

激光作用下纳米限域介质材料中的电子加速过程*

夏志林†

(武汉理工大学材料科学与工程学院, 武汉 430070)

(湘潭大学低维材料及其应用技术教育部重点实验室, 湘潭 411105)

(2010年5月21日收到; 2010年8月9日收到修改稿)

采用蒙特卡罗方法模拟了 1064 nm, GW/cm² 级脉冲激光辐照下, 纳米尺度材料中电子迁移及加速过程. 电子在激光场中迁移的过程涉及晶格散射、表面散射以及碰撞电离等作用. 结果表明: 材料的尺度小到一定程度后, 表面散射作用主导电子散射过程, 小尺寸限制效应表现明显, 电子很难有效地吸收激光能量. 研究结果对分析具有纳米尺度微结构材料的激光损伤行为提供了依据. 同时, 根据该小尺寸限制效应可以设计出具有新型纳米微结构的高激光损伤阈值薄膜.

关键词: 激光辐照, 小尺度效应, 电子加速, 蒙特卡罗模拟

PACS: 68.49.Jk, 34.80.Qb, 81.07.Ta, 68.65.Hb

1. 引言

随着制备工艺的不断进步, 人们已经能够制备出各种纳米材料^[1,2]. 随着纳米体系尺寸的量变, 在一定条件下会引起物理性质的质变, 这种由于尺寸变小所引起的宏观物理性质的变化称为小尺寸效应^[3]. 纳米体系尺寸小, 表面积大, 其电学、热学、力学、光学等特性将会发生很大的变化, 产生一系列奇特的性质^[2]. 材料中的电子行为往往决定着材料的宏观特性, 纳米材料中的电子行为已经得到了深入的研究, 电子与纳米材料宏观性能的关系也有了比较清晰的认识^[3]. 外场作用下的电子输运行为是微电子领域普遍关心的问题, 得到了广泛的研究^[4-6], 然而针对高频振荡的电磁场(例如激光场)作用下纳米尺度材料内的电子输运行为的研究却鲜有报道.

在功率密度为 GW/cm² 级激光脉冲作用下, 材料在可见光及近红外波段的吸收和其内部电子的运动有直接关系. 材料的破坏首先表现为电子在电场中的电离及电离后的加速, 随后高温电子将其部分能量转移给晶格, 晶格温度升高引起薄膜破

坏^[7]. 因此, 需要分析材料中电子在激光场作用下的运动过程.

采用蒙特卡罗方法模拟电子在激光场中的加速及电离过程时, 初始存在的自由电子或碰撞电离产生的自由电子在材料中经历电子-晶格散射、电子-表面散射而吸收激光能量, 高能电子通过碰撞使得束缚电子电离, 电子在不断被加速和电离的过程中吸收激光能量. 因此, 材料吸收激光能量的能力主要受电子运动过程的影响, 本文将侧重研究材料中电子的加速过程.

2. 理论基础

2.1. 激光场分布

高斯光束是常见的激光模式, 基模高斯光束光场分布可以表示为^[8]

$$E = E_0 \frac{w_0}{w(z)} \exp\left(\frac{x^2 + y^2}{w(z)^2}\right) \times \exp\left[-i\left(k \frac{x^2 + y^2}{2R(z)} - \varphi(z)\right)\right], \quad (1)$$

式中, w_0 为光束束腰; $R(z)$, $w(z)$ 和 $\varphi(z)$ 分别是光

* 国家自然科学基金(批准号: 10974150 及 10804090), 低维材料及其应用技术教育部重点实验室开放课题(批准号: DWKF0908), 中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: 2010-IV-056)资助的课题.

† E-mail: lionel626@163.com

束波阵面曲率半径,光斑尺寸和附加相位角. 设 $Z_R = kw_0^2/2$ 为瑞利长度, 则 $w(z) = w_0 [1 + (z/Z_R)^2]^{1/2}$, $R(z) = z[1 + (Z_R/z)^2]$, $\varphi(z) = \tan^{-1}(z/Z_R)$. 沿 x 方向极化的高斯光束激光场在旁轴近似各分量的计算公式如文献 [8] 所列.

电子离化机理主要有^[9]: 1) 热电离, 主要发生在材料温度很高的情况下, 由高温中性离子相互碰撞产生的电离; 2) 场电离, 主要发生在材料所受电场强度很高时, 电子被强激光场直接剥离; 3) 光电离, 主要发生在辐照光频率较高时, 电子吸收单个或多个光子而电离; 4) 碰撞电离, 主要发生在电子能量很高时, 高能电子碰撞原子使其发生电离而激发出二次电子.

