

形变超晶格的位错模型与粒子的退道效应

罗诗裕^{1,2} 周小方¹ 林钧锋¹ 马如康¹ 邵明珠^{1,2}

(1 漳州师范学院, 漳州 363000)

(2 龙岩学院, 龙岩 364000)

摘要: 引入位错模型讨论粒子的退道效应. 把超晶格的沟道偏折等效为位错引起的沟道弯曲, 并对刃型位错的退道行为作了具体分析. 利用正弦平方势, 把粒子运动方程化为具有外力矩的摆方程, 用能量法分析了系统的相平面特征, 导出了系统的退道系数.

关键词: 超晶格; 位错; 摆方程; 退道效应

PACC: 6180M

中图分类号: O471.5

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2003)05-0485-05

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, 而且还成功地用它来研究了形(应)变超晶格. 由于超晶格的材料、组分和层厚等均可以人为(甚至在原子和分子尺度上)控制, 可望得到均匀半导体材料所不具有的光电特征.

硅对微电子学作出了巨大贡献, 但是, 近年来它不断受到相邻领域(比如纳米电子学)和自身的严峻挑战. 作为广泛使用的硅确实存在一些缺陷, 比如载流子迁移率低、能带为间接带隙等. 前者使硅的微电子器件速度无法与 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的应用前景. 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^[1,2].

值得注意的是, 正是由于超晶格的特殊几何结构, 引起了人们对它的兴趣. 比如选择 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”. 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. 当然, 这只是一种理想情况. 实际上, 超晶格的沟道偏折是由于界面处晶格失配产生应力, 应力集中产生位错, 位错运动、钉扎导致晶格形变. 正是由于位错存在, 超晶格在界面处的沟道不再是折沟道, 而是弯沟道. 其特点是界面处沟道平面连续, 一阶导数存在.

在折沟道近似下, 由于在界面处不断受到“折沟道”对它的作用, 带电粒子的横向动量发生突变. 其效果等效于在直沟道中运动的粒子受到同“折沟道”形状相似的周期调制. 这种调制的强弱与晶格畸变有关. 当然同平面连续势相比, 它只是一个量. 正是在这一基本假设下, 文献[1,2] 从一般运动方程出发, 把“折沟道”的退道效应等效为面沟道粒子受到弱的周期调制, 利用正弦平方势^[3], 把粒子运动方程化为具有外周期弱调制的非线性微分方程, 并利用多尺度法研究了系统的主共振和子共振.

本文引入位错模型讨论粒子的退道效应, 把沟

罗诗裕 男, 1940 年出生, 教授, 主要从事凝聚态物理的研究.

2002-05-25 收到, 2003-01-20 定稿

©2003 中国电子学会

道畸变等效为由于位错引起的沟道弯曲，并对刃型位错的退道行为作了具体分析。利用我们曾经提出的正弦平方势，把粒子运动方程化为具有外力矩的摆方程，用能量法分析了系统的相平面特征，导出了系统的退道系数。并将结果同简谐势和“折沟道”近似作了比较。结果表明，由于非线性和位错的退道效应，使带电粒子的退道系数明显增加。

2 运动方程

当粒子沿平面沟道运动时，对于完整晶体，粒子的运动方程可表示为

$$m_0\gamma \frac{d^2x}{dt^2} = - \frac{dU}{dx} \quad (1)$$

其中

$$U = KW(x), \quad K = \pi Z_1 Z_2 N d_p^2 \quad (2)$$

式中 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； Z_1, Z_2 是入射粒子和晶体原子的原子序数； d_p 是晶面间距； $N d_p$ 是单位面积上的原子数； $W(x)$ 是粒子晶体相互作用势。

对于实际晶体，由于位错、堆剥层错或其它缺陷的存在使得晶格发生畸变。假设粒子沿 z 方向入射，沟道面的法线为 \vec{n} ；位错位于 (x, z) 平面上，且与 x 的夹角为 φ ； x 轴与沟道平面的夹角为 θ ；位错的 Burgers 矢量 \vec{b} 与沟道平面的夹角为 ψ （如图 1 所示）。

