

Фотоиндуцированная неустойчивость и фазовый переход полупроводник–металл в системе Пайерлса

© А.Л. Семенов

Ульяновский государственный университет,
432700 Ульяновск, Россия

E-mail: semenov@quant.univ.simbirsk.su

(Поступила в Редакцию 3 февраля 1998 г.
В окончательной редакции 21 мая 1998 г.)

Построена микроскопическая теория образования электрон-фононной неустойчивости и термодинамически неравновесного фазового перехода полупроводник–металл в системе Пайерлса при оптическом возбуждении электрон-дырочных пар. Получено уравнение, определяющее зависимость параметра порядка фазового перехода и однозначно связанной с ним ширины запрещенной зоны электронного спектра от концентрации n электронов в зоне проводимости. Вычислена критическая концентрация $n = n_c$, выше которой полупроводниковая фаза системы является неустойчивой по отношению к переходу в металлическое состояние. Проведено сравнение с экспериментом по облучению пленки двуокиси ванадия на подложке лазерным импульсом.

Система Пайерлса, рассматриваемая в настоящей работе, представляет собой одномерную цепочку атомов, на каждом из которых находится по одному внешнему электрону. В высокотемпературной металлической фазе атомы в цепочке расположены эквидистантно, а электронная зона проводимости заполнена наполовину. При охлаждении, когда температура достигает некоторого критического значения T_0 , металлическая фаза становится неустойчивой, и происходит фазовый переход металл–полупроводник. Атомы в цепочке при этом попарно сближаются [1].

Теоретические результаты, полученные на основе модели Пайерлса, используются для описания экспериментально наблюдаемых свойств целого ряда квазиодномерных материалов: комплексных соединений платины [1], соединения TaS₃ [2], органических проводников [3], оксидных ванадиевых бронз [4], вещества NbSe₃ [5] и т.п. [5–7]. В частности, в рамках этой модели удастся объяснить влияние на фазовый переход металл–полупроводник в диоксиде ванадия таких факторов, как одноосное давление [8], легирование [9,10], фонон-фононное взаимодействие [8,11], сцепление пленки VO₂ с подложкой [12], адсорбция и т.п. [13].

Известно, что в постоянном электрическом поле при некотором пороговом значении его напряженности E_t в низкотемпературной фазе система Пайерлса наблюдается термодинамически неравновесный фазовый переход в состояние с движущейся волной зарядовой плотности [5]. Данный переход в зависимости от конкретных условий может быть как второго, так и первого рода. Например, в NbSe₃ у вольт-амперной характеристики при температуре $T = 26.5$ К имеется характерная для переходов первого рода гистерезисная зависимость, в то время как при $T = 34$ К гистерезис отсутствует [5].

Поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса при оптическом возбуждении в ней неравновесных электрон-дырочных пар экспериментально изучалось на примере диоксида ванадия [14,15]. Было показано, что

при достаточно высоких уровнях фотовозбуждения происходят потеря устойчивости полупроводникового состояния и переход в металлическую фазу за характерное время, приближенно равное одной пикосекунде.

В настоящей работе предлагается микроскопическая теория, описывающая поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса при межзонном фотовозбуждении в ней неравновесных электрон-дырочных пар. Предполагается, что такое возбуждение может быть обусловлено, например, дипольными переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости под действием падающего лазерного излучения [16]. В рамках построенной теории проводится интерпретация эксперимента [15] по облучению двуокиси ванадия лазерным импульсом.

