

应变超晶格系统的共振行为及其动力学稳定性 *

罗诗裕[†] 李洪涛 吴木营 王善进 凌东雄 张伟凤 邵明珠

(东莞理工大学电子工程学院, 东莞 523106)

(2009 年 11 月 8 日收到; 2009 年 12 月 1 日收到修改稿)

在经典力学框架内和 Seeger 方程基础上, 讨论了应变超晶格界面附近的位错动力学行为, 指出了系统的非线性共振将导致位错的运动与堆积, 并可能造成超晶格的分层或断裂。首先, 引入阻尼项, 在小振幅近似下, 把描述一般位错运动的 Seeger 方程化为了超晶格系统的广义 Duffing 方程。利用多尺度法分析了系统的主共振、超共振和子共振, 并找到了系统出现这三类共振的临界条件。结果表明, 系统的临界条件与它的物理参数有关, 只需适当调节这些参数就可以原则上避免共振的出现, 保证了超晶格材料的完整性和性能的稳定性。

关键词: 位错动力学, 应变超晶格, 共振, 分岔

PACC: 7550R, 4620, 0545

1. 引 言

所谓应变超晶格就是将两种晶格常数不同的材料交替生长而成的多层薄膜结构。比如, 将材料 GaAs 和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 交替生长形成的多层结构就是典型的应变超晶格。超晶格的特殊几何结构, 引起了人们极大兴趣, 为人们寻找新材料和新光源开辟了全新领域。事实上, 基于这一概念, 半导体材料的光电性能得到了大大改善; 基于这一概念, 人们先后找到了光子晶体和声子晶体; 也是基于这一概念, 带电粒子同物质相互作用有了全新的研究方向——超晶格的沟道效应和沟道辐射^[1-14]。由于两种材料的晶格常数在生长方向上失配, 沿生长方向的各层在界面处将交替产生伸长和压缩形变, 导致晶面(比如(110)面)方向发生变化。特别是, 在超晶格材料的生长过程中, 由于晶格常数不匹配或外延条件不够理想, 超晶格会出现分层或断裂, 而这种现象很可能就是位错运动及系统的非线性共振造成的。对超晶格界面附近的位错动力学行为进行研究, 可为超晶格制备提出更符合实际的物理要求, 也可为进一步改善超晶格材料的性能(比如光电性能、机械性能等)提供新的思考。

本文从位错动力学出发, 讨论了超晶格分层或断裂的原因, 指出应变超晶格在界面处的分层或断

裂可能就是由于系统的非线性共振导致位错运动和堆积引起的。首先, 在 Seeger 方程基础上^[15]和小振幅近似下, 引入阻尼项, 把描述位错一般运动的 Seeger 方程化为广义 Duffing 方程; 利用多尺度法分析了系统的共振行为, 并找到了系统进入共振状态的临界条件。结果表明, 系统的临界条件与它的物理参数有关, 只需适当调节这些参数就可以避免共振的出现, 保证超晶格材料的完整性和性能的稳定性。

2. 运动方程

2.1. 无阻尼情况下的 Seeger 方程

假设位错是一段直的刃型位错, 位错线与 x 轴(超晶格相邻两晶面的交线)平行, 如图 1 所示(x 轴垂直于纸面, 图中未画出)。设在滑移面上, 位错垂直于 x 方向的“横向”位移为 $\psi(x, t)$, 则位移 $\psi(x, t)$ 满足经典的 Seeger 方程^[15]

$$E(\psi) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial E(\psi)}{\partial \psi} - b\sigma(t) + m \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}, \quad (1)$$

其中 b 是 Burgers 矢量, m 是单位位错长度的有效质量, $\sigma(t)$ 是单位位错长度所受的(应)力; 而 $E(\psi)$ 是与应变有关的弹性(势)能, 且是晶格常数 d 的周期函数。Seeger 在文献[15]中曾使用过图 2 所示的

* 广东省自然科学基金(批准号: 8151170003000010)资助的课题。

† E-mail: blguoshu@dgut.edu.cn

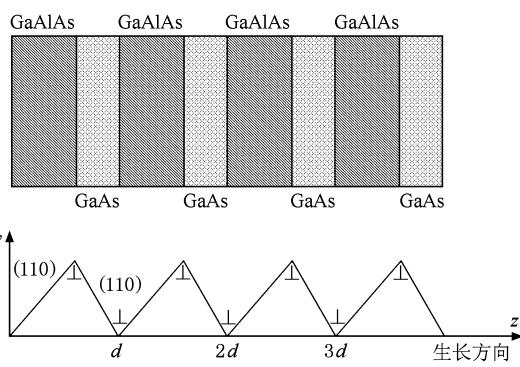


图1 应变超晶格(上)和界面处晶面偏折、位错堆积(下)示意图

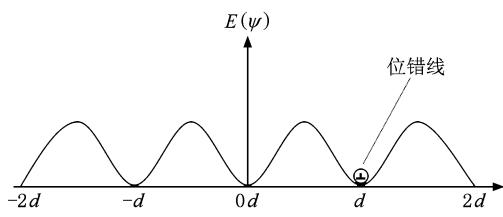


图2 正弦平方形式的弹性势能与位错线的位置^[15]