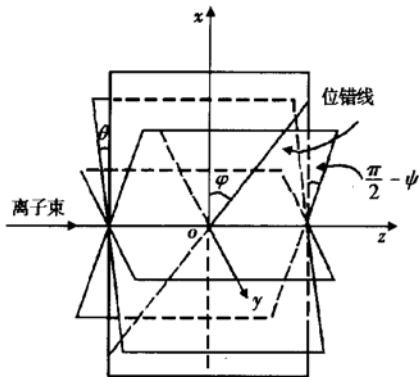


图 1 位错线与坐标系之间的几何关系

Fig. 1 Schematic of geometric relations between the dislocation and coordinates

示)。考虑到晶格畸变的影响，粒子的横向运动方程可化为^[4]

$$\frac{d^2x}{dz^2} + \frac{1}{2E} U'(x) = k(y, z) \quad (3)$$

其中 $U'(x) = \frac{\partial U(x)}{\partial x}$, $z = vt$, v 是粒子纵向速度,

$k(y, z)$ 是缺陷引起的晶体曲率。设 $u_{\perp}(y, z)$ 是位错在 (x, z) 平面内引起的原子位移，由曲率定义可知

$$k(y, z) = \frac{\partial^2 u_{\perp}(y, z)}{\partial z^2} \quad (4)$$

注意到方程(3)左端第二项表示晶格场对粒子的作用力，右端表示晶格畸变引起的离心力。引入直角坐标 $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ ，使得沟道平面法线 \vec{n} 的方向余弦为

$$\begin{aligned} \cos\alpha &= \cos\psi(1 - \sin^2\theta\cos^2\varphi)^{1/2} \\ \cos\beta &= \sin\psi(1 - \sin^2\theta\cos^2\varphi)^{1/2} \\ \cos\gamma &= \sin\theta\cos\varphi \end{aligned} \quad (5)$$

则位错引起的原子位移可表示为

$$\vec{u}(x, y, z) = u_1 \vec{i} + u_2 \vec{j} + u_3 \vec{k} \quad (6)$$

而 (y, z) 平面内的原子位移

$$u_{\perp}(x, y, z) = \vec{u} \cdot \vec{n} = u_1 \cos\alpha + u_2 \cos\beta + u_3 \cos\gamma \quad (7)$$

将(5)式代入(7)式，可得

$$\begin{aligned} u_{\perp}(x, y, z) &= u_1 \cos\psi(1 - \sin^2\theta\cos^2\varphi)^{1/2} \\ &\quad + u_2 \sin\psi(1 - \sin^2\theta\cos^2\varphi)^{1/2} \\ &\quad + u_3 \sin\theta\cos\varphi \end{aligned} \quad (8)$$

对于直线位错，上式中的 θ, φ 和 ψ 均为常数。由(2)式，可将曲率 k 表示为

$$\begin{aligned} k(x, y, z) &= \frac{\partial^2 u_1}{\partial z^2} \cos\psi(1 - \sin^2\theta\cos^2\varphi)^{1/2} \\ &\quad + \frac{\partial^2 u_2}{\partial z^2} \sin\psi(1 - \sin^2\theta\cos^2\varphi)^{1/2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial z^2} \sin\theta\cos\varphi \end{aligned} \quad (9)$$

现在，我们讨论下面两种情况。

(1) 直螺旋位错

设 \vec{d} 表示位错的单位矢量，对于直螺旋位错有 $\vec{b} \parallel \vec{d}$ ，则(6)式中的 $u_1 = u_2 = 0$ ，而

$$u_3 = \frac{b}{2\pi}\theta = \frac{b}{2\pi}\arctan(z/y) \quad (10)$$

由(9)式可将曲率简化为

$$k(y, z) = \beta'yz/(y^2 + z^2)^2 \quad (11)$$

其中

$$\beta' = -\frac{b}{\pi}\sin\theta\cos\varphi \quad (12)$$

(2) 刃型位错

对于刃型位错 $\vec{d} \perp \vec{b}$ ，位错线沿 \vec{k} 方向，则

$$\begin{aligned} u_1 &= -\frac{A}{\mu}[(1 - v)(\theta - \frac{\pi}{2}) + yz/2r^2] \\ u_2 &= \frac{A}{2\mu}[(1 - 2v)\ln(r/r_0) + y^2/r^2] \\ u_3 &= 0 \end{aligned} \quad (13)$$