1. Электронный спектр системы

Рассмотрим цепочку атомов, на каждом из которых находится по одному внешнему электрону. Гамильтониан электронной подсистемы в приближении сильной связи запишем в следующем виде [17]:

$$H = \sum_{n\sigma} B_{n,n+1} \left(a_{n\sigma}^+ a_{n+1,\sigma} + a_{n+1,\sigma}^+ a_{n,\sigma} \right) + \frac{1}{2} \sum_{n,m,\sigma,\delta} c(n-m) a_{n,\sigma}^+ a_{m,\delta}^+ a_{m,\delta} a_{n,\sigma}, \quad (1)$$

где n — номер атома в цепочке, $\sigma = \pm 1$ — индекс, характеризующий направление спина, $B_{n,n+1}$ — интеграл перекрытия волновых функций n -го и $(n+1)$ -го атомов, $a_{n,\sigma}^+$, $a_{n,\sigma}$ — соответственно операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ на атоме n ,

$$c(n-m) = \langle n, \sigma; m, \delta | U^{(2)} | m, \delta; n\sigma \rangle \quad (2)$$

— матричный элемент двухчастичного межэлектронного взаимодействия с потенциалом $U^{(2)}$.

Для узкозонных систем (в частности, для модели Пайерлса) расстояния $r_{n,n+1}$ между соседними атомами в несколько раз превышают эффективный радиус R атомной волновой функции электрона. В этом случае $B_{n,n+1} \sim \exp(-r_{n,n+1}/R)$ [18]. Расстояние $r_{n,n+1}$ запишем в форме

$$r_{n,n+1} = r_0 + (-1)^{n+1} R \xi, \quad (3)$$

где r_0 — межатомное расстояние в металлической фазе, ξ -параметр удвоения периода одномерного кристалла. С учетом (3) интеграл перекрытия $B_{n,n+1}$ принимает вид

$$B_{n,n+1} = b \exp((-1)^n \xi), \quad (4)$$

где b — интеграл перекрытия в металлической фазе ($\xi = 0$). Фазы атомных волновых функций при записи (1) выбираются таким образом, что b в (4) является действительной величиной.

Используя уравнение Гейзенберга для описания эволюции некоторого оператора f [17]

$$-i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} = [H, f] \quad (5)$$

и пользуясь коммутационными соотношениями для фермиевских операторов вторичного квантования, из (1) получаем

$$i\hbar \frac{\partial a_{m,\sigma}}{\partial t} = (B_{m,m+1} a_{m+1,\sigma} + B_{m-1,m} a_{m-1,\sigma}) + \sum_{n,\delta} c(n-m) a_{n,\delta}^+ a_{m,\sigma}. \quad (6)$$

Введем стандартным образом функцию Грина рассматриваемой системы [19]

$$G(m, \sigma, t_1; n, \delta, t_2) = -i \langle T a_{m,\sigma}(t_1) a_{n,\delta}^+(t_2) \rangle, \quad (7)$$

где T — оператор хронологического упорядочения. Используя (6), для функции Грина (7) находим следующее уравнение (для удобства обозначено $G(m, \sigma, t_1; n, \delta, t_2) = G(m, n)$):

$$i\hbar \frac{\partial G(m, n)}{\partial t_1} = B_{m,m+1} G(m+1, n) + B_{m-1,m} G(m-l, n) - i \sum_{p,\gamma} c(p-m) \langle T a_{p,\gamma}^+(t_1) a_{p,\gamma}(t_1) a_{m,\sigma}(t_1) a_{n,\delta}^+(t_2) \rangle + \delta_{n,m} \delta(t_1 - t_2). \quad (8)$$

Здесь $\delta_{m,n}$, $\delta(t)$ — соответственно символ Кронекера и δ -функция.

Дальнейший анализ уравнения (8) проведем в приближении Хаббарда, в котором учитывается взаимодействие только между электронами, находящимися в одном атоме,

$$c(m-n) = c_0 \delta_{m,n}. \quad (9)$$

Расцепляя в (8) трехчастичный коррелятор с использованием теоремы Вика [19], вводя параметр антиферромагнитного упорядочения ζ ($0 \leq \zeta \leq 1$) по формуле

$$\langle a_{m,\sigma}^+ a_{m,\sigma} \rangle = \frac{1}{2} (1 + \sigma(-1)^m \zeta) \quad (10)$$

и переходя в Фурье-пространство по временной и пространственной переменной, получаем четырехкомпонентную (из-за удвоения периода кристаллической решетки в полупроводниковой фазе системы) матрицу Грина

