

На правах рукописи

*Богатырев*

Богатырев Илья Борисович

НАГРЕВ И РЕЛАКСАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ЗОНЕ  
ПРОВОДИМОСТИ ДИЭЛЕКТРИКА  
ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ФЕМТОСЕКУНДНЫМИ  
ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

Специальность 01.04.05 - Оптика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва 2010

Работа выполнена на кафедре оптики и спектроскопии физического факультета  
Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук  
Васильев Андрей Николаевич  
(НИИ ядерной физики МГУ имени Ломоносова)

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук  
профессор Тихонова Ольга Владимировна  
(Физический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова)

кандидат физико-математических наук  
Поварницын Михаил Евгеньевич  
(Объединенный институт высоких температур РАН)

Ведущая организация: Российский научный центр «Курчатовский институт»

Защита диссертации состоится 29 сентября 2010 года в 15 часов на заседании  
совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д.501.001.45 при  
Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: Россия,  
119991, г. Москва, Ленинские горы дом 1, строение 5 (19-ый корпус, НИИ ядерной  
физики имени Д. В. Скобельцына МГУ имени М. В. Ломоносова), аудитория 2-15.

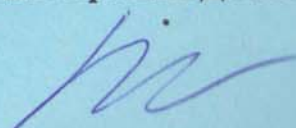
С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИИ ядерной физики имени  
Д. В. Скобельцына МГУ имени М. В. Ломоносова

Автореферат разослан 13.08 2010 года.

Ученый секретарь

совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д.501.001.45

кандидат физико-математических наук

 Вохник О. М.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы

Исследование нагрева и релаксации электронов в зоне проводимости диэлектрика при облучении фемтосекундными лазерными импульсами очень важно как для многочисленных применений, так и для понимания фундаментальных свойств диэлектрических материалов. Именно релаксация электронов в зоне проводимости диэлектрика определяет важные для практического применения свойства диэлектрических материалов. Такие материалы широко применяются в люминесцентных лампах, в качестве активных сред лазеров и как сцинтилляторы; современная техника постоянно ставит новые задачи их применения, поэтому изучение их фундаментальных свойств представляет большой интерес.

При облучении диэлектрика фемтосекундными лазерными импульсами открываются новые возможности изучения свойств диэлектрических материалов. Длительность фемтосекундного импульса мала по сравнению с характерными временами большинства релаксационных процессов, маскирующих прямую связь между энергетическим спектром фотоэлектронов, вылетающих из кристалла, и функцией распределения нагретых электронов внутри кристалла. Поэтому фотоэлектронные спектры, полученные с использованием фемтосекундных лазерных импульсов, непосредственно отражают особенности нагрева носителей заряда в зоне проводимости. Спектр электронов в таких условиях возбуждения позволяет сделать выводы о фундаментальных механизмах поглощения интенсивного света диэлектриком и рассмотреть подробнее многофотонное поглощение.

Знание механизмов взаимодействия лазерных импульсов с диэлектриками необходимо при изучении абляции, которая в последние годы является широко применяемым методом в нанотехнологиях. Область практического применения абляции необычайно широка: аналитическая химия, геохимия, а также техническая обработка поверхностей и нанотехнологии (например, при синтезе одностенных углеродных нанотрубок). Иногда абляция является негативным явлением (разрушение образцов, поверхностей), и необходимо знать механизм ее действия и критические параметры для предотвращения этого явления.

Поэтому в последние десять лет все более возрастает интерес к изучению диэлектриков при помощи интенсивных фемтосекундных лазерных импульсов. В частности, исследуются зависимости распределения электронов по энергии от

интенсивности фемтосекундного импульса, делаются попытки понять и смоделировать механизмы нагрева; активно изучается последующая релаксация, в том числе делаются оценки роли различных процессов рассеяния.

В связи с этим актуальным является изучение нагрева и релаксации электронов диэлектрика при облучении фемтосекундными лазерными импульсами, поскольку распределение электронов по энергии в различные моменты времени, в различных состояниях, во многом предопределяет поведение возбужденного диэлектрика и отражает особенности структуры зоны проводимости диэлектрика.

Поэтому данная работа посвящена теоретическому исследованию нагрева и релаксации электронов диэлектрика при облучении фемтосекундными лазерными импульсами.

#### **Цели и задачи работы:**

1. Провести оценку максимально возможного нагрева электронов в зоне проводимости диэлектрика при облучении фемтосекундными лазерными импульсами, используя модель гармонических осцилляторов. Рассчитать и исследовать распределения по энергии ансамбля гармонических осцилляторов после воздействия импульса.
2. Построить теоретическую модель нагрева электронов в зоне проводимости диэлектрика фемтосекундными лазерными импульсами, используя как входной параметр плотность состояний в зоне проводимости реального диэлектрика и основываясь на решении уравнения Шредингера. В качестве примера исследовать энергетические спектры неравновесных электронов в алмазе после его облучения фемтосекундным импульсом.
3. Обобщить модель нагрева электронов в диэлектрике, включив процессы рассеяния электронов на фононах и процессы неупругого электрон-электронного рассеяния, используя формализм уравнений для матрицы плотности.
4. Построить модель релаксации по энергии нагретых электронов в диэлектрике после окончания фемтосекундного импульса с учетом транспорта электронов к поверхности и определить характерные изменения энергетического спектра неравновесных электронов в процессе их движения из глубины диэлектрика к поверхности.

