

## ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННАЯ ЭВОЛЮЦИЯ СИСТЕМЫ НЕРАВНОВЕСНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ В КРЕМНИИ. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

© М.М.Бонч-Осмоловский, Т.И.Галкина, А.Ю.Клоков,  
А.И.Шарков, Д.В.Казаковцев

Физический институт им.П.Н.Лебедева Российской академии наук,  
117924 Москва, Россия  
(Поступила в Редакцию 8 августа 1995 г.)

Представлены разрешенные во времени отклики детекторов на приход неравновесных акустических фононов (НАФ), рассчитанные методом Монте-Карло для кремния в геометрии реального физического эксперимента при учете эффектов отражения на границах образца, процессов упругого рассеяния, а также неупругих процессов трехфононного распада и слияния. Показано влияние условий эксперимента на получаемые отклики. Полученные результаты позволяют объяснить ряд эффектов, экспериментально наблюдаемых при оптическом возбуждении полупроводника.

Проблема описания пространственно-временной эволюции системы неравновесных фононов, рожденных в результате импульсного возбуждения полупроводника, известна достаточно давно. Экспериментально информация об ансамбле неравновесных фононов получается преимущественно в технике тепловых импульсов (ТТИ) из анализа отклика детектора (как правило, сверхпроводникового) на приход неравновесных фононов, рожденных в некоторой области образца. Способы же аналитического решения такой задачи сталкиваются с рядом существенных принципиальных трудностей [1,2]. Кроме того, получаемые таким образом решения не дают явного вида отклика детектора. Поэтому в последнее время для анализа распространения неравновесных фононов по образцу используется численное моделирование методом Монте-Карло. Ранние работы по расчету разрешенных во времени тепловых импульсов имеют характер оценочных, т.е. направлены на выявление лишь общих характерных черт отклика [3-5]. За прошедшее время были проведены теоретические рассмотрения элементарных процессов, происходящих с неравновесными фононами, учитывающие такие особенности, как анизотропия материала. Более того, в работе [6] показаны детально рассчитанные картины пространственного прихода фононов (phonon imaging) в условиях различной геометрии вычислений и их сравнение с экспериментальными.

Сравнительно недавно появились работы, посвященные количественному расчету разрешенных во времени тепловых импульсов для

их сравнения с экспериментом [7-9]. К сожалению, авторы не рассматривают влияния на получаемые отклики поведения фононов на границах образца, геометрии эксперимента (размеров и взаимного расположения области возбуждения и детектора), способа возбуждения и т.д. Кроме того, авторы, как правило, приводят лишь некоторые результаты моделирования без рассмотрения влияния условий эксперимента на получаемый отклик, а также без подробного обсуждения алгоритма и приближений использованной модели вычислений. И, наконец, существенно, что не рассматриваются процессы фонон-фононного слияния и влияние этого явления на получаемые результаты. Все это не дает возможности применить опубликованные в этих работах результаты моделирования для анализа экспериментальных откликов в других экспериментах.

Поэтому целью данной работы было учесть все рассмотренные выше процессы с неравновесными фононами в среде в единой модели и научиться рассчитывать отклики детектора в различных условиях конкретного эксперимента. Оценено также влияние процессов фонон-фононного слияния на вид получаемых откликов.

## 1. Основные процессы при распространении неравновесных акустических фононов в среде

Геометрия физического эксперимента в ТТИ и основные процессы, происходящие с неравновесными фононами, показаны на рис. 1. Такими процессами являются генерация неравновесных фононов, их распространение в анизотропной среде, двухфононные процессы: упругое рассеяние на изотопах, примесных атомах и других дефектах решетки (в том числе и с изменением поляризации), а также процессы отражения фононов от границы либо выхода из образца; трехфононные процессы: спонтанный ангармонический распад на два фонона меньших энергий и попарное слияние фононов.

Напомним основные черты упомянутых процессов.

1) Генерация неравновесных акустических фононов (НАФ) происходит в результате некоторого возбуждения полупроводника, находящегося при низкой температуре. Такими возбуждениями могут

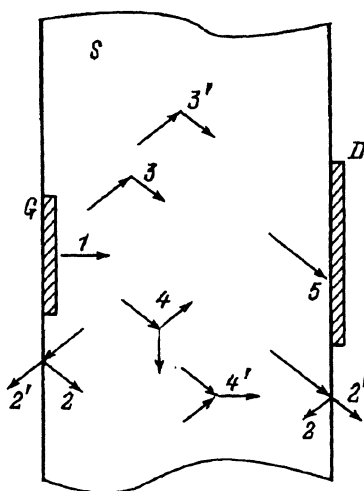


Рис. 1. Эксперимент в ТТИ и основные процессы с неравновесными фононами в среде.

$G$  — источник фононов,  $S$  — образец (среда распространения),  $D$  — детектор.  $1$  — баллистическое распространение,  $2, 2'$  — отражение фононов от границы либо выход из образца,  $3, 3'$  — упругое рассеяние, в том числе с конверсией моды,  $4, 4'$  — спонтанный ангармонический распад и слияние фононов,  $5$  — поглощение фонона детектором.

быть оптическое возбуждение, нагрев светом либо током нанесенной на поверхность полупроводника металлической пленки, сверхпроводниковый туннельный переход и т.д. От способа возбуждения зависит спектр и модовый состав генерируемых фононов. Например, при оптическом возбуждении полупроводника образуются преимущественно продольные (LA) фононы частотой  $\nu = \nu_{LO}/2$  [10]. Состав фононов, инжектируемых в полупроводник или диэлектрик из металлической пленки, нанесенной на его поверхность и нагреваемой импульсом тока или света, в зависимости от пары материалов рассматривался, например, в [11].

2) Анизотропия распространения НАФ, или «фононная фокусировка», связана с несферичностью поверхности  $\omega(\mathbf{k})$ , т.е. с тем, что направление распространения энергии  $d\omega/d\mathbf{k}$  (групповая скорость) не совпадает с  $\mathbf{k}$ . Известно, что в длинноволновом приближении в рамках теории упругости групповая скорость может быть получена следующим образом [12].

Соотношение

$$F(V_F, \mathbf{k}) = \det(\Lambda_{iklm} n_k n_m - \delta_{il} \rho V_F^2) = 0, \quad (1)$$

где  $n_i = k_i/k$ ,  $V_F = \omega/k$  — фазовая скорость,  $\Lambda_{iklm}$  — тензор упругости, а  $\rho$  — плотность материала образца, которая определяется кубическим уравнением относительно  $V_F^2$ . Получаемые из него значения фазовой скорости зависят только от направления распространения.

