

# Сверхбыстрые вибронные фазовые переходы в полупроводниках под действием фемтосекундных лазерных импульсов

© В.И. Емельянов, Д.В. Бабак

Международный Лазерный Центр Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 4 сентября 1998 г.  
В окончательной редакции 24 декабря 1998 г.)

Произведен учет межмодового ангармонического взаимодействия в теории сверхбыстрых ( $t \sim 10^{-13}$  s) вибронных фазовых переходов на поверхности полупроводников (Si, GaAs) под действием фемтосекундных лазерных импульсов. Получены условия плазменно-индуцированных переходов либо в состояние хаотической разупорядоченности положений атомов ("холодной жидкости"), либо в состояние с отличной от исходной кристаллической симметрией кристалла (новой кристаллической фазы). Показано, что в GaAs в случае перехода второго типа реализуется структура типа NaCl, причем этот переход обусловлен неустойчивостью ветви продольных оптических фононов. Сделаны соответствующие численные оценки для Si и GaAs.

Начиная с 80-х годов различными группами изучается эффект сверхбыстрого (на временах порядка  $10^{-13}$  s, меньших времени передачи энергии из электронной подсистемы в решетку  $\tau_{e-ph}$ ) изменения симметрии поверхности кристаллических полупроводников под действием фемтосекундных лазерных импульсов, генерирующих плотную электрон-дырочную (э-д) плазму. Такие сверхбыстрые лазерно-индуцированные фазовые переходы (ЛИФП) экспериментально изучались структурно-чувствительным методом регистрации отраженных первой и второй гармоник (ВГ) в Si [1–3], в GaAs [4–10] и в InSb [7]. Недавние эксперименты [9] в GaAs свидетельствуют о сверхбыстром схлопывании запрещенной зоны и переходе в металлическую фазу; при этом сигнал ВГ исчезает на временах порядка сотен фемтосекунд, что свидетельствует о переходе GaAs в centrosymmetric состояние [10].

Существуют две основные точки зрения на механизм сверхбыстрых структурных ЛИФП. В модели "холодной жидкости" (ХЖ) сверхбыстрое изменение симметрии кристалла в приповерхностном слое связывается с появлением разупорядочения положений атомов [1–3], которое можно трактовать как следствие неустойчивости континуума фононных мод. В модели новой кристаллической фазы (НКФ) результаты экспериментов [4] по фемтосекундному ЛИФП в GaAs трактуются с точки зрения плазменно-индуцированной неустойчивости одной фононной моды, приводящей к переходу в новое кристаллическое (centrosymmetric) состояние [11–13].

В теоретических работах [14–17] в качестве механизмов сверхбыстрого ЛИФП в полупроводниках рассмотрена неустойчивость поперечных акустических фононных мод. В данной работе будет показано, что сверхбыстрые структурные ЛИФП в полупроводниках могут быть связаны с неустойчивостью оптических фононных мод. Это объясняется следующими обстоятельствами.

Расчет свободной энергии как функции деформации и концентрации э-д плазмы [18] показал, что при ла-

зерном возбуждении в GaAs наиболее вероятен переход в centrosymmetric металлическую структуру типа NaCl, как наиболее близкую по энергии к исходной фазе цинковой обманки. Фазовый переход из структуры цинковой обманки GaAs в структуру типа NaCl происходит в результате сдвига подрешеток Ga и As относительно друг друга вдоль вектора  $\tau = 0.25s[111]b$  ( $\tau$  — вектор, направленный по диагонали гранцентрированной кубической ячейки,  $b$  — длина диагонали [19],  $s$  — параметр). При  $s = 1$  получается неcentrosymmetric структура GaAs, при  $s = 2$  centrosymmetric структура типа NaCl.

Относительные смещения двух подрешеток атомных плоскостей Ga и As вдоль направления вектора  $\tau$  соответствуют ветви продольных оптических (LO) фононов с  $q = 0$ . Таким образом, фазовый переход GaAs в структуру типа NaCl следует связать с плазменно-индуцированной неустойчивостью одной LO фононной моды с  $q = 0$ ,  $\Omega_0 = 5.3 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$  в центре зоны Бриллюэна. Аналогичный вывод может быть сделан и для случая Si.

В настоящей работе построена теория плазменно-индуцированной неустойчивости ветви LO мод. Проведен учет межмодового фонон-фононного взаимодействия, приводящего к сверхбыстрой трансформации структуры кристалла, описываемой временной эволюцией спектральной функции относительных атомных смещений. Показано, что в зависимости от условий облучения и характеристик кристалла возможен переход либо в состояние ХЖ, либо в состояние НКФ. Определены условия реализации каждого из этих состояний и проведена интерпретация экспериментов по индуцированию сверхбыстрых структурных ЛИФП в Si [1–3] и GaAs [4,8–10].

