## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

### Использование модели переходов в системе гармонических осцилляторов под воздействием интенсивного фемтосекундного лазерного импульса для оценки предельного нагрева электронов в диэлектриках

И.Б. Богатырев<sup>1</sup>, А.Н. Васильев<sup>2а</sup>, Ю.В. Попов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра оптики и спектроскопии; <sup>2</sup> Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына (НИИЯФ МГУ). Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2. E-mail: <sup>a</sup> anvasiliev@rambler.ru

Статья поступила 01.12.2008, подписана в печать 03.03.2009.

Исследуется поведение системы гармонических осцилляторов с непрерывно распределенными собственными частотами при воздействии фемтосекундного лазерного импульса. Эта модель может описывать вертикальные переходы (при сохранении квазиимпульса электрона) между ветвями в зоне проводимости в тех точках зоны Бриллюэна, в которых осуществляется эффективный нагрев, и применяться для оценки высокоэнергетического хвоста распределения нагретых электронов в диэлектриках в допробойном режиме. Рассматривается аналитическое решение задачи нахождения энергетического распределения в системе осцилляторов после воздействия фемтосекундного лазерного импульса. Показано, что при возрастании интенсивности свыше 3 ТВт/см<sup>2</sup> в поле лазера с энергией фотонов 1.55 эВ и длительностью импульса в 40 фс появляются электроны с энергией выше 10 эВ.

Ключевые слова: нагрев электронов, фемтосекундный импульс, осциллятор, диэлектрик.

УДК: 535.37. РАСS: 78.47.+р.

#### Введение

Исследование нагрева электронов, образующихся при ионизации дефектов в диэлектриках, фемтосекундными лазерными импульсами высокой интенсивности важно для понимания процессов, предшествующих оптическому пробою. Этот нагрев электронов происходит в зоне проводимости диэлектрического кристалла, при этом экспериментально установлено испускание электронов достаточно высоких энергий (до 20-30 эВ) при воздействии на кристаллы с широкой запрещенной зоной (5-10 эВ) инфракрасных (энергия фотонов 1.55 эВ) фемтосекундных (длительностью 30 фс) лазерных импульсов интенсивностью 1-6 ТВт/см<sup>2</sup> [1-3]. Чтобы набрать наблюдаемую в эксперименте энергию, электрон должен поглотить 10-20 фотонов в течение нескольких десятков фемтосекунд. В работах [4-6] для решения этой задачи использовалась система кинетических уравнений, в которой нагрев электронов описывался набором переходов между эквидистантными уровнями в зоне проводимости, причем расстояние между такими уровнями предполагалось равным энергии фотонов возбуждающего света. Такая модель требует дополнительного анализа.

Как известно, прямые (с сохранением квазиимпульса электрона) межзонные и межветвевые переходы в твердом теле под действием длинноволнового излучения имеют вероятность более чем на два порядка выше, чем непрямые, связанные с передачей избыточного импульса третьей частице — фонону или дефекту. Это связано с тем, что в случае прямых переходов в качестве третьего тела выступает весь кристалл, и брэгговское рассеяние электронов на решетке, приводящее к образованию ветвей в зоне проводимости, позволяет удовлетворить закону сохранения импульса, запрещающему поглощение света свободным электроном. Вероятность межветвевых переходов в интенсивных полях может быть оценена с использованием классического подхода, развитого Л. В. Келдышем [7], и в работе [8, 9] было показано, что в световых полях с интенсивностью порядка 3 ТВт/см<sup>2</sup> и энергией кванта света 1.55 эВ скорость одно-, двухи трехфотонных переходов достигает  $10^{15}$  c<sup>-1</sup>. При этом сдвиги уровней, определяемые пондеромоторными энергиями, несущественно искажают общую картину (в полях с такой интенсивностью пондеромоторная энергия порядка 0.1 эВ). Такие переходы могут приводить к последовательному переходу электрона с одной ветви на другую в случае, если длительность светового импульса составляет несколько десятков фемтосекунд (рис. 1). Однако эффективный нагрев возможен только при таких значениях квазиимпульса k<sub>i</sub>, при которых уровни  $E_i(k_i)$  расположены на расстояниях, приблизительно кратных энергии фотона (показаны стрелками на левой части рис. 1). Это было продемонстрировано в работах [3, 10, 11]. Поскольку среднее расстояние между уровнями в зоне проводимости типичных диэлектриков составляет от 2 до 4 эВ вблизи дна зоны и существенно снижается при повышении энергии (в соответствии с ростом плотности состояний), относительное число таких точек оказывается достаточным для формирования высокоэнергетического хвоста распределения электронов.