Тогда  $\omega(\mathbf{k}) = kV_F(\mathbf{k}/k)$ , откуда

$$(d\omega/dk_i) = n_i V_F + (dV_F/dn_i) - n_i (dV_F/dn_j) n_j.$$

Значения производных могут быть получены неявным дифференцированием соотношения (1)

$$(dV_F/dn_i) = -(dF/dn_j)/(dF/dV_F).$$

3) Упругое рассеяние НАФ происходит на изотопах и структурных дефектах решетки. Такими дефектами являются, например, точечные дефекты решетки (вакансии, примесные атомы), а также кластеры и дислокации. Средние времена свободного пробега НАФ зависят от среды распространения и частоты фононов. Из рассмотрения упругого рассеяния можно получить в длинноволновом приближении формулу для времен свободного пробега относительно упругого рассеяния на точечных дефектах

$$t_{sc}^{-1} = \left(\frac{v_0}{4\pi}\right) \sum_i x_i \left( \left(\frac{M_i - M}{M}\right)^2 + d \left(\frac{R_i - R}{R}\right)^2 \right) \sum_j \langle V_j^{-3} \rangle \omega^4 = A_{sc} \nu^4, \quad (2)$$

где  $v_0$  — объем, приходящийся на один атом,  $x_i$ ,  $M_i$ ,  $R_i$  — соответственно концентрация, масса и размер дефекта,  $M$  и  $R$  — масса и размер атомов основного материала решетки,  $\langle V_j^{-3} \rangle$  — скорость звука поляризации  $j$ , усредненная по направлениям распространения,  $\omega$ ,  $\nu$  —

частота фонона,  $a$  — некоторый коэффициент порядка  $10^3$  [13]. Первое слагаемое отвечает рассеянию из-за дефекта массы, а второе — из-за вносимых в решетку искажений пространственной структуры.

В отсутствие примесей и т.п. рассеяние происходит только на изотопах, которые не вносят искажений пространственной структуры, и мы приходим к формуле, полученной позднее Тамурой с величиной  $A_{is} = 2.43 \cdot 10^{-42} \text{ s}^3$  [14]. В случае присутствия дефектов других типов общий вид зависимости не изменится, отличие будет только в величине  $A_{sc}$ , которая будет зависеть от сорта примесных атомов и способа внедрения. Точный расчет постоянной  $A_{sc}$  при наличии дефектов разных типов является самостоятельной задачей.

4) Спонтанный ангармонический распад НАФ является гораздо более сложной задачей. Необходимо решить следующие вопросы: каковы времена жизни фононов частоты  $\nu_0$ , поляризации  $j_0$  с волновым вектором  $k_0$ ; какие фононы  $\nu_1, j_1, k_1$  и  $\nu_2, j_2, k_2$  образуются в результате распада. Теоретическое рассмотрение первого вопроса проведено в [14–17]. Для времен жизни фононов относительно спонтанного ангармонического распада в длинноволновом пределе получена формула, схожая с (2),

$$t_{ii}^{-1} = A_{ii}(j, k)\nu^5. \quad (3)$$

Из приведенных в [15, 17] результатов видна сильная зависимость постоянной  $A_{ii}$  от поляризации фонона и направления распространения. В [7] проведены численные значения постоянной  $A_{ii}$  для распада LA- и FTA-фононов, усредненные по направлениям распространения.

Вопрос о характеристиках дочерних фононов рассматривался в [5, 7] с учетом законов сохранения энергии и квазиимпульса. Можно выделить следующее.

В работе [7] приведены вычисленные функции плотности вероятности  $P(e)$  распада LA-фононов по двум каналам:  $LA \rightarrow LA + TA$  и  $LA \rightarrow TA + TA$ . Дополнительно приведены модельные выражения для плотности вероятности, использованные другими авторами.

Рассмотрение аналогичных процессов для FTA- и STA-фононов до настоящего времени, видимо, нигде не проводилось.

5) На границах образца в зависимости от условий конкретного эксперимента могут быть реализованы такие процессы, как отражение фонона с сохранением поляризации, отражение фонона с изменением поляризации, диффузное отражение и выход фонона из образца. Подобные процессы экспериментально исследовались в [18].

## 2. Малые уровни энергии возбуждения

При небольших плотностях энергии возбуждения, когда  $n(\nu) \ll 1$ , неравновесные фононы ведут себя как газ невзаимодействующих частиц. В этом случае задача сводится к рассмотрению судьбы каждого фонона от момента его рождения и до выхода из образца.

1) А л г о р и т м в ы ч и с л е н и й. В работах, посвященных расчетам разрешенных во времени откликов детектора, подробное описание алгоритма расчета не приводится, что часто мешает пониманию получаемых результатов. Мы приведем использованный нами в расчетах алгоритм и поясним, как протекают основные процессы «жизни» фононов в модели.

При моделировании под словом «фонон» будем подразумевать материальную точку, имеющую координаты  $x, y, z, t$ , характеризующуюся частотой (энергией)  $\nu$  и поляризацией  $j$ , которая при распространении в среде обладает описанными в разделе 1 свойствами.

Вычисления начинаются с генерации, т.е. образования фона на заданной энергии  $\nu$ , выбранной случайным образом в пределах заданного диапазона, поляризации  $j$ , выбранной случайным образом с заданными вероятностями. Фонон рождается в момент времени  $t$ , равновероятно выбранный в течение времени накачки  $T_p$ , с координатами  $x, y, z$ , выбранными случайным образом внутри заданной области возбуждения.

Затем случайным образом выбирается направление волнового вектора. В соответствии с анизотропией и ориентацией образца, поляризацией фонона и выбранным волновым вектором вычисляется групповая скорость (величина и направление). В соответствии с поляризацией и энергией фонона вычисляется время свободного пробега до следующего процесса: распада или упругого рассеяния  $\langle t \rangle$ . Считая, что в течение этого времени фонон распространяется баллистически с вычисленной групповой скоростью, получаем координаты следующего события: распада или упругого рассеяния.

При достижении границ образца в зависимости от заданных величин отражения происходит либо выход фонона из образца, либо его зеркальное отражение без конверсии моды.

При попадании фононов внутрь заданной области детектирования анализируются времена прихода фононов и строится гистограмма. При наборе статистики такая гистограмма образует расчетный отклик детектора.