В отсутствие лазерной накачки результаты данной теории согласуются с результатами равновесной вибронной теории сегнетоэлектричества [20].

# 1. Замкнутая система уравнений вибронной модели кристалла в лазерном поле

Рассмотрение плазменно-индуцированной неустойчивости  $LO$  мод в GaAs и Si проведем на основе вибронной модели, предложенной в равновесной теории сегнетоэлектричества [20] и использованной в теории лазерно-индуцированных фазовых переходов [21].

В простейшей ("молекулярной") модели ковалентный кристалл представляется как система двухатомных молекул в элементарных ячейках [22]. Электронный спектр в такой модели состоит из двух (вырожденных) уровней с верхним уровнем  $a$ , соответствующим зоне проводимости, и нижним уровнем  $b$ , соответствующим валентной зоне. Частота перехода между уровнями  $\omega_{ab} = E_g/\hbar$ , где  $E_g$  — ширина запрещенной зоны.

Уравнения для Фурье-амплитуды  $LO$  фононной моды  $u_0 \equiv u_{q=0}$  с учетом взаимодействия с электронной подсистемой имеет вид (см. [21])

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial t^2} + \tilde{\omega}_0^2 u_0 = \frac{1}{\mu} |\theta| \Delta \rho_{aa} - \frac{1}{\mu} (\theta_{ab} \rho_{ba} + \theta_{ba} \rho_{ab}), \quad (1)$$

где  $\tilde{\omega}_0$  — частота предельного оптического фона без учета электрон-фононного ангармонизма,  $\mu$  — приведенная масса ячейки,  $\theta_{ab} = \theta_{ba}$  — недиагональные матричные элементы оптического потенциала деформации,  $|\theta| = |\theta_{aa} - \theta_{bb}|$ ,  $\theta_{bb} > \theta_{aa} > 0$ ,  $\rho_{aa}$ ,  $\rho_{ab}$  — диагональные и недиагональные элементы электронной матрицы плотности ( $\rho_{ab} = \rho_{ba}$ ),  $\Delta \rho_{aa} = \rho_{aa} - \rho_{aa}^0 \approx \rho_{aa}$  — изменение диагонального элемента матрицы плотности при лазерном возбуждении ( $\rho_{aa}^0$  — равновесное значение диагонального элемента). Из (1) следует, что в равновесии ( $\frac{\partial^2 u_0}{\partial t^2} = 0$ ) в отсутствие лазерной накачки ( $\rho_{ab} = \rho_{ba} = 0$ ,  $\Delta \rho_{aa} = 0$ )  $u_0 = 0$ , что соответствует исходной, нецентросимметричной диэлектрической фазе GaAs.

Уравнение для низкочастотного недиагонального элемента электронной матрицы плотности  $\rho_{ab} \sim \exp(-i\tilde{\omega}_0 t)$  имеет вид [21]

$$\frac{\partial \rho_{ab}}{\partial t} + i\omega_{ab} \rho_{ab} = \frac{i|\theta|u_0 \rho_{ab}}{\hbar} + \frac{i\theta_{ab} u_0 D_{ab}}{\hbar} - \frac{iC\xi_L \rho_{ab}}{\hbar}. \quad (2)$$

Здесь  $D_{ab} = \rho_{aa} - \rho_{bb} < 0$ ,  $C = C_{aa} - C_{bb}$ , где  $C_{aa}$ ,  $C_{bb}$  — матричные элементы акустического потенциала деформации,  $\xi_L = \text{div } \mathbf{u}_L$  — лазерно-индуцированная деформация среды,  $\mathbf{u}_L$  — вектор смещения среды, индуцированного действием лазерного излучения.

Уравнение для концентрации электронов проводимости  $n_e$  имеет вид

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = -\frac{n_e}{\tau} - \gamma_A n_e^3 + D_e \frac{\partial^2 n_e}{\partial z^2} + \frac{\alpha c E^2 (1-R)}{2\pi \hbar \omega} \exp(-\alpha z), \quad (3)$$

где  $\alpha$  ( $\text{см}^{-1}$ ) и  $R$  — соответственно коэффициенты оптического поглощения и отражения;  $\omega$ ,  $E$  — частота

и амплитуда лазерного поля на поверхности  $z = 0$ ,  $\gamma_A$  — постоянная Оже-рекомбинации,  $c$  — скорость света в вакууме,  $\tau$  — время линейной рекомбинации,  $D_e$  — коэффициент амбиполярной диффузии носителей по направлению нормали к поверхности.