Нагрев при таких значениях квазиимпульса может быть смоделирован переходами в системе эквидистантных уровней, т.е. в гармонических осцилляторах, частоты которых распределены непрерывно (правая часть рис. 1). Такой подход наследует некоторые черты эквидистантной схемы уровней, используемой в [4–6], и в то же время более полно учитывает квантово-механические эффекты (в частности, спонтанные и вынужденные переходы и т.д.). Включение в ансамбль осцилляторов



Рис. 1. Энергетическая структура зоны проводимости в модели почти свободных электронов для ГЦК решетки с постоянной решетки, соответствующей кристаллу CsI (слева), и в модели ансамбля осцилляторов. Пунктирной линией изображен уровень дефекта, отщепленный от зоны проводимости. Стрелками показаны переходы под действием света, приводящие к интенсивному нагреву электронов

с частотой, не точно совпадающей со средней частотой поля, позволяет исследовать как вклад резонансных, так и нерезонансных переходов. Применение модели осцилляторов позволяет произвести оценку эффективности нагрева лазерным полем сверху, поскольку матричные элементы перехода в осцилляторе должны быть выше, чем в случае корректного расчета дипольных моментов переходов между ветвями зоны проводимости. Задача описания взаимодействия света с гармоническими осцилляторами допускает аналитическое решение, что позволяет использовать такую модель для качественного анализа зависимости характерных эффектов от параметров (длительности импульса, интенсивности лазерного импульса в максимуме).

## Аналитическое решение нагрева системы осцилляторов

Анализ поведения гармонического осциллятора в электромагнитном поле с произвольной временной зависимостью восходит к работам Фейнмана [12]. Уравнение Шрёдингера для трехмерного осциллятора с частотой Ω в электромагнитном поле лазера имеет следующий вид:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{eA_z(t)}{c}\right)^2 - \frac{m\Omega^2}{2}r^2\right]\psi(\mathbf{r},t) = 0.$$
(1)

Мы предполагаем, что электромагнитное поле лазера линейно поляризовано, и электрический вектор направлен по оси z. В этом случае переменные легко разделяются:  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_x(x, t)\psi_y(y, t)\psi_z(z, t)$ , и мы имеем два свободных осциллятора (без поля лазера) с движением по осям x и y и один возмущенный осциллятор по оси z. Используя преобразование  $\psi_z(z, t) = f(z, t) \exp (iz \frac{e}{ch} A_z(t))$ , можно получить уравнение Шрёдингера в следующем виде [12, 13]:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m\Omega^2}{2}z^2 + ezF(t)\right]f(z,t) = 0, \quad (2)$$

где  $F(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial A_z(t)}{\partial t}$  — электрическая компонента поля лазера.

Это уравнение имеет следующее решение [12, 13] (с учетом того, что в момент t = 0 осциллятор находится в нижнем состоянии):

$$f(z,t) = \left(\frac{m\Omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \times \exp\left[-\frac{m\Omega}{2\hbar}z^2 + zP(t) + \frac{i\hbar}{2m}\int_{0}^{t}P^2(\xi)\,d\xi - \frac{i\Omega t}{2}\right],\quad(3)$$

где

$$P(t) = i \frac{e}{\hbar} \int_{0}^{t} F(\xi) e^{-i\Omega(t-\xi)} d\xi.$$

$$\tag{4}$$

Проецируя решения (3) на собственные состояния осциллятора

$$\varphi_n(z) = \left(\frac{m\Omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\Omega}{2\hbar}z^2\right] H_n\left(z\sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}}\right),$$
(5)

где  $H_n - n$ -й полином Эрмита, можно найти населенность *n*-го уровня осциллятора после воздействия импульса [13]

$$|C_n(t)|^2 = \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar |P(t)|^2}{2m\Omega}\right)^n \exp\left(-\frac{\hbar |P(t)|^2}{2m\Omega}\right), \quad (6)$$