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix},$$

$$G_{11}(\omega, k) = G_{12}(\omega, k) = \frac{\hbar\omega - c_0(1 + \zeta)/2 + 2b \operatorname{ch}(\xi) \cos(k) - 2ib \operatorname{sh}(\xi) \sin(k)}{(\hbar\omega - c_0/2)^2 - (c_0\zeta/2)^2 - (2b \operatorname{ch}(\xi) \cos(k))^2 - (2b \operatorname{sh}(\xi) \sin(k))^2}. \quad (11)$$

Компоненты $G_{22} = G_{21}$ получаются из (11) путем замены $\zeta \rightarrow -\zeta$, $i \rightarrow -i$. С учетом (11) находим эффективный одноэлектронный спектр ε_k системы

$$\varepsilon_k = \hbar\omega_k = \frac{c_0}{2} \pm \sqrt{4b^2 (\cos^2(k) + \operatorname{sh}^2(\xi)) + (c_0\zeta/2)^2}. \quad (12)$$

Легко видеть, что щель запрещенных энергий в спектре (12) может образовываться либо благодаря удвоению периода кристаллической решетки (в (3) $\xi \neq 0$), либо благодаря антиферромагнитному упорядочению (в (10) $\zeta \neq 0$). При этом, поскольку на каждый атом приходится по одному электрону, при температуре $T = 0$ состояния ниже запрещенной зоны в (13) полностью заполнены электронами, а выше — пустые.

2. Уравнение равновесия

Рассмотрим поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса при возбуждении в ней неравновесных электрон-дырочных пар. Будем предполагать, что данное возбуждение обусловлено вынужденными переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости благодаря, например, дипольному электрон-фотонному взаимодействию с падающим излучением. Известно, что характерное время внутризонной релаксации электронов $\tau_e \sim 10^{-14}$ s значительно меньше времени межзонной релаксации $\tau \sim 10^{-11}$ s [20]. Поэтому при облучении системы световым полем с постоянной амплитудой приближенно считают [21], что внутри каждой электронной зоны устанавливается термодинамическое равновесие электронов со своим соответствующим данной зоне квазиуровнем Ферми. Вызванное внешним облучением нарушение термодинамического равновесия между зонами выражается различием соответствующих квазиуровней Ферми между собой.

Рассмотренный выше подход к описанию термодинамически неравновесной системы, состоящей из совокупности термодинамически равновесных подсистем, можно распространить и на случай, когда падающее излучение имеет адиабатически медленно меняющуюся амплитуду A (изменение амплитуды поля ΔA за время $\tau_e \sim 10^{-14}$ s много меньше A). Это связано с тем, что электронная подсистема внутри каждой из зон успевает полностью отслеживать изменение поля и поэтому в любой момент времени находится в состоянии термодинамического равновесия. Данная ситуация в некоторой степени аналогична обычно встречающейся при описании термодинамически равновесных систем при адиабатически медленном изменении внешних параметров.

В дальнейшем мы ограничимся построением теории именно для такого случая, при этом переходные процессы, происходящие в системе за время $\tau_e \sim 10^{-14}$ s при прохождении крутого фронта или спада светового импульса, нами обсуждаться не будут.

Свободная энергия F_j электронной подсистемы j -й зоны ($j = 1, 2$) определяется соотношением

$$F_j = \mu_j N_j - k_B T \sum_k \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\mu_j - \varepsilon_k}{k_B T} \right) \right), \quad (13)$$

где μ_j, N_j — соответственно квазиуровень Ферми и число электронов j -й зоны. Суммирование по k идет в пределах j -й зоны спектра (12) ($|k| < \pi/2$ для $j = 1$ и $\pi/2 < |k| < \pi$ для $j = 2$). В дальнейшем ограничимся рассмотрением случая, когда антиферромагнитное упорядочение отсутствует (в (12) $\zeta = 0$).