#### **Научная новизна работы**

- Подробно изучена теоретическая модель нагрева ансамбля гармонических осцилляторов под действием фемтосекундного импульса. Получено аналитическое

выражение для распределения осцилляторов по энергии по окончании импульса. На основе этой модели произведены оценки максимального нагрева электронов.

- На основе решения уравнения Шредингера построена модель нагрева электронов в зоне проводимости диэлектрика фемтосекундными лазерными импульсами, использующая в качестве входного параметра функцию плотности состояний электронов в зоне проводимости реального диэлектрика. Для построения системы энергетических уровней используется метод случайного выбора энергии уровней, а для оценки дипольных матричных элементов – правило сумм.
- На основе предложенной модели получены зависимости энергетического спектра неравновесных электронов в зоне проводимости диэлектрика в момент окончания фемтосекундного импульса от входящей интенсивности импульса. Выполнены расчеты для алмаза.
- На основе расчетов для алмаза, установлена закономерность существенного увеличения доли горячих электронов, имеющих энергию значительно выше порога неупругого электрон-электронного рассеяния, в распределении неравновесных электронов по энергии, при интенсивности импульса, превышающей  $3\text{ТВт/см}^2$ .
- Построена модель нагрева, учитывающая электрон-фононное и сильно неупругое электрон-электронное рассеяние возбужденных электронов, основанная на решении уравнений для матрицы плотности для возбужденных электронов в диэлектрике. Обобщенная модель нагрева позволяет учесть переходы с изменением квазиимпульса электрона.
- Построена модель релаксации по энергии возбужденных электронов в диэлектрике после окончания фемтосекундного лазерного импульса с учетом их переноса к поверхности диэлектрика, использующая в качестве входных параметров энергетический спектр возбужденных электронов по окончании импульса и характеристики процессов рассеяния.
- На основе предложенной модели релаксации установлена закономерность существенного уменьшения доли горячих электронов, имеющих энергию значительно выше порога неупругого электрон-электронного рассеяния, в процессе достижения поверхности диэлектрика.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Объем диссертации 118 страниц. Список литературы включает 101 наименование.

## Личный вклад автора

Автором диссертации были предложены методики и проведены все расчеты. Все изложенные выводы получены лично автором.

## Краткое содержание диссертации

Во введении сформулированы цели и задачи работы. Кратко изложено содержание диссертации. В первой главе дается обзор основных методов теоретического исследования нагрева и релаксации электронов в зоне проводимости диэлектрика при облучении фемтосекундными лазерными импульсами. Разобранные методы подробно анализируются с точки зрения целей данной диссертационной работы, рассматриваются их преимущества, и в то же время положения, требующие более тщательного анализа.

В разделе 1.1 разобраны теоретические методы расчета нагрева/ионизации в диэлектриках под воздействием лазерных импульсов. Первой разбирается модель Келдыша [1], как основополагающей работы для дальнейшего развития теории поглощения света веществом, и очень важной для данной диссертационной работы. Приводится формула (1) для вероятности многофотонной ионизации:

$$w = \frac{2}{9\pi} \omega \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/2} \Phi \left[ \left( 2 \left\langle \frac{\tilde{\Delta}}{\hbar\omega} + 1 \right\rangle - \frac{2\tilde{\Delta}}{\hbar\omega} \right)^{1/2} \right] \times \exp \left\{ 2 \left\langle \frac{\tilde{\Delta}}{\hbar\omega} + 1 \right\rangle \left( 1 - \frac{e^2 F^2}{4m\omega^2 \Delta} \right) \right\} \left( \frac{e^2 F^2}{16m\omega^2 \Delta} \right)^{\langle \frac{\tilde{\Delta}}{\hbar\omega} + 1 \rangle} \quad (1)$$

где  $w$  – вероятность многофотонного поглощения,  $\Phi$  – фурье-образ,  $\Delta$  - запрещенная зона,  $\tilde{\Delta} = \Delta + e^2 F^2 / 4m\omega^2$  запрещенная зона с поправкой,  $e$  – заряд электрона,  $F$  - амплитуда напряженности электрического поля лазера, а  $m$  – приведенная масса электрона и дырки,  $\omega$  - частота лазера. Отмечается ключевая роль последней скобки и ее степенного показателя. В работе [1] использовался «релятивистский» закон дисперсии для полупроводников, справедливый для прямозонных полупроводников с узкой запрещенной зоной. В диссертационной работе исследуются другие случаи, более характерные для широкозонных диэлектриков.

Далее в разделе 1.1 разбираются методы, использующие кинетические уравнения. Разбирается модель, использующая модификацию уравнения конечных разностей Фоккера-Планка [2], с учетом многофотонных спонтанных и индуцированных переходов:

$$\frac{\partial n(E,t)}{\partial t} = \sum_{k=1}^{N_k} \left\{ W_k^-(E+k\hbar\omega, I(t))n(E+k\hbar\omega, t) - W_k^-(E, I(t))n(E, t) \right\} + \theta(E-k\hbar\omega) \left\{ W_k^+(E-k\hbar\omega, I(t))n(E-k\hbar\omega, t) - W_k^+(E, I(t))n(E, t) \right\} - W_{loss} n(E, t) \theta(\hat{E}-E) \theta(E) \quad (2)$$

Для интенсивных лазерных импульсов подобные кинетические уравнения Больцмановского типа часто используются далеко за пределами применимости. Это уравнение имеет дополнительные ограничения. Первое, оно оперирует распределениями электронов по энергии и усредняет все величины и параметры по зоне Бриллюэна. Структура дисперсии энергий электрона не учитывается. Это корректно для медленных процессов, когда рассеяние на фононах приводит к перемешиванию состояний с различными квазиимпульсами, принадлежащих одной изоэнергетической поверхности. В диссертационной работе в третьей главе строится модель, позволяющая преодолеть эти ограничения.

