РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

2011 ТРУДЫ ИНСТИТУТА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ им. А.М. ПРОХОРОВА Том 67

УДК 544.032.65

С.В. ГАРНОВ, А.С. ЕПИФАНОВ, А.М. НИКИФОРОВ

ВЛИЯНИЕ НАГРЕВА ФОНОННОГО СПЕКТРА НА ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОЛЕМ ЛАЗЕРА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛАЗМЫ В ШИРОКОЗОННЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

Ключевые слова: прозрачные твёрдые диэлектрики, собственные механизмы оптического пробоя, ударная лавинная ионизация, разогрев кристаллической решётки
Keywords: transparent solids, intrinsic damage mechanisms, avalanche ionization, lattice heating

Анализ разогрева решётки является неотъемлемой частью исследований по проблеме лазерного разрушения оптических материалов. Уже в «долазерную» эпоху стало понятно, что в методологическом отношении полезно произвести разделение процесса пробоя твёрдых диэлектриков на две стадии: потерю электрической прочности и, как следствие, этап, сопровождающийся необратимыми изменениями материала [1]. В настоящее время благодаря бурному развитию техники генерации ультракоротких импульсов [2, 3] такое разделение представляется тем более естественным ввиду того, что в подавляющем числе экспериментов по лазерному разрушению разница во временных масштабах этих стадий оказывается весьма значительной.

На фоне обширной литературы, посвященной разрушению прозрачных твёрдых диэлектриков после действия лазерного импульса, обращает на себя внимание недостаточное количество публикаций, в которых разрабатывается вопрос о влиянии разогрева решётки на динамику генерации свободных носителей заряда и перераспределение поглощённой энергии между газом электронов проводимости и решёткой за период взаимодействия материала с излучением. На необходимость такого рода исследований указывает и возможность идентификации доминирующего механизма пробоя на основании анализа температурных зависимостей порога лазерного разрушения (минимального пикового значения напряжённости поля в центре каустики, необходимого для разрушения в одной вспышке).

В работе [4] было получено численное решение квантового кинетического уравнения (см. [5, 6])

$$g(\varepsilon_p)\frac{\partial f(\varepsilon_p,t)}{\partial t}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\vec{k}}B(k)\sum_{l=-\infty}^{\infty}\int_{-1}^{1}J_l^2\left(\frac{eEk\chi}{\hbar m\Omega\sqrt{\left[\tau_p^{-1}\right]^2+\Omega^2}}\right)d\chi\times$$
$$\times\Big\{\left[g(\varepsilon_{\mathbf{p+k}})f(\varepsilon_{\mathbf{p+k}},t)(N_k+1)-g(\varepsilon_p)f(\varepsilon_p,t)N_k\right]\delta(\varepsilon_{\mathbf{p+k}}-\varepsilon_p-\hbar\omega_k-l\hbar\Omega)+$$
$$+\left[g(\varepsilon_{\mathbf{p+k}})f(\varepsilon_{\mathbf{p+k}},t)N_k-g(\varepsilon_p)f(\varepsilon_p,t)(N_k+1)\right]\delta(\varepsilon_{\mathbf{p+k}}-\varepsilon_p+\hbar\omega_k-l\hbar\Omega)\Big\}, \quad (1)$$

описывающего эволюцию функции распределения электронов по энергии $f(\varepsilon_p, t)$, и приведена рабочая схема учёта нагрева решётки. В (1) использованы обозначения: $g(\varepsilon_p)$ — плотность состояний по шкале энергий; ε_p — энергия электрона с импульсом $\mathbf{p}$; $\hbar\omega_k$ — энергия фонона с импульсом $\mathbf{k}$; $B(k)$ — квадрат модуля матричного элемента электрон-фононного взаимодействия, зависящий от типа механизма рассеяния; $J_l(\ldots)$ — функция Бесселя целого порядка вещественного аргумента, $l = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ — число участвующих в процессе фотонов с энергией $\hbar\Omega$; E — амплитуда порогового поля; τ_p^{-1} — частота электрон-фононных столкновений; N_k — число заполнения фононов в состоянии с импульсом $\mathbf{k}$; m — эффективная масса электрона зоны проводимости; χ — косинус угла между напряженностью электрического поля и импульсом фонона. В течение импульса в процессе лавинной ударной ионизации область взаимодействия разогревается, возмущение фононного спектра отражается на вероятностях электрон-фононных и электрон-фонон-фотонных процессов, что, в свою очередь, сказывается на динамике нелинейного поглощения энергии из поля и величине энергетических потерь электронов проводимости. В зависимости от длительности лазерного импульса и от того, насколько активно возмущаемые электронной подсистемой эффективные фононы взаимодействуют с другими фононами, перераспределяя поступающую энергию, при исследовании динамики генерации электронов необходимо правильно выбрать способ учёта разогрева решётки. В настоящей статье мы рассмотрим проблему выбора схемы включения в процедуру моделирования электронной лавины [4] разогрева решётки и произведём сравнительный анализ результатов, полученных в предположении «холодной» решётки, с результатами моделирования с учётом её разогрева в течение импульса.

Частота электрон-фононных столкновений является функцией энергии электрона и определяется механизмом рассеяния [7] (поляризационное рассеяние на оптических фононах (PO), рассеяние на деформационном потенциале оптических фононов (DO), пьезоакустическое рассеяние (PA) и рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов (DA)). Скорость изменения импульса электрона задаётся уравнением (см., например, [6])

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}}B(k)[\mathbf{p}'-\mathbf{p}]\sum_{l=-n}^{n}\Upsilon_l(k)\times$$
$$\times\left[N_k\delta\left(\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_p-\hbar\omega_k-l\hbar\Omega\right)+\left(N_k+1\right)\delta\left(\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_p+\hbar\omega_k-l\hbar\Omega\right)\right],\qquad(2)$$

где $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ — импульс электрона до и после рассеяния соответственно,

$$\Upsilon_l(k)=\int_{-1}^{1}J_l^2\left(\frac{eEk\chi}{\hbar m\Omega\sqrt{\left[\tau_p^{-1}\right]^2+\Omega^2}}\right)d\chi.$$

Уравнение (2) дополняет квантовое кинетическое уравнение (1) при исследовании ударной лавинной ионизации. Из него определяется время релаксации продольной компоненты импульса электрона τ_p в присутствии поля лазера, которое можно представить в виде

$$\tau_p^{-1}=\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}\left(1+\frac{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(\mathrm{EMF})}}{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}}\right),$$

