

# 正弦平方势和形变超晶格的沟道特征

邵明珠

重庆交通学院物理系, 重庆 630074  
(1991年4月22日收到; 1992年4月5日修改定稿)

本文利用我们曾提出的粒子-晶体相互作用势(正弦平方势)讨论了带电粒子在形变超晶格中的运动行为, 导出了共振退道时的退道系数, 指出了用沟道技术研究形变超晶格的灵敏性、可靠性和重要性.

PACC: 6180M, 7340L

## 一、引言

当人们用分子束外延方法(MBE)制备超晶格时<sup>[1]</sup>, 由于两种材料的晶格常数略有不同, 相邻两层之间的晶格常数不能完全匹配, 因而在界面附近出现拉伸或压缩形变<sup>[2]</sup>. 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在形变超晶格中变成了折沟道. 沿折沟道运动的粒子在界面处将受到 $\delta$ -型的冲力作用, 使粒子运动方向发生突变. 注意到在形变超晶格的每一薄层中, 粒子的运动行为与通常的单晶完全一样, 再考虑到在界面处粒子的横向运动有一突变, 可以预期, 在形变超晶格中, 面沟道粒子的运动方程是一个受 $\delta$ -力矩作用的一维非线性微分方程. 由于受迫项的存在, 系统将出现共振现象. 事实上, 当粒子横向运动的有效波长等于粒子在一层中走过的路程时, 粒子将穿过很多层而不会出现明显地退道, 这就是所谓共振沟道现象; 当横向运动的有效波长等于粒子在一层中走过路程的两倍时, 粒子只须穿过不多几层就会出现明显的退道, 这就是所谓共振退道现象(或灾变性退道, Catastrophic dechanneling). 粒子的退道系数与超晶格的形变量有关. 超晶格的形变量是一个十分重要的物理参数, 正是这个参数改变着超晶格材料的能带结构和光电特征. 沟道技术可以测量0.1—0.5%的形变量. 由于它的灵敏性和可靠性使这一技术被广泛用于超晶格的研究.

本文利用我们曾经提出的正弦平方势来研究层状结构中粒子的运动行为, 并在简谐势和正弦平方势两种情况下讨论了面沟道粒子的共振现象; 利用计算机分析了粒子的相平面特征和退道行为, 指出了用共振退道技术研究形变超晶格的重要性.

\* 国家自然科学基金资助课题.

## 二、物理考虑

若选择 GaP 作基片, 沿 [100] 方向生长等厚的 GaP 和  $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$  薄层, 沟道方向为 [110]. 由于超晶格相邻层间晶格常数失配, 在界面附近将出现晶格畸变, 沿生长方向的各层将交替产生伸长与压缩形变, 导致 [110] 晶向(或 (110) 面沟道) 扭折, 如图 1 所示. [110] 方向的扭折是由于超晶层之间失配所引起.

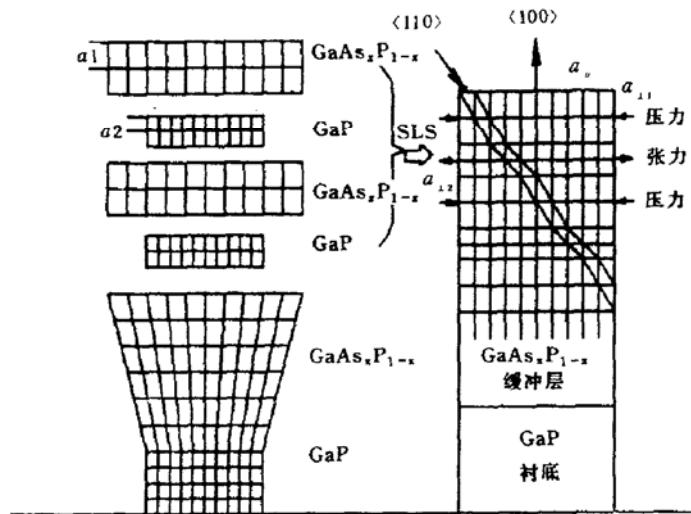


图1 沿[110]方向生长的  $\text{GaP}/\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$  的形变超晶格模型