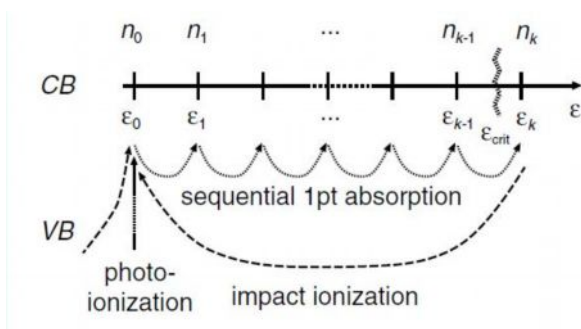


Рис. 1. Схема процесса ионизации к модели системы кинетических уравнений.

Далее рассматривается модель системы кинетических уравнений (МКУ), разработанная Rethfeld [3]. Особенностью этой работы является построение ионизационного цикла, который выглядит следующим образом, см. Рис. 1. В этой модели используются достаточно сильные приближения, требующие более подробного рассмотрения и исследования. Первое – такая схема предполагает эквидистантную систему уровней. Очевидно, что система уровней в диэлектрике далеко неэквидистантна, что существенно влияет на нагрев. Второе - электроны в этой системе уровней могут только нагреваться, не могут переходить вниз по энергии вплоть до достижения критической энергии. И третье, когда электрон достигает критического значения энергии, он порождает вторичный электрон, после чего оба электрона имеют одну и ту же начальную энергию - оба находятся на дне зоны проводимости.

В конце раздела рассматривается метод теоретического исследования нагрева основанный на квантово-механических уравнениях. Именно на основе этого подхода

строятся исследования в третьей и пятой главах данной диссертационной работы. В основе метода лежит нестационарное уравнение Шредингера (TDSE, Time Dependent Schrödinger Equation):

$$i\hbar \frac{\partial \alpha_k^i(t)}{\partial t} = E_k^i \alpha_k^i(t) + \frac{e}{mc} \mathbf{A}(t) \sum_{j=1}^{\infty} \mathbf{p}_k^{ij} \alpha_k^j(t) \quad (3)$$

где  $\mathbf{A}(t)$  - векторный потенциал поля лазера, зависящий от времени,  $\mathbf{p}_k^{ij} = -i\hbar \langle \theta_k^i(\mathbf{r}) | \nabla | \theta_k^j(\mathbf{r}) \rangle$  - матричный элемент перехода в импульсном представлении.

Это приближение TDSE может использоваться для сильных полей без ограничений на время между конкретными взаимодействиями, т. е. далеко за пределами приближения Больцмана. В работе [4] получено, что далеко не все k-точки в зоне Бриллюэна способствуют нагреву. TDSE описывает не только реальные переходы между уровнями, но и виртуальные переходы тоже. Поэтому в модели отсутствуют резонансные условия для промежуточных состояний, участвующих в процессе нагрева. Кинетические уравнения типа (2) описывают только реальные переходы между состояниями. Можно ожидать, уравнение (3), учитывающее как реальные, так и виртуальные переходы, будет намного точнее при описании взаимодействия с короткими импульсами. Это будет использоваться при построении модели в третьей главе данной диссертационной работы.

В разделе 1.2 рассматриваются основные теоретические методы исследования распространения и релаксации электронных возбуждений в диэлектрике. При этом необходимо учитывать изменение со временем функций распределения как по энергии, так и в пространстве, то есть при движении из глубины диэлектрика к поверхности. Релаксация происходит в результате как рассеяния на фононах, так и электрон-электронного рассеяния (когда высокоэнергетичный электрон рождает электрон-дырочную пару). Этот этап является неотъемлемым для сравнения с экспериментальными результатами, поскольку в эксперименте можно измерить только энергии электронов, вылетевших с поверхности.

Смешанное состояние квантово-механической системы должно описываться квантово-механической матрицей плотности. В данном случае квантово-механическая система - это электронные возбуждения в зоне проводимости диэлектрика. На основе работы [5] дается пример введения вспомогательной фононной матрицы для описания релаксации. Такой подход не является эквивалентом подхода для матрицы плотности электронных возбуждений, но тем не менее дает адекватное описание процессов релаксации с учетом рассеяния на фононах. Отказ авторов [5] от учета электрон-



электронного взаимодействия и многофотонного поглощения требует более тщательного анализа, что будет обсуждаться в четвертой главе диссертации. Далее приводятся оценки эффективности электрон-фононного рассеяния.

В разделе 1.3 дается полная постановка задачи диссертационной работы.