Распространение фононов, образованных в результате распада (а впоследствии и продуктов их распада), происходит аналогично описанному выше вплоть до выхода всех продуктов распада начального фонона из образца. Затем происходит генерация следующего фонона до получения отклика требуемой гладкости, т.е. до выявления его характерных черт: времени нарастания, положения максимума отклика во времени, длительности отклика на полувывсоте и т.д.

2) Основные процессы «жизни» фононов. При упругом рассеянии энергия фонона сохраняется, меняются направление распространения и, возможно, поляризация. Мы полагаем, что направление волнового вектора выбирается случайным образом с равномерным распределением по углам, а поляризация — пропорционально соотношению плотностей состояний.

При распаде фонона энергии  $\nu_0$  образуются два фонона с меньшими энергиями  $\nu_1$  и  $\nu_2$

$$\nu_1 = \nu_0 F^{-1}(x), \quad \nu_2 = \nu_0 - \nu_1,$$

где  $x$  — случайное число, равномерно распределенное на интервале от нуля до единицы а  $F^{-1}(x)$  есть функция, обратная функции распределения вероятностей, соответствующая функции плотности вероятности  $P(e)$

$$F(x) = \int_0^x P(e) de.$$

Для получения энергий фононов, образованных в результате распада LA-фононов по каналам  $LA \rightarrow LA + FTA(STA)$  и  $LA \rightarrow FTA(STA) + FTA(STA)$ , мы воспользовались функциями плотности вероятности  $P(\epsilon)$  для изотропного случая (процессы  $LA \rightarrow LA + TA$  и  $LA \rightarrow TA + TA$ , приведенными в [7], считая вероятности образования FTA- и STA-фононов одинаковыми. Для получения энергий фононов, образованных в результате распада FTA-фононов по каналам  $FTA \rightarrow FTA(STA) + FTA(STA)$ , мы использовали функцию плотности вероятности, аналогичную процессу  $LA \rightarrow TA + TA$ . STA-фононы полагались нераспадаемыми.

Индивидуальные времена свободного пробега выбирались из экспоненциального распределения. Это можно проиллюстрировать следующим образом: если есть поток фононов одинаковых энергий и поляризаций, а скорость процессов распада (рассеяния) не зависит от числа частиц, то

$$dN = -kN dt, \quad N(t) = N(0) \exp(-kt).$$

Среднее время в таком процессе есть

$$\langle t \rangle = \left(1/N(0)\right) \int_0^{\infty} N(t) dt = 1/k, \quad N(t) = N(0) \exp(-t/\langle t \rangle).$$

Тогда для отдельной частицы из такого ансамбля величина

$$x(t) = 1 - N(t)/N(0) = 1 - \exp(-t/\langle t \rangle)$$

будет означать вероятность распада (рассеяния) в момент времени  $t$ . Если решать обратную задачу, можно получить индивидуальные времена свободного пробега

$$t_m = -\langle t \rangle \ln(x),$$

где  $x$  — случайное число, равномерно распределенное на интервале от нуля до единицы.

Среднее время свободного пробега  $\langle t \rangle$ , если считать процессы распада и упругого рассеяния независимыми, определяется как обратная сумма вероятностей этих процессов

$$\langle t \rangle = \left[ (1/t_{li}) + (1/t_{sc}) \right]^{-1},$$

где величины  $t_{sc}$  и  $t_{li}$  определяются формулами (2) и (3) соответственно.

3) **Результаты моделирования.** Построенная таким образом модель позволяет рассчитывать отклики детектора на приход неравновесных фононов в различных материалах и оценивать изменения в откликах в зависимости от таких параметров, как размеры и ориентация образца, размеры и взаимное расположение области возбуждения и детектора, условий на границе, степени дефектности материала образца, способа возбуждения. Такие расчеты проводились

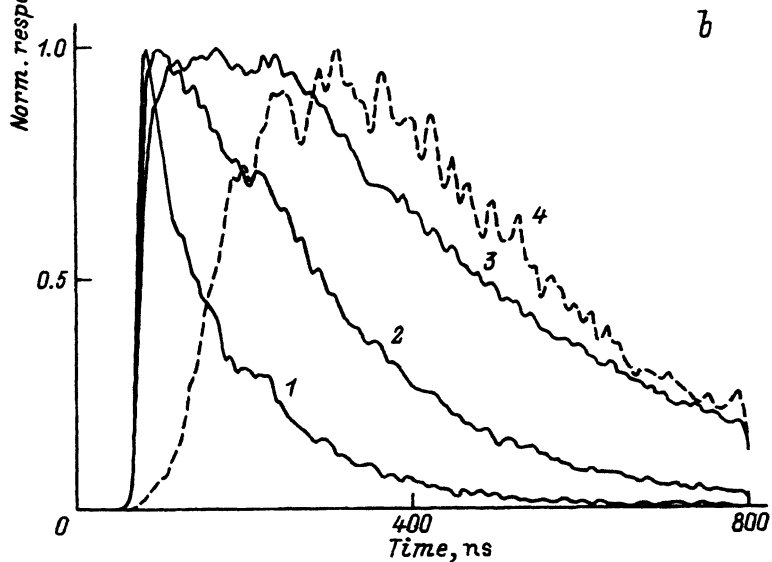
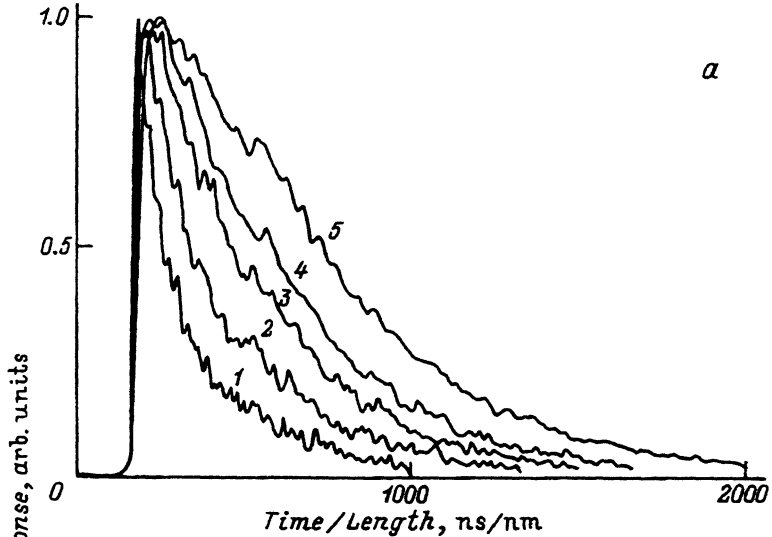


Рис. 2. Разрешенные во времени отклики детектора при малых уровнях возбуждения при изменении одного из параметров.