利用 Poisson 效应可求出形变量, 这个量与 [110] 晶向的偏折角  $\Delta\varphi$  直接相关, 且可表示为

$$\Delta\varphi = \theta_2 - \theta_1 = \arctg\left(\frac{a_{\perp 2}}{a_{\parallel 2}}\right) - \arctg\left(\frac{a_{\perp 1}}{a_{\parallel 1}}\right), \quad (1)$$

其中  $a_{\perp}$  和  $a_{\parallel}$  是垂直和平行 (100) 面的晶格常数(注意 [100] 晶向不出现扭折),  $\theta_1$  和  $\theta_2$  是相邻两层沟道的方位角. 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  $\Delta\varphi \approx 0.1 - 1^\circ$  时, 超晶格的形变量大约为 0.5—5%.

带电粒子在沟道内部运动时受晶格势的控制, 在每一层中我们仍采用平面连续势近似, 在界面处, 粒子受到  $\delta$ -型的力作用, 则粒子在第  $j$  层中的运动行为可用方程

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + \nabla V(x) = \sum_{j=1}^n (-1)^j \Delta I \delta(t - jt_0), \quad (2)$$

描写, 其中  $V(x)$  是粒子-晶体相互作用势,  $m$  是粒子质量,  $n$  是界面层数,  $t_0$  是粒子在每一层中所需的时间,  $\delta(t - jt_0)$  是 Dirac- $\delta$  函数,  $\Delta I$  是粒子穿过界面时所受到的冲量, 且

$$\Delta I = F \Delta t, \quad (3)$$

其中

$$F = mv_z^2/r, t_0 = l/v_z, t = z/v_z \quad (4)$$

$v_z$  是粒子沿沟道方向的运动速度,  $l$  是界面处沟道弯面的曲率半径,  $z$  是沿沟道轴运动的

距离,  $t$  是达到  $z$  点所需要的时间,  $l$  是粒子在每一层中走过的路程,  $\Delta t$  是粒子在界面处离心力作用的时间. 粒子在界面处的偏转角  $\Delta\varphi$  可表示为

$$\Delta\varphi = v_z \Delta t / r = \omega \Delta t, \quad (5)$$

其中  $\omega$  是粒子绕曲率中心转动的圆频率. 将式(3—5)代入方程(2), 可得

$$\frac{d^2x}{dz^2} + \frac{1}{2E} \nabla V(x) = \sum_{j=1}^n (-1)^j \Delta\varphi \delta(z - l_j), \quad (6)$$

其中  $E = \frac{1}{2}mv_z^2$  是粒子入射能量. 令

$$X = x/d_p, Z = z/l, \psi = dX/dZ \quad (7)$$

并注意到平面连续势可表示为

$$V(X) = KW(X), \quad (8)$$

其中  $W(X)$  是无量纲的粒子-晶体相互作用势, 而

$$K = \pi Z_1 Z_2 N e^2 c_p^2, \quad (9)$$

$d_p$  是平面间距离,  $Z_1$  和  $Z_2$  分别为入射粒子和靶原子的原子序数,  $N$  为靶材料的原子密度. 将式(7)和(8)代入方程(6), 可得

$$\frac{d^2X}{dZ^2} + \frac{1}{2} \Omega^2 \frac{dW(X)}{dX} = \Delta\psi \sum_{j=1}^n (-1)^j \delta(Z - j), \quad (10)$$

其中

$$\Omega^2 = \frac{K}{E} \left( \frac{2l}{d_p} \right)^2, \Delta\psi = \frac{2l}{d_p} \Delta\varphi, \quad (11)$$

且利用了  $\delta$ -函数的性质

$$\delta(Az - Ax) = \frac{1}{A} \delta(z - x), \quad (12)$$

由方程(10)可以看出, 粒子在超晶格中的横向运动方程可分别在层内和界面处考虑

$$\frac{d^2X}{dz^2} + \frac{1}{2} \Omega^2 \frac{dW(X)}{dX} = 0, \quad (\text{层内}) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} X_{j+1} &= X_j, \\ \left( \frac{dX}{dZ} \right)_{j+1} &= \psi_{j+1} = \psi_j + \Delta\psi, \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (\text{界面}) \quad (14)$$

