第 26 卷　第 11 期　　半 导 体 学 报　　Vol. 26　No. 11
2005 年 11 月　　CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS　　Nov. ,2005

小振幅近似与形变超晶格系统的动力学稳定性

罗诗裕　邵明珠

(东莞理工学院，东莞　523106)

摘要：假设超晶格的“锯齿形”沟道对粒子的作用可等效为形状相似的周期调制，引入正弦平方势，并在小振幅近似下，把粒子运动方程化为具有硬弹簧特性的 Duffing 方程. 利用多尺度方法分析了共振线附近的粒子运动行为，讨论了系统的主共振、子共振和超共振. 计算了超晶格“锯齿形”沟道的临界斜率与系统参数之间的关系，为能带工程或超晶格光磁电效应的进一步研究提供了理论分析.

关键词：超晶格；正弦平方势；沟道效应；非线性

PACC：6180M；7550R

中图分类号：O471. 5　　**文献标识码**：A　　**文章编号**：0253-4177(2005)11-2097-05

1　引言

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，而且还成功地用来研究形(应)变超晶格[1～3]，并成为一门活跃的研究领域. 所谓超晶格就是将两种晶格常数不同的材料交替生长而形成的多层薄膜结构. 正是由于超晶格的特殊几何结构，引起了人们对它的关注.

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)平面沟道偏折，使直沟道变成了锯齿状的“折沟道”，改变了半导体材料的能带特征，进而改变了半导体材料的光磁电性质. 值得注意的是，这种沟道的特点是在界面处沟道平面连续，一阶导数不存在. 由于超晶格具有特殊的层状结构，可望将沟道辐射改造为 X-激光或 γ-激光[4～6]，开辟超晶格材料应用的新领域；由于超晶格材料的组分和层厚等可以人为控制，从而有望得到均匀半导体材料所不具备的光电特征.

值得注意的是，粒子在(110)面沟道中运动时，由于不断受到“锯齿形”沟道对它的偏转作用，它的横向动量在界面处发生突变，其效果等效于在直沟道中运动的粒子受到如“锯齿形”沟道相似的相互作用势的调制. 文献[1～3]对超晶格的位错动力学和粒子动力学问题作过分析，本文进一步从一般运动方程出发，把“锯齿形”沟道对粒子的作用等效为面沟道粒子受到与“锯齿形”沟道形状类似的周期调制，利用我们曾经提出的正弦平方势[7,8]，在小振幅近似下，把粒子运动方程化为具有硬弹簧特性的 Duffing 方程，并利用摄动法求出了系统的近似解[9]，讨论了系统的主共振、子共振和超共振. 计算了超晶格“锯齿形”沟道的临界斜率与系统参数之间的关系，为能带工程或超晶格光磁电效应的进一步研究提供了理论分析.

2　运动方程

选择自然坐标. 假设 z 是粒子沿沟道中心线方向的平衡轨道，x 是粒子偏离平衡轨道的横向距离，并假设粒子在 (x, z) 平面内运动. 注意到超晶格的沟道不再是直沟道，而是呈锯齿状的折沟道，我们假设粒子在锯齿状沟道中的运动行为可以等效为粒子在直沟道中的运动，再加上一个由于锯齿状沟道引起的外周期势作用. 于是，粒子运动方程可表示为[10]

罗诗裕　男，1940 年出生，教授，主要从事凝聚态物理与半导体超晶格方面的研究. Email：luoshy@dgut.edu.cn

2004-11-18 收到，2005-06-15 定稿　

$$m_0\gamma\frac{d^2x}{dt^2}+2\mu_0\frac{dx}{dt}+\frac{dV(x)}{dx}=\chi\frac{dW(z)}{dz}\qquad(1)$$

其中 χ 是折沟道与等效势之间的比例因子；$z=vt$（v 是粒子纵向运动速度）；m_0 是粒子静止质量；γ 是相对论因子；$V(x)$ 是直沟道中的粒子-晶体相互作用势；$W(z)$ 是与锯齿形沟道相似的周期势. 对于薄层等厚的超晶格，$W(z)$ 是以层厚 l 为周期的锯齿形函数，且有 $\int_0^l W(z)dz=0$. 利用我们曾经提出的正弦平方势，可将 $V(x)$ 表示为[7,8,10]