Известно, что характерное время релаксации фоновой подсистемы $\tau_p \sim 10^{-13}$ s [20]. Поэтому в моменты времени, когда амплитуда импульса падающего излучения за отрезок времени $\tau_p \sim 10^{-13}$ s изменяется незначительно (адиабатически медленное изменение внешнего параметра), фоновая подсистема успевает релаксировать к своему динамически равновесному состоянию, зависящему от мгновенной амплитуды импульса.

В этом случае свободную энергию кристаллической решетки с учетом структурных искажений (3) можно описывать в гармоническом приближении выражением следующего вида:

$$F_c = F_0 + \frac{\gamma}{2} \sum_m (i_{m,m+1} - I_0)^2, \quad (14)$$

где F_0 — свободная энергия, характеризующая динамику решетки, γ — коэффициент жесткости решетки при статических смещениях атомов (3). Формула (14) записана в приближении молекулярного поля [1], в котором предполагается, что фоновая часть F_0 не зависит от параметра ξ , отвечающего за статические искажения. С физической точки зрения данное приближение предполагает отсутствие взаимодействия между динамическими (с частотой $\omega \neq 0$) и статическими (с частотой $\omega = 0$) фоновыми модами.

С учетом (3) из соотношения (14) получаем

$$F_c = F_0 + \frac{A}{2} \xi^2, \quad (15)$$

где $A = \gamma N R^2$.

Для того чтобы рассматриваемая термодинамически неравновесная система находилась с стационарным состоянием динамического равновесия, необходимо равенство нулю обобщенной силы f , соответствующей обобщенной координате ξ ,

$$f \equiv - \left(\frac{\partial F_1}{\partial \xi} \right)_{T, N_1} - \left(\frac{\partial F_2}{\partial \xi} \right)_{T, N_2} - \left(\frac{\partial F_c}{\partial \xi} \right)_T = 0. \quad (16)$$

Отсюда, принимая во внимание формулы (13) и (15), находим

$$f = -A\xi + 2 \sum_{|k| \leq \tau/2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \xi} \text{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) = 0. \quad (17)$$

Выражение (17) представляет собой уравнение равновесия системы Пайерлса, определяющее поведение параметра ξ при возбуждении неравновесных электрон-дырочных пар.

Коэффициент разложения A свободной энергии F_c кристаллической решетки в ряд по параметру порядка ξ выражается через критическую температуру T_0 термодинамически равновесного (в отсутствие светового поля) фазового перехода металл–полупроводник и другие характеристики системы [8,10]. Условием равновесного фазового перехода металл–полупроводник является потеря устойчивости металлической фазы ($\partial^2 F(T_0, \xi = 0) / \partial \xi^2 = 0$, где F — свободная энергия системы). В отсутствие светового поля квазиуровни Ферми валентной зоны и зоны проводимости спектра (12) равны нулю: $\mu_{1,2} = \mp \mu = 0$. Отсюда с учетом (17), (12) имеем

$$A = 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial \xi^2} \text{th} \left(\frac{\varepsilon_k}{2k_B T_0} \right) \right) \Big|_{\xi=0}. \quad (18)$$

Вычисляя сумму в (18), приближенно получаем

$$A = \frac{4bN}{\pi} \left(\ln \left(\frac{\pi b}{2k_B T_0} \right) + 1 \right). \quad (19)$$

С физической точки зрения в качестве внешне контролируемого параметра, характеризующего степень фотовоздействия, удобно рассматривать суммарную, включающую как равновесные, так и неравновесные возбуждения, концентрацию электрон-дырочных пар n . Для этого в дополнение к соотношению (17) необходимо записать уравнение электронейтральности системы, связывающее n и квазиуровень Ферми μ ,

$$n = \frac{N}{2} - \sum_{|k| \leq \pi/2} \text{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right). \quad (20)$$

Таким образом, уравнения (17), (12) с учетом (20) образуют замкнутую систему для определения параметра структурных искажений решетки ξ (3) при заданной температуре T и концентрации электрон-дырочных пар n .