где

$$\frac{P(t)|^2}{2m\Omega} = \frac{e^2}{2m\hbar\Omega} \left[ \left( \int_0^t F(\xi) \cos \Omega\xi \, d\xi \right)^2 + \left( \int_0^t F(\xi) \sin \Omega\xi \, d\xi \right)^2 \right]$$
(7)

Если выбрать временную зависимость поля импульса в виде  $F(t) = F_0 \sin \omega_0 t \sin^2 \frac{\omega_0 t}{2n_i}$ ,  $0 < t < 2\pi n_f / \omega_0$  ( $\omega_0$  центральная частота поля лазера, лазерный импульс состоит из  $n_f$  периодов), то после вычисления интегралов (7) мы получаем энергетическое распределение населенности уровней возбужденного осциллятора в следующем виде:

$$N(E,\Omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \rho^n(\Omega) \exp(-\rho(\Omega)) \delta(E - n\hbar\Omega), \quad (8)$$

где (учитывая, что  $F_0^2 = \frac{8\pi}{c} I_0$ )

$$\rho(\Omega) = \frac{4\pi e^2 I_0}{mc \hbar \omega_0^3} \left[ \omega_0 \left( 3n_f^2 \Omega^2 \omega_0^{-2} + (n_f^2 - 1) \right)^2 \sin^2 \left( \frac{\pi n_f \Omega}{\omega_0} \right) \right] \times \\ \times \left\{ \Omega \left( 1 - \Omega^2 \omega_0^{-2} \right)^2 \left( (n_f - 1)^2 - n_f^2 \Omega^2 \omega_0^{-2} \right)^2 \times \\ \times \left( (n_f + 1)^2 - n_f^2 \Omega^2 \omega_0^{-2} \right)^2 \right\}^{-1}.$$
(9)

Эта функция имеет резонансный пик при  $\Omega = \omega_0$ , полная ширина на полувысоте которого около  $1.44\omega_0/n_i$ . Для резонансных условий последняя безразмерная дробь в (9) равна  $\pi^2 n_i^2/4$  и ближайшие нули соответствуют  $\Omega = \omega_0(1 \pm 2/n_i)$ . Если мы предположим, что есть ансамбль осцилляторов, распределенных по частотам с плотностью  $w(\Omega)$  (где  $\int_{0}^{\infty} w(\Omega) d\Omega = 1$ ), мы получим распределение по энергии ансамбля осцилляторов в следующем виде:

$$N_{\text{tot}}(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \omega\left(\frac{E}{\hbar n}\right) \left[\rho\left(\frac{E}{\hbar n}\right)\right]^n \exp\left(-\rho\left(\frac{E}{\hbar n}\right)\right).$$
(10)

Если предполагать, что ширина  $\Delta\Omega$  распределения  $w(\Omega)$  много больше спектральной ширины импульса, то форма распределения  $N_{\rm tot}(E)$  не будет зависеть от ширины этого распределения осцилляторов по частотам. Что касается общей амплитуды  $N_{\rm tot}(E)$ , то она будет естественно уменьшаться с ростом  $\Delta\Omega$ , что соответствует уменьшению доли осцилляторов, находящихся примерно в резонансе с основной частотой лазерного импульса. Поскольку разброс частот осцилляторов  $\Delta\Omega$  должен соответствовать разбросу расстояний между ветвями зоны проводимости, то разумно предположить, что  $\Delta\Omega \sim \omega_0 \gg \omega_0/n_f$ .

#### Результаты и их обсуждение

Для изучения основных закономерностей нагрева ансамбля осцилляторов лазерным полем было рассчитано распределение заселенности уровней ансамбля осцилляторов по энергии (10) при четырех различных интенсивностях поля лазера 0.3, 1, 3 и 10 ТВт/см<sup>2</sup> (рис. 2) для длительности фемтосекундного импульса, равной 40 фс.