其中  $X_j$  和  $\psi_j$  是粒子穿出第  $j$  层时的横向坐标和偏转角, 而  $X_{j+1}$  和  $\psi_{j+1}$  为粒子进入第  $j+1$  层时的初值. 式(14)表明, 粒子在第  $j+1$  层的入射角等于它在第  $j$  层末的出射角与沟道偏折角之和.

方程(13)的解可一般地表示为(用反函数形式)

$$Z = \frac{d_p}{2l} \sqrt{E/E_\perp} \int_0^x \frac{dx}{\sqrt{1 - V(X)/E_\perp}}, \quad (15)$$

其中  $E_\perp$  是粒子的横向能量. 上式表明, 粒子-晶体相互作用势一旦给定, 系统的解是完全确定的. 本文讨论两种情况: 简谐势和正弦平方势. 前者简单、直观, 能给出清晰的物理图

象;后者能满意的描述实验结果.

### 三、简谐势

我们假定粒子在沟道中的运动受简谐势控制,则无量纲的粒子-晶体相互作用势可表示为

$$W(X) = \beta_h X^2, \beta_h = \frac{1}{8K} \alpha_0 d_p^2, \quad (16)$$

其中  $\alpha_0$  由正弦平方势的展开系数确定. 将式(16)代入式(13), 可得

$$\frac{d^2X}{dZ^2} + p_h X = 0, \quad (17)$$

其中脚标 h 表示与简谐势有关的量,且

$$p_h = \frac{K\beta_h}{E} \left( \frac{2l}{d_p} \right)^2, \quad (18)$$

由式(17)和(18)可直接求出粒子的运动周期

$$\lambda_h = \frac{\pi d_p}{l} \sqrt{E/K\beta_h}, \quad (19)$$

式(19)表明,粒子运动周期与入射粒子的初始状态无关.

为了描写粒子在形变超晶格中的共振行为,我们引入有效圆概念. 由方程(17)描写的线性系统,其状态可用相平面上的椭圆表示. 我们首先引入第一个近似. 用下列椭圆

$$\left( \frac{\psi(Z)}{\psi_c} \right)^2 + \left( \frac{X(Z)}{X_c} \right)^2 = \left( \frac{\psi_0}{\psi_c} \right)^2 + \left( \frac{X_0}{X_c} \right)^2, \quad (20)$$

代替方程(17)所描写的相椭圆. 其中  $X_0 = X(0)$ ,  $\psi_0 = \psi(0)$  是系统的初值;  $X_c$  和  $\psi_c$  是沟道的临界值. 式(20)表明,在相点  $(0, \psi_c)$  和  $(X_c, 0)$  处, 方程右端值为 1, 可见这一近似是一个比较好的近似; 再引入第二个近似, 把相椭圆变为有效圆. 假如粒子旋转速度为  $2\pi v_\perp / \lambda_e$ , 则  $X(Z)$  和  $\psi(Z)$  可化为

$$\left. \begin{aligned} \frac{X(Z)}{X_c} &= \frac{X_0}{X_c} \cos \frac{2\pi}{\lambda_e} Z + \frac{\psi_0}{\psi_c} \sin \frac{2\pi}{\lambda_e} Z, \\ \frac{\psi(Z)}{\psi_c} &= - \frac{X_0}{X_c} \sin \frac{2\pi}{\lambda_e} Z + \frac{\psi_0}{\psi_c} \cos \frac{2\pi}{\lambda_e} Z, \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

其中  $\lambda_e$  是有效波长. 借用加速器物理中的概念, 方程(21)决定了系统的接受度, 有效圆面积越大, 系统接受粒子的能力越强, 因而越稳定. 当粒子在形变超晶格中运动时, 只要它不跑出有效圆, 我们就认为这个粒子运动在沟道内部; 在有效圆内部的粒子称为沟道粒子, 有效圆外部的粒子称为退道粒子. 我们关心的是在形变超晶格中粒子的共振行为: 共振沟道和共振退道行为.