其中

$$\begin{aligned} A &= -\mu b/2\pi(1-v) \\ r &= (y^2 + z^2)^{1/2} \\ \theta &= \arctan^{-1}z/y \end{aligned} \quad (14)$$

3 刃型位错的退道行为

假定刃型位错引起的晶格畸变具有常数曲率,且假定在 $z = z_0$ 的一边曲率为正,另一边曲率为负,则(3)式右端的曲率项可用 Heaviside 阶跃函数表示,而方程(3)化为

$$\frac{d^2x}{dz^2} + \frac{1}{2E}U'(x) = k[H(z+z_0) - 2H(z) + H(z-z_0)] \quad (15)$$

其中 $H(z)$ 是 Heaviside 阶跃函数; E 是粒子能量. 令

$$X = \frac{2}{dp}x, \quad s = \frac{2}{dp}z \quad (16)$$

方程(15)化为

$$\frac{d^2X}{ds^2} + \frac{1}{2E}U'(X) = \frac{dp}{2}k[H(s+s_0) - 2H(s) + H(s-s_0)] \quad (17)$$

其中 $U(X)$ 是无量纲的粒子-晶体相互作用势,常用的有 Lindhard 势和 Moliere 势,我们引入正弦平方势^[3]

$$U(X) = K\beta_1 \sin^2 \frac{\pi}{2} X \quad (18)$$

其中 K 由(2)式给出; β_1 是势参数. 将(18)式代入(17)式,可得

$$\xi + \sin\xi = \sigma[H(s+s_0) - 2H(s) + H(s-s_0)] \quad (19)$$

其中

$$\xi = \pi X/\delta, \delta = \frac{\epsilon^2 \pi^2 \beta_1}{4}, \epsilon^2 = \frac{E}{K}, \sigma = 2dpk/\delta \quad (20)$$

方程(19)就是一个具有冲击力矩的摆方程,将它改写为如下形式

$$\begin{aligned} \dot{\xi} &= \zeta \\ \dot{\zeta} &= -\sin\xi + \sigma[H(s+s_0) - 2H(s) + H(s-s_0)] \end{aligned} \quad (21)$$

其中 σ 是一小量. 下面我们假设系统的基本特征由无扰动方程($\sigma=0$)描写, σ 项的作用仅导致系统量的变化. 为此,首先分析无扰动系统.

3.1 无扰动系统($\sigma=0$)的相平面特征

$$\begin{cases} \dot{\xi} = \zeta \\ \dot{\zeta} = -\sin\xi \end{cases} \quad (22)$$

公式(22)的 Hamiltonian 为

$$h = \frac{\zeta^2}{2} + (1 - \cos\xi) \quad (23)$$

对于不同的 h , (23) 式给出了相柱面上三类不同轨道^[5,6].

(1) $h=2$

当 $h=2$ 时, 方程(23)描写的是相柱面上连接 $(-\pi, 0)$ 和 $(\pi, 0)$ 的异宿轨道, 即系统的分界线. 注意到这条轨道满足条件

$$\xi_0(-s_1) = \xi_0, \quad \zeta_0(-s_1) = \zeta_0 \quad (24)$$

和关系式

$$\frac{\zeta_0^2}{2} + (1 - \cos\zeta_0) = 2 \quad (25)$$

可将方程(23)再积分一次, 得到方程(22)式的解为

$$\begin{cases} \xi = \pm 2\arctan[\operatorname{sh}(s+s_1 + \operatorname{sh}^{-1}(\tan\xi_0/2))] \\ \zeta = \pm 2\operatorname{sech}(s+s_1 + \operatorname{arcsech}\zeta_0) \end{cases} \quad (26)$$