$$V(x)=K_1\beta_1\sin^2(\pi x/d_p)\qquad(2)$$

其中 $K_1\beta_1$ 是势阱深度，β_1 是势参数，且

$$K_1=\pi Z_1Z_2e^2Nd_p^2$$

而 d_p 是相邻晶面间距；Z_1 和 Z_2 是入射粒子和晶体的原子序数；e 是电子电荷；Nd_p^2 是晶体原子面密度. 注意到 $W(z)$ 是 z 的周期函数，则 $W(z)$ 可展开为

$$W(z)=\sum_{p=1}^{\infty}b_p\cos p\omega z\qquad(3)$$

其中

$$b_p=\frac{2}{l}\int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}}W(\tau)\cos\frac{2\pi pz}{l}dz\qquad(4)$$

$$\omega=\frac{2\pi v}{l}\times\sqrt{\frac{m_0\gamma}{K_1\beta_1}}\qquad(5)$$

再注意到，对于薄层等厚的超晶格，沟道轴的方向与 z 轴的关系呈锯齿状，假设调制函数 $W(z)$ 也具有相似形状，且可用函数表示为

$$W(z)=\begin{cases}\kappa(\frac{l}{2}+z), & -l\le z\le 0\\ \kappa(\frac{l}{2}-z), & 0\le z\le l\end{cases}\qquad(6)$$

其中 κ 是斜率. 将(6)式代入(4)式，可得

$$b_p=\begin{cases}\frac{4\kappa l}{(p\pi)^2}, & p\text{ 为奇数}\\ 0, & p\text{ 为偶数}\end{cases}\qquad(7)$$

考虑到沟道粒子同晶体原子周围的电子云相互作用而损失能量，单位长度上的能损可以表示为 $2\mu_0\frac{dx}{dt}$，其中 μ_0 由文献[11]给出，且

$$\mu_0=\frac{2\pi Lr_er_pjZ_2^2}{e\gamma^2A\beta}\times\left(\frac{c}{v^*}\right)^3\qquad(8)$$

A 是靶原子量，而

$$\begin{cases}r_e=e^2/4\pi\varepsilon_0m_ec^2 & r_p=e^2/4\pi\varepsilon_0m_pc^2\\ j=Z_1en_e\beta c & L\cong\ln\left(\frac{\lambda_0(v^*/c)^2}{2Z_2r_e}\right)\end{cases}\qquad(9)$$

r_e 和 r_p 分别是经典电子半径和质子半径；n_e 是晶体的电子云密度；j 是粒子流密度；v^* 是粒子和电子之间的相对热速度；λ_0 是 Debye 屏蔽距离；β 是无量纲的粒子速度，c 是光速.

将(2)，(6)，(8)式代入方程(1)，并令

$$\xi=2\pi x/d_p,\ \tau=\delta^{1/2}t,\ \delta=\frac{2\pi^2K_1\beta_1}{m_0\gamma d_p^2}\qquad(10)$$

$$\mu=\mu_0/\delta^{1/2},\ \Omega=p\omega v/\delta^{1/2},\ K_p=\frac{2\pi\chi b_pp\omega}{md_p\delta}\qquad(11)$$

可得

$$\frac{d^2\xi}{d\tau^2}+\sin\xi=-2\mu\frac{d\xi}{d\tau}-\sum_{p=1}K_p\sin\Omega\tau\qquad(12)$$

方程(12)是一个具有外周期作用的摆方程，不存在严格的解析解. 我们引入小振幅近似，把粒子运动方程化为具有硬弹簧特性的 Duffing 方程[9]，用摄动法求出系统的近似解，并分析共振线附近粒子的运动行为.

在小振幅近似下，$\sin\xi$ 可用展开式中的前两项代替，并注意到方程(12)右边求和号中起主要作用的也只有前面少数几项. 为了方便又不失一般性，我们只保留求和号中的第一项. 于是，方程(12)可化为如下形式的 Duffing 方程

$$\frac{d^2\xi}{d\tau^2}+\omega_0^2\xi=-2\mu\frac{d\xi}{d\tau}+\alpha\xi^3+K\cos\Omega_1\tau\qquad(13)$$

其中

$$\omega_0=1,\ \alpha=1/6,\ K=\frac{2\pi\chi b_1\omega}{md_p\delta},\ \Omega_1\tau=\frac{\pi}{2}+\Omega\tau\qquad(14)$$