Для получения зависимости  $\alpha$  от  $u_0$  запишем уравнение для высокочастотной части недиагонального элемента матрицы плотности  $\rho_{ab}^{(\omega)} \sim \exp(i\omega t)$

$$\frac{\partial \rho_{ab}^{(\omega)}}{\partial t} + i \left( \omega_{ab} - \frac{|\theta|u_0}{\hbar} + \frac{C\xi_L}{\hbar} \right) \rho_{ab}^{(\omega)} + \gamma_{ab} \rho_{ab}^{(\omega)} = -\frac{id_{ab} D_{ab}}{\hbar} E \exp\left(-\frac{\alpha z}{2}\right), \quad (4)$$

где  $d_{ab}$  — недиагональный матричный элемент дипольного момента,  $\gamma_{ab}$  — константа релаксации недиагонального элемента матрицы плотности. При учете зависимости электронной матрицы плотности от квазиимпульса из (4) можно получить выражение для коэффициента оптического поглощения двухзонного полупроводника в общем виде

$$\alpha = \alpha(\hbar\omega - E_{g0} - C\xi_L + |\theta|u_0) \approx \alpha_0 + \alpha' \frac{|\theta|u_0}{\hbar} + \frac{1}{2} \alpha'' \left( \frac{\theta u_0}{\hbar} \right)^2. \quad (5)$$

Для рассматриваемого случая прямозонного полупроводника

$$\alpha_0 = \text{const} \cdot \sqrt{\hbar\omega - E_g}, \quad \alpha' = \frac{\partial \alpha}{\partial \omega}, \quad \alpha'' = \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \omega^2}. \quad (6)$$

Уравнения (1)–(3), (5) составляют замкнутую систему вибронных уравнений кристалла в лазерном поле.

## 2. Лазерно-индуцированное размягчение ветви продольных оптических фононов и вибронный фазовый переход

Из (5) видно, что при ФП с возникновением статического смещения  $u_0 > 0$ , без учета влияния лазерно-индуцированной деформации

$$E_{g \text{ eff}} = E_{g0} - |\theta|u_0, \quad (7)$$

где в нестационарном переходном режиме  $u_0 \sim \exp(\gamma_0 t)$  (см. [17]).

Из (7) следует, что  $u_0 = E_g/|\theta| = b/4$  соответствует центросимметричной металлической фазе со структурой NaCl ( $E_{g \text{ eff}} = 0$ ).

Пренебрегая в (3) диффузией и линейной рекомбинацией ( $\gamma_A n_e^2 \gg \tau_p^{-1}$ ), получаем с учетом (5) для концентрации плазмы на поверхности  $z = 0$

$$n_e = \sqrt[3]{\frac{\alpha c E^2 (1-R)}{2\pi \hbar \omega \gamma_A}} \approx n_{e0} \left[ 1 + \frac{1}{3} \frac{\alpha'}{\alpha_0} \frac{|\theta|u_0}{\hbar} + \left( \frac{1}{6} \frac{\alpha''}{\alpha_0} - \frac{2}{9} \frac{(\alpha')^2}{(\alpha_0)^2} \right) \left( \frac{|\theta|u_0}{\hbar} \right)^2 \right], \quad (8)$$

где

$$n_{e0} = \sqrt[3]{\frac{\alpha_0 c E^2 (1 - R)}{2\pi \hbar \omega \gamma_A}}. \quad (9)$$

Используя (3), (8) и (6), выражаем приращение диагонального элемента матрицы плотности  $\rho_{aa} = n_e/n$  через  $u_0$ ; из (2) выражаем  $\rho_{ab}$ . Подставляя полученные выражения в (1), получаем замкнутое нелинейное уравнение для фурье-амплитуды предельной оптической моды с  $q = 0$

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial t^2} + \omega_0^2 u_0 = -|\Gamma_A| u_0^2. \quad (10)$$

Здесь перенормированная частота мягкого  $LO$  фонона

$$\omega_0^2 = \tilde{\omega}_0^2 \left( 1 - \frac{2|D_{ab}|\theta_{ab}^2}{E_{g0}\mu\tilde{\omega}_0^2} - k_1\xi_L - k_2n_{e0} \right), \quad (11)$$