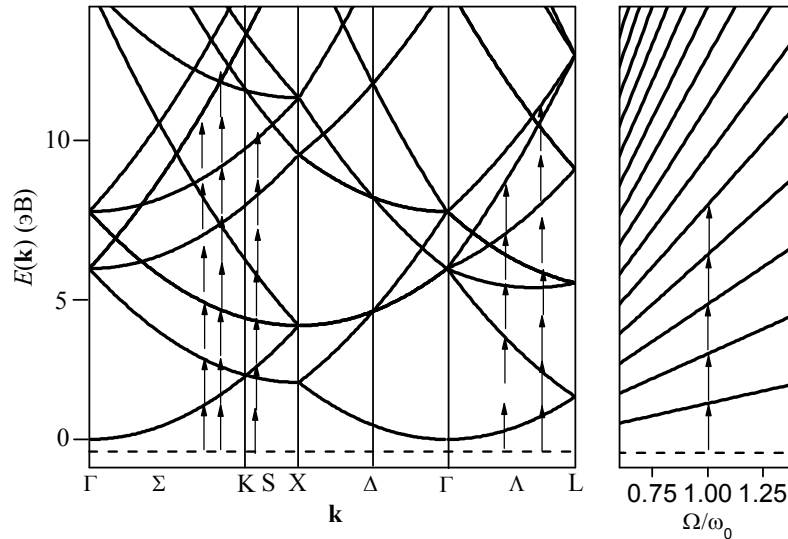


Рис. 2. Энергетическая структура зоны проводимости в модели почти свободных электронов для ГЦК решетки с постоянной решеткой, соответствующей кристаллу CsI (слева) и в модели ансамбля осцилляторов (справа). Пунктирной линией изображен уровень дефекта, отщепленный от зоны проводимости. Стрелками показаны переходы под действием света, приводящие к интенсивному нагреву электронов.

**Во второй главе** производится оценка сверхху нагрева электронов диэлектрика при помощи модели ансамбля гармонических осцилляторов. Эта глава отражает первый этап работы над задачей, в котором автор пытался провести аналитические оценки. В разделе 2.1 проводится анализ возможностей ансамбля гармонических осцилляторов для оценки сверхху нагрева электронов диэлектрика. В этом разделе сравниваются схемы (Рис. 2) для энергетической структуры зоны проводимости CsI и ансамбля гармонических осцилляторов, равномерно распределенных по энергии осциллятора. Устанавливается, что эффективный нагрев возможен в обоих случаях только при таких значениях квазиимпульса  $k_i$ , при которых уровни  $E_j(k_i)$  расположены на расстояниях, приблизительно кратных энергии фотона (показаны стрелками на левой части Рис. 2).

Нагрев при таких значениях квазиимпульса (при которых уровни  $E_j(k_i)$  расположены на расстояниях, приблизительно кратных энергии фотона) может быть смоделирован переходами в системе эквидистантных уровней, то есть в гармонических осцилляторах, частоты которых распределены непрерывно (правая часть Рис. 2). Такой подход наследует некоторые черты эквидистантной схемы уровней, используемой в модели МКУ, и в то же время более полно учитывает квантово-механические эффекты (в частности, спонтанные и вынужденные переходы и т.д.). Включение в ансамбль осцилляторов с частотой, отличающейся от средней частоты поля, позволяет исследовать как вклад резонансных, так и нерезонансных переходов.

В разделе 2.2 выводится аналитическое решение для нагрева ансамбля гармонических осцилляторов. Данная техника восходит к работам Фейнмана [6]. В результате для ансамбля осцилляторов, частоты которых распределены непрерывно с плотностью  $w(\Omega)$  (где  $\int_0^{\infty} w(\Omega) d\Omega = 1$ ), удается получить следующее выражение для распределения по энергии (4):

$$N_{tot}(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} w\left(\frac{E}{\hbar n}\right) \left[ \rho\left(\frac{E}{\hbar n}\right) \right]^n \exp\left(-\rho\left(\frac{E}{\hbar n}\right)\right), \quad (4)$$

$$\text{где } \rho(\Omega) = \frac{4\pi e^2 I_0}{m c \hbar \omega_0^3} \frac{\omega_0 (3n_f^2 \Omega^2 \omega_0^{-2} + (n_f - 1)^2) \sin^2(\pi n_f \Omega / \omega_0)}{\Omega (1 - \Omega^2 \omega_0^{-2})^2 ((n_f - 1)^2 - n_f^2 \Omega^2 \omega_0^{-2})^2 ((n_f + 1)^2 - n_f^2 \Omega^2 \omega_0^{-2})^2}.$$

Если предполагать, что ширина  $\Delta\Omega$  распределения  $w(\Omega)$  много больше спектральной ширины импульса, то форма распределения  $N_{tot}(E)$  не будет зависеть от ширины этого распределения осцилляторов по частотам. Что касается общей амплитуды  $N_{tot}(E)$ , то она будет, естественно, уменьшаться с ростом  $\Delta\Omega$ , что соответствует уменьшению доли осцилляторов, примерно находящихся в резонансе с основной частотой лазерного импульса. Поскольку разброс частот осцилляторов  $\Delta\Omega$  должен соответствовать разбросу расстояний между ветвями зоны проводимости, то разумно предположить, что  $\Delta\Omega \sim \omega_0 \gg \omega_0/n_f$ .