3 主共振，$\Omega_1\approx\omega_0$

为了表示方程(13)中各项的大小，我们引入小参数 ε. 如果系统(13)中的受迫项大小为 $O(\varepsilon)$ 量级时，系统将存在 $\Omega_1=\omega_0$ 的主共振. 为此，假设方程(13)中的 $2\mu\xi$，$\alpha\xi^3$ 和 $K\cos\Omega_1t$ 项的大小为 $O(\varepsilon)$ 数量级，其他项为 $O(1)$ 数量级，则形式上可将方程(13)改写为

$$\ddot{\xi}+\omega_0^2\xi=-2\varepsilon\mu\dot{\xi}+\varepsilon\alpha\xi^3+\varepsilon K\cos\Omega_1t\qquad(15)$$

（注意到 ε 是小参数，这里的作用只表示该项大小，在结果中只需令 $\varepsilon=1$ 即可回到原来状态）.

3.1 摄动解

利用多重尺度法[9]，把方程(15)的解按不同的

时间尺度展开

$$\xi(T,\varepsilon) = \xi_0(T_0, T_1) + \varepsilon\xi_1(T_0, T_1) + \cdots \quad (16)$$

式中 $T_0 = t$, $T_1 = \varepsilon t$. 因为我们只关心共振线附近的粒子运动行为,引入解谐因子 σ 来描写粒子离开共振线的程度. 于是 Ω_1 可表示为

$$\Omega_1 = \omega_0 + \varepsilon\sigma \quad (17)$$

式中 $\sigma = O(1)$,而

$$\Omega_1 t = \omega_0 T_0 + \sigma T_1 \quad (18)$$

将(16)和(18)式代入(15)式中,并分别令和的系数相等,可得

$$D_0^2\xi_0 + \omega_0^2\xi_0 = 0$$

$$D_0^2\xi_1 + \omega_0^2\xi_1 = -2D_0D_1\xi_0 - 2\mu D_0\xi_0 + \alpha X_0^3 + K\cos(\omega_0 T_0 + \sigma T_1) \quad (19)$$

式中 $D_n = \partial/\partial T_n$,解方程(19)可得方程(15)的一级近似解

$$\xi = a\cos(\omega_0 t + \sigma T_1 - \gamma) + O(\varepsilon) \quad (20)$$

其中 a 和 γ 由方程

$$a' = \mu a + \frac{1}{2}\times\frac{K}{\omega_0}\sin\gamma$$
$$a\gamma' = \sigma a + \frac{3}{8}\times\frac{\alpha}{\omega_0}a^3 + \frac{1}{2}\times\frac{K}{\omega_0}\cos\gamma \quad (21)$$

给出. 从方程(15),(20)和(21)可以看出,可将求二阶微分方程(13)的问题转化为求两个一阶微分方程(21)的问题. 但是,由于方程(21)的右边既是 a 的函数,又是 γ 的函数,要把它积分到最终形式仍然很困难(甚至是不可能). 不过,根据彭加勒(Poincare)定理,不积分方程(21)也可得到若干重要结果,比如,它的静态($a' = \gamma' = 0$)解就十分重要.

3.2 静态解

当 $a' = \gamma' = 0$ 时,方程(21)化为

$$\mu a = \frac{1}{2}\times\frac{K}{\omega_0}\sin\gamma$$
$$\sigma a + \frac{3}{8}\times\frac{\alpha}{\omega_0}a^3 = -\frac{1}{2}\times\frac{K}{\omega_0}\cos\gamma \quad (22)$$

于是静态解可表示为

$$\xi = a\cos(\Omega_1 t - \gamma) + O(\varepsilon) \quad (23)$$

式中 a 和 γ 由方程(22)给出. 由方程(22)可得系统的非线性频率响应曲线(共振曲线)

$$\sigma = -\frac{3}{8}\times\frac{\alpha}{\omega_0}a^2 \pm\left(\frac{K^2}{4\omega_0^2a^2} - \mu^2\right)^{1/2} \quad (24)$$

数值分析表明,共振曲线向左弯曲;同时,当频率从大到小或从小到大变化时,系统出现跳跃现象.