#### 1. 共振沟道

对于形变超晶格, 由于相邻层间晶格常数失配, 晶面弯曲, 使粒子在界面处的运动方向发生突变  $\Delta\phi$ . 用  $\psi_j^-$  和  $\psi_j^+$  分别表示粒子穿越第  $j$  层界面前后的运动速度. 选择形变超晶格材料为  $\text{GaP}/\text{GaAs}_{0.15}\text{P}_{0.85}$ , 入射粒子为  ${}^4\text{He}^+$  离子. 调节入射粒子能量, 使粒子在每一

层中走过的路程正好等于粒子运动周期  $\lambda$  (即  $l = \lambda$ )。则当  $l = \sqrt{2} l_0 = 440 \text{ \AA}$  ( $l_0$  是层厚),

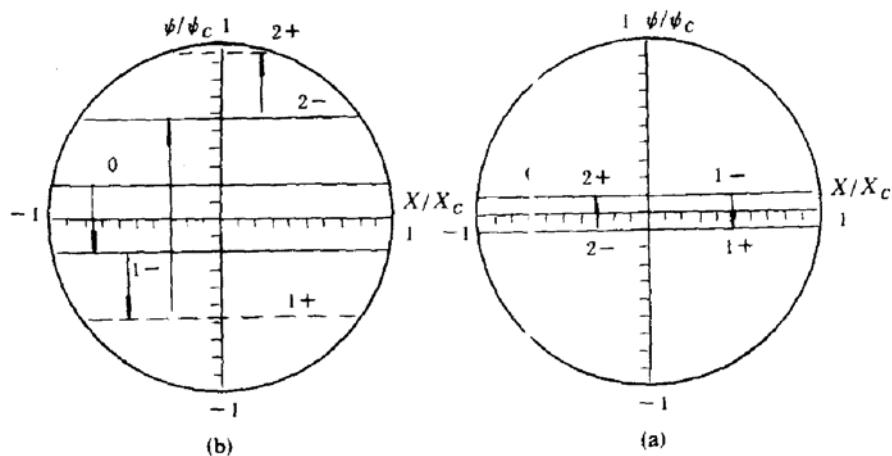


图2 入射 ${}^4\text{He}^+$ 离子, 入射角  $\phi_0 = 0.592$ , 晶格势为简谐势

(a)  $E = 0.3 \text{ MeV}, \lambda = 440 \text{ \AA}$  (共振沟道) (b)  $E = 1.2 \text{ MeV}, \lambda = 880 \text{ \AA}$  (共振退道)

$E = 0.3 \text{ MeV}$  时, 系统的相平面特征如图2(a)所示. 图中“0”线表示系统的初始状态(平行入射情况), 入射角  $\phi_0 = \Delta\varphi/2 = 0.75^\circ$  (或  $\psi_0 = 0.592$ ). 粒子进入晶体后受简谐势的作用达到  $z = l_0$  时(即走完第一层), 所有粒子完成一个周期运动, 粒子的相流曲线“0”绕原点顺时针旋转一周回到原来状态, 用“1<sup>-</sup>”线表示(同“0”线重合). 然后粒子穿过第一层界面, 运动方向发生突变  $-\Delta\psi$ , 粒子的状态由“1<sup>-</sup>”线跳到“1<sup>+</sup>”线, 同时进入第二层. 在同样的简谐势作用下, 粒子走完第二层(即  $z = 2l_0$ ), 完成第二个周期运动, 在相平面上对应于“1<sup>+</sup>”线绕原点顺时针旋转一周回到这一层的初始状态(用“2<sup>-</sup>”线表示), 接着穿过第二层界面, 方向发生突变  $+\Delta\psi$ , 系统由状态“2<sup>-</sup>”线跳到“2<sup>+</sup>”(即“0”线)进入第三层, 如此下去, 粒子始终在“0”线和“1<sup>+</sup>”线之间跳跃, 且第  $j$  层的粒子速度可表示为

$$\psi_j^+ = \psi_j^- + (-1)^j \Delta\psi, \quad (22)$$

由此可以看出, 当粒子入射能量  $E = 0.3 \text{ MeV}$ , 粒子的波长正好等于它在任一层中所过的路程  $l$  时, 在形变超晶格中, 这样的粒子始终保持在有效圆内, 这就是所谓共振沟道现象.

