

- [1] Цытович В.Н. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. В. 5. С. 1680-1695.
- [2] T s y t o v i c h V.N. // Phys. Reports. 1989. V. 178. N 5-6. P. 261-387.
- [3] Попель С.И., Цытович В.Н. Препринт 219, Москва, ФИАН, 1988.
- [4] T s y t o v i c h V.N., P o p e l S.I. // Comments Plasma Phys. Controlled Fusion. 1989. V. 12. No 4. P. 171-179.
- [5] Иванов А.А., Рудаков Л.И. // ЖЭТФ. 1966. Т. 51. В. 5. С. 1522-1534.

Физический институт  
им. П.Н. Лебедева АН СССР,  
Москва

Поступило в Редакцию  
14 февраля 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 16

26 августа 1990 г.

01; 05

© 1990

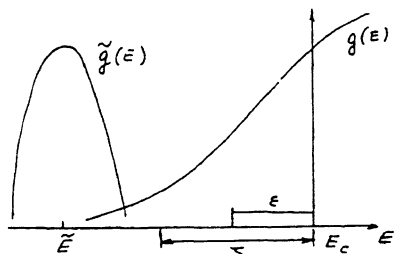
КИНЕТИКА УСТАНОВЛЕНИЯ РАВНОВЕСИЯ  
В СИСТЕМАХ С КВАЗИНЕПРЕРЫВНЫМ  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ.

С.Н. Т а р а с к и н, М.И. К л и н г е р

В данной работе анализируются некоторые процессы термической релаксации в системах с квазинепрерывным энергетическим спектром. Прежде всего имеется в виду релаксация электронной или неосновной атомной подсистемы в неупорядоченных твердых телах. Общее рассмотрение конкретизируется на примере анализа релаксации водородной подсистемы в аморфном кремнии с водородом ( $a-Si:H$ ). Для этого вещества экспериментально установлено, что закалка до температуры ниже определенной (т.е. быстрое охлаждение от  $T_0$  до  $T$ ) сопровождается затянутыми релаксационными процессами с макроскопическими характерными временами, которые связываются с дисперсионным диффузионным движением атомов водорода [1]. При этом дисперсия является следствием разброса глубин потенциальных ям для водорода, как правило, экспоненциального вида с характерным энергетическим масштабом спада  $\omega$ .

Ниже предлагается теоретическая модель релаксации водородной подсистемы при закалке  $a-Si:H$ , основанная на представлении о квазинепрерывном распределении энергий атомов водорода в основной сетке  $a-Si:H$ . На основе решений уравнений баланса полу-

Энергетическая плотность состояний атомов водорода в  $\alpha\text{-Si:H}$  (модель).



чены законы спада, имеющие дисперсионный характер и характеризующиеся дисперсионным параметром, существенно зависящим от температуры отжига.

Согласно [1], в  $\alpha\text{-Si:H}$  будем различать связанный ( $E < E_c$ ) и несвязанный ( $E > E_c$ ) водород (см. рисунок). При этом под несвязанными состояниями водорода понимаются состояния в межузельном пространстве, через которые неизбежно происходят переходы атомов водорода из одного связанного состояния в другое. Под связанными состояниями понимаются как состояния в центрах связей  $\text{Si-Si}$  (по аналогии с кристаллом. [2]) с плотностью  $g(\epsilon)$  (при  $\epsilon = E_c - F > 0$ ), так и состояния моногидридов  $\text{Si-H}$  с плотностью  $\tilde{g}(\epsilon)$  (см. рисунок).

Термические переходы атомов  $\text{H}$  между связанными состояниями через несвязанные обеспечивают установление термического равновесия в водородной подсистеме и описываются стандартными уравнениями баланса:

$$\frac{d}{dt} \left\{ n(t) + \int_0^{\infty} f(\epsilon, t) [g(\epsilon) + \tilde{g}(\epsilon)] d\epsilon \right\} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt} f(\epsilon, t) = \frac{\omega_0}{N_t} n(t) (1 - f(\epsilon, t)) - \omega_0 e^{-\frac{\epsilon}{T}} f(\epsilon, t). \quad (2)$$

Здесь  $n(t)$  — концентрация водорода в несвязанных состояниях,  $f(\epsilon, t)$  — функция распределения атомов водорода по связанным состояниям,  $N_t$  — концентрация незанятых связанных состояний;

$$N_t \approx \int_0^{\infty} [g(\epsilon) + \tilde{g}(\epsilon)] (1 - f(\epsilon)) d\epsilon, \quad \omega_0 - \text{характерная атомная частота.}$$

Уравнение (1) отвечает закону сохранения числа атомов водорода, а уравнение (2) описывает переходы между связанными и несвязанными состояниями. Начальное условие вида

$$f(\epsilon, t=0) = \left( 1 + \exp\left(-\frac{\epsilon - \zeta(T_0)}{T_0}\right) \right)^{-1} \quad (3)$$

при  $T_0 > T$  соответствует задаче о закалке  $\alpha\text{-Si:H}$ . В формуле (3)  $\zeta(T_0)$  задает положение уровня Ферми водородной подсистемы относительно  $E_c$ ,  $\zeta(T_0) < E_c - \tilde{E}$  [1].

