

利用一维原子链模型研究薄膜瞬态结构变化

郭鑫 李明华 李毅飞 陶梦泽 王进光 李大章 辛建国 陈黎明

Transient structure of thin films based on one-dimensional chain model

Guo Xin Li Ming-Hua Li Yi-Fei Tao Meng-Ze Wang Jin-Guang Li Da-Zhang Xin Jian-Guo Chen Li-Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 186202 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.186202

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.186202>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

高压下锗化镁的金属化相变研究

Pressure-induced metallization transition in Mg_2Ge

物理学报.2017, 66(16): 166201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.166201>

不变本征算符方法求解含不同在位势的一维双原子链的色散关系

Solving dispersion relations of one-dimensional diatomic chain with on-site potential by invariant eigen-operator method

物理学报.2013, 62(15): 156301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.156301>

N型掺杂应变Ge发光性质

The optical property of tensile-strained n-type doped Ge

物理学报.2012, 61(3): 036202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.036202>

利用一维原子链模型研究薄膜瞬态结构变化*

郭鑫¹⁾²⁾ 李明华²⁾ 李毅飞²⁾ 陶梦泽²⁾ 王进光²⁾
李大章⁴⁾ 辛建国¹⁾ 陈黎明^{2)3)†}

1)(北京理工大学光电学院, 北京 100081)

2)(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

3)(上海交通大学 IFSA 协同创新中心, 上海 200240)

4)(中国科学院高能物理研究所, 北京 100049)

(2017年5月11日收到; 2017年6月9日收到修改稿)

对于晶格结构响应的仿真与实验有助于我们理解激光激发引起的动态过程. 利用一维原子链模型研究了激光加热后由于温度分布不均匀性产生的热应力对晶格的影响, 该模型的计算结果与使用超快X射线衍射获得的实验结果相符合. 该模型为研究光激发金属以及半导体等材料的超快晶格动力学提供了理论分析基础.

关键词: 一维原子链模型, 超快X射线衍射, 晶格形变

PACS: 62.30.+d, 87.15.ht, 63.70.+h

DOI: 10.7498/aps.66.186202

1 引言

在过去几十年中, X射线技术不断发展, 在揭示物质结构方面起着非常重要的作用. 然而, 受限于时间分辨率, 传统的X射线技术只能提供物质结构的静态图像. 随着超快激光技术的飞速发展, 特别是超短脉冲激光的出现^[1], 使得激光等离子体领域兴起许多新型的X射线源^[2-4], 这给超快X射线源带来一场新的革命, 其中最具有重要应用价值的一个研究方向, 就是激光驱动的K壳层X射线辐射^[5]. 这种具有小型化、超快、单色性优势的X射线脉冲已被广泛应用于固体物质的超快结构动力学研究, 比如单晶样品中晶格相变^[6-8]和相干光子生成^[9-11]. 超短脉冲激光等离子体X射线辐射产生过程为: 飞秒激光脉冲经过聚焦后 ($> 10^{15} \text{ W/cm}^2$) 与靶材相互作用, 在激光场的作用下靶原子电子获得能量, 高能电子在原子势场中减速产生轫致辐射, 原子能级间跃迁产生特征辐射^[12], 发射的特征X射线脉冲的时间宽度, 与激光

脉冲宽度相当^[8,13]. 激光驱动的等离子体X射线源的主要优势就在于抽运探测 (pump-probe) 实验应用. 因为抽运光和探测光在使用过程中都是从同一束激光通过分束镜按照不同比例分出来, 所以抽运激光与X射线探测光具有天生的时间同步性. 此外, 激光驱动的等离子体X射线源不存在同步辐射源上X射线探测光与抽运激光的时间抖动这一问题. 在传统的光抽运-光探测实验中^[14,15], 激光的波长远大于晶格原子间距, 且探测光主要和晶格外层电子相互作用, 通过一定的理论模型, 可以间接地给出晶格结构的动力学过程. 对于X射线, 由于具有较强的穿透能力, 穿透厚度可以达到几百微米, 可以直接研究飞秒激光加热对晶体晶格的影响. 近年来, 利用千赫兹飞秒激光驱动的高通量高重频的超短X射线源已经成熟^[16,17], 并成为超快研究和其他应用的重要工具. 本文使用一维原子链模型研究超快激光加热金属过程中结构动力学变化. 通过模拟计算每个原子的位置来给定温度应力分布的时间函数, 提供了结构动力学的原子级视

* 国家自然科学基金 (批准号: 11334013, 11421064, 11374210) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lmchen@iphy.ac.cn

图. 通过比较模拟结果与实验结果, 该模型可以用来分析晶体的晶格动力学过程.