3.3 稳定性

为了讨论静态解的稳定性,令

$$a = a_0 + a_1, \gamma = \gamma_0 + \gamma_1 \quad (25)$$

式中 a_0 和 γ_0 是系统的静态解,满足方程(22),而 a_1 和 γ_1 是离开静态解的任意小量. 把方程(25)代入方程(21),按小量 a_1 和 γ_1 展开,保留线性项可得

$$a_1' = -\mu a_1 + \left(\frac{K}{2\omega_0}\cos\gamma_0\right)\gamma_1$$

$$\gamma_1' = \left(\frac{3\alpha a_0}{4\omega_0} - \frac{K}{2\omega_0 a_0^2}\cos\gamma_0\right)a_1 - \left(\frac{K}{2\omega_0 a_0}\sin\gamma_0\right)\gamma_1 \quad (26)$$

系统的稳定性与下列本征方程的本征值有关:

$$\lambda^2 + 2\mu\lambda + \Gamma = 0 \quad (27)$$

式中

$$\Gamma = \left(\sigma + \frac{3\alpha a_0^3}{8\omega_0}\right)\left(\sigma + \frac{9\alpha a_0^2}{8\omega_0}\right) + \mu^2 \quad (28)$$

当 $\Gamma > 0$ 时系统是稳定的;当 $\Gamma < 0$ 时系统是不稳定的;当 $\Gamma = 0$ 时系统处于临界状态.

4 超共振与子共振

如果方程(13)中的受迫项不是小量,而是 $O(1)$ 量级时,系统将存在超共振 $\Omega_p = \frac{1}{3}\omega_0$ 和子共振 $\Omega_p = 3\omega_0$. 我们首先讨论超共振.

4.1 超共振,$\Omega_1 \approx \frac{1}{3}\omega_0$

注意到方程(13)中的 $K = O(1)$,利用上面类似的方法可以导出超共振的一阶近似解

$$\xi = a\cos\{3(\Omega_1 t - \gamma)\} + \frac{K}{\omega_0^2 - \Omega_1^2}\cos\Omega_1 t + O(\varepsilon) \quad (29)$$

相应的频率响应曲线由方程

$$\sigma = -\alpha\left(\frac{3\Lambda^2}{\omega_0^2} + \frac{3a^2}{8\omega_0}\right) \pm\left(\frac{\alpha^2\Lambda^6}{\omega_0^2a^2} - \mu^2\right)^{1/2} \quad (30)$$

给出,其中

$$\Lambda = \frac{K}{2}(\omega_0^2 - \Omega_1^2)^{-1} \quad (31)$$

而系统的临界参数则可表示为

$$K_c = \frac{2}{\sqrt{3}}(\omega_0^2 - \Omega_1^2)\left(\frac{\alpha\omega_0}{\alpha} - \frac{9a_0^2}{16}\right)^{1/2} \quad (32)$$

4.2 子共振,$\Omega_1 \approx 3\omega_0$

利用类似的方法可以导出子共振的一阶近似解

$$\xi = a\cos\left\{\frac{1}{3}(\Omega_1 t - \gamma)\right\} + \frac{K}{\omega_0^2 - \Omega_1^2}\cos\Omega_1 t + O(\varepsilon) \tag{33}$$

频率响应曲线由方程

$$9\mu^2 + \left(\sigma + \frac{9\alpha\Lambda^2}{\omega_0} + \frac{9\alpha a^2}{8\omega_0}\right) = \frac{81\alpha^2\Lambda^2}{16\omega_0^2}a^2 \tag{34}$$

给出,而临界参数则可表示为

$$K_c = \left|2(\omega_0^2 - \Omega_1^2)\sqrt{\frac{\sigma\omega_0}{9\alpha}}\right| = 8\omega_0\sigma\sqrt{\frac{\sigma\omega_0}{9\alpha}} \tag{35}$$

5 结果和讨论

从(32)和(35)式可以看出,仅当参数满足临界条件时,系统才是稳定的.我们以子共振为例,分析一下系统的临界特征.在本文关心的情况下,(35)式中的 $\omega_0=1$, $\alpha=1/6$,由(35),(14),(10),(7)和(5)式,可得超晶格"锯齿形"沟道的临界斜率

$$\kappa_c = \frac{\pi^2}{\chi d_p v}\sqrt[3]{\sigma K_1\beta_1}\sqrt{2/(3m)} \tag{36}$$

注意到斜率 κ 直接与超晶格的形变参数有关,由此,可进一步描述超晶格的光磁电特征.