3. Связь между параметром порядка ξ фазового перехода полупроводник–металл и концентрацией n электрон-дырочных пар

Анализ уравнений (17), (20) проведем в предположении, что система Пайерлса является невырожденным либо слабо вырожденным полупроводником

$$\mu - 2b \operatorname{sh} \xi < 2k_B T. \quad (21)$$

Соотношение (21), накладывающее ограничение на пределы изменения квазиуровня Ферми μ , с учетом уравнения (20) эквивалентно приближенному неравенству, ограничивающему концентрацию электрон-дырочных пар n сверху,

$$n < n_1 = \frac{8N}{3\pi} \sqrt{\frac{k_B T \operatorname{sh} \xi}{b}}. \quad (22)$$

Используя формулы (17), (20), находим приближенное уравнение для параметра порядка фазового перехода металл–полупроводник ξ

$$A\xi - 4b \left(\frac{N\xi}{\pi} \operatorname{sh}(\xi) K(\sqrt{1 - \operatorname{th}^2 \xi}) - n \operatorname{ch}(\xi) \right) = 0, \quad (23)$$

где $K(x)$ — полный нормальный эллиптический интеграл первого рода.

С учетом того факта, что для реальных физических систем концентрация электрон-дырочных пар $n \ll N$, а параметр порядка фазового перехода металл–полупроводник системы $\xi \leq 0.5$ [1–6], из (23) приближенно получаем следующее уравнение:

$$n = \frac{N\xi}{\pi} \ln \left(\frac{\xi_0}{\xi} \right), \quad (24)$$

где

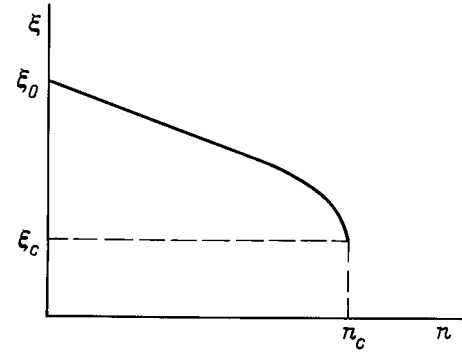
$$\xi_0 = \frac{\pi}{2} \exp \left\{ \operatorname{Arcsin} \left(\frac{\pi}{4} \right) - \frac{A\pi}{4bN} \right\} \quad (25)$$

— параметр порядка фазового перехода металл–полупроводник при $n = 0$.

Схематический график зависимости $\xi(n)$ при учете условия устойчивости по отношению к пространственно однородным флуктуациям параметра порядка фазового перехода металл–полупроводник ξ

$$\frac{\partial n}{\partial \xi} < 0 \quad (26)$$

показан на рисунке. Из него видно, что при увеличении концентрации n электрон-дырочных пар до значения n_c



Схематический график зависимости параметра порядка фазового перехода металл–полупроводник ξ от суммарной концентрации электрон-дырочных пар n . Величины ξ_c и n_c определяются формулой (27).

параметр порядка фазового перехода металл–полупроводник ξ плавно уменьшается до значения ξ_c , где

$$n_c = \frac{N\xi_0}{\pi c}, \quad \xi_c = \frac{\xi_0}{c}. \quad (27)$$

В точке n_c происходит скачкообразное уменьшение ξ от ξ_c до нуля (фазовый переход в металлическое состояние).

4. Численные оценки, сравнение с экспериментом и обсуждение полученных результатов

Численное значение критической концентрации n_c фотовозбужденных электрон-дырочных пар, инициирующих фазовый переход полупроводник–металл в системе Пайерлса, оценим с использованием формулы (27) для двуокиси ванадия. Положим характерные для VO_2 численные значения параметров [6]: концентрация атомов ванадия $N \approx 7 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, ширина запрещенной зоны в полупроводниковой фазе $E_g \approx 0.6 \text{ eV}$, ширина зоны проводимости в металлической фазе $E_0 \approx 1.2 \text{ eV}$. Тогда из (12), (27) находим

$$\xi_0 \approx \frac{E_g}{E_0} \approx 0.5, \quad n_c \approx 4 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}. \quad (28)$$