В разделе 2.3 приводятся результаты расчета нагрева ансамбля гармонических осцилляторов по формуле (4), и проводится их анализ. Приведен график расчета нагрева для четырех различных интенсивностей 0,3; 1; 3 и 10 ТВт/см<sup>2</sup> при длительности импульса 40 фс (см. Рис. 3).

Результаты этих расчетов показывают, что высокоэнергетичные электроны (с энергией больше 10 эВ) появляются уже при интенсивностях порядка 1 ТВт/см<sup>2</sup>,

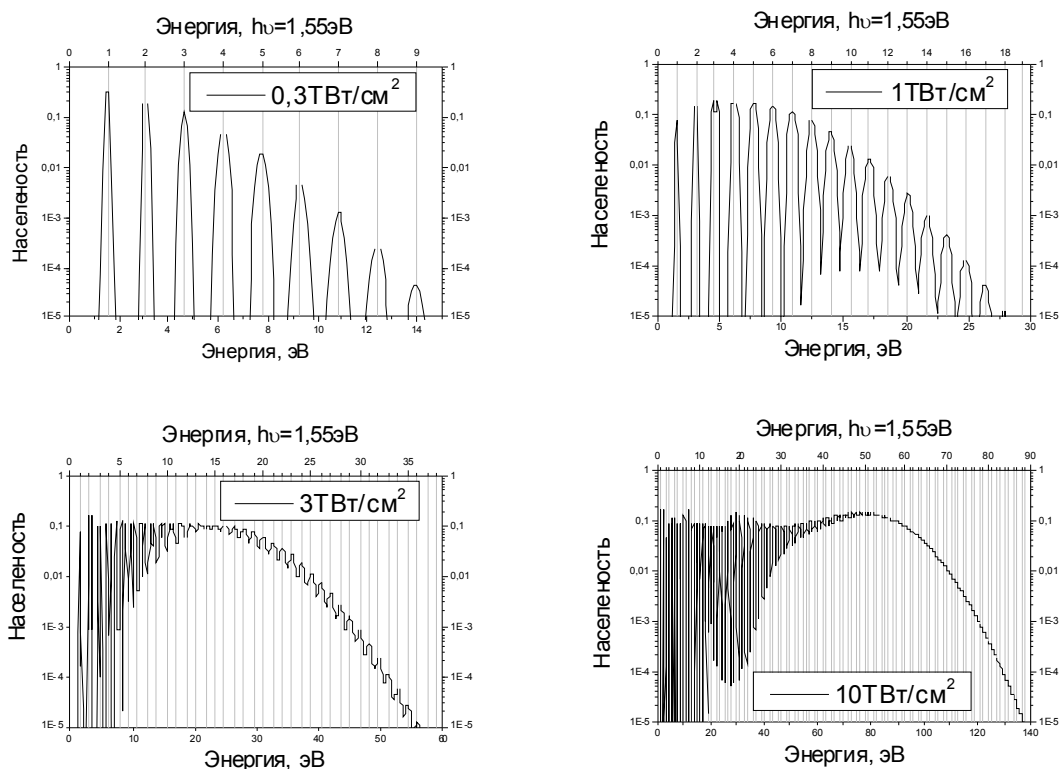


Рис. 3. Распределения системы осцилляторов по энергии, получающиеся при различной интенсивности фемтосекундного возбуждающего импульса.

что намного ниже, чем в эксперименте. Это различие связано с двумя факторами. Во-первых, в модели осцилляторов единственными возможными оказываются переходы на соседний уровень (правила отбора для осциллятора указывают на возможность переходов с изменением  $n$  только на единицу), поэтому матричные элементы перехода оказываются переоцененными по сравнению с реальной ситуацией. Во-вторых, модель осцилляторов излишне «регулярна»: если переходы находятся в резонансе при низких энергиях, то они остаются в резонансе и при высоких энергиях, что способствует переоценке нагрева. Однако качественно появление высокоэнергетических электронов согласуется как с экспериментом [3,7,8], так и с ранее проведенными расчетами нагрева [3,9]. Число точек в зоне Бриллюэна, которые могут быть сопоставлены квазиэквидистантным уровням, относительно небольшое, остальные точки будут определять низкоэнергетическую часть распределения электронов в зоне проводимости.

**В третьей главе** строится модель нагрева электронов в зоне проводимости диэлектрика через случайные уровни. В разделе 3.1 формулируется постановка задачи для создания модели нагрева, рассматриваются, какие процессы будут учитываться.

В разделе 3.2 строится модель, использующая случайные уровни для решения задачи, поставленной в 3.1. Модель основана на нестационарном уравнении Шрёдингера (TDSE). Известно, что после решения уравнения Шрёдингера во всех возможных точках зоны Бриллюэна, необходимо произвести интегрирование по всей зоне. Такое интегрирование может быть проведено путем суммирования по случайному набору точек в  $k$ -пространстве (аналог метода Монте-Карло). В этих случайных точках и уровни энергии можно считать случайными величинами, лишь бы при суммировании воспроизводились основные параметры электронной структуры, в частности, плотность состояний. Предлагаемый подход расширяет метод TDSE для случаев, когда структура электронных уровней не может быть найдена (например, структура очень сложная).

