Письма в ЖЭТФ, том 38, вып. 4, стр. 180 – 182 *25 августа 1983 г.*

НЕЛИНЕЙНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА И ЗВУКА В МАТЕРИАЛАХ СО СЛАБО СВЯЗАННЫМИ АТОМАМИ

В.Л.Бонч-Бруевич, Т.З.Качлишвили

Материалы со слабо связанными атомами (*a*-Si : H при большой концентраций водорода, сегнетоэлектрики вблизи точки фазового перехода и др.) следует рассматривать в модели системы ангармонических осцилляторов. Отмечено три эффекта, которых следует ожидать при поглощении электромагнитных или звуковых волн в таких системах. Даны ориентировочные оценки интенсивности света или звука, необходимой для наблюдения указанных эффектов.

В ряде веществ частоты атомных колебаний оказываются довольно малыми благодаря сравнительно небольшим силам связи. Примером может служить *a*-Si : H при не слишком малом процентном составе водорода; при этом часть его оказывается слабо связанной [1]; видимо, она не идет на блокирование болтающихся связей. Другой пример – туннельные моды в стеклообразных полупроводниках.

Не исключено, что аналогичная ситуация имеет место и в некоторых больших молекулах (с ван-дер-ваальсовой связью), а также в сегнетоэлектриках (мягкая мода). При действии периодической внешней силы частоты $\bar{\omega}$ на такую систему естественно ожидать заметных эффектов ангармонизма (сила может быть обусловлена электромагнитной или звуковой волной). Будем рассматривать, в основном, первый из указанных примеров; благодаря локальному характеру колебаний слабо связанного водорода там может иметь смысл простая модель независимых одномерных ангармонических осцилляторов. Пусть ω_0 есть собственная частота осциллятора (пока мы отвлекаемся от неизбежного разброса ее значений в неупорядоченной системе). Нас будут интересовать три эффекта: резонансы на частотах $\bar{\omega} = \omega_0/2$, $\bar{\omega} = 2\omega_0$ и скачки амплитуды вынужденных колебаний, связанные с S-образной формой амплитудной характеристики. В последнем случае будут иметь место скачки коэффициента поглощения электромагнитной или звуковой волны.

Первый из указанных эффектов возникает, в принципе, при любой амплитуде внешней силы; отношение амплитуды соответствующих вынужденных колебаний в точке резонанса к амплитуде линейных резонансных колебаний составляет $8|\kappa_1|F_0/9m\omega_0^4$, где F_0 – амплитуда внешней силы, m – приведенная масса осциллятора (в случае a-Si : H это есть, видимо, масса атома водорода – она мала как по сравнению с массой атома кремния, так и по сравнению с массами возможных структурных дефектов), κ_1 – первый коэффициент ангармонизма (потенциальная энергия осциллятора есть $U = 0{,}5\, m\omega_0^2 x^2 + {}^1/_3 m\kappa_1 x^3 + {}^1/_4 m\kappa_2 x^4$; по порядку величины $|\kappa_1| \sim \omega_0^2/2r_0$, $|\kappa_2| \sim \omega_0^2/6r_0^2$, где r_0 – характерное расстояние, на котором заметно изменяется потенциальная энергия взаимодействия между объектами, составляющими осциллятор). Обнаружение резонанса при $\tilde{\omega} = \omega_0/2$ позволило бы определить отношение $|\kappa_1|/m$.

Остальные эффекты возникают лишь если F_0 превышает некоторое пороговое значение F_k. Мы получаем соответственно для второго и третьего эффектов: $F_k^{(2)} = 12\,\omega_0\mu r_0 m$ и $F_k^{(3)} = 8r_0 m(3\omega_0\mu^3)^{1/2}$, где μ – линейный коэффициент поглощения. Поскольку резонансные явления заметны лишь при $\mu \ll \omega_0$, $F_k^{(3)} < F_k^{(2)}$ и только эту величину мы и будем рассматривать. Атом слабо связанного водорода может обладать или не обладать эффективным зарядом $ey\ (0 \leqslant |y| \leqslant 1)$. Соответственно, сила, действующая на этот атом со стороны электромагнитной волны, есть либо $F = eyE\sin\omega t$, либо $F = 0{,}5\,\sigma kE^2 \sin 2\omega t$, где ω и $k = \omega/c\sqrt{\epsilon}$ частота и волновой вектор волны в среде с диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\omega)$, E – амплитуда напряженности электрического поля в волне, σ – поляризуемость объекта "атом водорода + дефект" (для простоты мы считаем тензор поляризуемости изотропным). Отметим, что во втором из указанных случаев $\tilde{\omega} = 2\omega$.