2 模型的建立

2.1 双温模型

双温模型^[18,19]描述了电子与晶格之间的非平衡状态. 当样品被激光脉冲激发后, 电子和晶格之间产生不平衡的状态. 由于在电子体系中(简并费米分布)中建立平衡所需的时间远小于在电子和晶格声子之间建立平衡所需的时间, 金属可以被认为是由电子和其他声子构成的子系统组成的. 热退化电子以相对较慢的电子-声子耦合相互作用将能量传递给声子.

考虑由飞秒激光脉冲激发的金属样品, 由于电子热容量 C_e 和晶格(声子)热容量 C_p (室温下具有 $C_p \gg C_e$)之间的差异很大, 飞秒激光脉冲产生非平衡电子温度分布, 然而晶格温度基本不变 $T \simeq 300$ K. 然后, 在几百飞秒的时间尺度上, 非平

衡电子通过电子-电子库仑相互作用在它们之间重新分配能量, 并且在稍高的温度 $T_e > T_l$ (T_e , T_l 分别为电子及晶格的温度)下返回到局部平衡(在它们自己之间), 称为热电子分布. 然后, 这种激发的热电子通过电子-声子相互作用而冷却, 将过量的能量传递给声子. 双温模型是从一维非稳态热导出, 考虑到超短飞秒脉冲时光子与电子及电子与晶格两种不同的相互作用过程, 给出了电子和晶格的温度变化微分方程组, 即双温方程:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_e \frac{\partial T_e}{\partial t} \right) - g(T_e - T_l) + P(t), \quad (1)$$

$$C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = g(T_e - T_l), \quad (2)$$

其中, $C_e(T_e)$ 和 C_l 分别为电子和晶格的热容, g 为电声耦合系数, K_e 为电子热传导率, $P(t)$ 为激光抽运项. 在这里, 我们以金样品为例, 采用激光波长为400 nm, 脉冲宽度为30 fs, 抽运能量为3 mJ/cm². 图1给出了激光照射样品后电子和晶格的温度演