Принимая во внимание, что нагрев может происходить только в нескольких  $k$ -точках с удачным набором уровней, мы предлагаем использовать действительно случайный набор уровней для любой реализации  $k$ -точки в любых специальных корреляциях в расположении уровней. При этом распределение по энергии этих уровней соответствует плотности состояний  $g(E)$  и количество этих уровней

удовлетворяет бы уравнению 
$$N_{\text{levels}}(E) = \frac{v}{V} \int_0^E g(E') dE' = \frac{v(2m)^{3/2}}{6\pi^2 \hbar^3} E^{3/2}.$$
 В этом случае  $k$

становится просто индексом реализации случайного набора уровней во всем ансамбле.

В разделе 3.3 приведены результаты расчетов. При моделировании мы рассматривали возбуждение диэлектрика 40 фемтосекундным титан-сапфировым лазером (длина волны 800 нм, энергия фотона 1.55 эВ). Получающиеся энергетические спектры неравновесных электронов в конце лазерного импульса ( $t=T$ ) для различных интенсивностей лазера и разных постоянных решетки (т. е. плотности состояний) представлены на (Рис. 4).

Для самой низкой интенсивности (Рис. 4) показывает пики соответствующие населенности уровней около резонансных энергий  $n\hbar\omega$ . Эта структура спектра нагретых электронов ожидалась для возмущенного режима. Интенсивность пиков уменьшается экспоненциально с номером пика  $n$ . Для высоких интенсивностей сингулярности в спектре электронов становятся менее заметны. При интенсивности  $10 \text{ ТВ}/\text{см}^2$  в спектре появляется плато.

На (Рис. 5) представлены результаты расчета нагрева электронов в алмазе. Алмаз интересен для расчетов наличием провала в плотности состояний в зоне проводимости. В нижней части рисунка показана плотность состояний алмаза, а в верхней представлены распределения электронов по энергии после воздействия импульса. Расчеты были выполнены для интенсивности импульса от 1,7 до 50 ТВт/см<sup>2</sup>

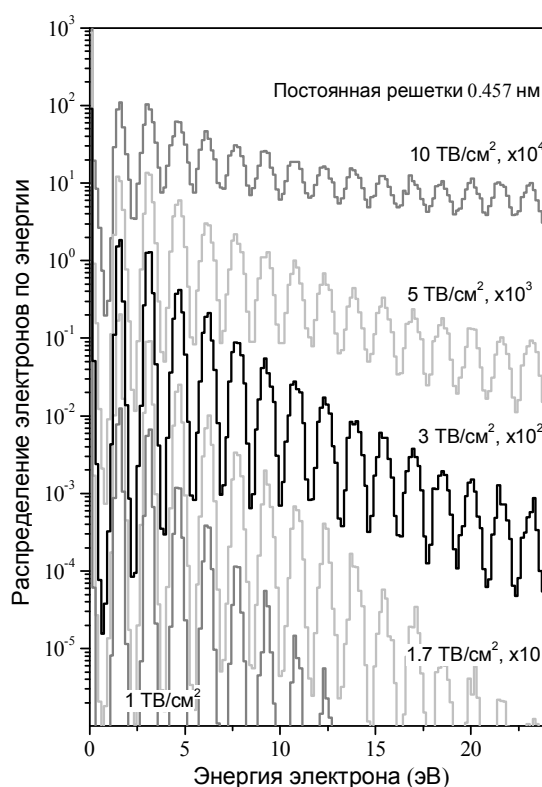


Рис. 4. Распределения электронов по энергии при различных интенсивностях фемтосекундного импульса.

При умеренных интенсивностях поля лазера основное изменение спектра фотоэлектронов может быть описано как рост широкого пика ниже 10эВ. При более высоких интенсивностях появляется дополнительный высокоэнергетичный пик при 16эВ. Нагрев электронов выше 20эВ достигается при 30ТВт/см<sup>2</sup> это выше, чем наблюдается в эксперименте (6ТВт/см<sup>2</sup>). Это объясняется недооценкой матричных элементов в случае алмаза.

**В главе 4** рассматривается релаксация по энергии нагретых электронов в диэлектрике. Изучаются изменения энергетического спектра неравновесных электронов одновременно с изменением их пространственного положения. При таком подходе можно связать энергетическое распределение электронов у поверхности с их

распределением в объеме кристалла. В разделе 4.1 рассматриваются процессы релаксации, изменяющие распределение неравновесных электронов по энергии. Основными полагаются процессы электрон-электронного и электрон-фононного рассеяний, характеризующиеся средней длиной свободного пробега  $\lambda_e$  и  $\lambda_{ph}$

