

07

## Особенности электрон-ионного теплообмена в условиях интенсивного фотовозбуждения диэлектриков ультракороткими лазерными импульсами

© Д.С. Поляков<sup>1</sup>, Е.Б. Яковлев<sup>1</sup>, Д.С. Иванов<sup>2</sup><sup>1</sup> Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики<sup>2</sup> Университет Кассель, 34109, Кассель, Германия

E-mail: polyakovdmitry1988@gmail.com

Поступило в Редакцию 29 марта 2016 г.

Проведен анализ скорости обмена энергией между перегретыми электронами и решеткой при воздействии ультракороткого лазерного импульса на диэлектрики для случая рассеяния электронов на деформационном потенциале акустических фононов и поляризационном потенциале оптических фононов. Определены температурные и концентрационные зависимости возникающего теплового потока, предложены аналитические выражения для их аппроксимации. Приведены оценки для диоксида кремния.

DOI: 10.21883/PJTF.2017.05.44359.16271

Поглощение ультракороткого лазерного импульса в полупроводниках и диэлектриках сопровождается интенсивной генерацией электронов и дырок, концентрация которых может достигать значений порядка  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  [1,2]. При этом их температура в течение некоторого промежутка времени существенно превосходит температуру решетки. В таких условиях возникает поток энергии от горячих носителей к решетке  $I_{ei}$ , который традиционно представляется в виде произведения постоянного коэффициента  $G$  на разность между электронной и решеточной температурами [3]. Однако, как показывают расчеты потока  $I_{ei}$ , проведенные в работах [4,5] для некоторых металлов, коэффициент  $G$  не является постоянным и зависит от электронной температуры. Для ряда важных с практической точки зрения полупроводников и диэлектриков детальны вычисления потока  $I_{ei}$  отсутствуют, а в работах по модели-

рованию воздействия ультракоротких импульсов на такие материалы используют феноменологические соотношения [6,7]. Таким образом, целью настоящей работы является получение теоретических оценок скорости электрон-ионного теплообмена и выявление ее температурной и концентрационной зависимостей на примере диоксида кремния.

Для энергии, передаваемой электронами проводимости в единицу времени единице объема решетки, справедливо выражение [5]

$$I_{ei} = \sum_j \int \hbar\Omega_j(\mathbf{q})w_j(\mathbf{q})f(\mathbf{p}) \left( (1 - f(\mathbf{p} - \mathbf{q}))(N_j(\mathbf{q}) + 1)\delta(E(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + \hbar\Omega_j(\mathbf{q}) - E(\mathbf{p})) - (1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{q}))N_j(\mathbf{q})\delta(E(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - \hbar\Omega_j(\mathbf{q}) - E(\mathbf{p})) \right) \frac{2d\mathbf{p}d\mathbf{q}}{(2\pi\hbar)^6}, \quad (1)$$

где  $f(\mathbf{p})$  — функция распределения электронов,  $N(\mathbf{q})$  — функция распределения фононов,  $w(\mathbf{q})$  определяет вероятность поглощения (испускания) электроном фонона,  $E(\mathbf{p})$  — энергия электрона,  $\Omega(\mathbf{q})$  — частота фонона,  $\mathbf{p}$  — импульс электрона,  $\mathbf{q}$  — импульс фонона,  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка, индекс  $j$  нумерует ветви фононного спектра, с которыми взаимодействуют электроны.

Для упрощения выражения (1) сделаем следующие допущения. Во-первых, функции распределения электронов и фононов будем полагать квазиравновесными:

$$f(E(\mathbf{p})) = \left( \exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) - \mu(n_e, T_e)}{kT_e}\right) + 1 \right)^{-1},$$

$$N(\Omega(\mathbf{q})) = \left( \exp\left(\frac{\hbar\Omega(\mathbf{q})}{kT_i}\right) - 1 \right)^{-1},$$

где  $\mu$  — химический потенциал,  $n_e$  — концентрация электронов,  $T_e$  — электронная температура,  $T_i$  — температура решетки,  $k$  — постоянная Больцмана. Обоснование этого допущения для электронов можно найти в работах [8,9]. Во-вторых, дисперсионные зависимости для электронов и фононов примем в виде  $E(\mathbf{p}) = (2m_e)^{-1}p^2$ ,  $\Omega(\mathbf{q}) = \hbar^{-1}sq$  для акустических фононов,  $\Omega(\mathbf{q}) = \Omega_0$  для оптических фононов, где  $p = |\mathbf{p}|$ ,