Экспериментальное исследование поведения пленки двуокиси ванадия на алюминиевой подложке при облучении ее лазерным импульсом с плотностью мощности $P \approx 7 \cdot 10^8 \text{ W/cm}^2$ и длительностью $6 \cdot 10^{-12} \text{ s}$ проводилось в работе [15]. Было зарегистрировано, что при энергии возбуждающих фотонов $\hbar\omega_0 = 1.17 \text{ eV}$ VO_2 переходит из полупроводникового состояния в металлическое через время $\tau_0 \sim 10^{-12} \text{ s}$ после начала импульса. После этого металлическая фаза остается устойчивой на протяжении достаточно длительного времени t ($t > 10^{-9} \text{ s}$). Если энергия возбуждающих фотонов $\hbar\omega_0 = 2.34 \text{ eV}$, потеря устойчивости полупроводникового состояния двуокиси ванадия имеет место спустя время $t \sim 10^{-9} \text{ s}$ после начала облучения.

Для объяснения вышеописанного экспериментально наблюдаемого явления проведем численную оценку максимально возможного изменения температуры ΔT образца под действием лазерного облучения. Для этого рассмотрим очень тонкую (~ 1 nm) приповерхностную, наиболее сильно нагреваемую область пленки в пренебрежении процессами теплопередачи и в предположении (достаточно условном на малых временах $t < 10^{-12}$ s), что вся поглощаемая энергия излучения успевает переходить в тепло. Используя приближенную формулу

$$\Delta T = \frac{\alpha P \Delta t}{c \rho} \quad (29)$$

(где α , c , ρ — соответственно коэффициент оптического поглощения, удельная теплоемкость и плотность материала пленки, Δt — время облучения), положив характерные для VO₂ численные значения параметров ($\alpha \sim 10^5$ cm⁻¹ [6], $c \sim 1$ J/(g · K), $\rho \approx 10$ g/cm³, $\Delta t = \tau_0 \sim 10^{-12}$ s), получаем $\Delta T \approx 10$ K. Учитывая, что температура термодинамически равновесного фазового перехода полупроводник–металл в двуокиси ванадия $T_0 \cong 340$ K, приходим к выводу о том, что при комнатной температуре фотоиндуцированный переход в металлическую фазу, происходящий за время $\tau_0 \sim 10^{-12}$ s, не может быть объяснен с точки зрения теплового механизма.

Вместе с тем устойчивость металлической фазы двуокиси ванадия после прохождения всего импульса ($\Delta t \sim 6 \cdot 10^{-12}$ s), по-видимому, связана с достаточно высокой температурой T пленки ($T > T_0 \cong 340$ K), поскольку в соответствии с формулой (29) в этом случае $\Delta T \approx 60$ K.

Отметим, что наблюдаемая при энергии возбуждающих фотонов $\hbar\omega_0 = 2.3$ eV задержка фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник–металл на время $t \sim 10^{-9}$ s, с нашей точки зрения, обусловлена большим временем жизни τ_π неравновесных электронов и дырок в π^* -зоне [6,15], что замедляет на соответствующее время процесс нагрева пленки. В отличие от авторов [15] мы предполагаем, что в этом случае фотоиндуцированный переход в металлическую фазу обусловлен чисто тепловым механизмом, поскольку $t_\pi 10^{-9}$ s $\gg \tau \sim 10^{-11}$ s [20], и поэтому концентрация неравновесных электрон-дырочных пар в d -зоне пренебрежимо мала ($n \ll n_c$).

Оценим теперь концентрацию n неравновесных электрон-дырочных пар, возбуждающихся в d -зоне двуокиси ванадия в условиях эксперимента [15] при облучении пленки импульсом с энергией фотона $\hbar\omega_0 = 1.17$ eV. Для этого воспользуемся следующим приближенным кинетическим уравнением [22]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\alpha P}{\hbar\omega_0} - \frac{n}{\tau} - \gamma n^3, \quad (30)$$

где γ — константа нелинейной Оже-рекомбинации неравновесных носителей.