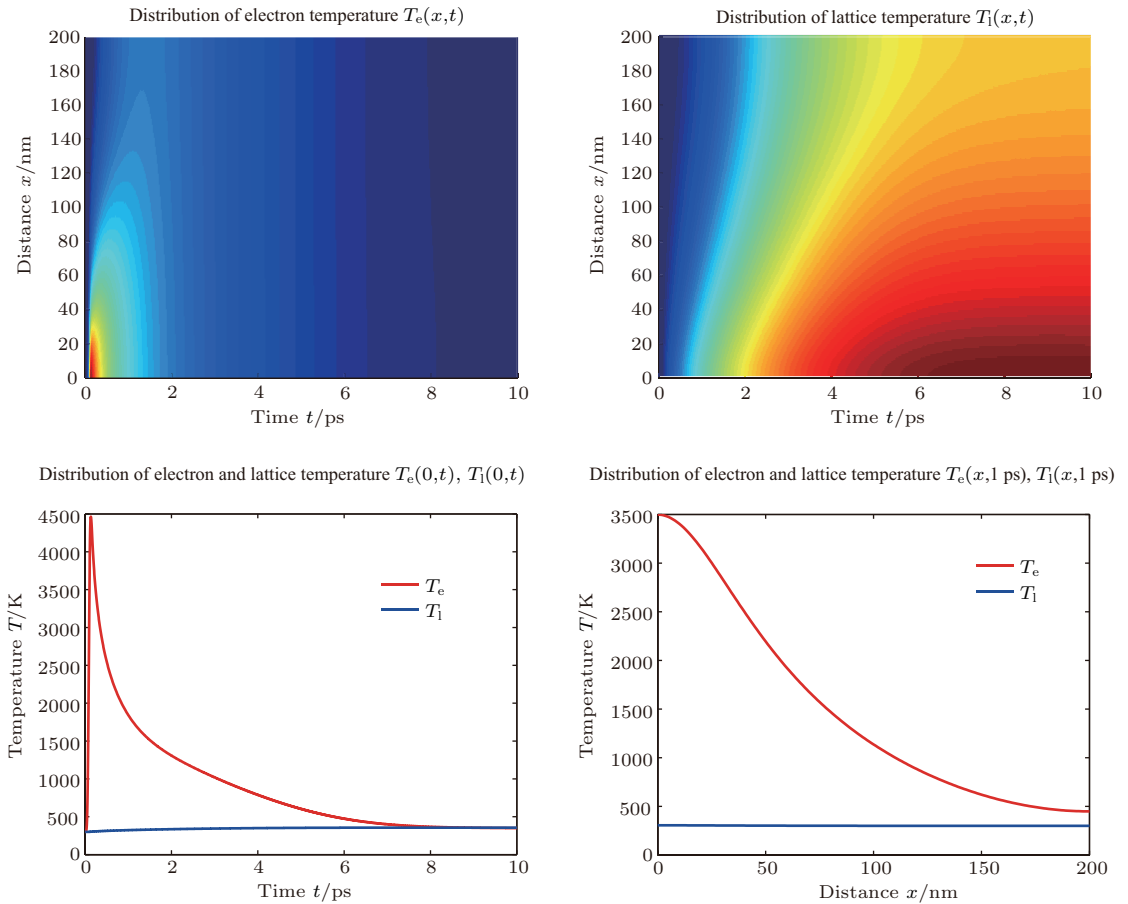


图1 (网刊彩色) 激光照射样品后电子和晶格温度演化过程

Fig. 1. (color online) The evolution of electron and lattice temperature after laser irradiation.

化过程. 从图 1 可以看出, 在激光照射时间内, 电子系统的温度升高很快, 而晶格系统的温度变化很小, 在激光停止照射较长时间内, 因电声相互作用, 电子的温度迅速下降, 而晶格的温度缓慢上升, 产生的瞬时晶格膨胀会在晶体内部产生压力, 并进一步产生相干声学应变向晶格内部传播.

2.2 一维原子链模型

利用超快光谱探测金属的热释放, 观察到瞬态现象主要取决于电子扩散和电声散射, 可以通过双温模型来简单描述. 然而时间分辨的 X 射线衍射技术被用来探测金属在光激发后应力的贡献. 为了量化的分析超快实验结果, 引入一维原子链模型来反映激光激发样品后引起的超快原子位移.

当激光照射样品之后, 样品的吸收层吸收激光的能量并在短时间内在膜内产生膨胀应力 Δz , 此应力演变规律符合 Lambert-Beer 定律: $\Delta z \sim e^{z/\zeta}$ (ζ 为激光在样品中的穿透深度). 为了仿真应变在晶体内的传播, 沿着面外方向构造了一个由晶胞和弹簧构成的一位原子链, 如图 2 所示. 相邻晶胞通过弹簧连接, 其弹簧常数为 $k_i = m_i v_i^2 / c_i^2$, 其中 m_i 为第 i 个晶胞的质量, v_i 为纵波声速, c_i 为第 i 个晶胞的面外方向的晶格常数. 如图 2(a) 所示, 各层之间的原子均处在稳态中, 原子之间通过弹簧链接; $t = 0$ 时, 激光照射样品, 被金属表面层吸收, 产生瞬时应力; 相当于在吸收层原子与弹簧之间添加了一个不可伸缩的连接杆, 如图 2(b) 所示. $t > 0$ 时, 由于连接杆的存在使得吸收层的弹簧产生压缩, 由于弹簧的弹性系数不变, 因此弹簧发生反弹并带动原子发生位移; $t = T/2$ 时, 弹簧膨胀达到最大; 等

到 $t = T$ 时, 原子回到初始位置, 完成一个周期的往返运动. 经过长时间之后, 一维原子链中的弹簧都恢复到初始的长度, 然而原子由于连接杆的存在回不到初始位置, 而是在新的平衡位置达到稳态, 如图 2(c) 所示. 同时, 这个模型也从侧面反映了位移型相干声子激发的原理 [20].

