнении для самосогласованной деформации (11) оставлен лишь один вклад с $\theta_d = \theta_i$. Таким образом, междоузлия образуют самосогласованную периодическую структуру с максимумами концентраций в областях $\xi_I > 0$. При этом вакансии скапливаются в областях $\xi_I < 0$, таким образом образуются двойные междоузельно-вакансионные стенки дефектов (рис. 3).

В проведенном рассмотрении пренебрегалось рекомбинацией дефектов ($\tau_d^{-1} = 0$). В стационарном состоянии это возможно при условии, что размер (период) ДД-структур $d < l_{sink}$ — среднего расстояния между стоками дефектов.

В данной работе исследован случай $\alpha < 0$. При $\alpha > 0$ иерархия процессов самоорганизации дефектов качественно не меняется. Причем смена знака α вообще не влияет на структуру решений в случаях антисимметричного кластера и периодической структуры, а в случае симметричного кластера смена знака α приводит к изменению его формы. При $\alpha = 0$ решения, описывающие иерархию процессов самоорганизации дефектов, переходят в решения, найденные в работе [13].

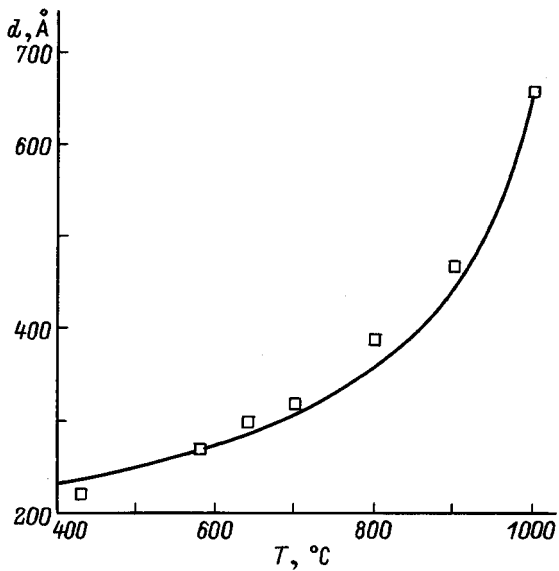


Рис. 5. Зависимость периода решетки пор d от температуры. Точки — экспериментальные данные для Мо, облученного нейтронами с энергией $E > 0.1$ MeV и дозой 10^{22} cm $^{-2}$ [18], кривая построена по формуле $d = 2\pi l_d \sqrt{T_c/(T_c - T)}$, следующей из (24) при $l_d \gg l_0$, $T_c = 1084^\circ\text{C}$, $l_d = 29$ Å, $l_0 = 5$ Å.

При больших концентрациях вакансий, собирающихся в ДД-структурах, образуется периодическое распределение пор с периодом, задаваемым формулой (22).

Образование периодической решетки пор наблюдалось в металлах [10] и диэлектриках [9] при облучении их пучками частиц. На рис. 4 показана экспериментальная зависимость решетки пор в молибдене от скорости генерации дефектов G_d , приведенная в работе [11]. Для сравнения этой зависимости с предсказанием формулы (22) положим в ней $n_{d0}/n_{dc} = G_d/G_{dc}$, где $G_{dc} = \text{const}$ и допустим, что $l_d \gg l_0$ (см. подпись к рис. 3). Тогда (22) приобретает вид

$$d = 2\pi l_d \left(\frac{G_d/G_{dc}}{G_d/G_{dc} - 1} \right)^{1/2}. \quad (23)$$

Сравнение зависимости (19) с экспериментальной зависимостью, приведенной в [11], дано на рис. 4. Из-за малого числа экспериментальных точек можно говорить только о качественном соответствии теории и эксперимента.

Из (22) получаем зависимость периода ДД-структуры от температуры

$$d = 2\pi l_0 \left(\frac{(l_d/l_0)^2 T_c - T}{T_c - T} \right)^{1/2}. \quad (24)$$

Зависимость (24) представлена на рис. 5 в сравнении с экспериментальной зависимостью из работы [18]. Видно хорошее согласие предсказания ДД-теории и эксперимента.