在经典物理框架内,我们把超晶格"锯齿形"沟道对粒子的作用等效为面沟道粒子受到与"锯齿形"沟道形状类似的周期调制,利用曾经提出的粒子-晶体相互作用势(正弦平方势),在小振幅近似下,把粒子运动方程化为了具有硬弹簧特性的 Duffing 方程.利用多尺度法分析了系统的主共振、子共振和超共振;讨论了粒子在共振线附近运动的非线性行为;从系统的临界特征出发导出了系统的临界参数,为能带工程(或超晶格光磁电性质)的研究提供了理论分析.

参考文献

[1] Robin A, Heiland W, Jensen J, et al. Channeling effects observed in energy-loss spectra of nitrogen ions scattered off a Pt(110) surface. Phys Rev A, 2001, 64(6): 052901

[2] Luo Shiyu, Shao Mingzhu. Dislocation model for strained superlattice and dechannelling effects of a particles. Chinese Journal of Semiconductors, 2003, 24(5): 485 (in Chinese) [罗诗裕,邵明珠.形变超晶格的位错模型与粒子的退道效应.半导体学报, 2003, 24(5): 485]

[3] Deng Chengliang, Luo Shiyu, Shao Mingzhu. Sine-squared potential and chaotic behaviour of strained superlattice. Chinese Journal of Semiconductors, 2005, 26(2): 294 (in Chinese) [邓成良,罗诗裕,邵明珠.正弦平方势与形变超晶格系统的混沌行为.半导体学报, 2005, 26(2): 294]

[4] Korol A, Solovyov A V, Greiner W. Coherent radiation of an ultrarelativistic charged particle channeled in a periodically bent crystal. J Phys G, 1998, 24: L45

[5] Korol A, Solovyov A V, Greiner W. Photon emission by an ultrarelativistic particle channelling in a periodically bent crystal. Int J Mod Phys E, 1999, 8: 49

[6] Luo Shiyu, Shao Mingzhu, Hu Xiduo. Average field idea and single particle model for 2-dimension crystallization beams (Ⅰ). HEP&NP, 2004, 28(1): 96 (in chinese) [罗诗裕,邵明珠,胡西多.二维晶化束的平均场概念与单粒子模型(Ⅰ).高能物理与核物理, 2004, 28(1): 96]

[7] Luo Shiyu, Shao Mingzhu. Sine-squared potential and Kumahov radiation for charged particles. Chin Phys (USA), 1984, 4(7): 670

[8] Luo Shiyu, Shao Mingzhu, Wei Luoxia. The dislocation dynamics and the global bifurcation of system. Acta Physica Sinica, 2004, 53(6): 1219 (in Chinese) [罗诗裕,邵明珠,韦洛霞.位错动力学与系统的全局分叉.物理学报, 2004, 53(6): 1219]

[9] Nayfeh A H. Introduction to perturbation techniques. John Wiley & Sons, 1981

[10] Luo Shiyu, Shao Mingzhu. Dechannelling effects of strained superlattice and global bifurcation in system. Nucl Phys Rev, 2003, 20(1): 55 (in Chinese) [罗诗裕,邵明珠.应变超晶格的退道效应与系统的全局分叉.原子核物理评论, 2003, 20(1): 55]

[11] Shao Mingzhu, Luo Shiyu, Hofmann I. Nonlinear dynamics for 1-dimension Coulomb system in storage ring. Acta Physica Sinica, 1990, 39(8): 1189 (in Chinese) [邵明珠,罗诗裕,Hofmann I.储存环中一维库仑系统的非线性动力学.物理学报, 1990, 39(8): 1189]

Small Amplitude Approximation and Dynamic Stabilities of a Strained Superlattice

Luo Shiyu and Shao Mingzhu

(Dongguan University of Technology, Dongguan 523106, China)

Abstract: It is assumed that a periodic modulation of the superlattice is equivalent to its "saw-toothed" channel. In the small amplitude approximation, the particle motion equation is reduced to the Duffing equation with a hard-spring property by using sine-squared potential. The main resonance, the sub-harmonic resonance, and the super-harmonic resonance are analyzed by the multi-scale technique. The critical parameter of the "saw-toothed" channel is calculated, and the result is provided for the theory analyses of the band-engineering for, or the photo-magneto-electric effects of the superlattice.

Key words: superlattice; sine-squared potential; channelling effect; nonlinearity

PACC: 6180M; 7550R

Article ID: 0253-4177(2005)11-2097-05

Luo Shiyu　male, was born in 1940, professor. He is engaged in research on condensation physics. Email: luoshy@dgut.edu.cn

Received 18 November 2004, revised manuscript received 15 June 2005　