где

$$k_1 = \frac{2\theta_{ab}^2 C |D_{ab}|}{E_{g0}^2 \mu \tilde{\omega}_0^2}, \quad k_2 = \frac{|\theta|^2}{6\mu n \tilde{\omega}_0^2 (\hbar\omega - E_{g0}).}$$

Константа электрон-решеточного ангармонизма

$$\Gamma_A = - \left\{ \frac{2\theta_{ab}^2 |\theta| |D_{ab}|}{\mu E_{g0}^2} + \frac{7|\theta|^3 n_{e0}}{72\mu n (\hbar\omega - E_g)^2} \right\}.$$

В отсутствие лазерной накачки ( $n_{e0} = 0$ ,  $\xi_L = 0$ ) выражение (11) совпадает с известной формулой для частоты мягкого оптического фонона, получаемой в равновесной вибронной теории сегнетоэлектричества [20]. Равновесный фазовый переход в кристаллическую фазу с новой симметрией происходит благодаря занулению эффективной частоты оптического фонона при критической температуре  $T_{cr}$ , определяемой из уравнения  $\text{th} \frac{E_{g0}}{2k_B T_{cr}} = \frac{E_{g0}\mu\tilde{\omega}_0^2}{2\theta_{ab}^2}$ , которое следует из (11) при  $\omega_0^2 = 0$  и совпадает с соответствующим уравнением [20]. Два дополнительных члена в (11) учитывают влияние концентрации неравновесной э-д плазмы  $n_{e0}$  и лазерно-индуцированной деформации  $\xi_L$ . Для области, где деформация размягчает частоту фонона ( $C\xi_L > 0$ ), имеем из (11) для квадрата частоты мягкого оптического фонона

$$\omega_0^2 = \Omega_0^2 (1 - |\sigma\xi_L|) \left( 1 - \frac{n_{e0}}{n_{cr}} \right). \quad (12)$$

Здесь квадрат частоты предельного оптического фонона в основном электронном состоянии ( $|D_{ab}| = 1$ ) с учетом влияния э-ф ангармонизма

$$\Omega_0^2 = \tilde{\omega}_0^2 \left( 1 - \frac{2\theta_{ab}^2 |D_{ab}|}{E_{g0}\mu\tilde{\omega}_0^2} \right), \quad \sigma = \frac{2\theta_{ab}^2 C |D_{ab}|}{E_{g0}^2 \mu \Omega_0^2} \quad (13)$$

и критическая концентрация э-д плазмы, при которой происходит зануление частоты оптического фонона

$$n_{cr} = (1 - |\sigma\xi_L|) n_{cr1}, \quad (14)$$

где критическая концентрация э-д плазмы в отсутствие деформации ( $\xi_L = 0$ )  $n_{cr1} = 6\mu\Omega_0^2(\hbar\omega - E_{g0})|\theta|^{-2}$ .

Размягчение частоты предельного оптического фонона ( $\omega_0 \rightarrow 0$ ) приводит к размягчению всей ветви  $LO$  фононов в окрестности  $q = 0$ , где частоты фононов  $\omega_q$  задаются формулой

$$\omega_q = \omega_0(1 - \beta q^2), \quad (15)$$

$\omega_0$  задается формулой (12) и  $\beta > 0$  — константа, которую можно определить из фоновой дисперсионной кривой  $LO$  фонона по формуле

$$\beta = - \frac{1}{2\omega_0} \frac{\partial^2 \omega_q}{\partial q^2} \Big|_{q=0}. \quad (16)$$

Формула (15) получается из простейшей модели решетки в виде одномерной системы упруго связанных атомных плоскостей Au и Ga.

Как следует из (15) и (12), при  $n_{e0} > n_{cr}$  частоты оптических фононов в окрестности  $q = 0$  становятся мнимыми

$$\omega_q = \pm i\gamma_q, \quad \omega_0 = \pm i\gamma_0; \quad \gamma_q = \gamma_0 - \beta\gamma_0 q^2, \quad (17)$$

где  $\gamma_q$  и  $\gamma_0$  — действительные величины, а фононные моды превращаются в неустойчивые моды относительных атомных смещений вдоль направления вектора  $\tau$ .

Перейдем теперь к нахождению спектральной функции атомных смещений.

