文章编号：1007－4627(2002)04－0407－04

形(应)变超晶格的沟道效应与系统的相平面特征

罗诗裕，马如康，邵明珠
(漳州师范学院，福建 漳州 363000)

摘　要：利用正弦平方势，把粒子运动方程化为具有 δ 力矩的摆方程. 分析了无扰动系统的相平面特征，计算了扰动系统的退道效应. 讨论了退道系数与晶格形变之间的关系.

关 键 词：超晶格；摆方程；力矩；退道效应
中图分类号：O471.5；O571.33　　**文献标识码**：A

随着加速器技术的发展，人们对带电粒子与物质相互作用进行了广泛而深入的研究. 带电粒子的沟道效应和沟道辐射便是人们发现的重要现象之一. 由此发展起来的沟道技术在固体物理和原子核物理中得到了广泛应用，而且成功地将这一技术用来研究形(应)变超晶格.

1970 年，Esaki 和 Tsu [1] 首次提出了超晶格概念. 最初的超晶格是用两种晶格常数相同的材料交替生长，形成一种多层薄膜结构. 后来，人们又用两种晶格常数相近的材料交替生长，形成多层薄膜结构的形变超晶格. 值得注意的是，当人们用分子束外延或其它方法制备超晶格时，由于两种材料的晶格常数略有不同，相邻两层间的晶格常数不能完全匹配，在界面处出现拉伸或压缩形变[2]. 正是这种形变使沟道方向在界面处发生“扭折”. 于是，通常情况下的直沟道变成了弯(折)沟道. 沟道粒子在界面处受到 δ 力矩的作用，使粒子运动方向发生突然变化. 粒子运动的这种特征可以用数学语言表述为在界面上粒子轨道连续，一阶导数不连续.

由于超晶格半导体具有特殊的光电特征，引起了人们对它的极大关注. 因为材料、组分和层厚等均可以人为控制(在原子和分子尺度上)，可望得到均匀半导体材料所不具有的光电特征.

值得注意的是，虽然半导体硅对微电子学做出了巨大贡献，但是，这些年来却不断受到纳米电子学(或自身)的严峻挑战. 不过，作为广泛使用的均匀半导体硅的确存在一些缺陷，比如载流子迁移率低，且能带为间接带隙. 前者使硅的微电子器件速度无法和 GaAs 相比，后者又使它不能发出可见光. 如果把它做成超晶格，则可将它变成(准)直接带隙，使它的光学性质得到改善，为实现大规模的光电集成提供广阔前景[3]. 正是由于能带结构与半导体材料的形(应)变有关，控制或调节超晶格的形变参数就可以得到不同性质的光电材料. 由于超晶格形变参数是一个很重要的量，人们已提出了不同方法对它进行描述，利用带电粒子的退道效应便是其中一种.

本文利用正弦平方势[4,5]，把粒子运动方程化为具有 δ 力矩的摆方程，讨论了无扰动系统的相平面特征，数值计算了扰动系统的粒子退道效应，导出了系统的退道系数及退道系数与晶格形变之间的关系.

1　运动方程

选择图 1 所示的坐标系，对于各层等厚(l) 的超晶格，粒子运动方程可表示为

$$m_0\gamma\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}+\frac{\partial}{\partial x}V(x)=\sum_{j=1}^{n}(-1)^j\Delta I\delta(t-jt_0)\ , \tag{1}$$

其中 x 是粒子偏离沟道中心平面的距离，m_0是粒子静止质量，γ 是相对论因子，n 是超晶格层数，t_0 是粒子穿过每层所需要的时间，$\delta(t-jt_0)$是 Dirac-δ 函数，ΔI 是粒子在界面处所受到的冲量，$V(x)$是粒子-晶体相互作用势，且可表示为

$$V(x)=KW(x)\ , \tag{2}$$

收稿日期：2002－06－26；**修改日期**：2002－08－29
作者简介：罗诗裕(1940—)，男(汉族)，四川射洪人，教授，从事粒子束与物质相互作用研究.

其中

$$K = \pi Z_1 Z_2 e^2 N d_p^2, \tag{3}$$

Z_1 和 Z_2 是粒子和晶体的原子序数，e 是电子电荷，d_p是晶面间距，Nd_p^2 是晶体的原子面密度. 引入正弦平方势[4]

$$W(X) = \beta \sin^2\left(\frac{\pi X}{2}\right), \tag{4}$$

其中 β 是势参数，而

$$X = \frac{2x}{d_p}, \tag{5}$$

令 $\xi = \pi X$, $\tau = \dfrac{2vt}{d_p\sqrt{\beta_1}}$, $\beta_1 = \dfrac{2pv\gamma}{\pi^2 K\beta}$,

$$p = m_0 v, \ \alpha = \sqrt{\frac{2v}{K\beta p}}. \tag{6}$$

再注意到 δ 函数的性质

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x).$$

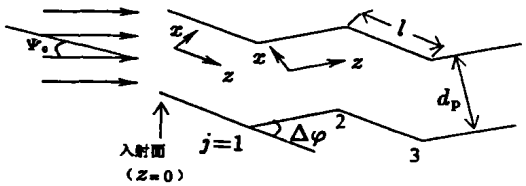

图 1 粒子运动坐标示意图

x 轴垂直于平衡轨道，z 轴沿着平衡轨道方向.