光致应力 $F_i(t)$ 使一维原子链中的原子偏离平衡位置 z_i^0 , 相对位移为 $x_i(t) = z_i(t) - z_i^0$, 可以通过以下方程解出:

$$m_i \ddot{x}_i = -k_i(x_i - x_{i-1}) - k_{i+1}(x_i - x_{i+1}) + F_i(t), \quad (3)$$

其中 $i = 1, 2, \dots, N$. 方程 (3) 两边同除 m_i , 且定义 $\Delta_i(t) = F_i(t)/m_i$, $\kappa_{i,j} = -(k_i + k_{i+1})/m_i$, $\kappa_{i,j+1} = \kappa_{i+1,j} = k_{i+1}/m_i$, 只考虑最近邻晶胞间的相互作用, 当 $|i - j| > 1$ 时, $\kappa_{i,j} = 0$; $i = 1$ 和 $i = N$ 的边界条件定义为 $\kappa_{1,1} = -k_2/m_1$, $\kappa_{N,N} = -k_N/m_N$. 则方程 (3) 可以转化为

$$\ddot{x}_i + \sum_{n=1}^N \kappa_{i,n} x_n = \Delta_i(t). \quad (4)$$

对于 $t \geq 0$, 假定应变与时间无关的函数, 因此上面方程可以改写成

$$\frac{d^2}{dt^2} \mathbf{X} - \mathbf{K} \mathbf{X} = \mathbf{\Delta}, \quad (5)$$

其中 $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_n)^T$ 为包含所有位移的矢量. $\mathbf{K}$ 为三角矩阵. 经过变量替换 $\mathbf{X}^\infty = \mathbf{X} - \mathbf{K}^{-1} \mathbf{\Delta}$, 则方程可以转化为齐次方程:

$$\frac{d^2}{dt^2} (\mathbf{X}^\infty) - \mathbf{K} (\mathbf{X}^\infty) = 0, \quad (6)$$

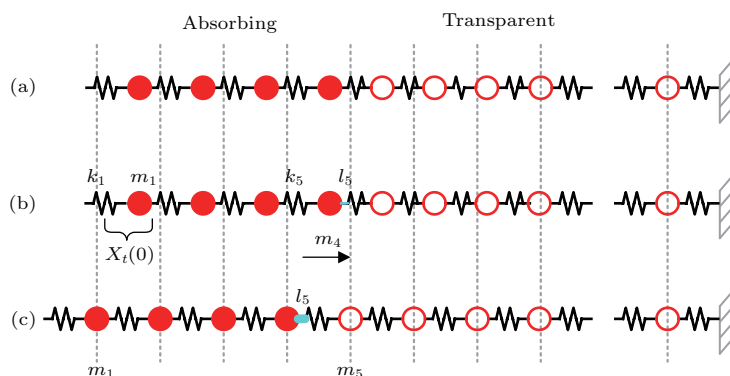


图 2 (网刊彩色) 一维原子链模型

Fig. 2. (color online) One dimensional chain model.

定义 z_i^∞ 为新的坐标系 $\mathbf{X}^\infty = \mathbf{X} - \mathbf{K}^{-1}\Delta$ 的平衡位置, 则可以得到

$$z_i(t) = z_i^0 + x_i(t) = z_i^\infty + x_i^\infty(t). \quad (7)$$

在新的坐标系下齐次方程的特解可以通过初始条件得出. $t = 0$ 时,

$$\begin{aligned} x_i^\infty(0) &= z_i^0 + x_i(0) - z_i^\infty = z_i^0 - z_i^\infty \\ &= \sum_{j=i+1}^N l_j, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\frac{d}{dt} x_i^\infty(0) = 0, \quad (9)$$

其中 l_j 是第 j 根连接杆的长度, 第 i 个原子的位移等于所有 i 原子之后的连接杆的长度之和, 用来描述光致应力的大小. $x_i(t)$ 求解出后, 其相对位移也可得出 $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, 则对于任意时刻 t 和初始应力梯度所对应的应变为 $\varepsilon_i = (\Delta x_i(t) - \Delta x_i(0)) / \Delta x_i(0)$.

我们假定一个 200 nm 厚的金薄膜生长在蓝宝石衬底上. 金薄膜材料的声速为 3450 m/s, 膜内纵波的传播过程如图 3 所示, 大约在 60 ps 之后应变波就会传播到衬底上, 并发生反射, 并伴随着相位反转.