где сомножитель $[\tau_p^{-1}]^{(0)}$ определяет время релаксации без учёта поля, а член $[\tau_p^{-1}]^{(\mathrm{EMF})}$ отвечает квадратичной по полю поправке:

$$\frac{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(\mathrm{EMF})}_{\mathrm{DO}}}{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{DO}}}=\frac{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(\mathrm{EMF})}_{\mathrm{DA}}}{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{DA}}}=\frac{8\sigma m\varepsilon}{3}\left\{\sqrt{1-\frac{\hbar\Omega}{\varepsilon}}+\sqrt{1+\frac{\hbar\Omega}{\varepsilon}}-2+\frac{5}{8}\frac{\hbar\Omega}{\varepsilon}\left[\sqrt{1+\frac{\hbar\Omega}{\varepsilon}}-\sqrt{1-\frac{\hbar\Omega}{\varepsilon}}\right]\right\},$$
$$\frac{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(\mathrm{EMF})}_{\mathrm{PO}}}{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{PO}}}=\frac{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(\mathrm{EMF})}_{\mathrm{PA}}}{\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{PA}}}=2\sigma m\varepsilon\left\{\sqrt{1-\frac{\hbar\Omega}{\varepsilon}}+\sqrt{1+\frac{\hbar\Omega}{\varepsilon}}-2\right\},$$

где для случая $\Omega\tau_p>>1$ множитель $\sigma=\frac{1}{6}\left(\frac{eE}{m\hbar\Omega^2}\right)^2$. Поскольку поправки невелики, будем предполагать, что $\tau_p^{-1}=[\tau_p^{-1}]^{(0)}$. Тогда

$$\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{PO}}=\frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar^4}B_1\hbar\omega(2N+1)\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\left[1+\frac{\hbar\omega}{(2N+1)2\varepsilon}\ln\frac{4\varepsilon}{\hbar\omega}\right],\qquad(3а)$$

$$\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{DO}}=\frac{\sqrt{(2m)^3}}{\pi\hbar^4}\frac{B_2}{\hbar\omega}(2N+1)\sqrt{\varepsilon},\qquad(3б)$$

$$\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{PA}}=\frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar^4}B_3\frac{k_{\mathrm{B}}T}{s}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}},\qquad(3в)$$

$$\left[\tau_p^{-1}\right]^{(0)}_{\mathrm{DA}}=\frac{4m\sqrt{2m}}{\pi\hbar^4}B_4\frac{k_{\mathrm{B}}T}{s}\sqrt{\varepsilon}.\qquad(3г)$$

Запуску моделирования [4] предшествует инициализация массива «поправочных» коэффициентов: i-й энергетической ячейке согласно (3а)–(3г) ставится в соответствие значение $[\tau_p^{-1}]^{(0)}(\varepsilon_i)$, нормированное на опорное время розыгрыша (10^{-15} с). При прогонке программы с учётом разогрева решётки аналогичным образом используются зависимости $[\tau_p^{-1}]^{(0)}(T)$. Результаты симуляции, произведённой как с учётом зависимостей $[\tau_p^{-1}]^{(0)}(\varepsilon_i)$ и $[\tau_p^{-1}]^{(0)}(T)$, так и в предположении постоянства частот электрон-фононных столкновений, практически не отличаются, несмотря на достаточно большое число актов рассеяния, предшествующих событию ионизации. Это обстоятельство позволяет в целях сокращения времени счёта при розыгрыше не принимать во внимание указанные зависимости. Однако следует иметь в виду, что соотношения (3а)–(3г) оказываются полезными при выборе схемы учёта нагрева решётки для заданного диэлектрика в случае нескольких эффективных механизмов рассеяния электронов на фононах.

Обратимся к случаю, когда эффективный отбор энергии из поля лазера обеспечивается благодаря двум типам электрон-фононных процессов: в частности, для щелочно-галлоидных кристаллов [8] и SiO_2 [9, 10] этими механизмами являются DA- и PO-рассеяние. Свойства SiO_2 интенсивно изучались в контексте проблемы лазерного разрушения (см. например [9–14]), поэтому последующие рассуждения для определённости будем относить к SiO_2.

Частота столкновений горячих электронов с акустическими фононами для SiO_2 на порядок выше, чем с оптическими (см., например, [11]), поэтому трудно заранее предвидеть, рассеяние на фононах какого типа ведёт к большим энергетическим потерям. Это обстоятельство, по-видимому, оправдывает выбор фонона с энергией около 0.03 эВ в качестве эффективного в работах [12, 13]. Высокоэнергетической оптической моде отвечает $\hbar\omega_H = 0.153$ эВ, низкоэнергетическим оптическим фононам $\hbar\omega_L = 0.063$ эВ [10]. Матричный элемент для PO-рассеяния пропорционален энергии фонона [7, 10], поэтому столкновения электронов с фононами низкоэнергетической моды происходят приблизительно в $\omega_H/\omega_L \approx 2.4$ раза реже, чем с фононами высокоэнергетической оптической моды $\{j_1\mathbf{k}_1\}$ (j_1 — поляризация, $\mathbf{k}_1$ — импульс). Следует ожидать, что последняя будет возмущена сильнее. Установление равновесия в этой области фононного спектра через трёхфононные процессы может достигаться лишь благодаря распаду на оптический фонон того же сорта и длинноволновый акустический фонон. Таким образом, взаимодействующая с электронами фононная подсистема не успевает перераспределять передаваемую ей энергию между всеми фононными модами; в результате разогреваются главным образом эффективные фононы, и этот разогрев косвенно влияет на скорость развития лавины, изменяя вероятности процессов рассеяния.