本文选取较低的激光电场强度 (相当于 GW/cm^2 级功率密度) 和较长波长的激光脉冲, 着重研究高能电子碰撞电离的情况, 忽略电子的光电离、隧道电离、热碰撞电离等过程.

2.2. 能带结构

能带结构可以由实验或量子计算获得, 而基于实验数据的计算往往由于难以获得全部所需的参数而无法进行^[10], 目前, 更多地采用量子计算方法获得^[11]. 本文计算实例中所依据的能带结构主要参考文献 [12, 13] 的数据, 采用简单的旋转抛物形等能面假设. 由于碰撞电离过程涉及到高能态电子, 所以采用非抛物性系数对高能态电子能量进行修正: $E_p = E(1 + \alpha E)$ ^[14], 其中, $\alpha = (1 - m/m_0)^2/E_g$ 为非抛物性系数, m, m_0, E_g 分别为电子有效质量, 自由电子质量, 材料能带带隙宽度.

2.3. 散射作用

没有受到散射的自由电子在激光场中是无法吸收能量的, 电子处于不断加速和减速的振荡运动中^[15]. 散射将破坏电子的规则周期性受力过程, 促进电子吸收激光能量. 所以, 研究电子在材料中的输运行为, 电子所受散射作用是必须考虑的. 电子所受散射作用主要有电子-晶格散射、电子-缺陷 (或界面) 散射、电子-表面散射、电子-离子散射、电子-电子散射等几种主要的散射机理^[14, 16, 17].

1) 电子-晶格 (声子) 散射, 可以分为电子-极性声子散射 (包括极性光学波散射和声学波压电散射) 和电子-非极性声子散射 (包括光学形变势散射和声学波形变势散射)^[18]. 对声学声子而言, 由于声

子能量相对电子能量较小, 一般可以视为弹性散射. 而对于光学声子而言, 其能量可以达到与电子相当的水平, 一般作为非弹性散射处理.

长光学波具有强的极化势, 使每个原胞内的正负两个离子振动位移相反, 产生局部极化电场, 而对载流子有 Coulomb 作用而引起散射. 极性光学波散射在谷间散射非主导时常常是主要的散射机理, 其散射率 (单位时间内发生散射的次数) 为^[14]

$$\lambda = \frac{e^2 m^{1/2} \omega_l}{4 \sqrt{2} \pi \hbar \epsilon_0 \epsilon_p} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times \frac{(1 + 2\alpha E')}{\gamma^{1/2}(E)} F_0(E', E), \quad (2)$$

其中

$$E' = E \pm \hbar \omega_l,$$

$$\epsilon_p = (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0)^{-1},$$

$$F_0(E', E) = \left(a \ln \frac{u}{v} + B \right) / C,$$

$$\gamma^{1/2}(E) = E(1 + \alpha E),$$

$$v = [\gamma^{1/2}(E) - \gamma^{1/2}(E')]^2.$$

$$A = \left\{ (1 + \alpha E)(1 + \alpha E') + \frac{\alpha}{2} [\gamma(E) + \gamma(E')] \right\}^2,$$

$$B = -\alpha \gamma^{1/2}(E) \gamma^{1/2}(E') \{ 4(1 + \alpha E) \times (1 + \alpha E') + \alpha(\gamma(E) + \gamma(E')) \},$$

$$C = 2(1 + \alpha E)(1 + \alpha E') \times (1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha E'),$$

$$u = [\gamma^{1/2}(E) + \gamma^{1/2}(E')]^2.$$

非抛物性能带结构的各向异性, 采用动量弛豫近似处理^[14]:

$$\overline{\cos \theta} = \frac{\gamma(E) + \gamma(E')}{2[\gamma(E)\gamma(E')]^{1/2}} - \frac{D}{A \ln \frac{u}{v} + B}, \quad (3)$$

其中

$$D = 2(1 + \alpha E)^2(1 + \alpha E')^2 + \frac{2}{3} \alpha^2 E E' (1 + \alpha E)(1 + \alpha E'),$$

$$N_q = [\exp(\hbar \omega_0 / (k_B T)) - 1]^{-1}.$$

光学波形变势散射是电子输运引起非极性晶体体积周期性膨胀与压缩, 从而导致带边的周期性移动, 产生各向同性形变势的散射. 对一些弱极性材料, 高温时该类散射往往比较重要, 其散射

率为^[14]

$$\lambda = \frac{m^{3/2} D_0^2}{\sqrt{2} \pi \rho \hbar^2 (\hbar \omega_0)} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) (E \pm \hbar \omega_0)^{1/2} \times (1 + \alpha(E \pm \hbar \omega_0))^{1/2} \times (1 + 2\alpha(E \pm \hbar \omega_0)), \quad (4)$$

其中, D_0 是光学形变势常数.