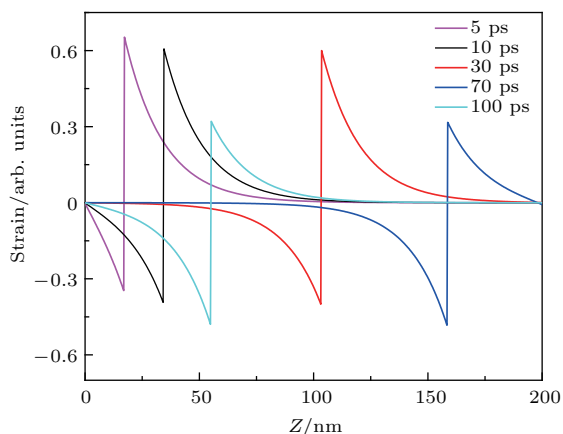


图 3 (网刊彩色) 基于原子链模型计算的应变波在金薄膜内部的传播过程示意图

Fig. 3. (color online) The propagation process of the strain wave in the gold film based on one dimension chain model.

3 实验结果与讨论

实验使用的激光是上海交通大学激光等离子体教育部重点实验室 kHz 掺钛蓝宝石飞秒激光系统, 激光的脉冲宽度是 35 fs, 能量为 6.3 mJ, 中心

波长为 800 nm. 激光经过离轴抛物面镜后聚焦在铜带上. 实验得到的能谱分布如图 4 所示. 通过计算 Cu K_α 光子通量为 2.0×10^{10} photons/s, 转换效率为 5.0×10^{-6} . 受限于探测器的能量分辨率 (约为 120 eV), 因此只能分辨出铜的 K_α 线和 K_β 线 ($K_\beta = 8.905$ keV). K_α 双线 ($K_{\alpha 1} = 8048$ eV, $K_{\alpha 2} = 8028$ eV) 则需要借助 500 nm Si(111) 晶体才能分辨出来, 如图 4 中的插图所示.

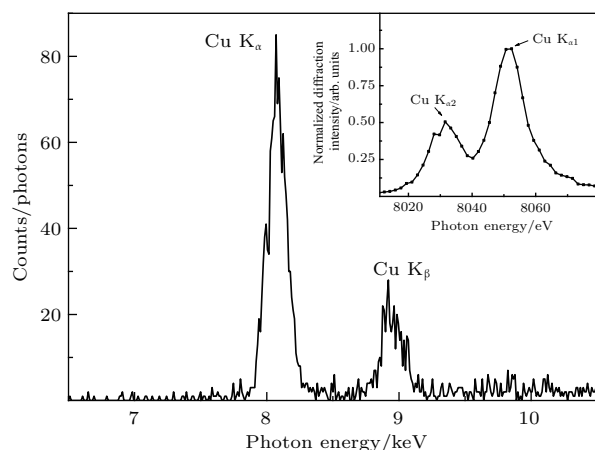


图 4 (网刊彩色) X 射线能谱图 (插图为通过 500 nm Si(111) 对 X 射线能谱分辨 Cu $K_{\alpha 1}$ 和 $K_{\alpha 2}$ 精细结构)

Fig. 4. (color online) Spectrum of Cu K_α and K_β radiation. Inset: Spectrally resolved Cu $K_{\alpha 1}$ and $K_{\alpha 2}$ fine structure components of the X-ray radiation by a 500 nm Si (111) crystal.

我们利用该 X 射线衍射系统来研究 200 nm 厚的 Au(111) 晶体的瞬态晶格动力学过程. 对于 Cu K_α , 根据布拉格公式可知, Au(111) 的布拉格衍射角为 19.1° , Au 对 400 nm 的光的反射率为 25%. 400 nm 光在金薄膜中的穿透深度为 17 nm. 激光脉冲被样品的薄层吸收并加热表面, 进而改变晶格结构. 晶格结构的变化可以被放置于距离晶体 150 mm X-ray 电荷耦合器件 (CCD) 相机 (PIXIS-XB: 1300R, Princeton Instruments) 所记录下来. 入射的 X 射线经过一个 0.25 mm 宽狭缝后, 发散角为 5 mrad, 并且 1 mm 宽的铜条沿着样品表面水平方向移动到某一位置可以完全挡住入射到样品上的 X 射线条纹, 这样就可以确定 X 射线照射到样品的区域. 此外, X 射线在竖直方向的尺寸大于晶体的高度 (10 mm), 同时也远大于抽运激光脉冲在晶体上照射宽度 (2 mm). 因此, 我们可以在 X-ray CCD 上同时记录了晶体的抽运区域 (S) 和未抽运区域 (R). 如图 5 的插图所示为 200 nm Au(111) 晶体的衍射信号, 采集时间为 30 s. 其中 R 为非抽运