*a* — длины образца (mm): 1 — 0.2, 2 — 1.2, 3 — 0.8, 4 — 0.6, 5 — 0.4; *b* — размеров детектора (mm): 1 — 0.2, 2 — 0.4, 3 — 0.8; его положения (4) относительно источника фононов; *c* — условий на границах образца; *d* — дефектности образца: 1 —  $A_{sc}, A_{is}$ ; 2 —  $A_{sc}, 2A_{is}$ ; 3 —  $A_{sc}, 3A_{is}$ ; 4 —  $A_{sc}, 5A_{is}$ ; *e* — способа возбуждения; *f* — ориентации образца.

нами для кремния. Результаты представлены в виде серий с одним изменяемым параметром.

а) Размеры образца (рис. 2, *a*) определяют форму сигнала, поскольку характерная величина (коэффициент диффузии)

$$D(\nu) = (1/3)t_{sc}(\nu)(V_{LA} + V_{FT} + V_{ST}) / (V_{LA}^{-3} + V_{FT}^{-3} + V_{ST}^{-3})$$

зависит от характерной частоты фононов и меняется по мере распространения фононов. Для сравнения формы откликов по оси абсцисс

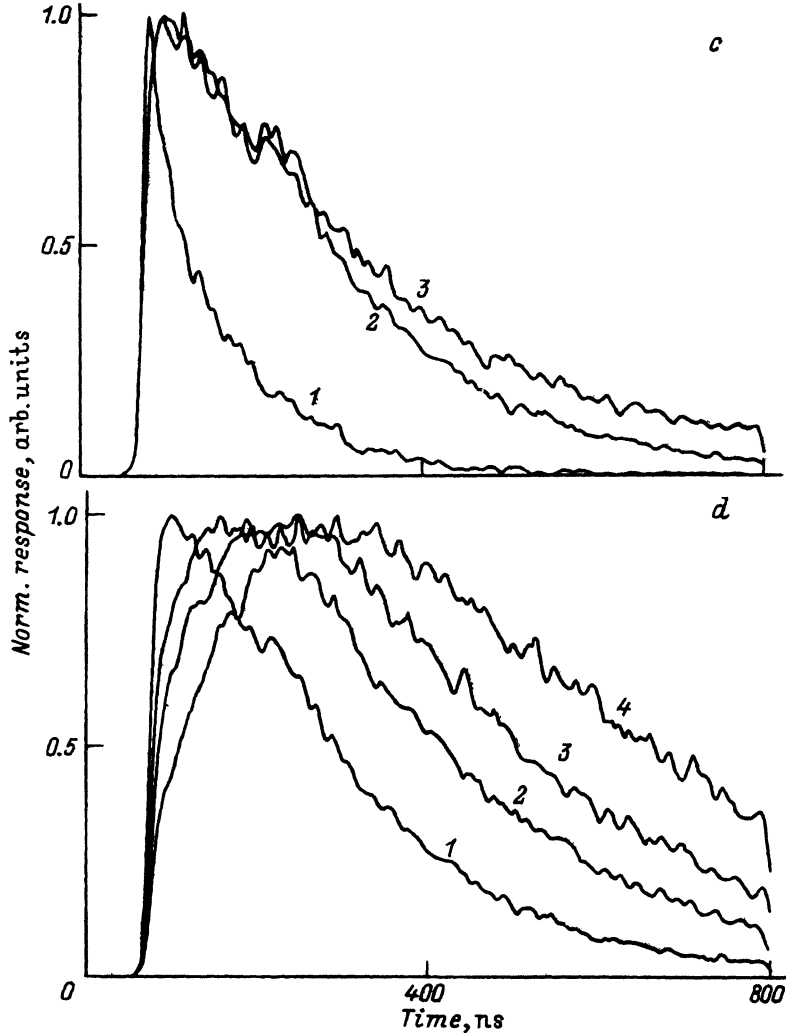


Рис. 2 (продолжение).

было проведено нормирование на время баллистического пролета, а по оси ординат — на максимум сигнала. В ранней работе [3] экспериментально наблюдалось похожее поведение для GaAs.

б) Размеры областей возбуждения и детектирования также могут быть различными, что отражается на сигнале (рис. 2, б). В случае большего детектора (кривые 2 и 3) происходит так называемое «геометрическое уширение» отклика, т.е. увеличение длительности за счет прихода фононов, испытавших большее число рассеяний. Экспериментально это наблюдалось, например, в [19].

Смещение области возбуждения относительно детектора (или наоборот) также меняет форму сигнала в связи с уменьшением вклада баллистических фононов в сигнал (кривая 4). Кроме того, попадание детектора на выходы осей может привести к появлению в сигнале мод, испытывающих фокусировку в этих направлениях.