在没有对称中心的极性材料中, 声学波可引起压电极化, 这种散射一般比较弱, 只有在低温下才需要考虑. 声学波压电散射的散射率为^[14]

$$\lambda = \frac{e^4 K^2 m^{1/2} k_B T}{2^{3/2} \pi \hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_l E^{1/2}} \left[\ln \frac{1+b}{b} - \frac{1}{1+b} \right], \quad (5)$$

其中, $K = \frac{\hbar_{px}}{\sqrt{\epsilon_0 \epsilon_l}}$ 为无量纲参数, \hbar_{px} 是压电系数.

声学波形变势散射通常只有在高能下才需考虑, 包含吸收和发射声子的总散射率为^[14]

$$\lambda = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \Xi^2 k_B T}{\pi \hbar^4 c_l} \times \frac{E^{1/2} (1 + \alpha E)^{1/2} [(1 + \alpha E)^2 + (\alpha E)^2 / 3]}{1 + 2\alpha E}, \quad (6)$$

其中, $c_l = \rho v_s^2$ 为纵弹性模量. 非抛物性能带结构的各向异性, 采用动量弛豫近似处理:

$$\frac{1}{(1 - \cos\theta)} = \frac{3 + 4\alpha E + 2\alpha^2 E^2}{3 + 6\alpha E + 4\alpha^2 E^2}.$$

2) 电子-表面散射, 该类散射只有在材料尺度很小时才是重要的, 一般对于纳米级材料, 当材料尺度与电子平均自由程相当时该类散射将起主导作用. 本文将重点研究该类散射对电子运输的影响, 为了处理的简单和结果分析的方便, 对表面处理采用简单的镜面弹性反射模型. 具体处理方法是将粗糙材料表面假想为由一系列小镜面组成, 电子在各个小镜面上以弹性镜面反射形式反弹. 假设电子与 +Z 方向的表面发生散射, 散射后电子速度分量由下式决定:

$$\begin{aligned} v_z &= |v| \times \sin\varphi, \\ v_x &= |v| \times \cos\varphi \times \cos\theta, \\ v_y &= |v| \times \cos\varphi \times \sin\theta, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $|v|$ 是电子速度的绝对值. φ 是散射后的方位角, $\varphi = \varphi_0 - \varphi_m r_\varphi$, $\varphi_0 \in (0, \pi/2)$ 是散射前电子入射方位角; φ_m 是 $(0, \pi/2)$ 间的常量值, 反映表面粗糙程度, φ_m 越大则表面粗糙度越大, 本文的模拟实例中取 $\varphi_m = \pi/10$, 即整个表面为近光滑表面; $r_\varphi \in (-1, 1)$ 是均匀分布的随机数. 散射后的 v_z 方向为背离表面方向. $\varphi_m > \varphi_0$ 时 r_φ 取值使得 $\varphi < 0$, 主要对应于

电子掠入射及阴影面虚假散射的情况, 需重新生成随机数. θ 是散射后的极角, $\theta = 2\pi r_\theta$, $r_\theta \in (0, 1]$ 是均匀分布的随机数.

3) 电子-离子散射, 该类散射是各向异性的弹性散射, 以屏蔽库伦势散射载流子, 其散射率可参考文献[14]. 电离杂质散射只有在离子密度很高且电子能量较低的时候才是明显的, 对于介质材料, 该类散射作用非常微弱.

4) 电子-电子散射, 该类散射只有在电子密度很高时才是需要考虑的, 而且该类散射的处理比较复杂, 因为散射率与电子能量的分布有关, 其散射率可参考文献[14].

5) 电子-缺陷(或界面)散射, 该类散射可以作弹性散射处理, 只有在缺陷密度很高时才是需要考虑的. 电子-电子及电子-缺陷散射作用主要表现为改变电子能量分布, 一般不会改变电子平均能量.

本文的模拟实例中没有考虑后三类散射的作用.

2.4. 蒙特卡罗模拟

蒙特卡罗模拟粒子输运包含两个主要过程^[19]: 粒子自由漂移和散射作用. 粒子自由漂移过程中由牛顿运动方程求解其波矢和能量的变化^[20], 再由统计理论求解相关特性参量. 接着产生一个随机数, 由此确定散射作用是否发生. 如果没有散射作用, 则粒子状态不变. 否则, 再产生一个随机数 r_m , 由此确定散射类型, 即, 如果 $F_{j-1} < r_m < F_j$, 则选用第 j 种散射. $F_i = \sum_{i=1}^j P_i$, 其中 $P_i = \lambda_i / \lambda$, λ_i, λ 分别是第 i 种散射的散射率及总散射率. 散射机理确定以后, 求解散射后的粒子状态参量值. 对于弹性散射, 主要是确定散射后的动量方向, 对非弹性散射则还要确定散射后的粒子能量. 一般情况下, 在吸收和发射声子过程的非弹性散射中, 主要为光学声子散射, 而光学声子能量随波矢的变化不大, 其能量可以考虑为固定的几个值.