区域, S为抽运区域. 我们通过 X-ray CCD 得到了不同时刻下飞秒激光照射样品后的衍射条纹, 比较了衍射曲线的照射和未照射区域. 通过高斯函数拟合衍射曲线, 得到衍射曲线在不同时间下的宽度变化如图 5 所示.

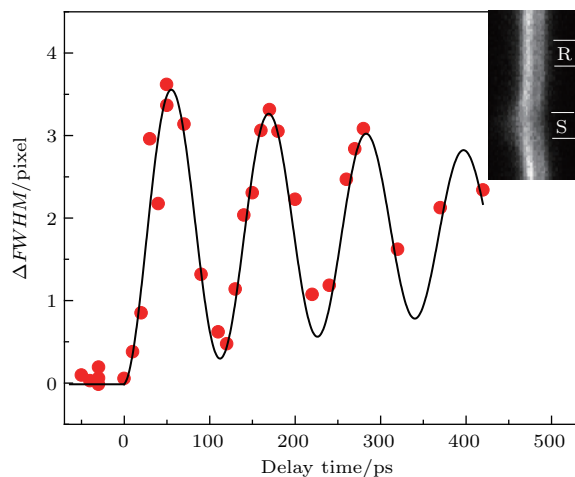


图 5 (网刊彩色) 衍射曲线的半高全宽的宽度随时间的变化 (插图为衍射条纹)

Fig. 5. (color online) Broadening of lattice constant of a 200 nm Au (111) crystal with pump-probe time delay. Inset: CCD image recorded after 30 s exposure.

由前面的双温模型可知, 当飞秒激光照射到金属样品后, 金属表面形成了两个热平衡体系: 被加热的电子体系和不受激光影响的晶格体系. 由于电子的热容量比晶格的热容量小三个数量级, 电子在 100 fs 内温度上升到 4500 K, 然而此时晶格的温度没有很大的变化. 结果, 电子通过电子系统和晶格系统之间的耦合传递其过剩的能量, 从而重新建立平衡, 在这个过程中, 晶格无法迅速响应到新的平衡, 从而产生热应力使得沉积的能量转变为晶格内部的势能, 这个势能将导致晶格围绕着新的平衡位置形成振荡运动. 由于 400 nm 的光在金薄膜中的穿透深度约 17 nm 远小于样品的厚度, 所以应变只能在表面 $z = 0$ 处开始, 并且在界面 ($z = d$) 处没有发生光激发. 在薄膜表面 ($z = 0$) 处, 拉伸应变进入薄膜, 通过渗透到空气中的压缩应变补偿. 但是对于空气来说, 压缩应变无法脱离薄膜且在界面上反射, 这改变了该压缩应变的相位使其成为膨胀波, 并向膜内传播开来. 在时间 $T = d/v_s = 61.7$ ps, 所有拉伸应变已经完全穿过金薄膜, 随之带来整个薄膜的最大应变, 正如我们实验所观察到的一样. 当 $t > T$, 源自表面的拉伸应变已经到达膜的界面, 并且作为压缩应变反射回薄膜中. 在 $t = 2T$ 左右时

到达薄膜的表面. 另外由于 Au(111) 和基底的声学不匹配, 应变到达薄膜与基底界面处将被反射回到金薄膜中. 因此, 我们可以观察到光子激发金膜的振荡行为. 在我们的实验中测量晶格的振荡周期为 124 ps, 与理论计算的振荡周期为 123 ps 非常接近.