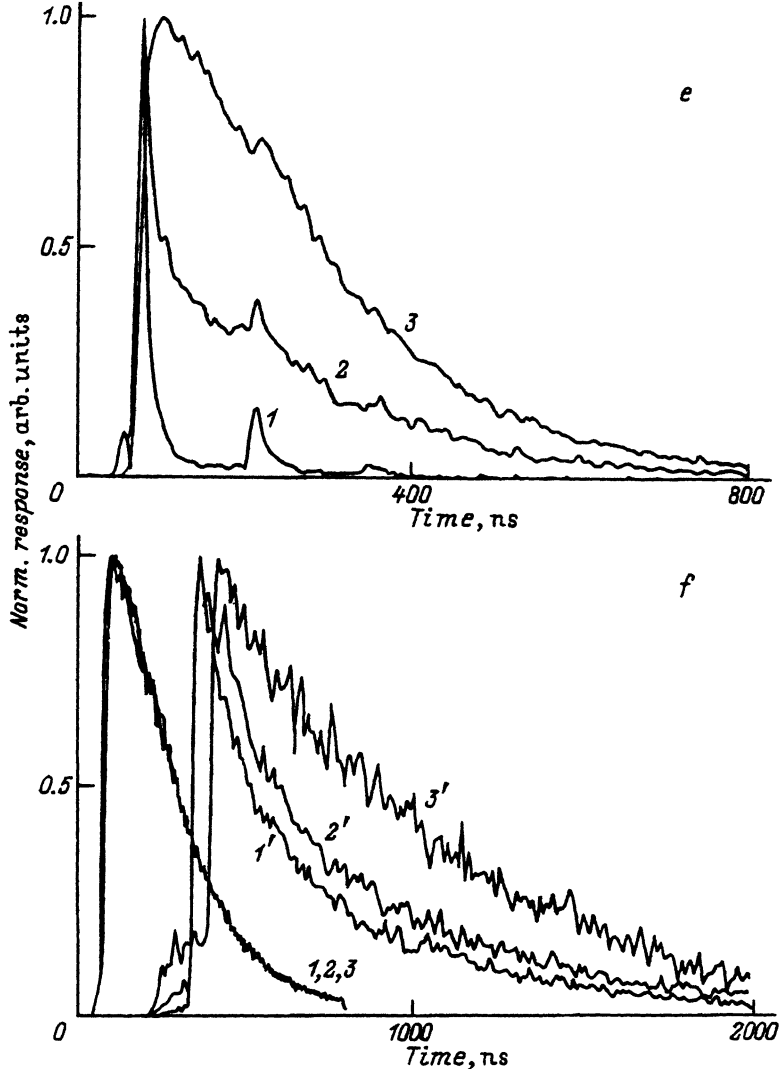


Рис. 2 (продолжение).

с) Условия на фронтальной границе: отражение фононов от нее (кривые 2 и 3) либо их выход из образца (кривая 1) — оказывают существенное влияние на получаемый сигнал (рис. 2,с). Аналогичный результат был получен в [9].

д) Дефектность материала, т.е. наличие в нем примесей, приводит к более диффузионному характеру отклика (рис. 2,д). Экспериментально это явление известно давно [20], однако теперь из сравнения экспериментальных и расчетных откликов появилась возможность оценивать величину  $A_{sc}$  в формуле (2) и соответственно времена и длины свободного пробега фононов разных частот. Такие расчеты представлены, например, в [19,21].

е) Способ возбуждения определяет состав генерируемых фононов и может заметно заменить отклик (рис. 2,е). Приведены отклики, соответствующие фотовозбуждению, т.е. генерируются только LA-фононы с частотой  $\nu = \nu_{LO}/2 = 7.5$  THz (кривая 3) и фононы с частотами 2 (кривая 2) и 1 THz (кривая 1) с модовым составом, пропорциональным плотностям состояний.

ф) Ориентация образца также может определять форму откликов (рис. 2,ф). Однако для тонких образцов (0.4 nm) из-за интенсивных процессов конверсии моды при упругих рассеяниях различие в форме откликов для ориентаций [100], [110], [111] (кривые 1-3 соответственно) практически отсутствует. Для более толстых образцов (2.0 nm), когда характерные частоты фононов заметно уменьшаются вследствие распада, уменьшается и влияние процессов конверсии моды. Это приводит к заметным различиям в форме откликов (кривые 1'-3').

4) **О б о с н о в а н и е и с п о л ь з о в а н н ы х п р е д п о л о ж е н и й.** Анизотропия учитывается только для процесса распространения фононов. Это связано с тем, что в настоящее время в литературе, видимо, отсутствует описание процессов рассеяния и распада с учетом анизотропии материала в виде, удобном для программирования. Поэтому при моделировании предполагалось, что времена жизни и свободного пробега относительно упругого рассеяния не зависят от направления распространения, а волновые векторы фононов, образованных после этих процессов, распределены по углам равномерно. Неучет анизотропии этих процессов заметно скажется, видимо, только на тонкой структуре картины фононной фокусировки и на откликах детектора очень малых ( $\approx 10 \mu\text{m}$ ) размеров. На откликах детектора, имеющего размеры, сравнимые с толщиной пластины, как это имеет место в наших экспериментах [19,22], это скажется гораздо меньше.

Для описания процессов распада и рассеяния использовались формулы, полученные в длинноволновом пределе. Существенные отличия от такого приближения проявляются лишь для сравнительно высокочастотных фононов [6], имеющих небольшие времена жизни по сравнению, например, с временем возбуждения (10 ns). Это несколько ограничивает временное разрешение полученных откликов.

### 3. Большие уровни энергии возбуждения

В описанной в разделе 2 модели распространение фононов происходило независимо друг от друга. Однако существует ряд экспериментов, когда влияние процессов фонон-фононного слияния становится существенным [17,23]. Теоретическое рассмотрение такого явления — образования области локального теплового равновесия (так называемого «горячего фононного пятна» (ГП)) — представлено в [2]. Показано, в частности, что в кремнии возможно образование ГП с временами жизни порядка сотен наносекунд и размерами в сотни микрон. Экспериментально образование ГП проявится, в частности, в изменении вида разрешенного во времени отклика детектора при изменении плотности энергии возбуждения [22]. Теория же оперирует с внутренними характеристиками ГП, но не дает возможности получения явного вида отклика детектора. Рассмотрим далее, насколько плодотворно применение метода Монте-Карло для описания процессов слияния фононов.

1) А л г о р и т м в ы ч и с л е н и й. Учитывают процессы фонон-фононного слияния, развивая описанную модель, можно двумя способами: 1) рассматривать распространение отдельных фононов в среде, в которой кроме описанных процессов (распад, рассеяние и т.д.) возможны дополнительно процессы поглощения фонона средой и поглощения фонона из среды (вероятности таких процессов должны зависеть от времени, координаты, частоты фононов); 2) рассматривать распространение сразу большого числа фононов и учитывать процессы слияния только между ними.

Второй способ при тех же объемах памяти дает лучшее разрешение по координате и по времени, поэтому для разработки алгоритма был выбран именно он.

Для реализации такого подхода необходимо отслеживать положения фононов. Был использован следующий алгоритм.

Специальным образом (см. далее) выбирался шаг по времени  $t$ . Полагалось, что в течение этого времени все фононы распространяются независимо друг от друга, испытывая те же процессы, что и при малых плотностях возбуждения (рассеяние, распад, отражение и т.д.). По окончании времени  $t$  производится попарное сравнение координат фононов. В случае, когда расстояние между двумя фононами оказывается менее некоторого заранее заданного, в зависимости от энергий фононов и величины шага по времени вычисляется вероятность их слияния (см. далее). Процессы попарного слияния происходят случайным образом в зависимости от вычисленной вероятности. Затем вычисляется новый шаг по времени, и процесс повторяется либо до выхода всех фононов из образца, либо до окончания заданного «времени сканирования».