3. 纳米结构氧化硅中的电子输运

3.1. 模型及参数

本文以 SiO_2 纳米点为模型, 研究量子限域条件下其内部电子在激光场作用下的输运情况, 了解小

尺寸效应下材料吸收激光能量的机制. 模拟中所采用的计算参数为^[12, 13]: 激光波长 1064 nm; 激光功率密度 1 GW/cm²; 激光脉宽 1 ps; 束腰直径 0.1 mm; 材料温度 300 °C; 电子初始位置 (0.25 L, 0.25 L, 0.25 L), L 为模拟单元尺寸; 光学声子能量 0.063 eV; 材料带隙宽度 9 eV; 压电系数 0.3 C/m²; 谷间散射形变势常数 300 eV/nm; 声速 6000 m/s; 初始离子密度 10 mm⁻³; 声学波形变势常数 6 eV; 折射率 1.46; 密度 2200 kg/m³; 相对介电常数 3.9.

3.2. 结果与分析

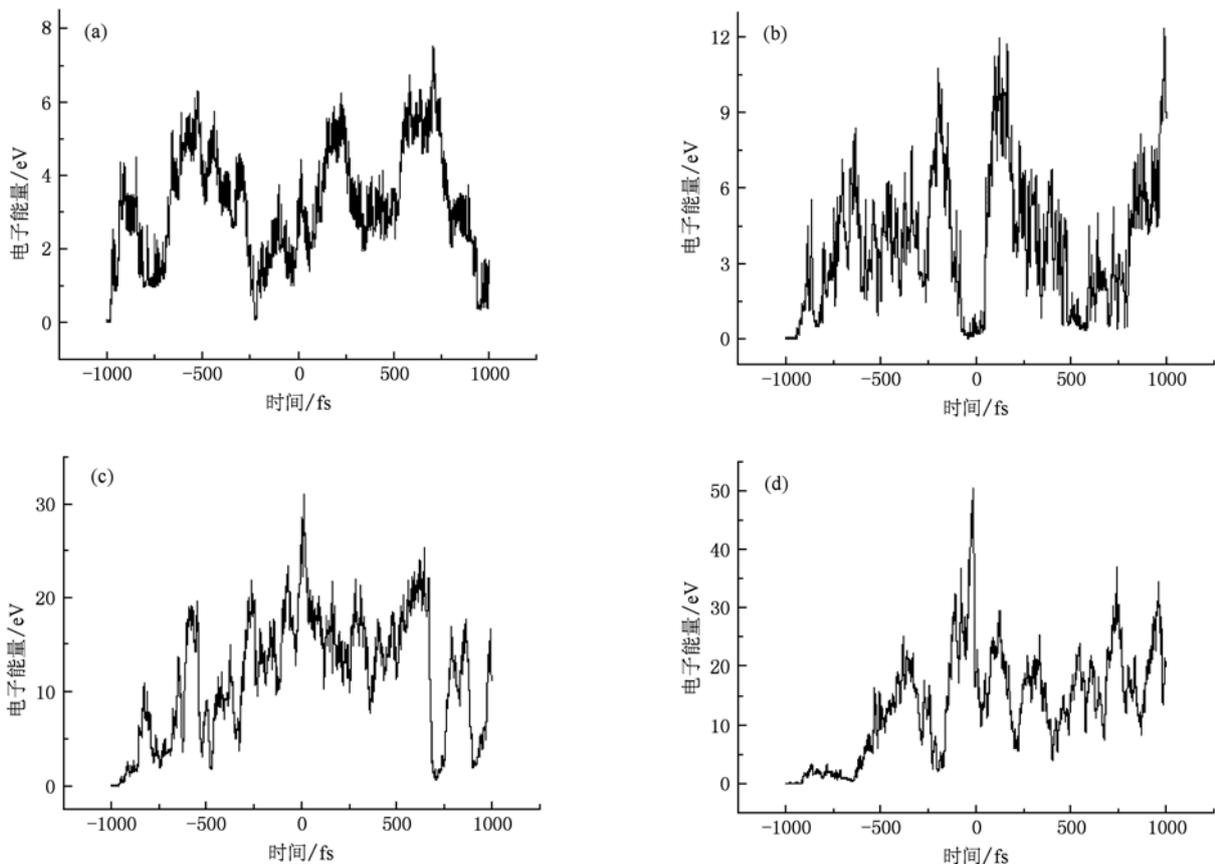
图 1 给出了不同尺寸下电子能量随时间的变化情况. 图 1(a)–(d) 中电子能量具有相似的变化趋势, 可以看出: 在 4 nm × 4 nm × 4 nm 以下的尺寸时, 电子能量呈振荡变化的形式, 整个模拟时间内未见明显的持续增加趋势. 这反映出能量累积的初期阶段电子在激光周期性变化的电磁场中振荡且不断累积能量, 该阶段持续时间极短, 当能量增加到足够大时, 表面散射机理开始作用. 表面散射作用一方面可以促进电子吸收激光能量; 另一方面, 在尺