$q = |\mathbf{q}|$ ,  $m_e$  — эффективная масса электрона,  $s$  — скорость звука,  $\Omega_0$  — частота оптического фонона, считающаяся не зависящей от  $q$ . В-третьих, будем рассматривать рассеяние электронов на деформационном потенциале акустических фононов (DA) и поляризационном потенциале оптических фононов (PO). Оба этих механизма рассеяния имеют место в  $\text{SiO}_2$  (см., например, [10,11]). Согласно [12], вероятности  $w(\mathbf{q})$  в этом случае будут иметь вид

$$w_{DA}(\mathbf{q}) = \frac{\pi D^2}{\hbar \rho s} q, \quad w_{PO}(\mathbf{q}) = \hbar \Omega_0 \frac{\pi e^2}{2 \varepsilon_0} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon} \right) q^{-2},$$

где  $D$  — константа деформационного потенциала,  $\rho$  — плотность,  $e$  — заряд электрона,  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная,  $\varepsilon_\infty$  — высокочастотная диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon$  — статическая диэлектрическая проницаемость.

С учетом сделанных допущений выражение (1) можно упростить. Для взаимодействия электронов с акустическими и оптическими фононами получаем

$$I_{ei}^{DA} = I_{ei}^{DA+} - I_{ei}^{DA-},$$

$$I_{ei}^{DA\pm} = \frac{m_e D^2}{8\pi^3 \hbar^7 \rho} \int_0^\infty f p dp \int_0^{q_{\max}^\pm(p)} (1 - f(E \mp sq)) \left( N + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) q^3 dq, \quad (2)$$

$$I_{ei}^{PO} = I_{ei}^{PO+} - I_{ei}^{PO-},$$

$$I_{ei}^{PO\pm} = \frac{m_e \Omega_0^2 e^2 (\varepsilon - \varepsilon_\infty)}{2(2\pi \hbar)^3 \varepsilon_0 \varepsilon \varepsilon_\infty} \left( N(\Omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \int_{(\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \sqrt{2m_e \hbar \Omega_0}}^\infty f (1 - f(E \mp \hbar \Omega_0)) \ln \left( \frac{q_{\max}^\pm(p)}{q_{\min}^\pm(p)} \right) p dp. \quad (3)$$

Пределы интегрирования в выражении (2) задаются следующими выражениями:

$$q_{\max}^+(p) = \begin{cases} 2p - 2m_e s, & 2p \leq q_D + 2m_e s, \\ q_D, & 2p > q_D + 2m_e s, \end{cases}$$

$$q_{\max}^-(p) = \begin{cases} 2p + 2m_e s, & 2p \leq q_D + 2m_e s, \\ q_D, & 2p > q_D + 2m_e s, \end{cases}$$

а значения аргументов логарифмов в формуле (3) определяются по соотношениям

$$q_{\max}^+(p) = \begin{cases} p + \sqrt{p^2 - 2m_e \hbar \Omega_0}, & 2\sqrt{2m_e \hbar \Omega_0} < 2p \leq q_D, \\ q_D, & 2p > q_D, \end{cases}$$

$$q_{\max}^-(p) = \begin{cases} p + \sqrt{p^2 + 2m_e \hbar \Omega_0}, & 2p \leq q_D, \\ q_D, & 2p > q_D, \end{cases}$$

$$q_{\min}^+(p) = p - \sqrt{p^2 - 2m_e \hbar \Omega_0}, \quad q_{\min}^-(p) = -p + \sqrt{p^2 + 2m_e \hbar \Omega_0},$$

где  $q_D$  — дебаевский импульс.

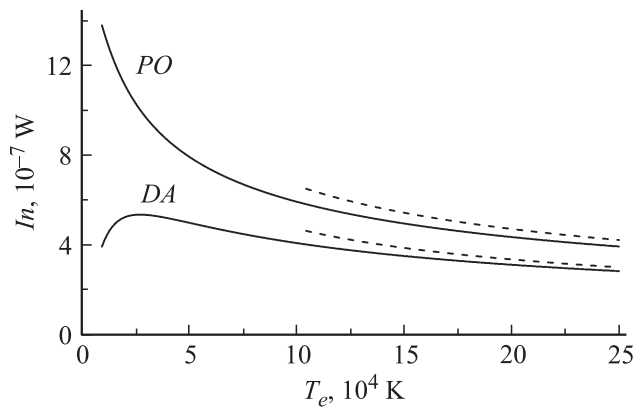
В случае высоких электронных температур, когда уместно пренебречь единицей в знаменателе  $f(E)$ , можно получить аналитические аппроксимации выражений (2) и (3):

$$I_{ei}^{DA}|_{HT} = \frac{D^2 m_e}{\rho} \frac{n_e q_D^3}{4\pi \hbar^4 \Gamma(1.5)} C^{-\frac{3}{2}} (1 - (C + 1) \exp(-C)), \quad (4)$$

$$I_{ei}^{PO}|_{HT} = m_e \Omega_0^2 \frac{n_e e^2}{2\pi \varepsilon_0 \Gamma(1.5)} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{\sqrt{C}}{q_D} \left( \ln\left(\frac{q_D}{\alpha}\right) - \frac{\sqrt{C}}{2} \right), \quad (5)$$

где  $C = q_D^2 (8m_e k T_e)^{-1}$ ,  $\alpha = \sqrt{2m_e \hbar \Omega_0}$ ,  $\Gamma(x)$  — гамма-функция.