### 3. Кинетическое уравнение для спектральной функции относительных атомных смещений

Гамильтониан системы фононов с учетом ангармонического взаимодействия оптических и акустических фононов имеет вид

$$H = H_0 + H_{inh} = \sum_q \hbar\omega_q \left( b_q^+ b_q + \frac{1}{2} \right) + \sum_{q_1 q_2} V_{q_1 q_2} (b_{q_1} a_{q_2} b_{q_1+q_2}^+ + b_{-q_1-q_2} a_{-q_2}^+ b_{-q_1}^+). \quad (18)$$

Здесь

$$V_{q_1 q_2} = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{\hbar^3}{8M\mu^2 N^3}} N^{-1/2} \times \frac{\sum_{n_1, n_2} \mathbf{f}_{n_1 n_2} \exp\{i(\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_{n_1} + \mathbf{q}_2 \mathbf{r}_{n_2})\}}{\sqrt{\omega_{q_1} \Omega_{q_2} \omega_{-q_1-q_2}}}, \quad (19)$$

$N$  — число атомов в кристалле;  $M$  — масса ячейки,  $\Omega_e = qs$  — частота акустического фонона,  $s$  — скорость звука,  $a_q$ ,  $a_{-q}^+$  и  $b_q$ ,  $b_{-q}^+$  — операторы уничтожения и порождения соответственно акустических и оптических фононов,  $\mathbf{r}_k$  — равновесный радиус-вектор  $k$ -й ячейки

$$\mathbf{f}_{k,l,m} = \left[ \frac{\partial^3 \Phi}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l \partial \mathbf{r}_m} \right]_{U_i=0}, \quad i = k, l, m,$$

где  $\Phi$  — энергия межатомного взаимодействия всего кристалла.

Определим спектральную функцию относительных атомных смещений по формуле

$$S(q) = \frac{\hbar}{\mu\omega_q} n_q, \quad n_q = \langle b_q^+ b_q \rangle. \quad (20)$$

Используя уравнения Гейзенберга для операторов устойчивых акустических и неустойчивых оптических мод, следующих из (18), получим уравнение для  $n(q)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_q}{\partial t} = 2\gamma_q n_q - \frac{i}{\hbar} \sum_{q_1} \left\{ V_{q_1, q-q_1} \langle b_q^+ b_{q_1} a_{q-q_1} \rangle \right. \\ \left. - V_{-q_1, -q+q_1} \langle b_q b_{q_1}^+ a_{q-q_1}^+ \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Из уравнений для  $b_q$ ,  $b_q^+$  и  $a_q^+$ , вводя в последнее константу затухания устойчивых акустических мод  $\delta_q$  и учитывая, что акустические фононы сильно демпфируются ( $\delta_q \gg \Omega_q, \gamma_q$ ), получаем для коррелятора  $\langle b_q^+ b_{q_1} a_{q-q_1} \rangle$  выражение:

$$\langle b_q^+ b_{q_1} a_{q-q_1} \rangle = \frac{i}{\hbar} \sum_{q_1} \frac{V_{-q_1, -q+q_1}}{\delta_{q-q_1}} n_{q_1} N_{q-q_1},$$

где  $N_{q-q_1} = \left( \exp\left(\frac{\hbar\Omega_{q-q_1}}{k_B T}\right) - 1 \right)^{-1}$  — числа заполнения акустической фононной моды  $q - q_1$ . Аналогичное выражение получается и для коррелятора  $\langle b_q b_{q_1}^+ a_{q-q_1}^+ \rangle$ .

Тогда с учетом определения (20) имеем из (21) искомого кинетическое уравнение для спектральной функции атомных смещений

$$\frac{\partial S(q)}{\partial t} = (\gamma_q + \gamma_{q_1}) S(q) + \frac{2}{\hbar^2} \sum_{q_1} \frac{V^2}{\delta_{q-q_1}} \frac{\omega_{q_1}}{\omega_q} N_{q-q_1} S(q_1). \quad (22)$$

Выражение для константы ангармонического взаимодействия  $V^2$ , следующее из (19) при условии  $n_{e0} > n_{cr}$ , имеет вид

$$\begin{aligned} V^2 \equiv V_{q_1, q-q_1} V_{-q_1, -q+q_1} = -\frac{1}{288} \frac{\hbar^3}{NM\mu^2} \frac{|f^2|}{\Omega_{q-q_1} \gamma_q^2} < 0, \\ |f|^2 \approx g^2 \left( \frac{W}{a^3} \right)^2, \end{aligned} \quad (23)$$

где  $g > 1$  — число ближайших соседей,  $W$  — энергия межатомного взаимодействия в ячейке. При выводе (23) использовано, что при  $n_{e0} > n_{cr}$  с учетом (17) имеет место равенство  $(\omega_{q_1} \omega_{-q_1} \omega_q \omega_{-q})^{-1/2} \approx -\gamma_q^{-2}$ .