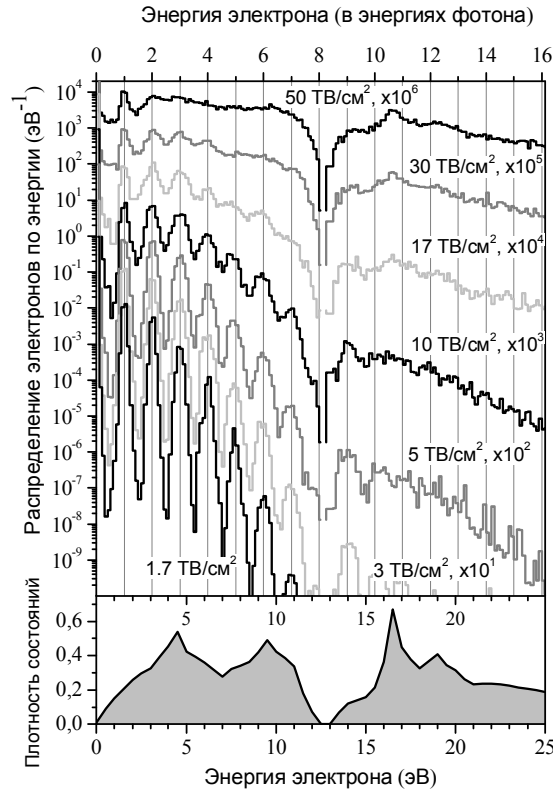


Рис. 5. Распределения электронов по энергии при различных интенсивностях фемтосекундного импульса (вверху) функция плотности состояний алмаза (внизу).

В полубесконечном кристалле электрон может сместиться на расстояние  $z$  с вероятностью  $\exp(-[\lambda_e^{-1}(E) + \lambda_{ph}^{-1}(E)]z/\cos\theta)$ . Поэтому электрон с энергией  $E$  в точке  $z$  дает следующее распределение электронов по энергии в точке  $z'$ :

$$K(E', z'; E, z) = \frac{\lambda_{ph}^{-1}(E)g_{ph}(E', E) + \lambda_e^{-1}(E)g_e(E', E)}{\lambda_e^{-1}(E) + \lambda_{ph}^{-1}(E)} \frac{1}{2} \left\{ \int_0^\pi \sin\theta d\theta \exp(-[\lambda_e^{-1}(E) + \lambda_{ph}^{-1}(E)]|z - z'|/\cos\theta) + \int_0^\pi \sin\theta d\theta \varphi(E, \theta) \exp(-[\lambda_e^{-1}(E) + \lambda_{ph}^{-1}(E)](z + z')/\cos\theta) \right\}. \quad (5)$$

Таким образом, пространственное распределение электронов по энергии после  $n$  рассеяний описывается следующим рекуррентным соотношением:

$$f_n(E, z) = \int_E^{E_{\max}} dE' \int_0^{\infty} dz' K(E, z; E', z') f_{n-1}(E', z') \quad (6)$$

Такой подход позволяет вместо решения уравнений с частной производной по времени описать распределение после  $n$  актов рассеяния.

В разделе 4.2 приводятся результаты расчетов релаксации. Сначала были произведены расчеты релаксации для однородного начального возбуждения кристалле с шириной запрещенной зоны, равной 5 эВ (как в алмазе), как результат расчета фиксировалось распределение электронов по энергии вблизи поверхности. Результаты расчетов представлены для интенсивностей от 2,75эВ до 27,5эВ на (Рис. 6).

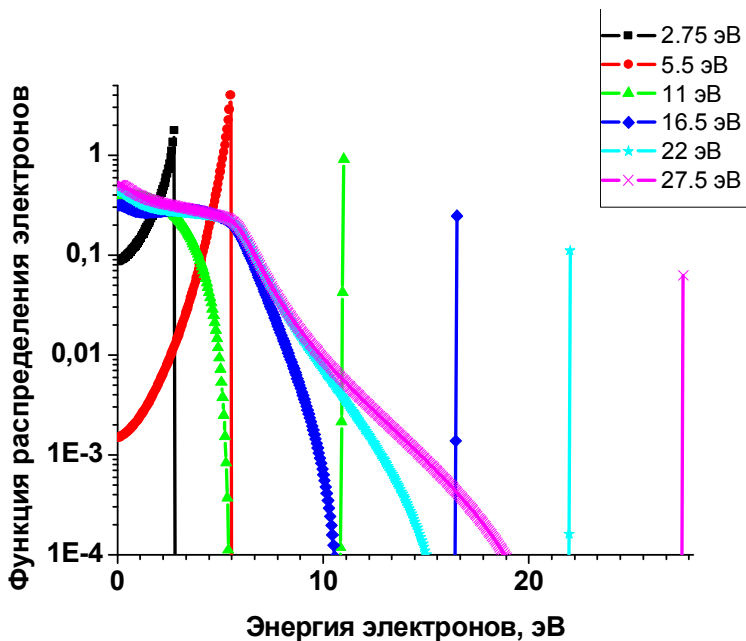


Рис. 6. Распределения электронов по энергии вблизи поверхности после релаксации в модельном кристалле для начальных энергий 2,75-27,5эВ; начальное распределение однородно по объему диэлектрика, все свободные электроны имеют в начальный момент времени одинаковую начальную энергию.

На Рис. 6 мы видим, что увеличение энергии первичных электронов не приводит к увеличению вторичных электронов в низкоэнергетической области (3-4эВ), а приводит к увеличению доли высокоэнергетичных вторичных электронов. Также виден порог появления вторичных электронов, он соответствует ширине запрещенной зоны, и знаем, что на энергиях выше запрещенной зоны, доля электронов начинает резко убывать.

На Рис. 7 хорошо заметно, как сильно снижается энергия в высокоэнергетичной части, также сильно уменьшается амплитуда осцилляций во всем распределении. В

низкоэнергетичной части в результате релаксации распределение становится практически равномерным, это связано образованием вторичных электронов (за счет электрон-электронного рассеяния), а также с фононным рассеянием.