(2) $0 < h < 2$

当 $0 < h < 2$ 时, 方程(23)式描写的一簇振荡型周期轨道, 同样满足初始条件(24). 对方程(22)式两次积分, 可将解用 Jacobian 椭圆函数 $\operatorname{sn}(s)$ 和 $\operatorname{cn}(s)$ 表示为

$$\begin{cases} \xi = \pm 2\arcsin[\kappa_1 \operatorname{sn}(s+s_1 + \operatorname{arcsn}(\frac{1}{\kappa_1} \sin \frac{\xi_0}{2}))] \\ \zeta = \pm 2\kappa_1 \operatorname{cn}[s+s_1 + \operatorname{arccn}(\zeta_0/2\kappa_1)] \end{cases} \quad (27)$$

其中

$$\kappa_1^2 = \frac{h}{2} \quad (28)$$

(3) $h > 2$

当 $h > 2$ 时, 方程(23)描写的一簇回转型周期轨道, 仍然满足初始条件(24). 注意到 $h > 2$, 用类似上面的方法, 可找到方程的解为

$$\begin{cases} \xi = \pm 2\arcsin[\operatorname{sn}(\frac{1}{\kappa'_1}(s+s_1 + \kappa'_1 \operatorname{arcsn}(\sin \frac{\xi_0}{2})))] \\ \zeta = \pm \frac{2}{\kappa'_1} \operatorname{dn}[\frac{1}{\kappa'_1}(s+s_1 + \kappa'_1 \operatorname{aredn}(\kappa'_1 \zeta_0/2))] \end{cases} \quad (29)$$

其中 $\kappa'_1 = 2/h$, $\operatorname{dn}(s)$ 是 Jacobian 椭圆函数.

3.2 扰动系统($\sigma \neq 0$)的相平面特征

因为晶格畸变出现在 $-s_1 < s < s_1$ 范围内, 当 $s > s_1$ 或 $s < -s_1$ 时, 系统无扰动, 方程的解由(26)、(27)和(29)式给出。考虑到扰动效应, 可将扰动系统在 $-s_1 < s < s_1$ 范围内的解近似地表示为

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \xi + O(\sigma) \\ \zeta_1 &= \zeta + O(\sigma)\end{aligned}\quad (30)$$

其中 $O(\sigma)$ 表示与 σ 同阶的小量。从物理上考虑, 扰动系统相当于外力矩作用使系统能量增加所作的功。在“时间”间隔 $[-s_1, s_1]$ 内, 外力矩作功可以表示为

$$\begin{aligned}W &= \int_{-s_1}^{s_1} \sigma [H(s - s_1) - 2H(s) + H(s + s_1)] d\xi \\ &= \sigma \int_{-s_1}^{s_1} [H(s - s_1) - 2H(s) + H(s + s_1)] \\ &\quad \times \zeta(s) ds + O(\sigma^2)\end{aligned}\quad (31)$$

将(26)、(27)和(29)式代入上式, 完成积分可分别得到

$$\begin{aligned}W_1 &= \sigma \{4\arctan[\operatorname{sh}(s_1 + \operatorname{arcsh}(\tan(\xi_0/2)))] - \xi_0 \\ &\quad - 2\arctan[\operatorname{sh}(2s_1 + \operatorname{arcsh}(\tan(\xi_0/2)))]\} \\ &\quad h = 2\end{aligned}\quad (32)$$

$$\begin{aligned}W_2 &= \sigma \{4\arcsin[\kappa_1 \operatorname{sn}(s_1 + \operatorname{arcsn}(\frac{1}{\kappa_1} \sin \frac{\xi_0}{2}))] - \xi_0 \\ &\quad - 2\arcsin[\kappa_1 \operatorname{sn}(2s_1 + \operatorname{arcsn}(\frac{1}{\kappa_1} \sin \frac{\xi_0}{2}))]\} \\ &\quad 0 < h < 2\end{aligned}\quad (33)$$

$$\begin{aligned}W_3 &= 4\{\arcsin[\operatorname{sn}(\frac{1}{\kappa'_1}(s_1 + \kappa'_1 \operatorname{arcsn}(\sin(\xi_0/2))))] - \xi_0 \\ &\quad - 2\arcsin[\operatorname{sn}(\frac{1}{\kappa'_1}(2s_1 + \kappa'_1 \operatorname{arcsn}(\sin(\xi_0/2))))]\} \\ &\quad h > 2\end{aligned}\quad (34)$$