我们根据之前介绍的一维原子链模型计算了 Au 内部的超快应变产生及传播过程, 如图 6 所示. 对照应变计算结果, 超快 X 射线衍射实验的角度分辨不足, 不能准确地分辨出时间零点附近的压缩, 但是整体的超快膨胀的演变趋势及特征时间 (~ 123 ps) 和衍射峰展宽还是可以被清楚地观察到.

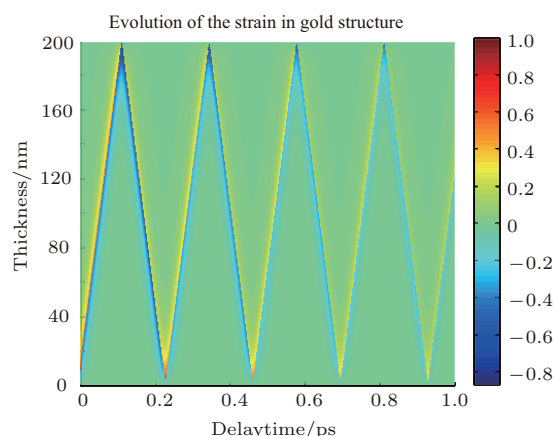


图 6 (网刊彩色) 应变在金薄膜内部的传播的计算结果

Fig. 6. (color online) The results of the propagation of the strain in the Au films.

4 结 论

本文利用双温度模型解释了激光照射金薄膜样品后, 电子和晶格温度分布的不均匀性, 导致沿着薄膜表面的法线方向传播的相干的声学纵波, 同时借助于一维原子链模型分析了 Au 内部的超快应变与传播过程, 与使用超快 X 射线衍射系统测量飞秒激光照射 Au 薄膜样品后晶格的超快动力学过程符合. 从实验结果的分析可以得到该系统具有亚皮秒的时间分辨, 为研究光激发的超快结构动力学特别是晶体材料的超快动力学提供了有力的实验工具, 同时借助于一维原子链模型更加便于我们理解激光诱导晶格的动力学过程.

参考文献

- [1] Mourou G A, Tajima T, Bulanov S V 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 309

- [2] Sheng Z M, Mima K, Zhang J, Sanuki H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 095003
- [3] Chen L M, Wang W M, Kando M, Hudson L T, Liu F, Lin X X, Ma J L, Li Y T, Bulanov S V, Tajima T, Kato Y, Sheng Z M, Zhang J 2010 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. Sect. A* **619** 128
- [4] Rousse A, Phuoc K T, Shah R, Pukhov A, Lefebvre E, Malka V, Kiselev S, Burgy F, Rousseau J P, Umstadter D, Hulin D 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 135005
- [5] Chen L M, Liu F, Wang W M, Kando M, Mao J Y, Zhang L, Ma J L, Li Y T, Bulanov S V, Tajima T, Kato Y, Sheng Z M, Wei Z Y, Zhang J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 215004
- [6] Chen X C, Zhou J P, Wang H Y, Xu P S, Pan G Q 2011 *Chin. Phys. B* **20** 096102
- [7] Sokolowski T K, Blome C, Dietrich C, Tarasevitch A, Hornvon H M, Vonder L D, Cavalleri A, Squier J, Kammler M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 225701
- [8] Rousse A, Rischel C, Fourmaux S, Uschmann I, Sebban S, Grillon G, Balcou P, Förster E, Geindre J P, Audebert P 2001 *Nature* **410** 65
- [9] Schick D, Bojahr A, Herzog M, Schmising C V K, Shayduk R, Leitenberger W, Gaal P, Bargheer M 2012 *Rev. Sci. Instrum.* **83** 025104
- [10] Sokolowski T K, Blome C, Blums J, Cavalleri A, Dietrich C, Tarasevitch A, Uschmann I, Förster E, Kammler M, Hornvon H M 2003 *Nature* **422** 287
- [11] Chen J, Tomov I, Elsayed A, Rentzepis P 2006 *Chem. Phys. Lett.* **419** 374
- [12] Chen L M, Kando M, Xu M, Li Y, Koga J, Chen M, Xu H, Yuan X, Dong Q, Sheng Z M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 045004
- [13] Reich C, Uschmann I, Ewald F, Dusterer S, Lubcke A, Schwoerer H, Sauerbrey R, Forster E, Gibbon P 2003 *Phys. Rev. E* **68** 056408
- [14] Tao Z S, Han T T, Subhendra D M, Phillip M D, Yuan F, Ruan C Y, Kevin W, Wu J Q 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 166406
- [15] Liang W X, Giovanni M V, Ahmed H Z 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** 5491
- [16] Huang K, Li M H, Yan W C, Guo X, Li D Z, Chen Y P, Ma Y, Zhao J R, Li Y F, Chen L M, Zhang J 2014 *Rev. Sci. Instrum.* **85** 113304
- [17] Huang K, Yan W C, Li M H, Tao M Z, Chen Y P, Chen J, Yuan X H, Zhao J R, Ma Y, Li D Z, Gao J, Chen L M, Zhang J 2013 *Acta. Phys. Sin.* **62** 205204 (in Chinese)
[黄开, 闫文超, 李明华, 陶孟泽, 陈燕萍, 陈洁, 远晓辉, 赵家瑞, 马勇, 李大章, 高杰, 陈黎明, 张杰 2013 物理学报 **62** 205204]
- [18] Hohlfeld J, Wellershoff S S, Güdde J, Conrad U, Jähnke V, Matthias E 2000 *Chem. Phys.* **251** 237
- [19] Anisimov S I, Kapeliovich B L, Perelman T L 1974 *J. Exp. Theor. Phys.* **66** 776
- [20] Bargheer M, Zhavoronkov N, Gritsai Y, Woo J C, Kim D S, Woerner M, Elsaesser T 2004 *Science* **306** 1771