## 2. 共振退道

共振退道又称为灾变性退道, 如图2(b)所示. 选择能量  $E = 1.2 \text{ MeV}$ , 入射角  $\phi_0 = \Delta\varphi/2 = 0.592$ , 粒子在每一层内走过的路程  $l = 880 \text{ \AA}$ . 粒子的初始状态如图2(b)中的“0”线所示, 它与  $X/X_c$  轴的距离正好等于  $\psi_0$ . 注意到粒子在沟道中运动时, 这条线匀速地绕相平面中心顺时针旋转, 相流曲线始终为一条直线. 因为粒

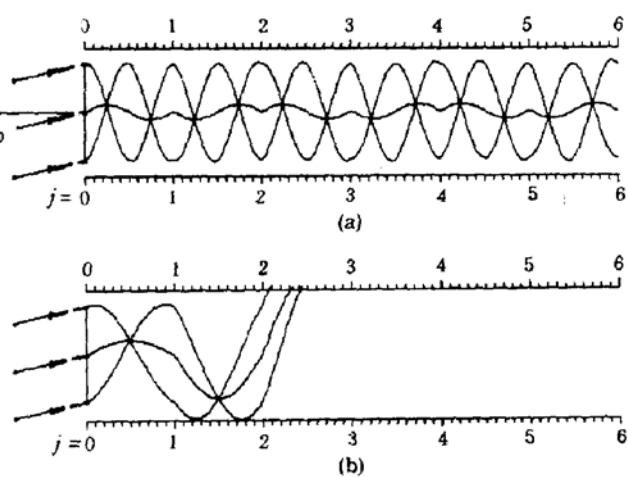


图3 入射 ${}^4\text{He}^+$ 离子,  $\phi_0 = 0.592, X_0 = 0, \pm 0.6$ ; 晶格势为简谐势的粒子运动轨迹  
(a)  $E = 0.3 \text{ MeV}$  (共振沟道)  
(b)  $E = 1.2 \text{ MeV}$  (共振退道)

子在每一层中过的路程正好是粒子运动周期的一半,于是,当粒子走完第一层时,相平上的“0”线正好转过 $180^\circ$ ,位于下半平面的 $1^-$ 位置(注意 $j^\pm$ 表示粒子穿过第 $j$ 个界面前后时状态);考虑到所有粒子的运动方向在界面处都要经受一个突变 $-\Delta\psi$ ,粒子穿过第一层界面时,状态由 $1^-$ 变为 $1^+$ ,同时进入第二层。当粒子走完第二层时,直线段 $1^+$ 再旋转 $180^\circ$ ,达到状态 $2^-$ ;当粒子穿过第二层界面时,状态 $2^-$ 发生突变 $+\Delta\psi$ ,达到状态 $2^+$ 。如此下去,只需不多几层,粒子就全部跑出有效圆,出现灾变性退道。

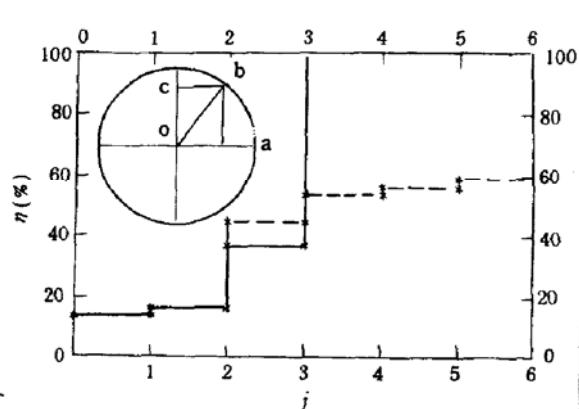


图4 退道系数入射 ${}^4\text{He}^+$ 离子,  $E = 1.2 \text{ MeV}$ ,  $\phi_0 = 0.592$ , 选择120个粒子进行计算 实线——简谐势;虚线——正弦平方势;插图——推导退道系数示意图