а) Шаг по времени. Можно отметить, что в таком алгоритме присутствуют как процессы, происходящие непрерывно (распад, рассеяние и т.д.), так и процессы, происходящие в моменты, выделенные шагом по времени (генерация, слияние). Это означает, что введенный таким образом шаг по времени не может быть выбран произвольно. Величина шага по времени  $t$  определяет максимальную частоту процессов слияния и поэтому должна вычисляться в зависимости от состояния системы фононов. Если фононы за это время успеют распаться в среднем более одного раза, то об установлении равновесия речи быть не может. Принято, что величина шага по времени равна половине времени жизни фонона средней в данное время энергии.

б) Генерация фононов производится несколько иначе, чем в случае малых энергий возбуждения. Фононы образуются не равномерно в течение времени накачки, а в моменты, соответствующие шагам по времени. В начале каждого шага до истечения времени накачки генерируется некоторое число фононов, пропорциональное величине этого шага.

в) Слияние фононов. В модели протекание процессов слияния зависит от двух величин: размера области слияния, т.е. максимального расстояния, на котором могут находиться фононы для того, чтобы их слияние смогло бы произойти, и вероятности слияния таких фононов, которая должна зависеть от энергий фононов и от величины шага по времени.

Размер области слияния физически определяется как область, где отличен от нуля «интеграл перекрытия» волновых пакетов фононов.

Такая область имеет размеры порядка нескольких постоянных решетки материала. Однако к построенной модели такая величина не имеет отношения, поскольку число фононов, образуемых в физическом эксперименте, не может быть достигнуто в вычислениях. Например, характерной величине энергии возбуждения  $E_{\text{exp}} = 1 \mu\text{J}$  в кремнии соответствует следующее число LA-фононов с частотой  $\nu_{\text{LA}} = 7.5 \text{ THz}$ :

$$N = E_{\text{exp}} / (h\nu_{\text{LA}}) = 2 \cdot 10^{14}.$$

Если теперь для оценки принять, что физическая область слияния есть куб со стороной  $a = 10 \text{ \AA}$ , то для  $N_0 = 400$  фононов находим, что необходимые размеры области слияния в модели должны быть

$$R_c = \left( \frac{Na^3}{Nd} \right)^{1/3} = 8 \mu\text{m}.$$

Такие размеры представляются вполне разумными для вычислений распространения неравновесных фононов в пластинах толщиной в сотни микрон.

Вероятность слияния пары фононов  $P_c$ , попавших внутрь заданной области слияния, в модели вычисляется по формуле

$$P_c = 1, \quad t_0 < t, \quad P_c = t/t_0, \quad t < t_0,$$

где  $t$  — шаг по времени, а характерное время  $t_0$  определяется из представлений о равновероятности протекания процессов слияния и распада и представляет собой ожидаемое время жизни фонона, образуемого в результате слияния этой пары фононов,

$$t_0 = \left( A_{\text{II}}(\nu_1 + \nu_2)^5 \right)^{-1}, \quad F^{-1}(\nu_1/(\nu_1 + \nu_2)),$$

где  $F^{-1}(\nu_1/(\nu_1 + \nu_2))$  — множитель, учитывающий разницу в энергиях фононов аналогично распаду.

При моделировании в случае больших плотностей энергии возбуждения использованы следующие упрощения: 1) считается, что все фононы отражаются от передней границы образца, физически это соответствует вакуумным условиям на границе (это приближение корректно, поскольку, даже если образец находится в жидком гелии, при таких плотностях энергии возбуждения вблизи возбуждаемой поверхности образца образуется прослойка газообразного гелия, препятствующая выходу фононов); 2) не рассматриваются различия свойств фононов разных поляризаций и анизотропия среды, что является допустимым в условиях интенсивного перемешивания мод.

**2) Результаты моделирования и обсуждение.** Построенная таким образом модель позволяет оценивать влияние процессов слияния на эволюцию системы фононов и получать соответствующие отклики детектора. В рамках этой модели были проведены следующие серии вычислений (представлены разрешенные во времени отклики детектора и эволюция средней энергии фононов).

а) При одинаковых геометрии вычислений и свойствах среды варьировали число генерируемых за время  $T_p$  фононов. В эксперименте

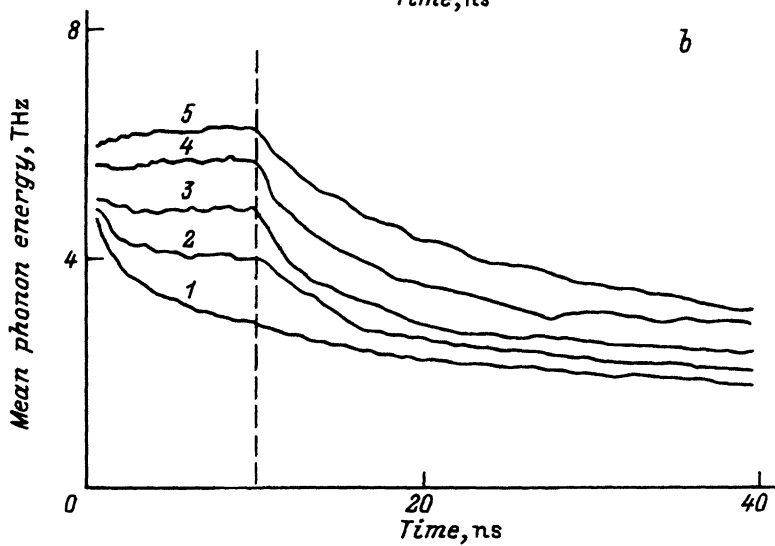
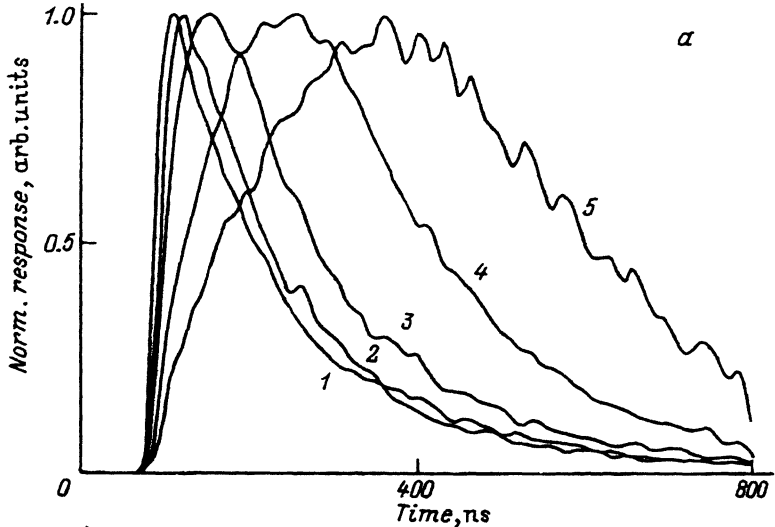