Transient structure of thin films based on one-dimensional chain model*

Guo Xin¹⁾²⁾ Li Ming-Hua²⁾ Li Yi-Fei²⁾ Tao Meng-Ze²⁾ Wang Jin-Guang²⁾
Li Da-Zhang⁴⁾ Xin Jian-Guo¹⁾ Chen Li-Ming^{2)3)†}

1) (School of Optoelectronics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

2) (Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

3) (IFSA Collaborative Innovation Center, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

4) (Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(Received 11 May 2017; revised manuscript received 9 June 2017)

Abstract

Functional materials have received much attention in the development of scientific technology. Macroscopic function of material is usually linked to the microscopic properties. In order to understand the relationship between structure and function, it is necessary to observe transient structural change of material in real time. In the earlier experimental work femtosecond optical probes were used to measure associated modulation in optical properties like transmissivity or reflectivity and extract the information about structural dynamics through sophisticated theoretical modeling. Since the development of laser-based ultrafast X-ray sources, there has been extensive work on femtosecond X-ray diffraction measurements. The coupling of sensitive X-ray with time-resolved pump-probe technique provides a way to directly monitor the time-dependent lattice structural changes in condensed matter. Recent researches are devoted to the study of non-thermal melting and coherent acoustic phonons. The classical continuous elastic equation can only provide a limited view of structural dynamics. So, simulation of structural dynamics at an atomic level and comparison of such simulation with time-resolved X-ray diffraction data are necessary.

In this paper, we use the one-dimensional chain model to study the effect of thermal stress on the lattice due to the inhomogeneity of temperature distribution after ultrafast laser heating. It is developed from the classic continuous elastic equation by considering a nanometer film as a chain of point mass connected by springs. The simulation can directly reveal the position of each point mass (atom) as a function of time for a given temperature (stress) profile. The simulation results accord very well with experimental data obtained with femtosecond X-ray diffraction. Compared with simulation results, the ultrafast X-ray diffraction experimental results are not enough to distinguish the compression near the zero time, but the characteristic time (~ 123 ps) and broadening of the diffraction peak are clearly observed. The simulation and experimental study of the lattice structural response are of great help for understanding the direct relationship between the lattice responses caused by ultrafast laser excitation, the generation and propagation of strain, one-dimensional chain model has important applications in studying the recoverable ultrafast lattice dynamics of metals, semiconductors and other materials.

Keywords: one-dimensional linear chain model, ultrafast X-ray diffraction, lattice deformation

PACS: 62.30.+d, 87.15.ht, 63.70.+h

DOI: 10.7498/aps.66.186202

* Project supported by the National Nature Science Foundation of China (Grant Nos. 11334013, 11421064, 11374210).

† Corresponding author. E-mail: lmchen@iphy.ac.cn