注意到有效圆内部的粒子才是沟道粒子,由图4插图可以看出, $cb$  表示同一时刻的沟道粒子数,而 $b$ 点的坐标为 $(X/X_c, \psi/\psi_c)$ ,注意到 $ob$ 的长度为1(单位圆),在三角形 $\Delta cob$ 中, $cb = X_c[1 - (\psi/\psi_c)^2]^{1/2}$  表示沟道粒子数,于是退道粒子数为 $N_1 = 1 - X_c[1 - (\psi/\psi_c)^2]^{1/2}$ ,因为初始状态下的沟道粒子数已归一化为1(即 $N_0 = 1$ ),则简谐近似下,退道系数可表示为( $\psi(j) = j\Delta\psi$ )

$$\eta = \begin{cases} 1 - X_c[1 - (j\Delta\psi/\psi_c)^2]^{1/2}, & |j\Delta\psi/\psi_c| \leqslant 1 \\ 1, & |j\Delta\psi/\psi_c| > 1 \end{cases} \quad (23)$$

上式表明,随 $Z$ 的增加, $\psi(j)$ 越来越大;当 $\psi(j) \geqslant \psi_c$ 时, $\eta = 1$ 粒子全部退道。图5中的实线表示简谐近似下的共振退道系数,由图可见 $j=3$ 时,粒子全部退道。

#### 四、正弦平方势

由文献[3—7],粒子-晶体相互作用势可由正弦平方势

$$V(X) = K\beta \sin^2 \alpha X, \quad (24)$$

描写,其中 $K$ 由式(9)给出, $\alpha = \pi/2$ , $\beta$ 为势参数。将式(24)代入方程(13),可得系统的周期解

$$\left. \begin{aligned} X &= \frac{2}{\pi} \arcsin(k s n u), \\ \psi &= dX/dz = 2/\pi k c n u, \\ u &= \frac{\pi l}{d_p} \sqrt{\frac{K\beta}{E}} Z, \quad k^2 = E_\perp / K\beta \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

图3(a)和图3(b)表示粒子在形变超晶格中的运动轨迹,分别对应于共振沟道和共振退道现象。为了直观,我们把扭折的沟道拉直了。入射角 $\phi_0 = 0.592$ 。图3(a)表明,粒子可以始终保持在沟道内部,而图3(b)则表明粒子只需2—3层就全部退道。

引入退道系数。退道系数 $\eta$ 定义为

$$\eta = \frac{N_1(\text{退道粒子数})}{N_0(\text{总沟道粒子数})}.$$

其中  $snu$  和  $cnu$  为 Jacobian 椭圆函数; 粒子的波长(空间周期)

$$\Lambda = \frac{\Delta d_p}{\pi l} \sqrt{\frac{E}{K\beta}} F(k) \quad (26)$$

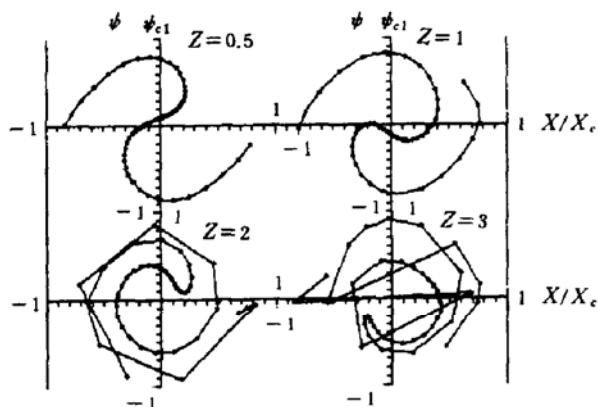


图5 入射 ${}^4He^+$ 离子,  $E = 0.3\text{MeV}$ ,  $\phi_0 = 0.592$ , 不同深度下的相流曲线

$F(k)$  是第一类椭圆积分. 比较式(26)和式(19), 可以看出正弦平方势情况下, 粒子的波长与初始状态有关, 这是系统的非线性决定的. 我们仍选取前面一组参数  $E = 0.3\text{MeV}$  和  $E = 1.2\text{MeV}$  讨论粒子在形变超晶格中的共振现象.