Пусть $N_{j\mathbf{k}} = \langle N_{j\mathbf{k}}\rangle\left[1+\dfrac{\nu_{j\mathbf{k}}}{\langle N_{j\mathbf{k}}\rangle}\right]$. Здесь $N_{j\mathbf{k}}$ — число заполнения возмущённой моды $\{j\mathbf{k}\}$, $\langle N_{j\mathbf{k}}\rangle$ и $\nu_{j\mathbf{k}}$ — её равновесная и неравновесная составляющие. Считаем, что возмущение мало $\nu_{j\mathbf{k}}/\langle N_{j\mathbf{k}}\rangle << 1$. Кинетическое уравнение Больцмана для моды $\{j_1\mathbf{k}_1\}$ имеет вид

$$\frac{\partial\nu_{j_1\mathbf{k}_1}(t)}{\partial t} = \sum_i I_{\mathrm{col}}^{(i)}. \tag{4}$$

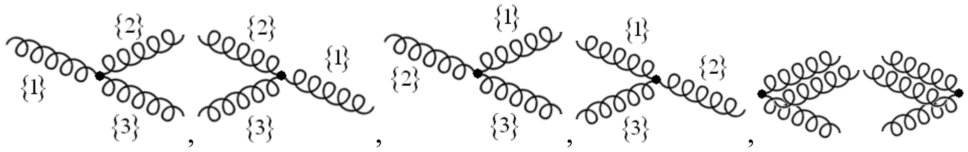
Здесь $I_{\mathrm{col}}^{(i)}$ — интеграл столкновений, обусловленный процессами i-го типа взаимодействия фононов с электронами и друг с другом. Записывая для процессов фонон-фононного рассеяния $I_{\mathrm{col}}^{(i)}$, всеми неравновесностями, кроме $\nu_{j_1\mathbf{k}_1}(t)$, пренебрегаем; в результате интегралам столкновений удаётся придать вид [15]

$$I_{\mathrm{col}}^{(i)} = -\frac{\nu_{j_1\mathbf{k}_1}}{\tau^{(i)}}, \tag{5}$$

где $\tau^{(i)}$ — время релаксации, обусловленное процессами i-го типа.

Выписывая вклады трёхфононных процессов (рассматриваемой высокоэнергетической оптической моде на всех диаграммах отвечает фонону $\{1\}$)

А Б В Г Д

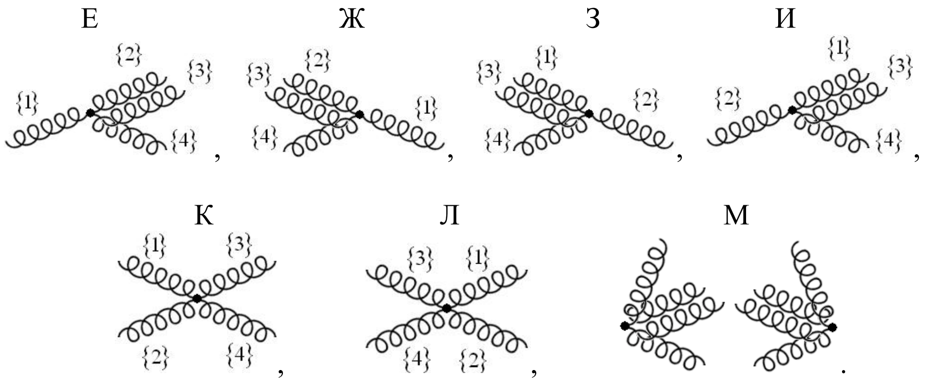


в интеграл столкновений при комнатных температурах, принимая во внимание (1), приходим к выражению для времени релаксации

$$\frac{1}{\tau^{(\text{АБ})}} = \frac{2\pi}{\hbar}k_{\mathrm{B}}T\sum_{j_2\mathbf{k}_2}\frac{\left|\eta(j_1,j_2,j_3,\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)\right|^2}{s_{j_2}k_2}\delta\left[\hbar\omega_{j_1}(\mathbf{k}_1)-\hbar\omega_{j_2}(\mathbf{k}_2)-\hbar\omega_{j_3}(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\right], \tag{6}$$

где $\{j_3\mathbf{k}_3\}$ отвечает высокоэнергетической оптической моде, как и $\{j_1\mathbf{k}_1\}$; через функции η от поляризаций j и квазиимпульсов $\mathbf{k}$ фононов обозначены матричные элементы соответствующих трёхфононных процессов; здесь и далее для акустических фононов предполагаем линейный закон дисперсии $\hbar\omega_{j_2}(\mathbf{k}_2) = s_{j_2}k_2$, s_{j_2} — соответствующая скорость звука. Для В и Г $\{j_2\mathbf{k}_2\}$ и $\{j_1\mathbf{k}_1\}$ отвечают высокоэнергетическим оптическим фононам, тогда как $\{j_3\mathbf{k}_3\}$ соответствует длинноволновому акустическому фонону: $[\tau^{(\text{ВГ})}]^{-1} \sim [\tau^{(\text{АБ})}]^{-1}$. Таким образом, перекачка энергии из высокоэнергетической оптической моды в другие ветви фононного спектра происходит через четырёхфононные процессы. Заметим, что процессы типа Д вклад в интеграл столкновений не дают, поскольку не удовлетворяют закону сохранения энергии. Их учёт, однако, необходим при вычислении функции Грина фонона, когда принимаются во внимание многоступенчатые процессы.

Ниже представлены диаграммы, отвечающие за перераспределение энергии через процессы четырёхфононного рассеяния:



Как и в случае трёхфононных процессов всюду предполагается доминирование $v_{j_1}(\mathbf{k}_1, t)$ над прочими неравновесностями. Через ϑ, ζ обозначены матричные элементы соответствующих четырёхфононных процессов рассеяния.

Для процессов Е и Ж возможны следующие варианты:

1. {2} — того же типа, что и {1} ($\hbar\omega_{\text{H}} = 0.153$ эВ), а {3}, {4} — длинноволновые акустические фононы; в этом случае величина, обратная времени релаксации через процессы Е и Ж, записывается в виде

$$\frac{1}{\tau_1^{(\text{ЕЖ})}} = \frac{2\pi}{\hbar} k_{\text{B}} T \sum_{j_3 j_4 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \left|\vartheta\left(j_1, j_2, j_3, j_4, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3\right)\right|^2 \left(\frac{1}{s_{j_3} k_3} + \frac{1}{s_{j_4}\left|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3\right|}\right) \times$$
$$\times \delta\left[\hbar\omega_{j_1}\left(\mathbf{k}_1\right) - \hbar\omega_{j_2}\left(\mathbf{k}_2\right) - \hbar\omega_{j_3}\left(\mathbf{k}_3\right) - \hbar\omega_{j_4}\left(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3\right)\right]. \tag{7}$$

2. {2} и {3} отвечают низкоэнергетическим оптическим фононам, а {4} соответствует акустическому фонону ($\hbar\omega_{j_4}(\mathbf{k}_4) = 0.027$ эВ); для таких процессов имеем

$$\frac{1}{\tau_2^{(\text{ЕЖ})}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{j_2 j_3 j_4 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \left|\vartheta\left(j_1, j_2, j_3, j_4, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3\right)\right|^2 \times$$
$$\times \delta\left[\hbar\omega_{j_1}\left(\mathbf{k}_1\right) - \hbar\omega_{j_2}\left(\mathbf{k}_2\right) - \hbar\omega_{j_3}\left(\mathbf{k}_3\right) - \hbar\omega_{j_4}\left(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3\right)\right] \times$$
$$\times \left[1 + N_{j_4 \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3} + N_{j_2 \mathbf{k}_2} + N_{j_3 \mathbf{k}_3}\right]. \tag{8}$$