Рис. 3. Разрешенные во времени отклики детектора (a,c,e) и эволюция средней энергии фононов (b,d,f) при больших уровнях возбуждения при изменении одного из параметров.

a, b — энергии возбуждения.  $E$  (arb. units): 1 — 1, 2 — 25, 3 — 100, 4 — 400, 5 — 1100; c, d — размера области возбуждения  $R$  при  $E = 400$  arb. units.  $R$  (mm): 1 — 0.20, 2 — 0.10, 3 — 0.05; e, f — дефектности образца:  $A_{sc}$ : 1, 2 —  $A_{is}$ , 1', 2' —  $2.5A_{is}$ ;  $E$  (arb. units): 1, 1' — 1, 2, 2' — 400.

этому соответствует изменение энергии возбуждения и соответственно плотности энергии возбуждения. На рис 3, a представлены расчетные отклики детектора в этом случае. Можно видеть изменение формы отклика: сдвиг максимума и уширение сигнала. На рис. 3, b показана эволюция средней энергии фононов на начальной стадии развития. Можно видеть, как введение даже слабого взаимодействия, которое еще не приводит к изменению формы отклика, заметно меняет эволюцию фононной системы. Этот результат согласуется с выводом, сделанным в

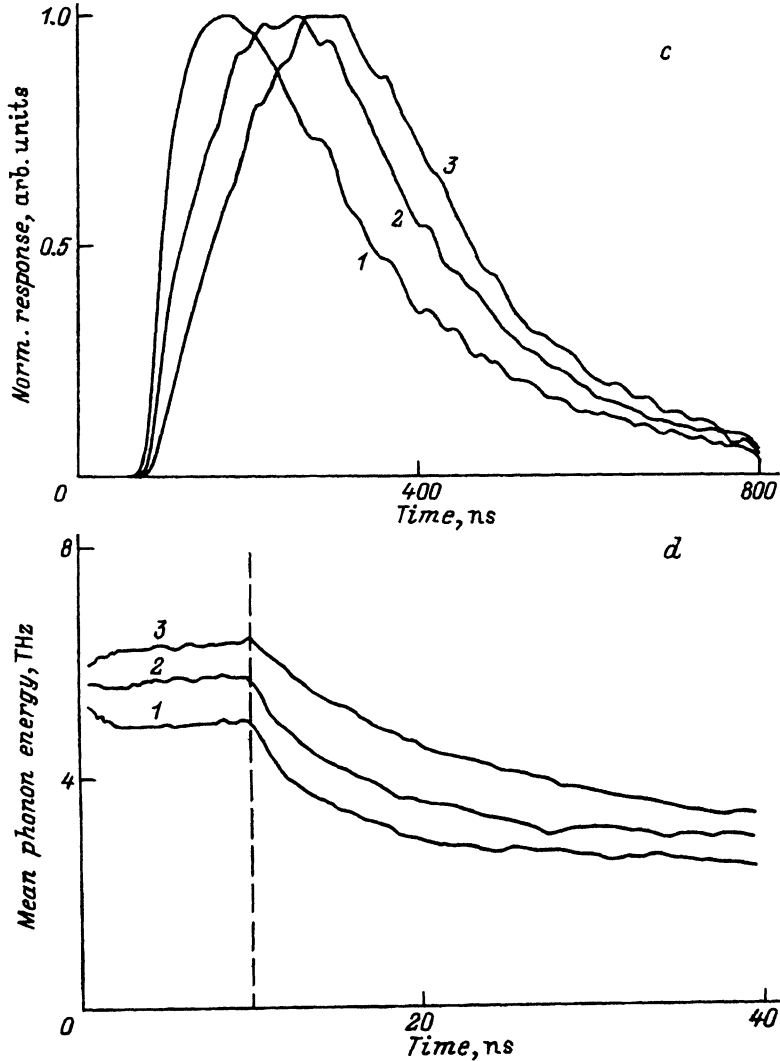


Рис. 3 (продолжение).

[2], о том, что прямое оптическое возбуждение полупроводников всегда является сильным.

б) При одинаковых свойствах среды и числе генерируемых фононов варьировали размер источника фононов. При уменьшении размеров источника возрастает плотность энергии возбуждения, однако из-за более быстрого выхода на сферическую геометрию расширения разрушение пятна происходит быстрее. Кроме того, при размерах источника, достигающих размера детектора, проявляется влияние «геометрического» уширения отклика. На представленных на рис. 3,с расчетных откликах можно видеть сдвиг максимума сигнала практически без изменения его ширины.

Подобное изменение откликов экспериментально наблюдалось в [22].