Будем ниже для простоты считать, что  $\tilde{g}(\epsilon) \approx \tilde{N} \delta(\epsilon - E_c + \tilde{E})$ . Тогда возможны две ситуации в зависимости от величины концентрации.

Рассмотрим сначала случай, когда  $g(\xi)\omega \gg \tilde{N}$ , и моногидридные состояния не определяют положение уровня Ферми  $\xi(T) \approx \xi(T_0)$  ( $\omega$  — масштаб спада  $g(\epsilon)$ ,  $g(\epsilon) \sim \exp(-\epsilon/\omega)$ ). В этом случае термализация водородной подсистемы происходит за время  $t_0$ ,

$$t_0 \sim \omega_0^{-1} \exp(\xi/T), \quad (4)$$

а наиболее значительный спад  $n(t)$  при  $t \ll t_0$  осуществляется по закону

$$n(t) = n(T_0) \frac{T}{T_0} \cdot \frac{\delta E_1}{\delta E_2} \cdot (\omega_0 t)^{\beta-1}, \quad \beta = T/T_0, \quad (5)$$

$$\delta E_1 = \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{\omega}\right)^{-1} + \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\omega} - \frac{1}{T_0}\right)^{-1}, \quad \delta E_2 = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{\omega}\right)^{-1} + \omega. \quad (6)$$

При таких временах концентрация оборванных связей  $N_D(t) = (1-f)\tilde{N}$  незначительно спадает по затянutoму экспоненциальному закону:

$$N_D(t) = N_D(T_0) \exp[-(t/r)^\beta], \quad (7)$$

$$\tau = \omega_0^{-1} \left(\frac{\delta E_2}{\delta E_1}\right)^{T_0/T} \exp(\xi/T), \quad (8)$$

в котором дисперсионный параметр  $\beta = T/T_0$  не зависит от масштаба спада плотности состояний  $\omega$  в отличие от  $\beta = T/\omega$  из работы [1].

Иная ситуация, когда  $\tilde{N} \gg g(\xi)\omega$ , положение уровня Ферми определяется моногидридным водородом, а  $\xi(T)$  существенно зависит от температуры. В этом случае существует три масштаба времен в законе спада  $n(t)$ . При  $t \ll t_1$ , где

$$t_1 \sim \omega_0^{-1} \exp\left\{\left[\xi(T_0) - \omega \ln \frac{N_D(T_0)}{g(\xi(T_0))\omega}\right]/T\right\}, \quad (9)$$

релаксация аналогична рассмотренному выше случаю. В интервале  $t_1 \ll t \ll t_2$ , где

$$t_2 \sim \omega_0^{-1} \exp\{\xi(T_0)/T\}, \quad (10)$$

спад  $n(t)$  описывается формулой вида:

$$n(t) \approx n(T_0) \frac{N_t}{N_D(T_0)} \cdot \frac{(\omega - T_0)T\delta E_1}{\omega^2 T_0} (\omega_0 t)^{-1+\beta}, \quad (11)$$

$$\beta = T/T_0 - T/\omega. \quad (12)$$

Заметим, что и в этом режиме дисперсионный параметр (12) слабо зависит от  $\omega$  при актуальных  $\omega \gg T_0$  ( $\beta \approx T/T_0$ ). Поведение  $N_D(t)$  при этом определяется законом (7) с  $\beta$  вида (12) и  $\tau$ , удовлетворяющему соотношению

$$\tau = \omega_0^{-1} \left( \frac{N_D(T_0)}{g(\zeta(T_0))\omega} \right)^{T_0\omega/T(\omega-T_0)} \exp\left(\frac{\zeta(T_0)}{T}\right). \quad (13)$$