Процессы З и И возможны только если {2} того же типа, что и {1}, а {3}, {4} — длинноволновые акустические фононы; обусловленная этими процессами величина, обратная времени релаксации, записывается в форме

$$\frac{1}{\tau^{(\text{ЗИ})}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(k_{\text{B}} T\right)^2 \sum_{j_3 j_4 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \frac{\left|\vartheta\left(j_2, j_1, j_3, j_4, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3\right)\right|^2}{s_{j_3} k_3 s_{j_4}\left|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3\right|} \times$$
$$\times \delta\left[\hbar\omega_{j_2}\left(\mathbf{k}_2\right) - \hbar\omega_{j_1}\left(\mathbf{k}_1\right) - \hbar\omega_{j_3}\left(\mathbf{k}_3\right) - \hbar\omega_{j_4}\left(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3\right)\right]. \tag{9}$$

Для процессов К и Л закон сохранения энергии выполняется, если фонон {3} того же типа, что и {1}, а оставшиеся фононы имеют одинаковую энергию (акустические или низкоэнергетические оптические фононы). Если $\{j_2\mathbf{k}_2\}$ и $\{j_4\mathbf{k}_4\}$ акустические, имеем

$$\frac{1}{\tau_1^{(\text{КЛ})}} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(k_\text{B}T\right)^2 \sum_{j_2 j_4 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \frac{\left|\zeta\left(j_1, j_2, j_3, j_4, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3\right)\right|^2}{s_{j_2} k_2 s_{j_4} \left|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3\right|} \times$$
$$\times \delta\left[\hbar\omega_{j_1}\left(\mathbf{k}_1\right) + \hbar\omega_{j_2}\left(\mathbf{k}_2\right) - \hbar\omega_{j_3}\left(\mathbf{k}_3\right) - \hbar\omega_{j_4}\left(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3\right)\right], \tag{10}$$

если они отвечают низкоэнергетическим оптическим фононам, то

$$\frac{1}{\tau_2^{(\text{КЛ})}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{j_2 j_4 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \left|\zeta\left(j_1, j_2, j_3, j_4, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3\right)\right|^2 N_{j_2 \mathbf{k}_2} \times$$
$$\times \delta\left[\hbar\omega_{j_1}\left(\mathbf{k}_1\right) + \hbar\omega_{j_2}\left(\mathbf{k}_2\right) - \hbar\omega_{j_3}\left(\mathbf{k}_3\right) - \hbar\omega_{j_4}\left(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3\right)\right]. \tag{11}$$

Процессы типа М вклад в интеграл столкновений не дают: $I_\text{col}^{(\text{M})} = 0$.

Время релаксации через трёхфононные процессы $\tau^{(3\text{ph})}$ определяется из соотношения

$$\left[\tau^{(3\text{ph})}\right]^{-1} = \left[\tau^{(\text{АБ})}\right]^{-1} + \left[\tau^{(\text{ВГ})}\right]^{-1}, \tag{12}$$

для времени релаксации через четырёхфононные процессы $\tau^{(4\text{ph})}$ имеем

$$\left[\tau^{(4\text{ph})}\right]^{-1} = \left[\tau_1^{(\text{ЕЖ})}\right]^{-1} + \left[\tau_2^{(\text{ЕЖ})}\right]^{-1} + \left[\tau^{(\text{ЗИ})}\right]^{-1} + \left[\tau_1^{(\text{КЛ})}\right]^{-1} + \left[\tau_2^{(\text{КЛ})}\right]^{-1}. \tag{13}$$

Используя в (8) и (9) оценки (2–7) получаем $\tau^{(3\text{ph})} \sim 10^{-13}$–$10^{-12}$ с, что примерно на два порядка меньше времени релаксации через четырёхфононные процессы $\tau^{(4\text{ph})}$.

Спустя время $t > \tau^{(4\text{ph})}$ после возмущения фононной системы можно полагать, что перераспределение энергии произошло, и в решётке установилось термодинамическое равновесие. При $\tau^{(4\text{ph})} > t > \tau^{(3\text{ph})}$ в высокоэнергетической фононной моде благодаря трёхфононным процессам успеет установиться равновесие, однако в целом фононная система останется неравновесной. В этом случае каждой моде условно можно поставить в соответствие некоторую температуру.

Если длительность импульса $\tau^{(4\text{ph})} > t_\text{p} > \tau^{(3\text{ph})}$, то энергия перераспределяется в основном в сам**о**й высокоэнергетической оптической моде — она будет разогреваться быстрее остальных. Это приведёт к тому, что данная мода с точки зрения выкачивания электронами энергии из поля на этом временном масштабе будет становиться всё более эффективной. Возмущённая акустическая мода охотнее передаёт энергию остальным ветвям фононного спектра, оставаясь практически холодной. Таким образом, в процессе моделирования разогрева электронов в SiO_2 при длительностях импульса $\tau^{(4\text{ph})} > t_\text{p} > \tau^{(3\text{ph})}$ высокоэнергетическую оптическую моду целесообразно рассматривать, принимая во внимание описанную в [4] модификацию процедуры моделирования, в то время как для акустических фононов числа заполнения в процессе симуляции можно полагать неизменными. Если длительность импульса $t_p > \tau^{(4ph)}$, то для учёта разогрева решётки можно испробовать эвристический приём, суть которого состоит в обновлении равновесных чисел заполнения фононов в соответствии с накапливаемой в течение промежутков $\tau^{(4ph)}$ информацией.

Оценки характерных времён $\tau^{(3ph)}$ и $\tau^{(4ph)}$ обычно производятся в приближении времени релаксации [15], однако строгое рассмотрение установления равновесия в фононном спектре, учитывающее специфику конкретного материала, требует привлечения температурной одночастичной функции Грина для определения зависимости времени жизни фонона (обусловленного процессами трёх- и четырёхфононного рассеяния) от его сорта. Указанные схемы учёта нагрева решётки можно использовать, если для рассматриваемого материала время релаксации, обусловленное четырёхфононными процессами, не окажется меньше времени релаксации через трехфононные процессы.