方程(1)可以化为

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \sin\xi = \alpha\sum_{j=1}^{n}(-1)^j \Delta I \delta(\tau - j\tau_0). \tag{7}$$

注意到冲量的改变等于粒子动量的变化

$$\Delta I = \Delta m v_\perp = m\Delta\left(\frac{dx}{dt}\right) \cong m\Delta\phi, \tag{8}$$

其中 $\Delta\phi$ 是粒子在界面处角度的变化. 将式(6)代入上式，然后将上式代入(7)式，可得

$$\frac{d^2\xi}{d\tau^2} + \sin\xi = \Delta\Psi\sum_{j=1}^{n}(-1)^j\delta(\tau - j\tau_0), \tag{9}$$

其中

$$\Delta\Psi = m\alpha\Delta\phi. \tag{10}$$

由方程(9)可以看出，粒子在形变超晶格中的横向运动方程可分别表示为

$$\frac{d^2\xi}{d\tau^2} + \sin\xi = 0, \quad \text{层内} \tag{11}$$

$$\left.\begin{aligned} \xi_{j+1} &= \xi_j, \\ \Psi_{j+1} &= \frac{d\xi_j}{d\tau} + \Psi_j = \Psi_j + \Delta\Psi_j, \end{aligned}\right\} \quad \text{界面} \tag{12}$$

其中 ξ_j，Ψ_j 是粒子穿出第 j 层时的横向坐标和横向动量，而 ξ_{j+1}，Ψ_{j+1}是粒子进入第 $j+1$ 层时的初值，$\Delta\Psi_j$是粒子穿过第 j 层时方位角的变化.

2 无扰动系统的相平面特征

方程(9)的无扰动系统由

$$\left.\begin{aligned} \dot{\xi} &= \Psi \\ \dot{\Psi} &= -\sin\xi \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

给出，相应的哈密顿量为

$$\frac{1}{2}\Psi^2 + (1 - \cos\xi) = h, \tag{14}$$

其中 h 是积分常数. 下面分 3 种情况讨论[6,7].

(1) $h > 2$

相应的解(及其它物理量)用脚标“1”表示，称为旋转周期解，这个解描写了带电粒子在晶体中跨越沟道的运动行为，其解可用 Jacobian 函数表示为

$$\xi_1 = \pm 2\arcsin\left(\frac{sn\tau}{k_1}\right),$$

$$\Psi_1 = \pm\frac{2}{k_1}dn\left(\frac{\tau}{k_1}\right). \tag{15}$$

粒子运动周期

$$T(k_1) = 2k_1 K(k_1), \tag{16}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{1}{2}}, \tag{17}$$

k_1 是椭圆函数的模，$K(k_1)$是第一类全椭圆积分.

(2) $0 < h < 2$

相应的解用脚标“2”表示，称为振动周期解，它描写了沟道粒子的运动行为，其解可表示为

$$\left.\begin{aligned} \xi_2 &= \pm 2\arcsin(k_2 sn\tau) \\ \Psi_2 &= \pm 2k_2\, cn\tau \end{aligned}\right\}, \tag{18}$$

$sn\tau$，$cn\tau$ 是 Jacobian 椭圆函数，ξ_2 的周期为

$$T(k_2) = 4K(k_2), \ k_2 = \sqrt{\frac{h}{2}}, \tag{19}$$

其中，k_2 是椭圆函数的模，$K(k_2)$是第一类全椭圆

积分.

(3) $h = 2$

$h=2$ 的轨道称为异宿轨道，又称为分界线. 它的解可用脚标"c"表示为

$$\left.\begin{aligned}\xi_c &= \pm 4\mathrm{arctg}\left(\frac{th\tau}{2}\right)\\ \Psi_c &= \pm 2\ \mathrm{sech}\tau\end{aligned}\right\}. \tag{20}$$

相应的周期为无穷.