Наиболее существенный спад  $N_D(t)$  происходит в интервале  $t_2 \ll \ll t \ll t_0$ , где  $t_0$  удовлетворяет (4) при  $\zeta = \zeta(T) > \zeta(T_0)$  по закону вида

$$\Delta N_D(t) = N_D(t) - N_D(T) \sim N_t(\omega_0 t)^{-\beta} \quad (14)$$

$$\beta = T/\omega. \quad (15)$$

В этом интервале времен атомы водорода переходят из состояний с энергией  $\epsilon$  из интервала  $\zeta(T_0) < \epsilon < \zeta(T)$  на оборванные связи, и дисперсионный параметр теперь обычным образом зависит от  $\omega$  [1]. Концентрация несвязанного водорода при этом спадает по закону, близкому к гиперболическому:

$$n(t) \sim n(t_2) \frac{t_2}{t} \frac{T}{\omega}, \quad n(t_2) = N_t \exp(-\zeta(T_0)/T). \quad (16)$$

В работе показано, что концентрация несвязанного водорода в  $a-Si:H$  при закалке ( $T_0 \rightarrow T$ ) спадает по дисперсионному закону  $\sim t^{-1+\beta}$ , где дисперсионный параметр определяется главным образом начальной и конечной температурой ( $\beta \approx T/T_0$ ), а не масштабом спада плотности связанных состояний  $\omega$  (ср. [1], где  $\beta = T/\omega$ ).

Отметим, что использованная выше аппроксимация  $\tilde{g}(\epsilon)$  может быть актуальной при достаточно быстром спаде  $\tilde{g}(\epsilon)$  вблизи  $\zeta$  при не слишком низкой температуре [3]. При этом следует иметь в виду, что эффективный дискретный уровень оборванных связей находится выше по энергии нежели основной пик моногидридов. Что касается зарядового состояния связанного водорода, то в соответствии с ЭПР данными водород в центре  $Si-H$  связи, по-видимому, заряжен положительно и нейтрален в моногидридном положении.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Street R.A., Winer K. // Phys. Rev. B40, N 9, 6236-6249.  
 [2] Van de Walle C.G., Denteneer P.J.H., Bar-Yam Y., Pantelides S.T. // Phys. Rev. 1989. B39. N 15. P. 10791-10808.

[3] Klinger M.I., Kudryavtsev V.G.,  
 Ryazanov M.I., Tarasikin S.N. //  
 Phys. Rev. 1989. В 40. N 9. P. 6311-6320.

Физико-технический институт  
 им. А.Ф. Иоффе АН СССР,  
 Ленинград

Поступило в Редакцию  
 13 июня 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 16

26 августа 1990 г.

07

© 1990

ИЗМЕРЕНИЕ ФАЗЫ ГАУССОВСКИХ ПУЧКОВ  
 МЕТОДОМ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ ВТОРЫХ ГАРМОНИК,  
 ГЕНЕРИРУЕМЫХ В РАЗЛИЧНЫХ  
 НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

Б.Я. З е л ь д о в и ч, Ю.Е. К а п и ц к и й,  
 А.Н. Ч у д и н о в, В.М. Ч у р и к о в

При распространении света фаза вдоль геометро-оптического луча меняется по закону  $\varphi = kZ$ , т.е.  $E \sim \exp(ikZ - i\omega t)$ . Геометрическая оптика отказывает при прохождении луча мимо каустики. За каустикой фаза снова меняется по закону  $\varphi = kZ + \Delta\varphi$ , где  $\Delta\varphi = -\frac{\pi}{2}$  — „недобранный“ по сравнению с геометрической оптикой сдвиг фазы. Прохождение луча мимо двух каустик или мимо стигматического фокуса вносит сдвиг фазы:  $-\pi$  по сравнению с геометрооптическим выражением для фазы вдоль луча.

Это обстоятельство, хорошо известное в классической волновой теории, может быть дополнительно проиллюстрировано выражением для поля гауссовского пучка [1]:

$$E(x, y, z) \approx \left[ 1 + i(z - z_0)/k\alpha_0^2 \right]^{-1} \exp \left[ ikz - \frac{ik(x^2 + y^2)}{1 + i(z - z_0)/k\alpha_0^2} \right]. \quad (1)$$

Здесь сдвиг фазы  $-\pi$  обусловлен предэкспонентой  $\Delta\varphi(z) = \arctg[(z - z_0)/k\alpha_0^2]$ , где  $\alpha_0$  — радиус перетяжки,  $k\alpha_0^2$  — ее длина,  $z_0$  — положение центра перетяжки.

В настоящей работе этот сдвиг фазы измерен в эксперименте по интерференции второй гармоники, генерируемой в двух кристаллах. Впервые оптимизация такой схемы исследовалась в работах [2, 3]. Интенсивность второй гармоники на выходе из второго кристалла будет определяться интерференцией вторых гармоник в первом и во втором кристаллах, которая зависит от разницы фаз  $\Delta\varphi$ :