寸很小时将引起小尺寸效应, 此后电子能量难以再继续增加.

一般地, 电子-表面散射的弛豫时间 τ 和电子能量 E 有关, $\tau = L/(2E/m)^{1/2}$ (L 是纳米颗粒尺寸). 电子-晶格散射的弛豫时间在飞秒到亚皮秒量级^[20]. 当表面散射弛豫时间与晶格散射的相当或更小时, 表面散射作用将明显表现出来. 当表面散射弛豫时间与激光半周期相当或更小时, 小尺寸效应将凸现出来.

图 1(e) 给出了 5 nm × 5 nm × 5 nm 尺寸时电子能量的变化趋势, 此时电子能量仍具有振荡变化的形式, 但是在整个模拟时间内, 电子能量呈现出与激光脉冲功率密度类似的时间谱, 能量先增加后减小, 在激光功率密度最强的 0 时刻电子能量达到最大. 这反映出电子能量的激光场强度依赖性, 小尺寸效应的影响已经减弱. 但表面散射机理仍是主要的散射机理, 否则在晶格散射作用之前电子能量应该难以积累, 即图 1(f)–(j) 所示的情况.

在图 1(f)–(i) 中, 电子能量具有相似的变化趋势, 可以看出在 6 nm × 6 nm × 6 nm 以上尺寸时,



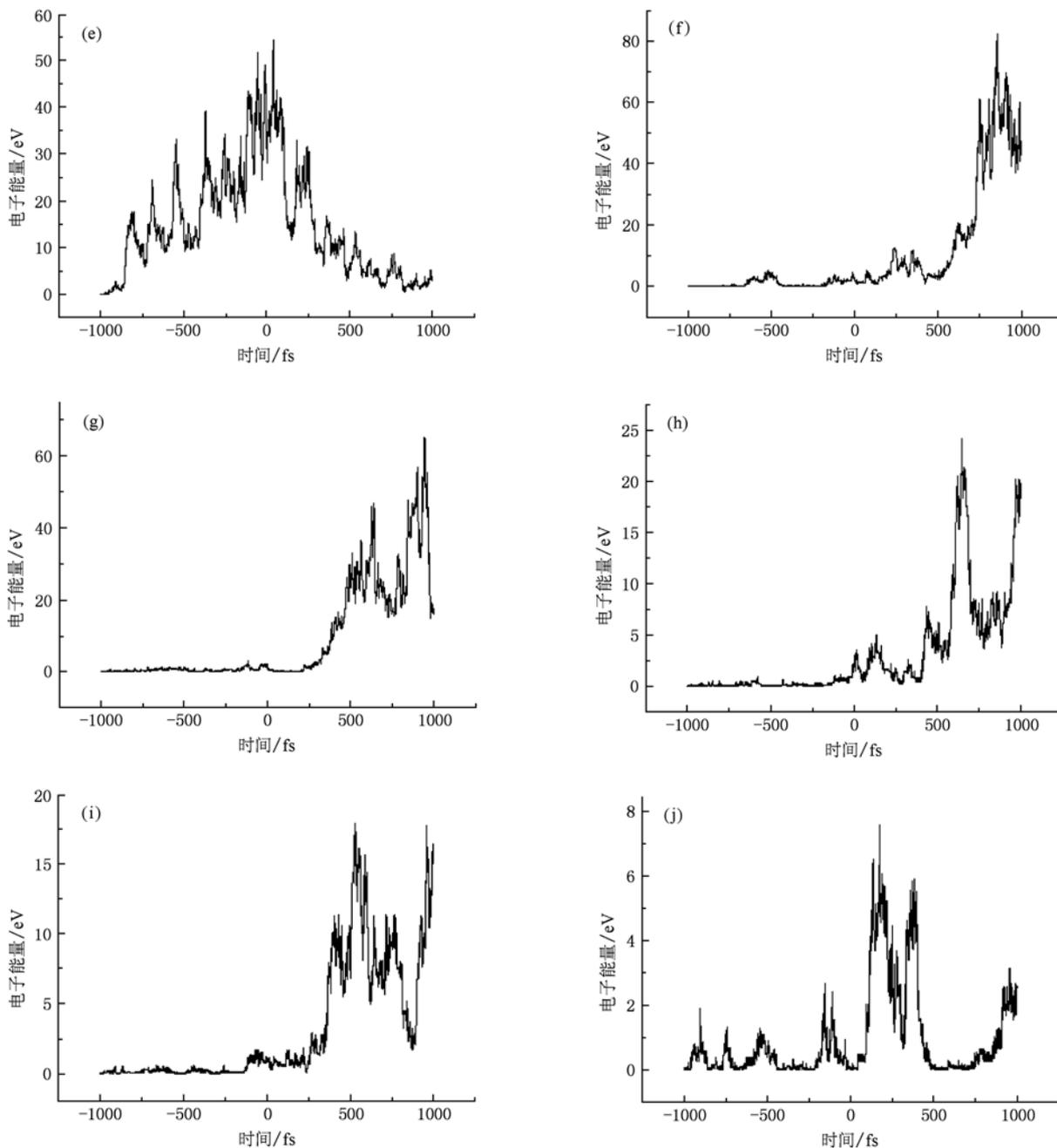


图1 电子能量随时间变化情况 (a) 尺寸为 $1 \times 1 \times 1$; (b) 尺寸为 $2 \times 2 \times 2$; (c) 尺寸为 $3 \times 3 \times 3$; (d) 尺寸为 $4 \times 4 \times 4$; (e) 尺寸为 $5 \times 5 \times 5$; (f) 尺寸为 $6 \times 6 \times 6$; (g) 尺寸为 $7 \times 7 \times 7$; (h) 尺寸为 $8 \times 8 \times 8$; (i) 尺寸为 $10 \times 10 \times 10$; (j) 尺寸为 $20 \times 20 \times 20$ (尺寸单位: nm)