3 小振幅近似

当振幅比较小时，$\sin\xi$ 可以近似表示为

$$\sin\xi \cong \xi\ , \tag{21}$$

于是扰动系统的运动方程(13)可以简化为

$$\frac{d^2\xi}{d\tau^2} + \xi = 0\ . \tag{22}$$

令 $d\xi/d\tau = \Psi$，在相平面上有

$$\Psi^2 + \xi^2 = r_0^2,\ r_0^2 = \Psi_0^2 + \xi_0^2, \tag{23}$$

其中 ξ_0 和 Ψ_0 是系统初值. 上式表明，相平面上的相椭圆退化为半径为 r_0 的圆，我们把它叫做有效圆. 用加速器的语言来说，方程(23)决定了系统的接收度，有效圆面积越大，接收能力越强，系统越稳定. 当粒子在形变超晶格中运动时，只要不跑出这个有效圆所包含的范围，它的运动就是稳定的，并称为沟道粒子，否则称为退道粒子. 无扰动系统是一个保守系统，其特点是沟道粒子始终是沟道粒子. 注意到无扰动系统仅对应于直沟道或者层内情形，再注意到，在形变超晶格界面处粒子将受到冲力作用，可见我们考察的系统是一个非保守系统，因为它同外部在不断交换能量. 当粒子几次穿过界面之后，由于粒子的横向动量越来越大，它就可能跑到有效圆外面成为退道粒子. 调整粒子初始状态(如能量)，在形变超晶格中运动的粒子也可能始终保持在沟道内部. 如果这类现象比较明显就是所谓共振. 前者称为共振退道，后者称为共振沟道. 事实上，当粒子波长为层厚的整数倍时，粒子将始终保持在沟道内部；当粒子波长为层厚的半整数倍时，粒子很快(只需穿过几层)就会跑到沟道外面(如图 2 所示). 选择入射离子为氦离子，入射角 $\Psi_0 = -0.592$，初始位置 $X_0 = 0$，± 0.3 和 ± 0.6，晶格势为简谐势. 将式(23)用单位圆表示

$$\left(\frac{\zeta}{r_0}\right)^2 + \left(\frac{\xi}{r_0}\right)^2 = 1\ , \tag{24}$$

则根据定义，可将退道系数表示为

$$\eta = 1 - \frac{\xi}{r_0} \text{ 或 } \eta = 1 - \left[1 - \left(\frac{\Psi}{r_0}\right)^2\right]^{1/2}. \tag{25}$$

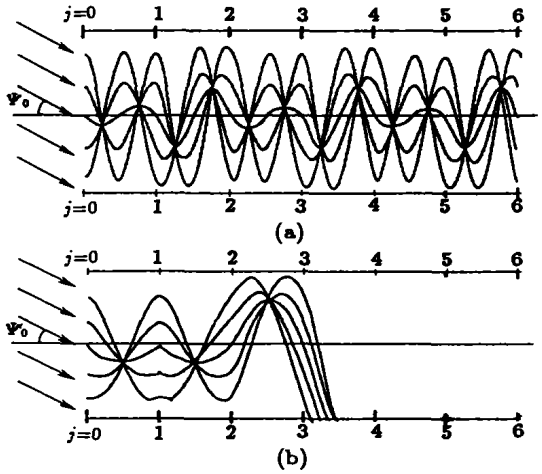

图 2　入射 $^4He^+$ 离子，$\Psi_0 = -0.592$，$X_0 = 0$，± 0.3 和 ± 0.6；晶格势为简谐势的粒子运动轨迹

(a) $E=0.3$ MeV(共振沟道)，(b) $E=1.2$ MeV(共振退道)；横坐标为沟道中心线方向，纵坐标为粒子偏离沟道中心线距离.

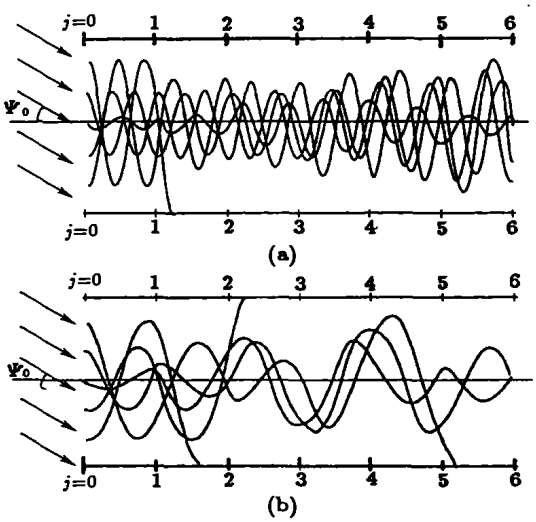

图 3　入射 $^4He^+$ 离子，$\Psi_0 = -0.592$，$X_0 = 0$，± 0.3 和 ± 0.6；晶格势为正弦平方势的粒子运动轨迹

说明同图 2.