图5给出了不同深度情况下, 共振沟道粒子的相流曲线, 同简谐势比较, 相流曲线不再是一条直线; 还可以看出, 随着深度的增加, 相流曲线变成一条越来越紧密缠绕的螺旋线, 说明大多数粒子都能“长期”保持在有效圆内, 这正是共振沟道现象. 图6给出了

共振沟道图6(a)和共振退道图6(b)状态下的运动轨迹. 退道系数由图4中的虚线给出, 由图4虚线可以看出, 当  $j=3$  时有 50% 的粒子退道, 当  $j=6$  时有 60% 的粒子退道.

## 五、结果和讨论

粒子的共振行为是由系统的非线性特征决定的. 本文的主要目的是想找到系统的共振条件. 结果表明, 当粒子的波长等于它在一层中走过路程的两倍时, 系统出现灾变性退道, 波长和路程正好相等时出现共振沟道. 鉴于退道系数与形变超晶格的形变量  $\Delta\varphi$  (或  $\Delta\psi$ ) 有关, 使得沟道技术成为了研究形变超晶格的重要手段之一.

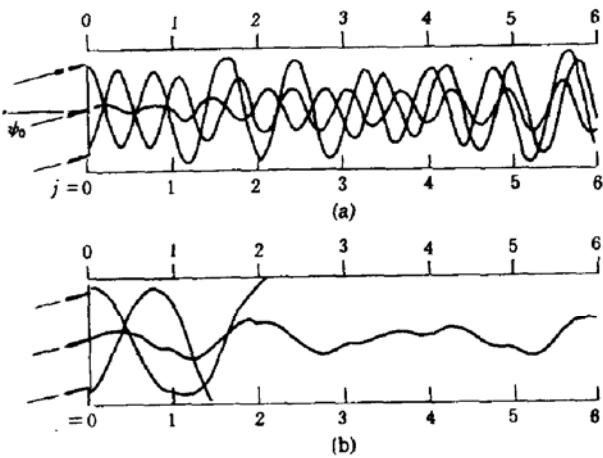


图6 入射 ${}^4He^+$ 离子,  $\phi_0 = 0.592$ , 粒子-晶体相互作用势为 1: 弦平方势情况下的运动轨迹 (a) 共振沟道 (b) 共振退道

## 参 考 文 献

- [1] L. L. Chang et al., *J. vac. Sci. Technol.*, **10**, 11 (1973).
- [2] C. K. Pan et al., *Phys. Rev.*, **B31**, 1270 (1985).
- [3] 邵明珠, 罗诗裕, I. Hofmann, *物理学报*, **39**(8), 1189 (1990).
- [4] 邵明珠, 罗诗裕, I. Hofmann, *物理学报*, **39**(8), 1200 (1990).
- [5] 邵明珠, 罗诗裕, I. Hofmann, *物理学报*, **39**(8), 1207 (1990).
- [6] Luo Shiyu and Shao Mingzhu, *Chin. Phys.*, (USA), **4**(3), (1984).
- [7] Luo Shiyu and Shao Mingzhu, *Radiation Effects Express*, **2**, 45 (1988).

## Sine-Squared Potential and Channeling Properties of Strained Superlattice

Shao Mingzhu

*Department of Physics, Chongqing Institute of Communications, Chongqing 630074*

(Received 22 April 1991; revised manuscript received 5 April 1992)

### Abstract

The behaviour of the motion of a charged particle in channels of a strained superlattice is discussed by using sine—squared potential. The dechanneling fraction in resonance is derived. We emphasize the sensitivity, reliability and the importance of using channeling technique to investigate strained superlattice.

PACC: 6180M, 7340L