#### 4. Диффузионный коллапс спектральной функции относительных атомных смещений

Для константы затухания устойчивых акустических фононных мод в (22) можно получить следующее выражение:

$$\delta_{q-q_1} = |q - q_1| b, \quad (24)$$

где  $b = \frac{2\pi\theta C_{ab} n_e^*}{\hbar\gamma_{ab} M s} \frac{n_e^*}{n}$ ,  $n_e^*$  — эффективная концентрация электронов проводимости в вырожденном полупроводнике, принимающих участие в поглощении фононов.

Полагая в (22)  $\gamma_{q_1} \approx \gamma_q$  и переходя от суммирования к интегрированию, с учетом (23) и (24) получаем линейное интегральное уравнение для спектральной функции

$$\frac{\partial S(q)}{\partial t} = 2\gamma_q S(q) - |A| \int_{-\infty}^{+\infty} dq_1 K(|q - q_1|) S(q_1), \quad (25)$$

где

$$|A| = \frac{1}{576\pi^2} \frac{n}{n_e^*} \frac{\gamma_{ab}}{\gamma_0^2} \frac{\hbar^2 |f|^2}{\mu^2 \theta_{ab}^2} a, \quad K(|q - q_1|) = \frac{N_{q-q_1}}{|q - q_1|^2}.$$

Делая замену переменных  $q_1 = q - \xi$  и раскладывая функцию  $S(q_1)$  в подынтегральном выражении в (25) в ряд Тейлора по  $\xi$ , из (25) получаем уравнение диффузии для спектральной функции атомных смещений в  $q$ -пространстве с отрицательным коэффициентом диффузии  $D$

$$\frac{\partial S(q)}{\partial t} = 2\gamma_q S(q) - |D| \frac{\partial^2 S}{\partial q^2}, \quad (26)$$

где модуль коэффициента спектральной диффузии

$$|D| = \frac{|A|}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi K(|\xi|) \xi^2 \equiv \frac{A}{2} \frac{2kT}{\hbar s} \int_{x_m}^{\infty} \frac{dx}{e^x - 1}.$$

Здесь нижний предел интегрирования определяется неопределенностью значения  $|\xi| = |\mathbf{q} - \mathbf{q}_1|$  (векторы  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{q}_1$  направлены вдоль [111]):  $x_m = (\hbar s/kT) \min |\xi| = (\hbar s/kT) 2\pi\alpha$ , где  $\alpha$  — коэффициент оптического поглощения.

Тогда коэффициент спектральной диффузии

$$\begin{aligned} |D| = \frac{\hbar}{576\pi^2} \frac{n}{n_e^*} \frac{\gamma_{ab}}{\Omega_0^2} \frac{k_B T}{a^5 \mu^2 s} g^2 \\ \times \left( \frac{W}{C_{ab}} \right)^2 \left( \frac{n_{e0}}{n_{cr}} - 1 \right)^{-1} \ln \left( \frac{2\pi\alpha \hbar s}{kT} \right). \end{aligned} \quad (27)$$

Будем считать, что в начальный момент (при  $t = 0$ )  $S(q, 0) = S_0 = \text{const}$ . Тогда решение уравнения (26) для неравновесной спектральной функции относительных атомных смещений имеет вид

$$S(q, t) = S_0 \frac{\exp(2\gamma_0 t)}{\sqrt{1 - 8\beta\gamma_0 |D| t^2}} \exp\left(-\frac{q^2}{\frac{1}{4\beta\gamma_0} - 2|D|t}\right). \quad (28)$$

Введем характерное время схлопывания спектра по формуле

$$t_m = \frac{1}{\sqrt{8|D|\beta\gamma_0}}. \quad (29)$$

Как видно из (28), на временах  $0 < t < t_m$  спектральная функция  $S(q, t)$  испытывает эволюцию от равномерного начального распределения к гауссовому распределению с растущим во времени максимумом в центре зоны Бриллюэна  $q = 0$  и уменьшающейся во времени шириной. В момент  $t = t_m$  спектральная функция оптических атомных смещений схлопывается в  $\delta$ -функцию:  $S(q, t_m) \sim \delta(q)$ .