电子能量经历一个很长的慢速累积阶段,此阶段电子能量很小.待到激光脉冲过半以后(约0.5 ps处)能量累积快速增加.此外,在整个计算时间内电子能量最大值随模拟区域尺寸的增加而减小.这反映了表面散射作用已经比较微弱,电子只能以近自由振荡运动为主,电子能量只有待到晶格散射作用后才能有效增加.而且,表面散射作用的衰减程度随尺寸的增加逐渐增强,直至极少发生.

需要说明的是,如图1(j)所示, $20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$ 以上尺寸时,电子能量很小,且未见明显的累积,这并不说明此时电子能量始终难以累积.此时表面散射几乎没有任何作用,电子能量在初期的慢速积累阶段增加太慢,以致在本次模拟的激光脉冲宽内(1ps),晶格散射还没有开始明显地影响电子吸收激光能量(晶格总散射率随电子能量增加而增大).对于更长脉冲激光,随着时间的延长,一旦晶

格散射开始起作用,电子能量将迅速累积.

晶格散射与表面散射作用均有利于电子能量的增加.晶格散射弛豫时间在亚皮秒量级,主要受电子能量的影响,随电子能量的增加而缩短;而表面散射弛豫时间则主要依赖于模拟区域尺寸,尺寸越小弛豫时间越短.总体上,对不同的模拟单元尺寸,由图1可以看出:尺寸很大时(如图1(j)所示),材料吸收行为与体材料相同,此时表面散射作用可以忽略,电子在激光场中自由振荡,其能量变化呈现出波动变化的特征,能量极大值依赖于激光场强度,在激光场峰值附近出现最大值;随着尺寸的减小(如图1(h),(i)所示),表面散射开始作用并逐渐增强,电子在自由振荡阶段吸收逐渐增大,能量最大值逐渐增加,晶格散射作用越来越大,电子能量最大值出现的时间逐渐靠近晶格弛豫时间(亚皮秒量级),即不断推迟;尺寸继续减小(如图1(f),(g)所示),表面散射作用继续增强,电子在自由振荡阶段累积的能量继续增加,晶格散射作用逐渐主导电子吸收过程,且晶格散射的弛豫时间越来越短,电子能量最大值出现的时间不断提前;随着尺寸的进一步减小(如图1(d),(e)所示),表面散射逐渐主导电子吸收过程,且表面散射弛豫时间很短,考虑到表面散射对电子能量的约束能力,此时电子能量的变化依赖激光场强度,电子能量最大值又将出现在激光脉冲峰值位置附近;待尺寸降到一定值后(如图1(a)–(c)所示),表面散射的限制效果主导电子能量的变化,小尺寸效应逐渐明显,电子能量无法继续升高,又呈现出振荡变化趋势.