При интенсивности 0.3  $TBt/cm^2$  в диапазоне от 0 до 14 эВ видна серия узких пиков, быстро убывающих по высоте и расширяющихся с ростом номера пика (счет слева направо). Эти пики соответствуют откликам осцилляторов, энергии  $\hbar\Omega$  которых кратны средней энер-

 $10^{0}$ 

6

8

гии фотонов возбуждающего импульса (1.55 эВ). При интенсивности 1 ТВт/см<sup>2</sup> диапазон энергий, до которых нагреваются осцилляторные состояния, расширяется до 30 эВ, при этом максимум населенности сдвигается вправо от начальных энергий, и начинает «подниматься» середина распределения. Такое изменение спектра обусловлено ростом вероятности многофотонных переходов и соответственно более интенсивными переходами на высокие состояния осцилляторов. При интенсивности 3 ТВт/см<sup>2</sup> перераспределение энергии осцилляторов в область высоких энергий становится подавляющим и практически все распределение становится «поднятым». При интенсивности 10 ТВт/см<sup>2</sup> в области низких энергий наблюдаются резкие осцилляции, а в области средних и высоких энергий осцилляции практически пропадают.

Кроме того, на рис. 2. видно появление «провалов» в пиках, которые становятся глубже по мере возрастания интенсивности, и при интенсивности 10 TBт/см<sup>2</sup>, такие провалы доходят почти до нуля населенности, и пик разделяется на два и более пиков. Причина возникновения такой структуры пиков в распределении по энергии состоит в суммировании откликов осцилляторов с разными энергиями. В центр пика вносят вклад осцилляторы, энергия которых совпадает с центральной частотой лазерного поля. При этом для таких резонансных осцилляторов при достаточно больших интенсивностях нижние состояния оказываются уже не заполненными, поскольку в основном заполняются высоколежащие состояния (формула (8) указывает на пуассоновский характер распределения заселения). При увеличении отстройки от резонанса заполняются в основном низколежащие уровни. Этим и объясняется сложная структура пиков при большой интенсивности поля.

10

12 14

16 18

 $10^{0}$ 



*Рис. 2.* Распределение заселенности уровней ансамбля осцилляторов по энергии. Средняя энергия фотонов возбуждающего импульса  $\hbar \omega = 1,55$  эВ



*Рис. 3.* Распределение заселенности уровней ансамбля осцилляторов по энергии при пошаговом изменении интенсивности от 0.25 до 20 ТВт/см<sup>2</sup>

Результаты этого расчета показывают, что высокоэнергетичные электроны (с энергией больше 10 эВ) появляются уже при интенсивностях порядка 1 ТВт/см<sup>2</sup>. В эксперименте такие электроны появляются при более высоких интенсивностях. Это различие связано с двумя факторами. Во-первых, в модели осцилляторов единственно возможными оказываются переходы на соседний уровень (правила отбора для осциллятора указывают на возможность переходов с изменением *n* только на единицу), поэтому матричные элементы перехода оказываются переоцененными по сравнению с реальной ситуацией. Во-вторых, модель осцилляторов излишне «регулярна»: если переходы находятся в резонансе при низких энергиях, то они остаются в резонансе и при высоких энергиях, что способствует переоценке нагрева по сравнению с реальной задачей исследования переходов между ветвями в зоне проводимости.

Однако качественно появление высокоэнергетических электронов согласуется как с экспериментом [1-3], так и с расчетами нагрева в модели, когда состояния в зоне проводимости описываются с помощью зонных расчетов с использованием псевдопотенциалов [3, 10, 11].

При сравнении модели нагрева в ансамбле осцилляторов с нагревом в зоне проводимости диэлектриков необходимо отметить, что число точек в зоне Бриллюэна, которые могут быть сопоставлены квазиэквидистантным уровням, относительно небольшое. Остальные точки будут определять низкоэнергетическую часть распределения электронов в зоне проводимости.

Кроме того, нами были выполнены расчеты при постепенном изменении интенсивности от 0.1 до 10 ТВт/см<sup>2</sup>. Результат представлен на трехмерном графике (рис. 3). При интенсивности 0.1  $\text{TBr/cm}^2$  все осцилляторы находятся в области энергий вблизи нуля, нагрева практически не происходит. При интенсивности 1  $\text{TBr/cm}^2$ проявляется пик и большинство осцилляторов находятся в возбужденном состоянии. При интенсивности 3  $\text{TBr/cm}^2$  пик находится уже в области  $15\hbar\omega_0$ . На графике видно, как плавно изменяется энергетическое распределение и постепенно происходит как расширение, так и повышение пика.