Обратимся теперь к рассмотрению влияния разогрева решётки на развитие электронной лавины. На рис. 1 представлены значения постоянной развития лавины (нормированной на опорную частоту электрон-фононных столкновений 10^{15} с$^{-1}$) для нескольких длин волн падающего излучения, вычисленные по двум схемам: без включения разогрева решётки в алгоритм моделирования (γ_C) и с учётом её нагрева в течение импульса (γ_H). Величина ς задается как отношение энергии эффективного фонона к начальной энергетической температуре кристалла. Видно, что учет нагрева решётки приводит к большим скоростям развития лавины: это увеличение меньше выражено для длины волны $\lambda = 0.27$ мкм с

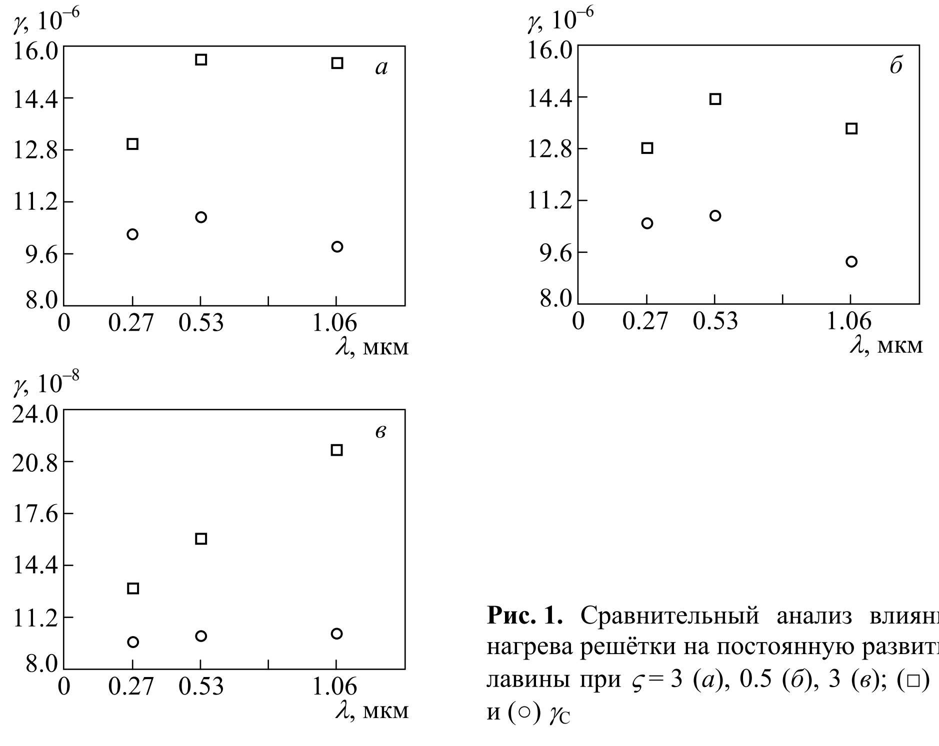


Рис. 1. Сравнительный анализ влияния нагрева решётки на постоянную развития лавины при $\varsigma = 3$ (*а*), 0.5 (*б*), 3 (*в*); (□) γ_H и (○) γ_C

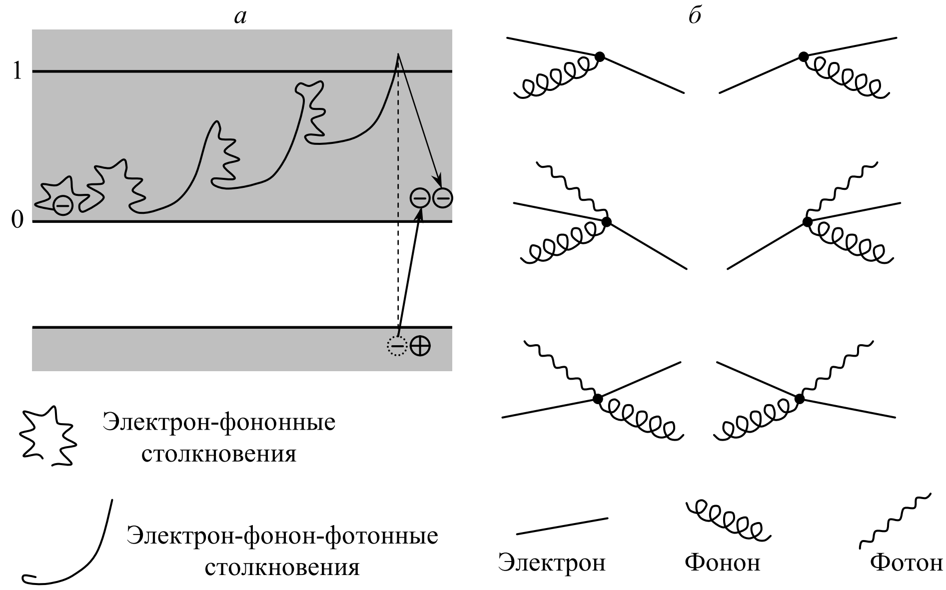


Рис. 2. Схематическое изображение набора электроном энергии в результате электрон-фононных (*а*) и электрон-фонон-фотонных столкновений (*б*) в однофотонном приближении

одной стороны, а с другой — оно сильнее для наносекундного диапазона длительностей лазерного импульса. На рис. 2 схематически представлен процесс набора электроном проводимости энергии, достаточной для ионизации. Скорость развития лавины определяется двумя конкурирующими тенденциями: с одной стороны, чем больше энергия кванта света, тем труднее его поглотить [4], а с другой — при меньшем отношении ширины запрещённой зоны к энергии фотона достичь потенциала ионизации проще. Вновь обратимся к рис. 1, на котором определяющая динамику генерации носителей постоянная развития лавины вычислена при фиксированной ширине запрещённой зоны (≈ 9 эВ) для трёх частот электромагнитного поля. Для различных отношений ς в пикосекундном диапазоне длительностей импульсов на рис. 1*а* и 1*б* можно проследить указанные тенденции. В наносекундном диапазоне длительностей импульсов они выражены в меньшей степени. Это связано с тем обстоятельством, что частота электрон-фононных столкновений в данном случае гораздо сильнее отличается от частоты электрон-фонон-фотонных столкновений. Отметим также, что при учёте разогрева решётки при любых длительностях импульсов наблюдается более резкое возрастание постоянной развития лавины при переходе от $\lambda = 0.27$ мкм к $\lambda = 0.53$ мкм и менее резкое её изменение при переходе от $\lambda = 0.53$ мкм к $\lambda = 1.06$ мкм по сравнению с аналогичными результатами, полученными в предположении «холодной» решётки.