Из (4) и (5) видно, что величина  $I_{ei}$  растет линейно с ростом концентрации электронов в высокотемпературном приближении. Также существенно, что в выражениях (4) и (5) отсутствует решеточная температура. Зависимость от электронной температуры более сложная. Для ее иллюстрации на рис. 1 построены зависимости величины  $In = I_{ei}|_{HT} n_e^{-1}$ , вычисленные в соответствии с формулами (4) и (5) при высоких электронных температурах для следующего набора типичных значений параметров:  $D = 9$  эВ,  $s = 9000$  м/с,  $q_D = 1.5 \cdot 10^{-24}$  кг · м/с,  $\rho = 2330$  кг/м<sup>3</sup>,  $m_e = m_0$ ,  $\varepsilon_\infty = 2.9$ ,  $\varepsilon = 3.9$ ,  $\hbar \Omega_0 = 100$  меВ. Из рис. 1 видно, что температурная зависимость величины  $In$  для случая рассеяния электронов на акустических фононах в рассмотренном диапазоне температур слабая. При больших  $T_e$  справедливо разложение  $\exp(-C) \approx 1 - C$ , соответственно, как следует из формулы (4),

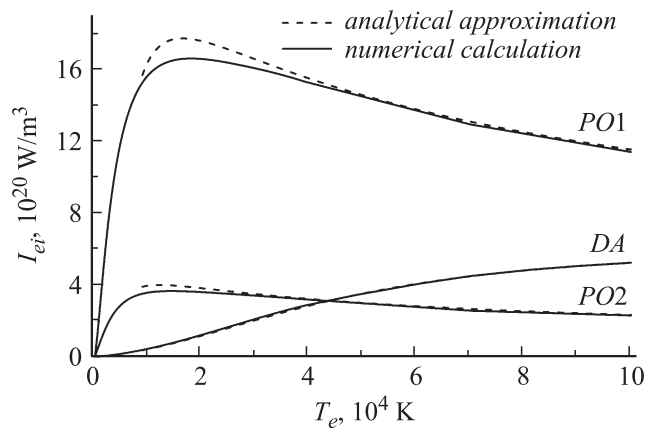


**Рис. 1.** Характерные температурные зависимости величины  $In$  для случая рассеяния на акустических фононах (деформационный потенциал, кривая  $DA$ ) и оптических фононах (поляризационный потенциал, кривая  $PO$ ), пунктиром показаны высокотемпературные асимптотики, имеющие обратную корневую зависимость ( $\sim T_e^{-1/2}$ ).

в высокотемпературном пределе  $In \sim T_e^{-1/2}$ . В случае рассеяния на оптических фононах зависимость  $In$  от  $T_e$  более резкая, однако в пределе высоких температур  $In \sim T_e^{-1/2}$ , так же как и для случая рассеяния на акустических фононах.

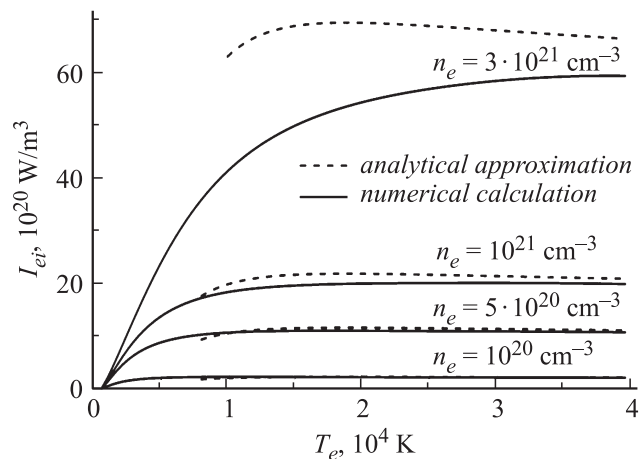
Приведем оценки скорости обмена энергией между электронами и решеткой для практически важного случая диоксида кремния. В  $\text{SiO}_2$  имеется взаимодействие как с акустическими, так и с оптическими фононами. Обычно рассматривают две ветви оптических фононов с энергиями 153 и 63 meV и акустическую ветвь с  $s = 5935$  m/s и  $q_D = 2.6 \cdot 10^{-24}$  kg · m/s [11]. Остальные параметры следующие:  $D = 6$  eV [11],  $\varepsilon_\infty = 2.9$ ,  $\varepsilon = 3.9$ ,  $\rho = 2649$  kg/m<sup>3</sup>,  $m_e = 0.5m_0$  [13].