При выполнении условия

$$t_m < (2\gamma_0)^{-1} < \tau_{cr} \sim \tau_P, \quad (30)$$

где  $\tau_{cr}$  — время, в течение которого концентрация плазмы  $n_{e0}$  превосходит критическое значение  $n_{cr}$ , амплитуды мод за время  $\tau_P$  успевают нарасти, а их спектр схлопывается в  $\delta$ -функцию при  $q = 0$ . Таким образом, в случае (30) за время  $\tau_P$  решетка переходит в состояние с полностью скоррелированным когерентным относительным смещением атомов во всех ячейках кристалла, т.е. в состояние НКФ.

С другой стороны, при условии

$$(2\gamma_0)^{-1} \ll t_m, \quad (2\gamma_0)^{-1} < \tau_{cr} \sim \tau_P \quad (31)$$

за время  $\tau_P$  нарастает широкий спектр мод, который благодаря нелинейности стабилизируется и становится плоским. Таким образом, в случае (31) происходит переход в состояние ХЖ.

Сделаем численные оценки для случаев ЛИФП в GaAs и Si. Из (14) и (13) для GaAs при  $\mu = 6 \cdot 10^{-23}$  г,  $\Omega_0 = 5.3 \cdot 10^{13}$  с $^{-1}$ ,  $\omega = 3 \cdot 10^{15}$  с $^{-1}$ ,  $E_{g0} = 1.44$  эВ,  $|\theta| \sim 10^{-3}$  эрг/см,  $n = 2 \cdot 10^{22}$  см $^{-3}$ ,  $\theta_{ab} = 2.1 \cdot 10^{-4}$  эрг · см $^{-1}$  и  $|C| = 20$  эВ [23] и оценочном значении  $\xi_L = 0.25$  [24] имеем для критической концентрации плазмы:  $n_{cr} = 3 \cdot 10^{21}$  см $^{-3}$ . В условиях эксперимента [4] при  $E^2 = 4 \cdot 10^9$  эрг · см $^{-3}$ ,  $R = 0.35$ ;  $\gamma_A = 4 \cdot 10^{-28}$  см $^6$ с $^{-1}$  [23], учитывая нелинейное увеличение коэффициента оптического поглощения  $\alpha_0 \sim 10^2 \bar{\alpha}_0 = 4.3 \cdot 10^6$  см $^{-1}$ , из (9) получаем оценку для концентрации плазмы  $n_{e0} \sim 3.5 \cdot 10^{21}$  см $^{-3} > n_{cr}$ .

Из (12) и (17) находим  $\gamma_0 = 10^{13}$  с $^{-1}$ . Используя данные из [23], имеем с учетом (16)  $\beta\gamma_0 \sim 10^{-1}$  см $^2$ с $^{-1}$ . Используя в (27) и (29) значения  $W = 3.1 \cdot 10^{-11}$  эрг,  $g = 4$ ,  $T = 300$  К,  $s = 5 \cdot 10^5$  см/с,  $a = 3.6 \cdot 10^{-8}$  см,  $n/n_e^* \sim 2 \cdot 10^2$ ,  $\gamma_{ab} \sim 10 \cdot \Omega_0$ ,  $C_{ab} \sim 1$  эВ [23] и полученные выше значения  $n_{e0}$  и  $n_{cr}$ , получаем оценки для коэффициента спектральной диффузии в GaAs  $|D| = 5 \cdot 10^{26}$  см $^{-2}$ с $^{-1}$  и для времени схлопывания спектра:  $t_m = 48$  fs  $< (2\gamma_0)^{-1} \sim 50$  fs  $< \tau_{cr} \sim \tau_P$ . Таким образом, для GaAs выполняются условия перехода в состояние НКФ (30).

Теперь сделаем аналогичные оценки для Si. При тех же значениях  $\omega$ ,  $E^2$ ,  $T$  и при  $\alpha_0 \sim 10^2 \bar{\alpha}_0 = 4.5 \cdot 10^5$  см $^{-1}$ ,  $R = 0.35$ ;  $\gamma_A = 4 \cdot 10^{-31}$  см $^6$ с $^{-1}$ ,  $C_{ab} \sim 1$  эВ [23] из (9) получаем  $n_{e0} \sim 1.7 \cdot 10^{22}$  см $^{-3}$ . Подставляя в (27) и (29)  $n_{cr} = 9 \cdot 10^{21}$  см $^{-3}$  [16],  $\mu = 2.4 \cdot 10^{-23}$  г,  $W = 2.88 \cdot 10^{-12}$  эрг,  $g = 4$ ,  $\Omega_0 = 1.1 \cdot 10^{14}$  с $^{-1}$ ,  $s = 10^6$  см/с,  $a = 3.4 \cdot 10^{-8}$  см,  $n/n_e^* \sim 2 \cdot 10^2$ ,  $\gamma_{ab} \sim 10 \cdot \Omega_0$  [23],  $\gamma_0 = 5 \cdot 10^{13}$  с $^{-1}$ ,  $\beta\gamma_0 \sim 10^{-1}$  см $^2$ с $^{-1}$ , получаем оценки для коэффициента спектральной диффузии в Si  $|D| = 2.2 \cdot 10^{24}$  см $^{-2}$ с $^{-1}$  и времени "схлопывания" спектра:  $t_m = 756$  fs  $\gg (2\gamma_0)^{-1} = 10$  fs,  $\tau_{cr} \sim \tau_P \gg (2\gamma_0)^{-1}$ . Таким образом, для Si с большим запасом выполняются условия перехода в состояние ХЖ (31).