Обращаясь к силе, действующей со стороны звуковой волны частоты ω, заметим, что в a-Si : H химические связи частично гетерополярны – за счет сильно связанного водорода, блокирующего болтающиеся связи. По этой причине колебания матрицы в звуковой волне сопровождаются и волной напряженности электрического поля, создаваемого диполями с моментом $\mathbf{d} = e^*\mathbf{Q}ka$, где $e^* = e\bar{y}$ – эффективный заряд сильно связанного водорода, $k = \omega/s$, s – скорость звука, a – длина связи Si – H, $\mathbf{Q}$ – вектор смещения в звуковой волне. Соответственно получаются прежние выражения для силы, в которых надо положить лишь $E = d/r^3$, где r – величина порядка нескольких межатомных расстояний. Величины Q и E удобно выразить через значения потока энергии, J, в акустической и электромагнитной волнах. При этом из формулы для $F_k^{(3)}$ получаются следующие выражения для критических значений потока энергии в электромагнитной $(J_{k,opt})$ и звуковой $(J_{k,ac})$ волнах:

а) в случае заряженных атомов слабо связанного водорода

$$J_{k,\,opt.}^{(1)} = 24c\epsilon^{1/2} r_0^2\, \omega\mu^3 m^2 (\pi e^2 y^2)^{-1}, \qquad (1а)$$

$$J_{k,\,ac}^{(1)} = 96 s^3 \rho r^6 r_0^2 m^2 \omega_0 \mu^3 (e^4 y^2 \bar{y}^2 a^2)^{-1}. \qquad (1б)$$

б) В случае нейтральных атомов слабо связанного водорода

$$J_{k,\,opt}^{(2)} = 2c^2 m r_0 (3\mu^3)^{1/2} (\pi\sigma\omega_0^{1/2})^{-1}, \qquad (2а)$$

$$J_{k,ac}^{(2)} = 8s^4 \rho r^6 r_0 m\, (3\mu^3)^{1/2} (e^2 \bar{y}^2 a^2 \sigma\omega_0^{1/2})^{-1}. \qquad (2б)$$

Здесь ρ – плотность вещества.

Численные оценки здесь весьма затруднительны, так как о состоянии слабо связанного водорода в a-Si неизвестно практически ничего. Ясно лишь, что величина $\hbar\omega_0$ должна быть заметно меньше энергии связи этих атомов. Последняя, скорее всего, имеет ван-дер-ваальсову природу; следовательно, $\hbar\omega_0 \lesssim 4\cdot 10^{-2}$ эВ. Ориентировочные оценки при $s = 4\cdot 10^5$ см/с, $\rho = 2$ г/см^3, $r_0 = r = 1{,}8\cdot 10^{-7}$ см, $\epsilon = 12$ и $\mu = 0{,}1\,\omega_0$ дают в случае (2а) нереально большое значение; в случаях (1а), (1б) и (2б) мы получаем, соответственно, $J^{(1)}_{k,\,opt} = 0{,}3\,y^{-2}(\omega_0 \cdot 10^{-10})^4$ Вт/см^2, $J^{(2)}_{k,\,ac} = 7\,(y\bar{y})^{-2}(\omega_0 \cdot 10^{-10})^4$ Вт/см^2, $J^{(2)}_{k,\,ac} = 3\bar{y}^{-2}(\omega_0 \cdot 10^{-10})^{3/2} \cdot 10^{-21}\,\sigma^{-1}$ Вт/см^2. Здесь ω_0 выражена в c^{-1}, а σ — в см^3.

В реальном материале естественно происходит усреднение по распределению собственных частот, коэффициентов затухания и т. д. При этом реальный вклад в эффект будут давать лишь осцилляторы с наивыгоднейшим сочетанием параметров.

Литература

1. Аморфные полупроводники. Под ред. М.Бродски. М.: Мир, 1982.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Физматгиз, 1958.

Московский
государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
1 июля 1983 г.