Рис. 2 иллюстрирует вклад различных механизмов рассеяния электронов в скорость обмена энергией между перегретыми электронами и решеткой. Как видно, основной вклад в области низких электронных температур в величину  $I_{ei}$  дает рассеяние на высокоэнергичной ветви оптических фононов. В области высоких  $T_e$  становится существенным учитывать взаимодействие с акустическими фононами. На



**Рис. 2.** Вклад различных механизмов рассеяния электронов на фононах в  $\text{SiO}_2$  в скорость теплообмена между электронами и решеткой для  $n_e = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ : DA — вклад акустических фононов, PO1 — вклад оптических фононов с энергией 153 meV, PO2 — вклад оптических фононов с энергией 63 meV, сплошные кривые — численный расчет по формулам (2) и (3), пунктирные кривые — расчет по формулам (4) и (5).

рис. 3 показаны зависимости скорости электрон-ионного теплообмена для  $\text{SiO}_2$  от электронной температуры при различных концентрациях, рассчитанные по формулам (2), (3), и их сравнение с аналитическими аппроксимациями (4) и (5). Из рисунка видно, что для достигаемых в экспериментах по облучению  $\text{SiO}_2$  ультракороткими лазерными импульсами концентраций фотовозбужденных электронов порядка  $10^{20} - 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  [2] и электронных температур порядка  $10^4 \text{ K}$  предложенные в работе аналитические аппроксимации (4) и (5) дают приемлемый результат. Конечно, реальная погрешность вычисления величины потока  $I_{ei}$  может быть связана с нарушением допущений, сделанных при упрощении исходного выражения (1). Например, значение эффективной массы у высокоэнергичного электрона может отличаться от значения эффективной массы электрона у дна зоны проводимости. Соответственно представленные в работе расчеты для высоких электронных температур носят оценочный характер. Тем не менее, ввиду отсутствия надежных экспериментальных данных и более



**Рис. 3.** Зависимости скорости электрон-ионного теплообмена в  $\text{SiO}_2$  от электронной температуры при различных концентрациях: сплошные кривые — численный расчет по формулам (2) и (3), пунктирные кривые — расчет по формулам (4) и (5).

детальных вычислений величины потока  $I_{ei}$ , полагаем, что представленные в работе результаты будут полезны для количественного анализа воздействия сверхкоротких лазерных импульсов на диэлектрики (в частности,  $\text{SiO}_2$ ).

Таким образом, в работе получены температурные и концентрационные зависимости потока энергии от горячих электронов, сгенерированных при воздействии ультракороткого лазерного импульса на диэлектрики, к решетке для случаев рассеяния электронов на деформационном потенциале акустических фононов и поляризационном потенциале оптических фононов. Показано, что величина потока не является пропорциональной разности между электронной и решеточной температурами, и это следует учитывать при моделировании воздействия ультракоротких лазерных импульсов на диэлектрики.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 14-12-00351 и при государственной финансовой поддержке ведущих университетов РФ (субсидия 074-U01).

**Список литературы**

- [1] *Ионин А.А., Кудряшов С.И., Макаров С.В* и др. // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96. В. 6. С. 413–418.
- [2] *Mao S.S., Quere F., Guizard S.* et al. // Appl. Phys. A. 2004. V. 79. P. 1695–1709.
- [3] *Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б.* Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика. М.: Физматлит, 2008. 312 с.
- [4] *Lin Z., Zhigilei L.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 075133.
- [5] *Петров Ю.В., Иногамов Н.А., Мигдал К.П.* // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. В. 1. С. 14–31.
- [6] *Булгакова Н.М., Стоян Р., Розенфельд А.* // Квантовая электроника. 2010. Т. 40. В. 11. С. 966–985.
- [7] *Ramer A., Osmani O., Rethfeld B.* // J. Appl. Phys. 2014. V. 116. P. 053508.
- [8] *Яковлев Е.Б., Поляков Д.С.* // Известия вузов. Приборостроение. 2015. Т. 58. В. 8. С. 664–669.
- [9] *Scheblanov N., Silaeva E., Itina T.* // Appl. Surf. Sci. 2012. V. 258. P. 9417–9420.
- [10] *Fischetti M.V., DiMaria D.J., Brorson S.D.* et al. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. P. 8124–8142.
- [11] *Kaiser A., Rethfeld B., Vicanek M., Simon G.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 11437–11450.
- [12] *Басс Ф.Г., Гуревич Ю.Г.* Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Физматлит, 1975. 399 с.
- [13] *Некрашевич С.С., Гриценко В.А.* // ФТТ. 2014. Т. 56. В. 2. С. 209–223.