#### Заключение

К решению задачи нахождения распределения по энергии в системе гармонических осцилляторов после воздействия лазерного импульса применено аналитическое решение. Установлено качественное соответствие результатов, полученных для ансамбля осцилляторов, высокоэнергетической части распределения электронов, наблюдаемого как в эксперименте, так и в оценках, основанных на расчетах зоны проводимости твердого тела с применением псевдопотенциалов. Показано, что модель ансамбля гармонических осцилляторов завышает нагрев ввиду переоценки матричных элементов (переходы возможны только на соседний уровень) и отсутствия выхода из резонанса после одного-двух переходов, наблюдающегося в системе неэквидистантных уровней.

Расчеты, выполненные для системы осцилляторов, показывают появление высокоэнергетичных электронов в конце распределения по энергии. Этот результат согласуется с экспериментальными данными и моделированием в широкозонных диэлектриках [1–3, 10, 11].

#### Список литературы

- Quere F., Guizard S., Martin P. // Europhys. Lett. 2001. 56, P. 138.
- Belsky A.N., Bachau H., Gaudin J. et al. // Appl. Phys. B. Lasers and Optics. 2004. 78, P. 989.
- 3. Belsky A., Martin P., Bachau H. et al. // Europhys. Lett. 2004. 67, N 2. P. 301.
- 4. Rethfeld B. // Phys. Rev. Lett. 2004. 92. P. 187401-1.
- 5. Rethfeld B. // Phys. Rev. B. 2006. 73. P. 035101.
- 6. Rethfeld B. // Contrib. Plasma Phys. 2007. 47, N 4-5. P. 360.
- 7. *Келдыш Л.В. //* ЖЭТФ. 1964. **47**. С. 1945.
- 8. Бельский А.Н., Васильев А.Н., Яценко Б.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2003. № 2. С. 38.
- 9. Belsky A., Martin P., Bachau H. et al. // Europhys. Lett. 2004. 67, N 2. P. 301.
- Bachau H., Belsky A.N., Martin P. et al. // Phys. Rev. B. 2006. 74. P. 235215.
- Yatsenko B.N., Bachau H., Belsky A.N. et al. // Phys. Stat. Sol. (c). 2005. 2, N 1. P. 240.
- Feynman R.P. // Rev. Mod. Phys. 1948. 20. P. 367; Feynman R.P. // Phys. Rev. 1950. 80. P. 440.
- Kim H., Lee M., Ji J., Kim J.K. // Phys. Rev. A. 1966. 53. P. 3767.

# Heating a system of harmonic oscillators by femtosecond pulse as electron heating model in insulators

### I. B. Bogatyrev<sup>1</sup>, A. N. Vasil'ev<sup>2a</sup>, Yu. V. Popov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Optics and Spectroscopy, Faculty of Physics; <sup>2</sup>D. V. Skobeltsyn Research Institute of Nuclear Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia. E-mail: <sup>a</sup> anvasiliev@rambler.ru.

Dynamics of a system of harmonic oscillators irradiated by a femtosecond laser pulse is studied to clarify the model of electron heating in insulators. Analytic solution for the electron energy distribution in this system after heating by  $0.1-10 \text{ TW/cm}^2$  femtosecond laser pulse is obtained. Modification of the energy distribution and peculiarities of the energy spectra in the system of oscillators are analyzed versus the intensity of the laser field. It is shown with this model that there exist high-energy electrons for intensities higher than 3 TW/cm<sup>2</sup>.

*Keywords*: electron heating, femtosecond pulse, oscillator, insulator. PACS: 78.47.+p. *Received 1 December 2008*.

English version: Moscow University Physics Bulletin 4(2009).

#### Сведения об авторах

- 1. Богатырев Илья Борисович аспирант; тел.: 939-31-69, e-mail: ilyabogatyr@rambler.ru.
- 2. Васильев Андрей Николаевич докт. физ. мат. наук, вед. науч. сотр.; тел.: 939-31-69, e-mail: anvasiliev@rambler.ru.
- 3. Попов Юрий Владимирович канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: 939-50-47, e-mail: popov@srd.sinp.msu.ru.