В пятой главе обсуждаются перспективы дальнейшего развития модели нагрева и релаксации электронов в зоне проводимости диэлектрика. Основная идея связана с использованием матрицы плотности электронных и дырочных возбуждений диэлектрика. Такая модель обладает преимуществами моделей развитых в предыдущих главах и позволяет учесть новые явления, в частности переходы с изменением квазиимпульса (невертикальные переходы).

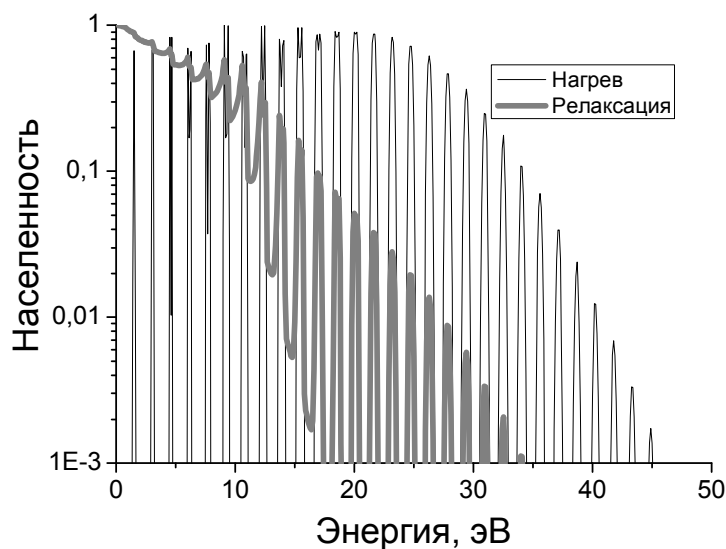


Рис. 7. Распределение нагретых электронов по энергии в модели осциллятора (в полулогарифмическом масштабе) сразу после окончания фемтосекундного импульса (верхний график) и после вылета с поверхности с учетом релаксации на фонах и с учетом создания вторичных электронов (нижний график) для  $W=0.3 \text{ ТВт/см}^2$ .

В заключении сформулированы основные результаты работы:

- 1) Построена теоретическая модель нагрева для ансамбля гармонических осцилляторов. Получено аналитическое выражение для конечного распределения осцилляторов по энергии. Произведены оценки предельного нагрева электронов в диэлектрике.
- 2) Построена модель нагрева электронов в зоне проводимости диэлектрика фемтосекундными лазерными импульсами, использующая как входной параметр функцию плотности состояний реального диэлектрика и как основу модели –



решение уравнения Шредингера. Модель использует новый метод «случайных уровней» для решения уравнения Шредингера.

- 3) На основе новой модели получены зависимости энергетического спектра электронов диэлектрика в момент окончания фемтосекундного импульса от интенсивности возбуждающего импульса. Установлена закономерность образования высокоэнергетичной части из горячих электронов в хвосте энергетического распределения при интенсивностях, превышающих  $3\text{ТВт/см}^2$ . Выполнены расчеты для алмаза.
- 4) Новая модель нагрева обобщена для применения к матрице плотности электронных возбуждений диэлектрика. Обобщенная модель нагрева позволяет учесть переходы с изменением квазиимпульса электрона.
- 5) Построена квантово-механическая модель релаксации по энергии электронов в диэлектрике с учетом их миграции по объему и с выходом на поверхность, использующая, как входные параметры, начальный энергетический спектр и характеристики процессов рассеяния.
- 6) На основе модели релаксации произведена оценка перераспределения энергии электронов из горячей области в более низкоэнергетическую в процессе достижения поверхности диэлектрика.

#### Список публикаций

- A1. Богатырев И. Б., Васильев А. Н., Попов Ю. В. «Использование модели переходов в системе гармонических осцилляторов под воздействием интенсивного фемтосекундного лазерного импульса для оценки предельного нагрева электронов в диэлектриках» **Вестник Московского Университета**. Серия 3. Физика. Астрономия. **4** с.103-106 (2009);
- A2. H. Bachau, A.N. Belsky, I.B. Bogatyrev, J. Gaudin, G. Geoffroy, S. Guizard, P. Martin, Yu.V. Popov, A.N. Vasil'ev, B.N. Yatsenko “*Electron heating through a set of random levels in the conduction band of insulators induced by femtosecond laser pulses*” **Appl. Phys. A** **98**, p.679-689 (2010)
- A3. I. B. Bogatyrev, A. N. Vasil'ev “*Electron heating through a set of random levels in the conduction band of insulators*”, **LOYS-2006 Technical digest** (Сборник тезисов докладов) p.36, LOYS-2006. Oral sessions. (WeS3-02) (Лазерная оптика для молодых ученых, Санкт-Петербург, Россия);
- A4. Васильев А. Н., Богатырев И. Б. «*Релаксация электронов в диэлектрике после нагрева мощным фемтосекундным инфракрасным импульсом: фононное рассеяние и*

Напечатано с готового оригинал-макета

Издательство ООО "МАКС Пресс"

Лицензия ИД N 00510 от 01.12.99 г.

Подписано к печати 11.08.2010 г.

Формат 60x90 1/16. Усл.печ.л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ 353.

Тел. 939-3890. Тел./Факс 939-3891

119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В. Ломоносова,  
2-й учебный корпус, 627 к.