Интересно в связи с рассмотренной в настоящей работе иерархией процессов образования ДД-кластеров и

периодических ДД-структур отметить, что при импульсном лазерном воздействии на полупроводники наблюдается иерархия результирующих лазерно-индуцированных структурных несовершенств. Именно при низкой плотности энергии в импульсе W (J/cm 2) наблюдается аморфизация поверхности полупроводника (Si). С ростом W аморфное состояние сменяется мелкозернистым поликристаллическим состоянием. При дальнейшем увеличении W возникает фаза крупнозернистого поликристаллического Si. Далее после превышения некоторого критического значения $W = W_c$ эта фаза сменяется на фазу кристаллического кремния, насыщенного протяженными дефектами (тетраэдрическими кластерами и дислокационными петлями [7]). Обратная последовательность деградации кристаллической структуры с уменьшением W соответствует иерархии процессов образования ДД-кластеров и периодических ДД-структур с ростом концентрации лазерно-индуцированных дефектов n_{d0} , если предположить, что дефекты захватываются в твердую фазу из жидкой фазы при движении фронта отвердевания. При этом в областях малых W с соответственно малой глубиной расплава скорость фронта отвердевания велика, и соответственно велико значение n_{d0} . По мере увеличения W глубина расплава растет, и соответственно падает значение n_{d0} . Таким образом, направление возрастания W противоположно направлению возрастания n_{d0} . При достижении первого порога по n_{d0} образуются кластеры дефектов, а при превышении третьего порога по n_{d0} образуются периодические структуры дефектов. Достижение порога образования нанометровых периодических ДД-структур в соответствии с механизмом лазерно-индуцированной аморфизации полупроводников, предположенным в [12], и означает достижение порога аморфизации.

Список литературы

- [1] V.I. Emel'yanov. *Laser Phys.* **32**, 389 (1992).
- [2] V.I. Emel'yanov. In: *Laser-Induced Damage in Optical Materials* / Ed. H.E. Bennet, L.L. Chase, A.H. Guenther, B.E. Newnam, M.J. Soileau. (1993). SPIE. V. N 2114. 580 p.
- [3] V.I. Emel'yanov, M. Ledgerwood, H.M. van Driel. In: *Non-linear optics of low-dimensional structures and new materials* / Ed. V.I. Emel'yanov, V.Ya. Panchenko. (1996). SPIE. V. N 2801. 740 p.
- [4] *Laser and Electron Beam Interactions with Solids* / Ed. B.R. Appleton and G.K. Celler. North Holland, Amsterdam. (1982).
- [5] T. Sameshima, S. Usui. *J. Appl. Phys.* **70**, 1281 (1991).
- [6] А.Ю. Абдуллаев, С.В. Говорков, Н.И. Коротеев. *Письма в ЖТФ* **12**, 1363 (1986).
- [7] Ф.Ф. Комаров, А.П. Новиков, В.С. Соловьев, С.Ю. Ширяев. *Дефекты структуры в ионно-имплантированном кремнии*. Минск (1990).
- [8] *Crystallization and related phenomenon in amorphous materials*. Symposium (Boston, MA, USA, 29.11–02.12.1993) Pittsburg PA, USA, MRS (1994).
- [9] L.T. Ghadderton, E. Johnson, T. Wohlenberg. *Rad. Eff.* **28**, 111 (1976).

- [10] D.I.R. Norris. *Rad. Eff.* **15**, 1 (1972).
- [11] Ю.В. Конобеев. *ФТТ* **20**, 5, 1560 (1978).
- [12] V.I. Emel'yanov. *Laser Phys.* **6**, 2, 423 (1996).
- [13] V.I. Emel'yanov. *Laser Phys.* **6**, 5, 971 (1996).
- [14] V.I. Emel'yanov, I.M. Panin. In: *Nanostructures. Physics and Technology-96. Int. Symposium. Abstracts of invited lectures and contributed papers* (Saint-Petersburg, Russia, June 1996). P. 155.
- [15] P. Bruesch. *Phonons. Lattice Dynamics and Models of Interatomic Forces.* Springer Verlag, Berlin (1982).
- [16] J. Kouke. *Phys. Rev.* **B47**, 13, 7700 (1993).
- [17] С.Т. Конобеевский. *Действие облучения на материалы.* Атомиздат, М. (1967).
- [18] V.K. Sikka, J. Moteff. *J. Nucl. Mater.* **54**. 325 (1974).