На рис. 3 приведены значения $\Delta_\gamma = (\gamma_H - \gamma_C)/\gamma_H$ для различных длин волн. Если экспериментальная ситуация отвечает греющейся решётке, эта величина даёт представление о погрешности вычисления постоянной развития лавины,

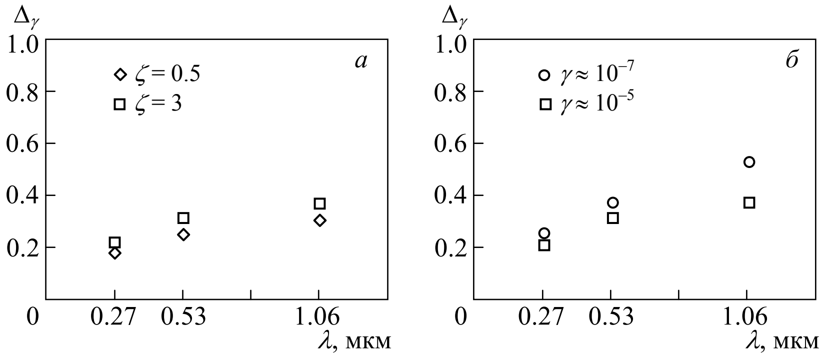


Рис. 3. $\Delta_\gamma(\lambda)$ при фиксированной длительности импульса, отвечающей $\gamma \approx 10^{-5}$ (*а*), при заданной начальной температуре кристалла, соответствующей $\zeta = 3$ (*б*)

связанной с пренебрежением пересчётом вероятностей электрон-фононных и электрон-фонон-фотонных процессов. При любых длительностях импульса и величинах ς видим, что погрешность возрастает с увеличением длины волны. В пикосекундных импульсах на рис. 3*а* можно видеть, что для меньших значений ς погрешность несколько меньше. Сравнение данных на рис. 3*б* показывает, что при одинаковых значениях ς в более длинных импульсах погрешность несколько больше. Эти результаты согласуются с физическими предпосылками моделирования и могут рассматриваться в качестве косвенной проверки представленных на рис. 1 данных.

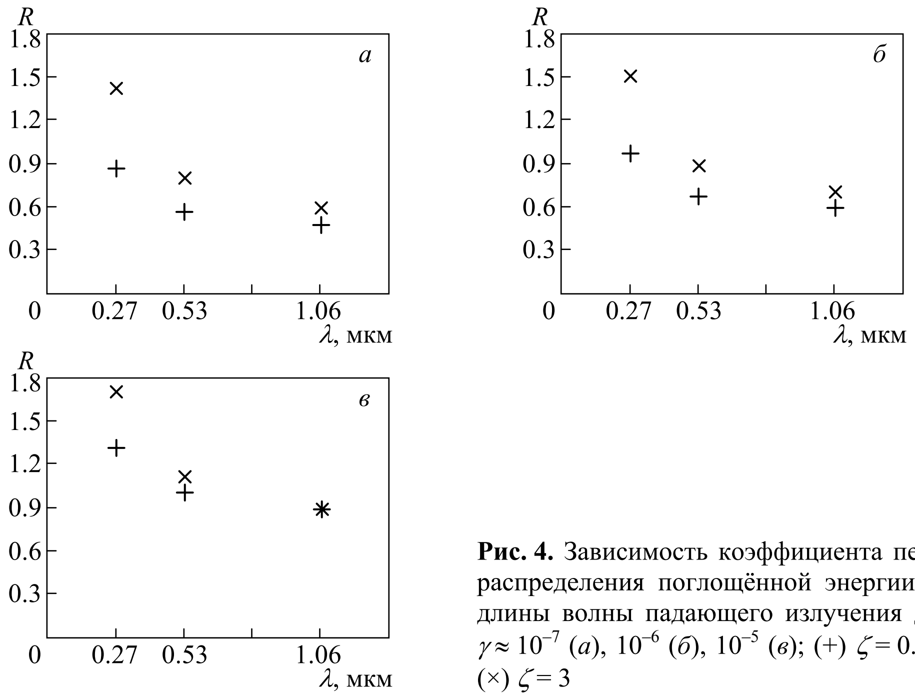


Рис. 4. Зависимость коэффициента перераспределения поглощённой энергии от длины волны падающего излучения для $\gamma \approx 10^{-7}$ (*а*), 10^{-6} (*б*), 10^{-5} (*в*); (+) $\zeta = 0.3$ и (×) $\zeta = 3$

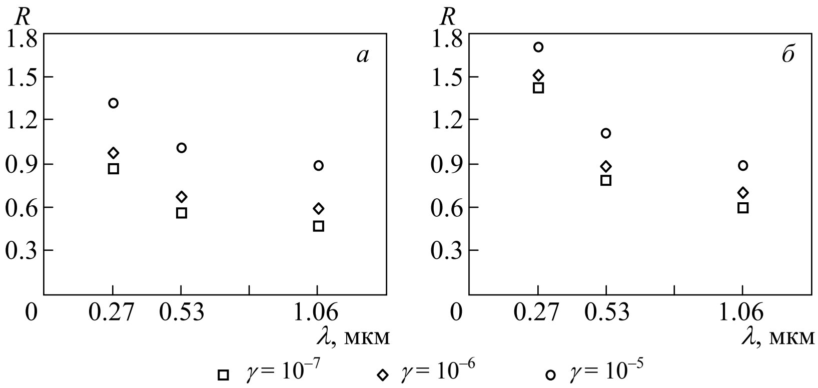


Рис. 5. Зависимость коэффициента перераспределения поглощённой энергии от длины волны падающего излучения для $\zeta = 0.3$ (*а*), 3 (*б*)

Обратимся теперь к результатам компьютерного моделирования процесса развития электронной лавины, касающимся перераспределения поглощённой за время импульса энергии между электронной и фононной подсистемами. Сначала этот вопрос изучается в предположении, что скорость передачи энергии в решётку определяется лишь её начальной температурой. Последующее рассмотрение даёт представление о том, каким образом использование схемы моделирования с разогревом решётки отражается на перераспределении поглощаемой энергии.