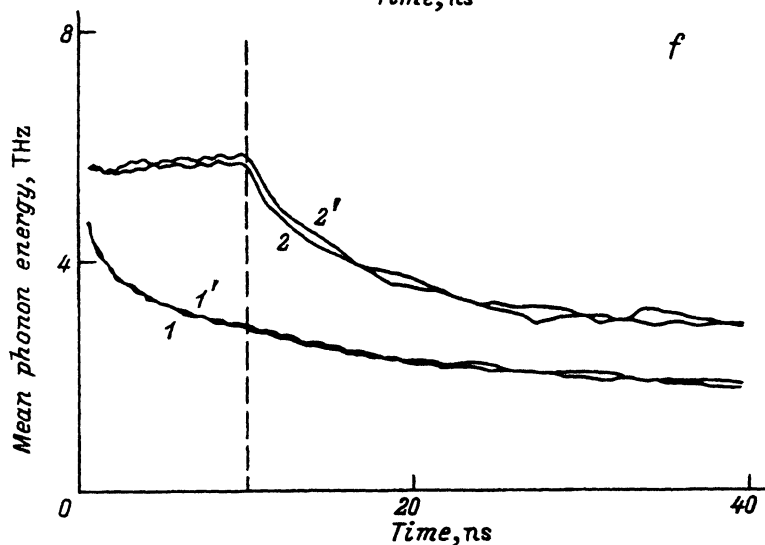
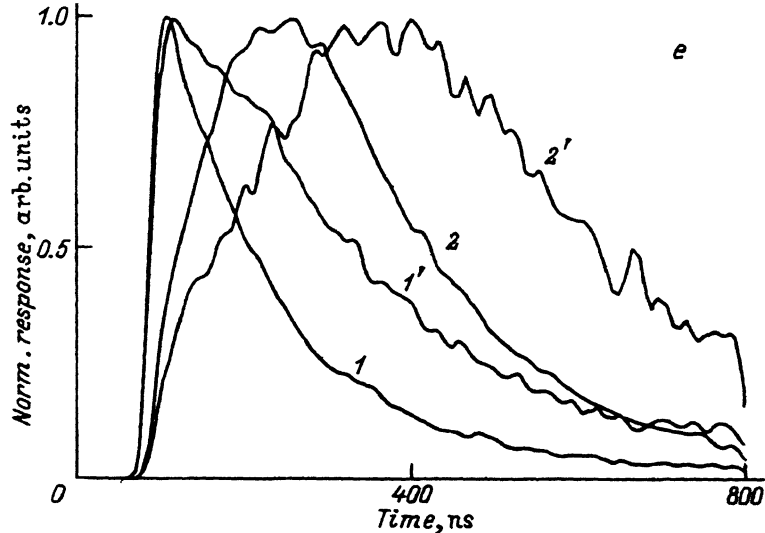


Рис. 3 (продолжение).

с) При одинаковых геометрии вычислений и числе генерируемых фононов варьировали  $A_{sc}$ , т.е. степень дефектности материала. Можно видеть (рис. 3, e) различие в откликах при одинаковых параметрах возбуждения: больший сдвиг максимума и большее уширение. Несколько неожиданным является сравнение эволюции средней энергии фононов (рис. 3, f). Оказалось, что она определяется только параметрами возбуждения и практически не зависит от дефектности материала.

Распределение пришедших на детектор фононов по энергии практически одинаково во всех представленных случаях. Это означает, что распад пятна происходит достаточно далеко от детектора, что соответствует «свечению» горячего пятна низкочастотными фононами.

Таким образом, представленная модель позволяет рассчитывать отклики детектора на приход НАФ с учетом условий (геометрии, способа возбуждения и т.д.) реального физического эксперимента.

Представленные серии расчетных откликов показывают основные тенденции в изменениях откликов при изменении условий эксперимента. Показано, что для возможности сравнения расчетных и экспериментальных откликов необходим учет геометрии физического эксперимента.

Проведенное моделирование эволюции системы неравновесных фононов при учете процессов фонон-фононного слияния позволяет объяснить обнаруженные ранее экспериментальные результаты.

Авторы благодарны В.А. Чуенкову за полезное обсуждение.

Эта работа поддерживалась программой «Высокотемпературная сверхпроводимость» (проект № 83190).

### Список литературы

- [1] Казаковцев Д.В., Левинсон И.Б. Письма в ЖЭТФ **27**, 3, 194 (1978).
- [2] Казаковцев Д.В., Левинсон И.Б. ЖЭТФ **88**, 6, 2228 (1985).
- [3] Wolfe J.P., Nortrop G.A. Proc. 4th Int. Conf. Phonon Scattering in Cond. Matter. Springer-Verlag. Berlin (1984). P. 100.
- [4] Lax M., Narayanamurti V., Ulbrich R. Proc. 4th Int. Conf. on Phonon Scattering in Cond. Matter. Springer-Verlag. Berlin (1984). P. 103.
- [5] Maris H.J. Phys. Rev. **B41**, 14, 9736 (1990).
- [6] Tamura S., Shield J.A., Wolfe J.P. Phys. Rev. **B44**, 7, 3001 (1991).
- [7] Tamura S. Phys. Rev. **B48**, 18, 13502 (1993).
- [8] Данильченко Б.А., Казаковцев Д.В., Обухов И.А. ЖЭТФ **106**, 5(11), 1439 (1994).
- [9] Msall M.E., Carroll M.S., Shield G.A., Wolfe J.P. Proc. 7th Int. Conf. Phonon Scattering. Springer (1993). P. 116.
- [10] Orbach R. Phys. Rev. Lett. **16**, 1, 15 (1966).
- [11] Вайс О. В кн.: Физика фононов больших энергий. М. (1976). С. 138.
- [12] Maris H.J. J. Acoust. Soc. Am. **50**, 812 (1971).
- [13] Могилевский В.М., Чудновский А.Ф. В кн.: Теплопроводность полупроводников. М. (1972). С. 79.
- [14] Tamura S. Phys. Rev. **B31**, 4, 2574 (1985).
- [15] Berke A., Mayer A.P., Wehner R.K. Solid State Commun. **54**, 5, 395 (1985).
- [16] Tamura S. Phys. Rev. **B31**, 4, 2595 (1985).
- [17] Schwartz H., Renk K.F., Berke A., Mayer A.P., Wehner R.K. Proc. 5th Int. Conf. Phonon Scattering Cond. Matt. Springer-Verlag (1986). P. 362-364.
- [18] Marx D., Eisenmenger W. Phys. Lett. **93A**, 3, 152 (1983).
- [19] Бонч-Осмоловский М.М., Галкина Т.И., Клоков А.Ю., Онищенко Е.Е., Шарков А.И. Кр. сообщ. по физике ФИАН, **11(12)**, 25 (1993).
- [20] Померанц М., Гутфельд Р. Тр. IX Междунар. конф. по физике полупроводников. М. (1968). Т. 2. С. 732.
- [21] Галкина Т.И., Клоков А.Ю., Шарков А.И. Письма в ЖТФ. **21**, 17, 5 (1995).
- [22] Bonch-Osmolovskii M.M., Galkina T.I., Klovov A.Yu., Plotnikov A.F., Pokrovskii Yu.Yu., Sharkov A.I. Solid State Commun. **92**, 13, 203 (1994).
- [23] Багаев В.С., Бельская-Левандовская Г., Бонч-Осмоловский М.М., Галкина Т.И., Левандовский С.Ю., Михайлова Г.Н., Поярков А.Г., Юнг Г. ЖЭТФ **77**, 5(11), 2117 (1979).