由于外力矩作用, 粒子通过具有常曲率的弯曲轨道 $s \in (-s_1, s_1)$ 后, 能量增加了 W_i ($i = 1, 2, 3$)。于是, 系统的能量积分可近似地表示为

$$\frac{\zeta^2}{2} + (1 - \cos \xi) = h + W_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (35)$$

比较(35)和(23)式可以看出, 由于外力矩作用, 系统的相平面特征发生了定量变化。方程(35)描写了相柱面哪类轨道决定于 $h + W_2$ 和 $h + W_3$ 的值。当 $h + W_2 < 2 + W_3$ 时, 粒子经过弯曲轨道后仍然是沟道粒子, 否则为非沟道粒子。这种退道效应完全是由于晶体弯曲(或位错)引起的。算出有多少粒子具有

这种行为, 就能推导出弯晶的退道系数。

4 退道系数

在相平面上, 分界线包围的区域大小决定了系统的稳定程度^[7,8]。根据刘维定理, 对于保守系统, 相面积始终保持不变。由于弯晶等效于外力矩的作用, 在粒子通过区域 $(-s_1, s_1)$ 后, 系统的相面积将发生变化。当 $s > s_1$ 时, 系统又恢复为保守系统。设 $s < -s_1$ 时相面积为 π_0 , $s > s_1$ 时相面积为 π_1 , 则力矩引起的相面积变化为

$$\Delta\pi = \pi_1 - \pi_0 \quad (36)$$

对于均匀相空间密度, 弯晶的退道系数定义为

$$\eta = \Delta\pi/\pi_0 \quad (37)$$

对于振荡型周期轨道, 粒子的相面积可表示为

$$\pi = 8\kappa'_1 [E(\kappa_1, \varPhi) - \kappa'_1 F(\kappa_1, \varPhi)] \quad (38)$$

其中 $E(\kappa_1, \varPhi)$ 和 $F(\kappa_1, \varPhi)$ 分别是第二类和第一类椭圆函数, 而

$$\varPhi = \arcsin \kappa_1 \quad h < 2 \quad (39)$$

对(38)式微分, 并代入(37)式可得退道系数

$$\eta = \frac{E(\kappa_1, \varPhi)h - 4\sqrt{2}h^{-3/2}[E(\kappa_1, \varPhi) - \kappa'_1 F(\kappa_1, \varPhi)]}{4[E(\kappa_1, \varPhi) - \kappa'_1 F(\kappa_1, \varPhi)]} \Delta h \quad (40)$$

其中 $\Delta h = W_2$, 且由(33)式给出。

5 结果与讨论

我们关心的是粒子退道系数。所谓退道系数是指退道粒子数与初始状态下沟道粒子数之比。在简谐势与“折沟道”近似下, 退道系数为^[2]

$$\eta = \begin{cases} 1 - X_c [1 - (j \Delta\psi/\psi_c)^2]^{1/2} & |j \Delta\psi/\psi_c| < 1 \\ 1 & |j \Delta\psi/\psi_c| \geq 1 \end{cases} \quad (41)$$

其中 X_c 是沟道的临界距离; ψ_c 是临界角; j 是粒子在超晶格中穿过的层数。在正弦平方势和弯晶曲率的 Heaviside 阶跃函数近似下, 退道系数由(40)式给出。选择与入射粒子有关的参数 $Z_1 = 1$, $E = 1.5 \text{ meV}$; 与晶体有关的参数 $Z_2 = 14$, $N = 4.97 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $d_p = 0.192 \text{ nm}$; 与正弦平方势有关的参数 $\beta_1 = 0.2$ (由此可以算出 $K = 115 \text{ eV}$)。对于折沟道近似, 可得退道系数 $\eta = 0.21$ (当 $j = 3$ 时); 对于 Heaviside 阶跃函数近似 $\eta = 0.45$ 。二者的差别主要是因为后者使用了正弦平方势, 由于非线性退道效应使