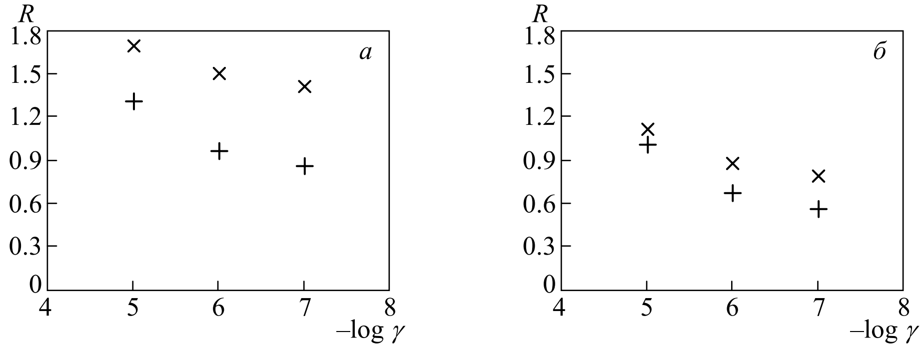
Информация, накопленная в процессе моделирования [4], используется для вычисления коэффициента перераспределения R — отношения энергии, запасенной в электронной подсистеме к избыточной (по отношению к равновесному состоянию) энергии, сконцентрированной в решётке к концу действия лазерного импульса.

Рис. 4 иллюстрирует следующие закономерности:

1. при заданной температуре с ростом длины волны отношение R убывает для всех длительностей импульсов;
2. при зафиксированных длинах волн для более высоких температур отношение R меньше для всех длительностей импульсов;
3. с возрастанием длины волны разница значений R, отвечающих различным температурам, убывает. Это означает, что с точки зрения перераспределения энергии между электронной и фононной подсистемами с ростом длины волны становится всё менее важным, до какой температуры нагрет образец.

На рис. 5 можно видеть, что:

1. при заданной длительности импульса R убывает с ростом длины волны излучения;
2. при фиксированных длинах волн при более коротких импульсах отношение R выше;
3. спад отношения R с ростом длины волны более резкий в случае более низких температур для всех длительностей импульсов;
4. для всех длин волн и температур разница в R, отвечающих $\gamma = 10^{-7}$ и $\gamma = 10^{-6}$, заметно меньше разницы в R, отвечающих $\gamma = 10^{-6}$ и $\gamma = 10^{-5}$.



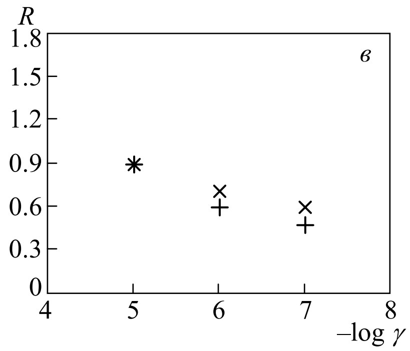


Рис. 6. Зависимоть коэффициента перераспределения от длительности лазерного импульса для $\lambda = 0.27$ мкм (*а*), 0.53 мкм (*б*), 1.06 мкм (*в*); (+) $\zeta = 0.3$ и (×) $\zeta = 3$

На рис. 6 хорошо заметно, что разница между отвечающими разным температурам значениями R возрастает с ростом длительности импульса. Указанная особенность имеет место для всех длин волн, однако возрастание становится менее выраженным при бóльших длинах волн.

При фиксированной температуре для всех длительностей импульсов разница в отношениях R, отвечающих $\lambda = 1.06$ и 0.53 мкм, заметно меньше разницы в R, отвечающих $\lambda = 0.53$ и 0.27 мкм. Сравнение рис. 7*а* и 7*б* показывает, что для более низких температур эта особенность выражена сильнее.

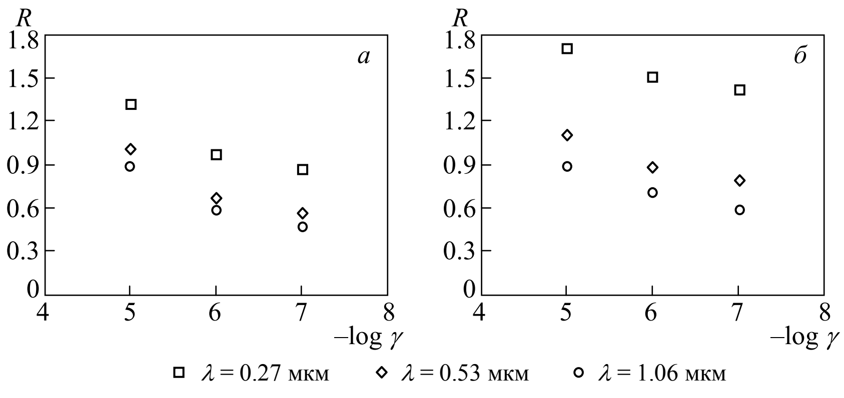


Рис. 7. Зависимость коэффициента перераспределения от длительности лазерного импульса для $\zeta = 0.3$ (*а*), 3 (*б*)

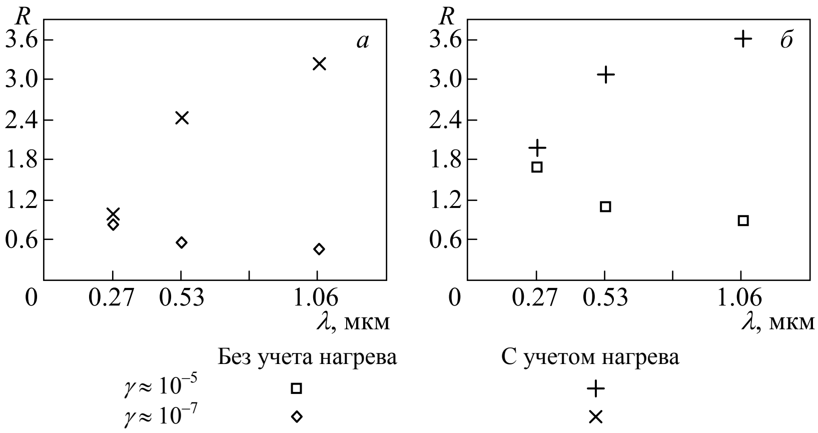


Рис. 8. Влияние разогрева решётки на перераспределение энергии между электронной и фононной подсистемой при $\zeta = 3$ для (*а*) пикосекундных и (*б*) наносекундных лазерных импульсов