图1还反映出:随着尺寸的减小,电子能量最大值先增加后减小.图1(a)–(f)中电子能量逐渐增加,此时表面散射引起的小尺寸效应确定了电子能量最大值,其大小受模拟单元尺寸的影响,随尺寸的增加而增大.小尺寸效应的物理图像为:在激光周期性电磁场的半个周期内,电子受力方向不变,持续加速或减速,在材料尺度很小时,材料在半个周期内将受到表面散射至少一次,从而改变运动及加速度方向,这将抑制材料在激光场中的有效加速.这样,电子能量将受到材料尺度的限制: $E_m = \frac{1}{2}m[L/(0.5\lambda/c)]^2$, m, L, λ, c 分别是电子有效质量,模拟区域尺寸,激光波长,真空中光速.所以,材料尺寸增加,小尺寸效应下的电子能量也增加,直到小尺寸效应基本消失,电子能量达到最大值.尺寸进一步增加,表面散射作用越来越小,电子能量

最大值越来越小.最终,表面散射几乎不起作用时,电子能量最大值由晶格散射作用决定而趋于稳定.

值得注意的是,在尺寸为 $6\text{ nm} \times 6\text{ nm} \times 6\text{ nm}$ 时电子能量达到了 82.14 eV ;而在尺寸为 $1\text{ nm} \times 1\text{ nm} \times 1\text{ nm}$ 时电子能量仅有 7.78 eV ,小于材料的能带带隙,以至雪崩电离过程将难以发生.由此可以预测:在小尺寸效应明显时,电子能量无法积累,薄膜微观结构尺寸在此范围内将具有足够高的抗激光损伤能力;随着尺寸的增加,小尺寸效应逐渐消失,电子能量迅速增加,相应结构薄膜材料的抗激光损伤能力将迅速下降,应当避免获得微结构尺寸在此区间的薄膜;随着尺寸继续增加,表面散射作用不断减弱,材料的吸收行为逐渐过渡到体材料的情况.

图2给出了不同尺寸下电子 x 方向的位置随时间的变化情况,由此可以直观地看出表面散射的作用.如图2(a)所示,表面散射作用随时间推移逐渐增强,而图2(b)中表面散射一直没有起到明显的作用.结合图1(f)与图2(a)及图1(j)与图2(b)可以

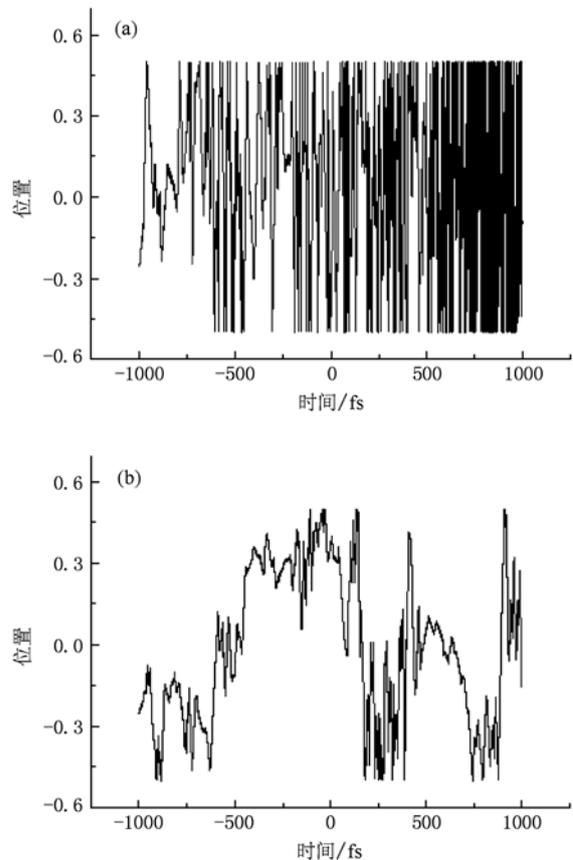


图2 电子 x 方向的位置 (a) 尺寸为 $6 \times 6 \times 6$; (b) 尺寸为 $20 \times 20 \times 20$ (尺寸单位: nm, 纵坐标为电子 x 方向的坐标与模拟区域边界所在位置该方向坐标的比值)

看出表面散射对促进电子吸收激光能量的作用.