粒子的退道几率增加;同时,又因为位错假设使粒子退道可能性进一步增强。

实际上,由于势垒穿透、晶格热振动和电子多重散射等因素的影响,粒子的退道系数还会增加。文献[9]讨论了势垒穿透和晶格热振动的粒子退道效应。本文引入位错模型模拟半导体超晶格的晶格形变,进一步讨论粒子的退道系数。通过退道系数可以直接推导出超晶格的沟道偏转和晶格形变。

参考文献

- [1] Luo Shiyu, Ma Rukang, Shao Mingzhu. Channeling effect of strained superlattice and phase characteristics of system. Nuclear Physics Review, 2002, 19(4): 407 (in Chinese) [罗诗裕, 马如康, 邵明珠. 形变超晶格的退道效应与系统的相平面特征. 原子核物理评论, 2002, 19(4): 407]
- [2] Shao Mingzhu. Sine-squared potential and channeling properties of strained superlattice. Chinese Journal of Semiconductors, 1993, 14(6): 353 (in Chinese) [邵明珠. 正弦平方势与形变超晶格的沟道特征. 半导体学报, 1993, 14(6): 353]
- [3] Luo S Y. Sine-squared potential of planar channeled particles and Kumakhov radiation of charged particles. Chin Phys (USA), 1984, 4(3): 670
- [4] Shao Mingzhu. Dechanneling effects of charged particles in bend crystals with varying curvature. Acta Physica Sinica, 1992, 41(11): 1825 (in Chinese) [邵明珠. 变曲率弯晶的退道行为. 物理学报, 1992, 41(11): 1825]
- [5] Luo S Y, Shao M Z. Dechanneling effects by penetrating barrier. Radiation Effects Express, 1988, 1(4): 239
- [6] Luo Shiyu, Shao Mingzhu, Tang Jianning, et al. Chaotic behaviours in bend crystal channel. Acta Physica Sinica, 1986, 37(8): 1394 (in Chinese) [罗诗裕, 邵明珠, 唐建宁, 等. 弯晶沟道的混沌行为. 物理学报, 1986, 37(8): 1394]
- [7] Luo Shiyu. Dynamic stability and phase planar properties for radial sector cyclotrons with N-folded symmetry. Appl Math Mech, 1985, 6(6): 499 (in Chinese) [罗诗裕. N度对称径向扇回旋加速器的动力学稳定性及系统的相平面特征. 应用数学和力学, 1985, 6(6): 499]
- [8] Robin N, 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(3): 052901
- [9] Luo Shiyu, Liu Zengrong, Shao Mingzhu. Sine-squared potential and semiclassical description for dechanneling process. Chinese Journal of Semiconductors, 1985, 6(1): 82 (in Chinese) [罗诗裕, 刘曾荣, 邵明珠. 正弦平方势及退道过程的半经典描述. 半导体学报, 1985, 6(1): 82]

Dislocation Model for Strained Superlattice and Dechanneling Effects of a Particle

Luo Shiyu^{1,2}, Zhou Xiaofang¹, Lin Junfeng¹, Ma Rukang¹ and Shao Mingzhu^{1,2}

(1 Zhangzhou Teachers College, Zhangzhou 363000, China)

(2 Longyan College, Longyan 364000, China)

Abstracts: The dechanneling effect is discussed using dislocation model. It supposes that the channeling deflection is equivalent to crystal bend by dislocation. The dechanneling effect by edge-dislocation is analysed in detail. The dechanneling effects induced by dislocations are discussed using sine-squared potential. The motion equation of a particle is reduced to the pendulum equation with a momentum; a phase planar characteristics are analysed by energy method. The dechanneling fraction is derived for a strained superlattice.

Key words: strained superlattice; dislocation; pendulum equation; dechanneling effects

PACC: 6180M

Article ID: 0253-4177(2003)05-0485-05

Luo Shiyu male, was born in 1940. He is engaged in the research on condensed matter physics.

Received 25 May 2002, revised manuscript received 20 January 2003

© 2003 The Chinese Institute of Electronics