Учитывая, что время межзонной электронной релаксации в VO₂ $\tau \sim 10^{-11}$ s [20], и положив $\gamma \sim 10^{-30}$ cm⁶/s (константа γ для ряда хорошо исследованных полупроводников, таких как Si, GaAs и т.д., меняется в пределах $\gamma \sim 10^{-28} - 10^{-31}$ cm⁶/s [22–24]), получаем приближенное решение уравнения (30)

$$n_0^2 \gamma t = \frac{1}{6} \ln \frac{n_0^2 + n_0 n + n^2}{(n_0 - n)^2} - \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\text{Arctg} \left(\frac{2n + n_0}{\sqrt{3}n_0} \right) - \text{Arctg} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \right), \quad (31)$$

где

$$n_0 = n(t \rightarrow \infty) = \sqrt[3]{\frac{\alpha P}{\hbar\omega_0 \gamma}}. \quad (32)$$

При выводе соотношения (31) мы пренебрегли процессами линейной рекомбинации электрон-дырочных пар, поскольку второе слагаемое в правой части уравнения (30) в данных условиях мало по сравнению с суммой двух других [22–24].

Подставляя в (31), (32) характерные численные значения параметров: $\alpha \sim 10^5$ cm⁻¹, $P \approx 7 \cdot 10^8$ W/cm², $\hbar\omega_0 = 1.17$ eV, $\gamma \sim 10^{-30}$ cm⁶/s, находим, что предельная концентрация неравновесных электрон-дырочных пар $n_0 \sim 10^{21}$ cm⁻³ устанавливается за характерное время $t \approx 1/(\gamma n_0^2) \approx 10^{-12}$ s.

Отметим, что полученное нами численное значение концентрации $n \sim 10^{21}$ cm⁻³ неравновесных электрон-дырочных пар, фотовозбужденных в условиях эксперимента [15], несколько меньше указываемого авторами работы [25], где при облучении пленки VO₂ на алюминиевой подложке лазерным импульсом с плотностью мощности $P \approx 6 \cdot 10^8$ W/cm² и длительностью $5 \cdot 10^{-11}$ s концентрация неравновесных носителей составляла величину $n \sim 10^{22}$ cm⁻³. Данное отличие, по-видимому, связано с некоторым произволом выбора параметров материала α и γ в формуле (32). Эти параметры, кроме того, могут варьироваться от образца к образцу в достаточно широких пределах в зависимости от способа изготовления пленки VO₂. В частности, коэффициент оптического поглощения α меняется в пределах одного порядка [6].

Нетепловые фотоиндуцированные изменения структуры кристаллической решетки, такие как аморфизация [22,24] и переход в новую кристаллическую фазу [22,26], могут наблюдаться в целом ряде материалов (Si, GaAs, InSb, полупроводниках группы A₃B₅ и т.п.) и происходят при неравновесных концентрациях носителей $n \sim 10^{21} - 10^{22}$ cm⁻³ в условиях облучения мощными лазерными импульсами пико- и фемтосекундного диапазона [22,24,26].

Таким образом, развитая в настоящей работе микроскопическая теория фотоиндуцированной неустойчивости и фазового перехода полупроводник–металл с одновременным изменением кристаллической структуры в

системе Пайерлса в состоянии удовлетворительно объяснить совокупность экспериментально наблюдаемых явлений, происходящих при облучении пленки двуокиси ванадия на подложке мощным коротким лазерным импульсом [15]. Оцененное из теории численное значение критической концентрации неравновесных электрон-дырочных пар (28), инициирующих этот переход, по порядку величины совпадает с оцененным из экспериментальных данных для VO_2 [15,25] и результатами других работ по нетепловому фотоиндуцированному изменению структуры кристаллической решетки полупроводников [22,26].