Таким образом, проведенное в настоящей работе рассмотрение показывает, что при сверхбыстрых ЛИФП в GaAs наиболее вероятен переход в состояние НКФ, в то время как в Si реализуется переход в состояние ХЖ.

## Список литературы

- [1] C.V. Shank, R. Yen, C. Hirlimann. Phys. Rev. Lett. **50**, 454 (1983).
- [2] C.V. Shank, R. Yen, C. Hirlimann. Phys. Rev. Lett. **54**, 2151 (1985).
- [3] H.W.K. Tom, G.D. Aumiller, C.H. Brito-Cruz. Phys. Rev. Lett. **60**, 1438 (1988).
- [4] С.В. Говорков, И.Л. Шумай, В. Рудольф, У. Шредер. Письма в ЖЭТФ **52**, 2, 755 (1990).
- [5] K. Sokolovski-Tinten, H. Schulz, J. Bialkowski, D. von der Linde. Appl. Phys. **53**, 227 (1991).
- [6] K. Sokolovski-Tinten, J. Bialkowski, D. von der Linde. Phys. Rev. **B51**, 20, 14186 (1995).
- [7] I.L. Shumay, V. Hofer. Phys. Rev. **B53**, 23, 15878 (1996).
- [8] Y. Siegal, E.N. Glezer, E. Mazur. Phys. Rev. **B49**, 23, 16403 (1994).
- [9] E.N. Glezer, Y. Siegal, L. Huang, E. Mazur. Phys. Rev. **B51**, 11, 6959 (1995).
- [10] E.N. Glezer, Y. Siegal, L. Huang, E. Mazur. Phys. Rev. **B51**, 15, 9589 (1995).
- [11] S.V. Govorkov, V.I. Emel'yanov, N.I. Koroteev, I.L. Shumay. J. of Luminescence **53**, 153 (1992).
- [12] С.В. Говорков, В.И. Емельянов, И.Л. Шумай, В. Рудольф, Т. Шредер. ИРАН **56**, 6, 64 (1992).
- [13] S.V. Govorkov, V.I. Emel'yanov, I.L. Shumay. Laser Physics **2**, 1, 77 (1992).
- [14] V. Heine, J.A. Van Vechten. Phys. Rev. **B13**, 4, 1622 (1976).
- [15] R. Biswas, V. Ambegaokar. Phys. Rev. **B26**, 1982 (1982).
- [16] P. Stampfli, K.H. Bennemann. Phys. Rev. **B42**, 7163 (1990); *ibid.* Phys. Rev. **B49**, 11, 7299 (1994).
- [17] V.I. Emel'yanov, D.V. Babak. Laser Phys. **7**, 2, 514 (1997).
- [18] Ю.В. Копаев, В.В. Меняйленко, С.Н. Молотков. ФТТ **27**, 11, 3288 (1985).
- [19] Toshinobu Soma. J. Phys. C: Solid State Phys. **11**, 2681 (1978).
- [20] N. Kristoffel, P. Konsin. Phys. Stat. Sol. **21**, 39 (1967); **28**, 731 (1968).
- [21] A.V. Andreev, V.I. Emel'yanov, Yu.A. Il'inskii. Cooperative effects in optics: Superradiance and phase transitions. Adam Hilger, Bristol (1993).
- [22] M. Lannoo, J. Bourgoin. Point Defects in Semiconductors I. Springer Verlag, Berlin (1981).
- [23] Landolt-Bornstein. Numerical data and functional relationships in science and technology. New series. Group III. V. 17. Semiconductors. Subvolume a. Phys. of group IV elements and III-V compounds.
- [24] В.И. Емельянов, И.Ф. Уварова. ЖЭТФ **94**, 255 (1988); Laser Physics **2**, 4, 389 (1992).