弹性势(能). 假设这个势能具有正弦平方形式

$$E(\psi) = E_0 \sin^2 \frac{\pi\psi}{d}, \quad (2)$$

其中 E_0 是弹性势能的幅值(激活能). 图2还给出了周期势场中, 位错线处于最低能量位置(沿密排方向). 注意到 $\frac{\partial E(\psi)}{\partial \psi} = \frac{\pi E_0}{d} \sin \frac{2\pi\psi}{d}$, 方程(1)化为

$$E(\psi) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\pi E_0}{d} \sin \frac{2\pi\psi}{d} - b\sigma(t) + m \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}. \quad (3)$$

这是一个描写位错形状与位错形状随时间变化的“波动”方程.

假设在滑移面内位错线的运动是均匀的, 则系统状态与 x 无关, 于是, $\psi(x, t)$ 退化为 $\psi(t)$, 而 $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0$, 偏微分方程(3)化为

$$m \frac{d^2 \psi}{dt^2} + \frac{\pi E_0}{d} \sin \frac{2\pi\psi}{d} = b\sigma(t) \quad (4)$$

的常微分方程. 这是一个无阻尼的位错动力学方程, 描写了位错线的整体运动行为, 也描写了位错在超晶格生长过程中的瞬态行为.

2.2. 阻尼情况下的 Seeger 方程

Peierls 指出, 位错可通过势垒翻越实现滑移面

内的“横向”运动; Shockley 指出, 在退火状态下, 通过位错打结, 比较容易完成这种运动. Seeger 进一步指出, 位错的势垒翻越一般不是整体翻越, 而是由于热涨落, 某一部分位错可能获得更多能量, 于是这部分位错将率先翻越势垒, 带动两侧位错运动, 并在两侧势垒处形成弯结(对). 如果弯结(对)之间的距离小于临界距离, 已经翻越势垒的那段位错将被拉回, 弯结对湮没, 运动中止; 如果弯结对之间的距离大于临界距离, 相邻位错将被带到新的位置完成翻越, 实现位错在滑移面内的运动. 弯结对的形成和湮没直接影响着位错的运动. 而弯结对的形成和运动必须克服介质对它的阻力, 阻力的大小正比

于“速度” $\frac{d\psi(x)}{dt}$. 引入阻尼项 $2m\mu \frac{d\psi(x)}{dt}$, 并假设

$\sigma(t) = \sigma_0 \cos \Omega t$, 方程(4)可化为

$$m \frac{d^2 \psi}{dt^2} + 2m\mu \frac{d\psi}{dt} + \frac{\pi E_0}{d} \sin \frac{2\pi\psi}{d} = b\sigma_0 \cos \Omega t, \quad (5)$$

其中 μ 是阻尼系数. 令

$$\begin{aligned} \xi &= 2\pi\psi/d, \\ \omega_0^2 &= \frac{4\pi^2 E_0}{md^2}, \\ \alpha &= \omega_0^2/6, \\ f &= \frac{2\pi b\sigma_0}{md}, \end{aligned} \quad (6)$$

在小振幅近似下 $\sin x \approx x - \frac{x^3}{6}$, 方程(5)可化为

$$\frac{d^2 \xi}{dt^2} + \omega_0^2 \xi = -2\mu \frac{d\xi}{dt} + \alpha \xi^3 + f \cos \Omega t. \quad (7)$$

方程(7)是一个含有阻尼项和受迫项的广义 Duffing 方程, 具有典型的非线性特征, 比如跳跃、分岔和混沌等. 下面用摄动法对系统的非线性共振进行分析, 并对系统的分岔和跳跃进行讨论.

3. 主共振 $\Omega \approx \omega_0$

为了表示方程(7)中各项的大小, 引入小参数 ε . 当系统(7)中的受迫项大小为 $O(\varepsilon)$ 量级时, 系统将存在 $\Omega = \omega_0$ 的主共振. 为此, 假设方程(7)中的 $2\mu \dot{\xi}, \alpha \dot{\xi}^3, f \cos \Omega t$ 的大小为 $O(\varepsilon)$ 量级, 其他项为 $O(1)$ 量级, 则形式上可将方程(7)改写为

$$\ddot{\xi} + \omega_0^2 \xi = -2\varepsilon \mu \dot{\xi} + \varepsilon \alpha \dot{\xi}^3 + \varepsilon f \cos \Omega t. \quad (8)$$