Сравнительный анализ результатов, представленных на рис. 4–7, позволил выявить качественные особенности перераспределения энергии между электронной и фононной подсистемами. Подчеркнём, что процедура моделирования при этом не учитывала влияния разогрева решётки на вероятности процессов рассеяния. Это предположение достаточно широко распространено, особенно если речь идёт о пробое импульсами $t_{\text{p}} \sim 10^{-12}$ с и меньше. Подобные утверждения подкрепляются, как правило, лишь интуитивными соображениями, и до сих пор не выяснено, насколько далеко их можно продолжить в область импульсов пикосекундного диапазона. Оценить следствия из этого допущения позволяют результаты вычислений коэффициента перераспределения (для различных длин волн и длительностей лазерных импульсов), приведённые на рис. 8 для двух схем моделирования лавины: с учётом влияния разогрева решётки на вероятности процессов рассеяния и без него. Видно, что в обоих случаях при фиксированной длине волны отношение R, отвечающее более коротким импульсам, выше. Для всех длин волн учёт влияния нагрева фононного газа приводит к более высоким значениям коэффициента перераспределения. Однако, анализируя зависимость R от λ, наблюдаем, что при использовании схемы моделирования без учёта влияния нагрева решётки это отношение растет с уменьшением длины волны лазерного излучения, тогда как при учёте – убывает при всех длительностях импульсов. Хорошо видно, что расхождение в значениях R нарастает с увеличением λ.

Сравнивая на рис. 1 и 8 данные, полученные в предположении постоянства вероятностей процессов рассеяния в течение импульса, с результатами вычислений, учитывающими влияние разогрева фононов на эти вероятности, мы имеем дело с двумя предельными случаями. Гипотеза холодной решётки в пикосекундных импульсах отвечает ситуации, когда эффективно рассеяние электронов на акустических фононах. Если с точки зрения отбора энергии из поля работает только рассеяние электронов на LO-фононах, то при вычислении коэффициента перераспределения, по всей видимости, следует применять схему с разогревом решётки. Заметим, что в наносекундных импульсах использование этой схемы может быть оправдано и при рассеянии на акустических фононах.

ABSTRACT

The effect of lattice heating under a laser pulse on the dynamics of electron plasma generation in transparent solids has been studied. Several ways of taking into account the phonon-spectrum heating in the consideration of the electron avalanche, depending on the type of the effective (with respect to the field energy absorption by electrons) phonons and laser pulse width, have been proposed. A comparative analysis of the results of Monte-Carlo modeling of the electron-gas heating in the laser-pulse field, which were obtained for cold and heating lattices, has been performed. It is shown that the effect of lattice heating on the probabilities of electron–phonon and electron–phonon–photon scattering leads to an increase in the avalanche rate coefficient, which is more pronounced at longer wavelengths of the incident radiation and under longer laser pulses.

Some qualitative features of the redistribution of the energy absorbed during a pulse between the electron plasma and lattice are revealed. In particular, the ratio *R* of the energy accumulated in the electron subsystem to the excess (with respect to the initial equilibrium state) energy in the phonon subsystem (the energy conversion ratio) at the end of pass laser pulse has been calculated for different wavelengths and laser pulse durations and in fact for different initial lattice temperatures. This ratio suggests when the damage itself develops: if it is small then irreversible microscopic changes can begin during the laser pulse, if it is above 1 then all breakdown manifestations ought to be expected after the pulse ends. The consideration of the lattice heating effect is found to yield higher values of the energy redistribution ratio *R* for all wavelengths. It is shown that parameter increases with a decrease in the laser wavelength in the computation scheme with lattice heating disregarded and decreases at all pulse widths when the lattice heating is taken into account.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Воробьёв Г.А., Похолков Ю.П., Королёв Ю.Д., Меркулов В.И.* Физика диэлектриков (область сильных полей): Учеб. пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2003. 244 с.
2. *Херман Й., Вильгельми Б.* Лазеры сверхкоротких световых импульсов. М.: Мир, 1986. 368 с.
3. *Крюков П.Г.* Лазеры ультракоротких импульсов // Квантовая электроника. 2001. № 31. С. 95–119.
4. *Никифоров А.М., Епифанов А.С., Гарнов С.В.* Разогрев неравновесных электронов лазерным излучением в твёрдых прозрачных диэлектриках // ЖЭТФ. 2011. № 139. С. 184–198.
5. *Эпштейн Э.М.* Фононы в поле сильной электромагнитной волны // ФТТ. 1969. № 11. С. 2874–2880.
6. *Епифанов А.С., Маненков А.А., Прохоров А.М.* Теория лавинной ионизации в твёрдых телах под действием электромагнитного поля // Труды ФИАН. 1978. № 101. С. 87–129.

7. *Казлаускас П.А., Левинсон И.Б.* Релаксация импульса и энергии электрона в кристалле. 1. Общие соотношения для пробного электрона // Литовский физ. сборник. 1966. № 6. С. 33–43.
8. *Sparks M., Mills D.L., Warren R., Holstein T., Maradudin A.A., Sham L.J., Loh E., King Jr., King D.F.* Theory of electron avalanche breakdown in solids // Phys. Rev. B. 1981. Vol. 24. P. 3519–3536.
9. *Fischetti M.V.* Monte Carlo solution to the problem of high-field electron heating in SiO_2 // Phys. Rev. Lett. 1984. Vol. 53. P. 1755–1758.
10. *Fischetti M.V., DiMaria D.J., Brorson S.D., Theis T.N., Kirtley J.R.* Theory of high-field electron transport in silicon dioxide // Phys. Rev. B. 1985. Vol. 31. P. 8124–8142.
11. *Arnold D., Cartier E., Fischetti M.V.* Monte Carlo calculations of laser-induced free electron heating in SiO_2 // SPIE. 1990. Vol. 1441. P. 478–487.
12. *Stuart B.S., Feit M.D., Rubenchik A.M., Shore B.W., Perry M.D.* Laser-induced damage in dielectrics with nanosecond to subpicosecond pulses // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 74. P. 2248–2252.
13. *Stuart B.C., Feit M.D., Herman S., Rubenchik A.M., Shore B.W., Perry M.D.* Nanosecond to femtosecond laser-induced breakdown in dielectrics // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. P. 1749–1761.
14. *Гарнов С.В., Конов В.И., Малютин А.А., Царькова О.Г., Яцковский И.С., Даусингер Ф.* Динамика формирования и развития плазмы в газах и прозрачных твёрдых телах в поле высокоинтенсивных острофокусированных пикосекундных лазерных импульсов // Квантовая электроника. 2003. № 33. С. 758–764.
15. *Морозов А.И.* Физика твёрдого тела. Кристаллическая структура. Фононы: Учеб. пособие. М.: Изд-во МИРЭА, 2006. 151 с.