4. 结 论

基于小尺寸材料下的电子加速过程的研究,得出如下结论:电子所受散射作用与其能量紧密相关,电子能量过低时,表面散射弛豫时间大于激光半周期,表面散射作用很小,此时电子以自由振荡为主;电子能量过高时,表面散射弛豫时间大于声子散射弛豫时间,表面散射作用也很小,此时声子

散射起主导作用.但对于尺寸很小的器件,由表面散射引起尺寸限制作用,其内部电子的能量难以积累,以致声子散射主导散射过程的情况难以发生,从而出现由表面散射主导散射过程而引起的小尺寸效应.随着尺寸的增加,表面散射起主导作用的电子能量范围逐渐减小,小尺寸效应逐渐减弱,直至消失.激光辐照下,小尺寸元件中的表面散射作用对电子加速的约束限制了电子吸收激光能量.这对设计一些具有新型纳米微结构的高激光损伤阈值的光学薄膜具有重要意义.

- [1] Zhang L D, Mou J M 2001 *Nanomaterials and Nanostructures* (Beijing: Science Press) p1—20 (in Chinese) [张立德,牟季美 2001 纳米材料和纳米结构(北京:科学出版社)第1—20页]
- [2] Cao G Z 2004 *Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications* (London: Imperial College Press) p10—15
- [3] Ferry D K, Goodnick S M 1997 *Transport in Nanostructure* (New York: Cambridge University Press) p1—30
- [4] Zhang Y B, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201
- [5] Novoselov K S, Jiang Z, Zhang Y, Morozov S V, Stormer H L, Zeitler U, Maan J C, Boebinger G S, Kim P, Geim A K 2007 *Science* **315** 1379
- [6] Cheianov V V, Falko V, Altshuler B L 2007 *Science* **315** 1252
- [7] Xia Z L, Guo P T, Xue Y Y, Huang C H, and Li Z W 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3523 (in Chinese) [夏志林、郭培涛、薛亦渝、黄才华、李展望 2010 物理学报 **59** 3523]
- [8] Wang W 2006 *PH. D. dissertation* (Shanghai: Fudan University) (in Chinese) [王伟 2006 博士学位论文(上海:复旦大学)]
- [9] Arnold D, Cartier E, DiMaria D J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 10278
- [10] Ghillino E, Garetto C, Goano M, Ghione G, Bellotti E, Brennan K F 2001 *VLSI Design* **13** 63
- [11] Nilsson H E, Englund U, Hjelm M 2002 *Materials Science Forum* **537** 389
- [12] Scozzoli L, Regglani S, Rudan M 2000 *IEICE Trans. Electron E* **83C** 1183
- [13] Xia Z L, Fan Z X, Shao J D 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3007 (in Chinese) [夏志林、范正修、邵建达 2006 物理学报 **55** 3007]
- [14] Ye L X 1997 *Monte Carlo Simulation of Small Size Semiconductor Device* (Beijing: Science Press) p318—460 (in Chinese) [叶良修 1997 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟(北京:科学出版社)第318—460页]
- [15] Zhou S, Yuan X, Hua D, Zhong X, Yu W 2010 *High Power Laser and Particle Beams* **22** 379 (in Chinese) [周素云、袁孝、华丹、张翔、余玮 2010 强激光与粒子束 **22** 379]
- [16] Kortov V S, Zvonarev S V, Schreiber E, and Fitting H J 2009 *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **173** 79
- [17] Pop E 2010 *Nano Res.* **3** 147
- [18] Fischetti M V, DiMaria D J, Bronson S D, Theid T N, and Kirtley J R 1985 *Physical Review B* **31** 8124
- [19] Fischetti M V, Laux S E 1988 *Physical Review B* **38** 9721
- [20] Kosina H 2000 *IEEE Transactions on Electron Devices* **47** 1898

The laser induced electronic acceleration process in nanostructured dielectric^{*}

Xia Zhi-Lin[†]

(School of Materials Science and Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

(Low Dimensional Materials & Application Technology, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(Received 21 May 2010; revised manuscript received 9 August 2010)

Abstract

The Monte Carlo method has been used to simulate the process of electron transport and acceleration in a nano-dimensional unit when irradiated by laser pulse of wavelength 1064 nm and power density of GW/cm^2 level. When electrons transport in laser field, the scattering of electron-phonon and electron-surface are considered. The results show that: when the size of simulation unit is small to a degree, electron-surface scattering will dominate the scattering process and the small size effect becomes obvious. As a result, the electron is difficult to absorb laser energy. Based on the results, we can design new kind of films with nanostructure and improve the laser induced damage threshold of optical films.

Keywords: laser irradiation, small size effect, electron acceleration, Monte Carlo simulation

PACS: 68.49.Jk, 34.80.Qb, 81.07.Ta, 68.65.Hb

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974150 and 10804090), the Open Project Program of Low Dimensional Materials & Application Technology (Xiangtan University), Ministry of Education, China (Grant No. DWKF0908) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant No. 2010-IV-056).

[†] E-mail: lionel626@163.com