Итак, в настоящей работе показано, что термодинамически неравновесный фазовый переход полупроводник–металл, имеющий место в системе Пайерлса при приложении постоянного ($\omega = 0$) электрического поля большой напряженности [5], может также наблюдаться и в высокочастотном оптическом диапазоне ($\omega \neq 0$). В обоих случаях этот переход обусловлен возбуждением электронной подсистемы. Однако если при $\omega = 0$ определяющим является проявление коллективных свойств, приводящих к образованию электронного кристалла [27], то при $\omega \neq 0$ рассматриваемое явление может успешно описываться и в одноэлектронном приближении, полностью игнорирующем электрон-электронное взаимодействие (или учитывающем его по методу Хартри–Фока).

Список литературы

- [1] Л.Н. Булаевский. УФН. **115**, 2, 263 (1975).
- [2] В.Е. Минакова, Ю.И. Латышев, В.А. Волков. Письма в ЖЭТФ **62**, 5, 442 (1995).
- [3] Л.П. Горьков. УФН **144**, 3, 381 (1984).
- [4] А.А. Фотиев, В.Л. Волков, В.К. Капусткин. Оксидные ванадиевые бронзы. Наука, М., (1978). С. 151.
- [5] G. Gruner. Rev. Mod. Phys. **60**, 4, 1129 (1988).
- [6] А.А. Бугаев, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновский. Фазовый переход металл–полупроводник и его применение. Наука, Л. (1979). 183 с.
- [7] Р.О. Зайцев, Е.В. Кузьмин, С.Г. Овчинников. УФН **148**, 4, 603 (1986).
- [8] В.И. Емельянов, Н.Л. Левшин, А.Л. Семенов. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия **30**, 5, 52 (1989).
- [9] В.И. Емельянов, Н.Л. Левшин, А.Л. Семенов. ФТТ **31**, 10, 261 (1989).
- [10] А.Л. Семенов. ФТТ **36**, 7, 1974 (1994).
- [11] А.Л. Семенов. ФТТ **39**, 5, 925 (1997).
- [12] В.И. Емельянов, А.Л. Семенов. ФТТ **32**, 10, 3083 (1990).
- [13] В.И. Емельянов, Н.Л. Левшин, С.Ю. Поройков, А.Л. Семенов. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия **32**, 1, 63 (1991).
- [14] А.А. Бугаев, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновский. Письма в ЖЭТФ **33**, 12, 643 (1981).
- [15] А.А. Бугаев, В.В. Гудялис, Б.П. Захарченя, Ф.А. Чудновский. Письма в ЖЭТФ **34**, 8, 452 (1981).
- [16] А.Л. Семенов. ЖЭТФ **111**, 6, 2147 (1997).
- [17] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989). 768 с.

- [18] О. Маделунг. Физика твердого тела: локализованные состояния. Наука, М. (1985). С. 144.
- [19] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Статистическая физика. Наука, М. (1978). Ч. 2. 448 с.
- [20] Н.Р. Белашенков, В.Б. Карасев, А.А. Солунин, И.А. Хахаев, К.Ш. Цибадзе, Ф.А. Чудновский. ФТТ **36**, 8, 2475 (1994).
- [21] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. Наука, М. (1977). 688 с.
- [22] V.I. Emel'yanov, D.V. Babak. Laser Phys. **7**, 2, 514 (1997).
- [23] В.И. Емельянов, И.Ф. Уварова. ЖЭТФ **94**, 8, 255 (1988).
- [24] С.А. Ахманов, В.И. Емельянов, Н.И. Коротеев, В.Н. Семенов. УФН **147**, 4, 675 (1985).
- [25] А.А. Бугаев, А.В. Клочков. ФТТ **26**, 11, 3487 (1984).
- [26] Ю.В. Копаев, В.В. Меняйленко, С.Н. Молотков. ФТТ **27**, 11, 3288 (1985).
- [27] С.Н. Артеменко, А.Ф. Волков, С.В. Зайцев. УФН **166**, 4, 434 (1996).