当我们采用正弦平方势来描写粒子与晶体相互作用时，无扰动系统的粒子运动轨迹和它的运动周期严格地由方程(18)和(19)给出. 由于扰动存在，系统变得比较复杂，直接从方程(11)和(12)出发，

对系统进行数值分析. 选择与图 2 相同的一组参数，相互作用势为正弦平方势，得到了图 3 所示的共振沟道和共振退道行为.

4 结果和讨论

我们关心的是退道系数与晶格形变之间的关系. 选择 GaP 作基片，沿[100]方向生长等厚的 GaP 和 $GaAs_xP_{1-x}$薄层，由于在生长方向上晶格失配，沿生长方向的各层将交替产生伸长和压缩形变，导致(110)平面沟道扭折，使直沟道变成了“折沟道”. 偏折程度用 $\Delta\varphi$ 表示，且直接与形变有关. 从图 4 可以看出

$$\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = \mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{a_{\perp 2}}{a_{/\!/}}\right) - \mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{a_{\perp 1}}{a_{/\!/}}\right), \qquad (26)$$

其中 φ_1 和 φ_2 是相邻两层沟道的方位角，$a_\perp$ 和 $a_{/\!/}$ 是垂直和平行(100)面的晶格常数. 上式表明，当用同一种材料生长时，有 $a_{\perp 2}=a_{\perp 1}$，因而有 $\Delta\varphi=0$，沟道没有被扭折(即通常的直沟道). 注意到形变量正比于 $|a_{\perp 2}-a_{\perp 1}|$，计算表明，当 $\Delta\varphi \cong 0.1$—1 时，超晶格的形变量大约为 0.5%—5%. 实际上，由于种种原因(比如位错等)，超晶格沟道的偏转角总是与式(26)有差别. 利用退道技术可以比较真实地模拟晶格形变[8]. 比如，通过退道粒子的测量可以导出退道系数，再通过退道系数可以导出偏转角或晶格形变.

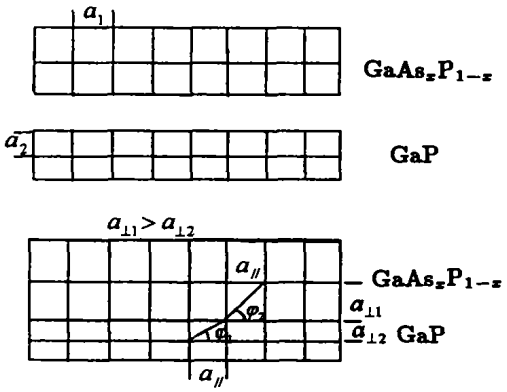

图 4 GaP/Ga_xP_{1-x}的形变超晶格模型

参 考 文 献:

[1] Esaki L, Tsu R. IBM J Rev Develop, 1970, **14**: 61.

[2] Pan C K. Phys Rev, 1985, **B31**: 1 270.

[3] 王振林，闵乃本. 二维非线性光学超晶格中光学双稳、倍周期反转及混沌[J]. 物理, 1995, **24**: 124.

[4] Luo Shiyu, Shao Mingzhu. Sine-squared Potential of Planar Channeled Particles and Kumakhov Radiation of Charged Particles[J]. Chin Phys (USA), 1984, **4**: 670.

[5] Luo Shiyu, Shao Mingzhu. Dechanneling Effects by Penetrating Barrier, Radiation Effects Express[J]. 1988, **1**: 239.

[6] 罗诗裕，邵明珠. 变曲率弯晶的退道行为[J]. 物理学报, 1992, **41**: 1 825.

[7] 罗诗裕，邵明珠. 弯晶沟道的混沌行为[J]. 物理学报, 1986, **37**: 1 394.

[8] Robin N, Heiland W, Jensen J, *et al*. Channeling Effects Observed in Energy-loss Spectra of Nitrogen Ions Scattered of a Pt (110) Suface[J]. Phys Rev, 2001, **A64**: 052901, 1.

Channeling Effect of Strained Superlattice and Phase Planar Characteristics of System

LUO Shi-yu, MA Ru-kang, SHAO Ming-zhu

(*Zhangzhou Normal College, Zhangzhou* 363000 *Fujian, China*)

Abstract: The particle motion equation has been reduced to the pendulum equation with a δ-moment by using sine-squared potential. The phase planar characteristics have been analysed for a non-perturbed systeam . The dechanneling effects have been calculated numerically for a perturbed system. The relationship between the dechanneling fraction and superlattice deformation in resonance has been discussed.

Key words: superlattice; pendulum equation; moment; dechanneling effect