(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. 摆动解

利用多重尺度法^[16], 将方程(8)的解按不同的时间尺度展开

$$\xi(T, \varepsilon) = \xi_0(T_0, T_1) + \varepsilon \xi_1(T_0, T_1) + \cdots, \quad (9)$$

(9)式中 $T_0 = t, T_1 = \varepsilon t, \dots$. 如果我们只关心共振线附近的位错运动行为, 可引入解谐参数 s 来描写运动离开共振线的程度. 于是 Ω 可表示为

$$\Omega = \omega_0 + \varepsilon s, \quad (10)$$

上式中 $s = O(1)$, 而

$$\Omega t = \omega_0 T_0 + s T_1, \quad (11)$$

将(9)式和(11)式代入(8)式, 并分别令 $\varepsilon^0, \varepsilon^1, \dots$ 的系数相等, 可得

$$\begin{aligned} D_0^2 \xi_0 + \omega_0^2 \xi_0 &= 0, \\ D_0^2 \xi_1 + \omega_0^2 \xi_1 &= -2D_0 D_1 \xi_0 - 2\mu D_0 \xi_0 + \alpha \xi_0^3 \\ &\quad + f \cos(\omega_0 T_0 + s T_1), \\ &\vdots \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $D_n = \partial/\partial T_n$. 由方程(12)可得方程(8)的一级近似解

$$\xi = a \cos(\omega_0 t + s T_1 - \gamma) + O(\varepsilon), \quad (13)$$

其中 a 和 γ 由以下方程给出:

$$\begin{aligned} a' &= \mu a + \frac{1}{2} \frac{f}{\omega_0} \sin \gamma, \\ a \gamma' &= sa + \frac{3}{8} \frac{\alpha}{\omega_0} a^3 + \frac{1}{2} \frac{f}{\omega_0} \cos \gamma. \end{aligned} \quad (14)$$

从方程(8), (13)和(14)可以看出, 求解二阶微分方程(7)的问题转化为求解两个一阶微分方程(14)的问题, 应当说这是一种简化. 但是, 由于方程(14)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. 根据 Poincare 定理, 不积分方程(14)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

注意到对于静态解 $a' = \gamma' = 0$, 方程(14)化为

$$\begin{aligned} \mu a &= \frac{1}{2} \frac{f}{\omega_0} \sin \gamma, \\ sa + \frac{3\alpha}{8\omega_0} a^3 &= -\frac{f}{2\omega_0} \cos \gamma, \end{aligned} \quad (15)$$

而静态解则可表示为

$$\xi = a \cos(\Omega t - \gamma) + O(\varepsilon), \quad (16)$$

式中 a 和 γ 由方程(15)给出. 由方程(15)可得系统

的非线性频率响应曲线(共振曲线)

$$s = -\frac{3}{8} \frac{\alpha}{\omega_0} a^2 \pm \left(\frac{f^2}{4\omega_0^2 a^2} - \mu^2 \right)^{1/2}. \quad (17)$$

图3给出了应变超晶格位错运动振幅 a 与解谐参数 s 之间的关系. 从图3可以看出系统存在特有的跳跃和分岔现象.

1) 跳跃现象. 跳跃是共振曲线的弯曲引起的. 从图3可以看出, 在本文关心的情况下 ($\alpha > 0$) 系统的共振曲线向左弯曲 ($\alpha < 0$ 时, 向右弯曲). 当解谐参数 (或频率) s 从大到小变化时, 振幅将沿着共振曲线的上支不断变化, 直至振幅最大, 当 s 继续减小还没有减小时, 振幅突然下降 (跳跃), 且落到共振曲线的下支上; 当 s 继续减小时, 振幅沿着下支缓慢减小. 相反, 当解谐参数 s 从小到大变化时, 振幅将沿着共振曲线的下支不断增加, 直到曲线拐弯 (切线垂直) 处, 当 s 继续增加还没有增加时, 振幅突然增加 (再次跳跃), 且上升到共振曲线的上支上; 当 s 继续增加时, 振幅沿着上支继续减小. 这正是三阶位错动力学系统的跳跃现象. 注意到跳跃伴随着振幅的突变, 而振幅突变将导致系统不稳定. 当然, 只要工作状态远离共振, 系统仍然是稳定的.

2) 分岔与混沌现象. 从图3还可以看出, 在共振曲线振幅最大值附近, 曲线的上支出现了不规则, 这种不规则正是系统的分岔或混沌引起的. 事实上, 如果用 Melnikov 方法对系统的异宿轨道进行分析, 将发现对于充分小的 ε , 系统(8)的 Poincare 映射在两个不动点 ($\xi = \pm 1, \zeta = 0$) 的稳定流形和不稳定流形横向交截, Poincare 映射具有 Smale 马蹄变换意义下的混沌行为. 如果我们用 Melnikov 方法对系统的周期轨道进行分析, 将发现对于充分小的 ε , 系统(8)存在奇阶次谐分岔, 且可通过“无限”

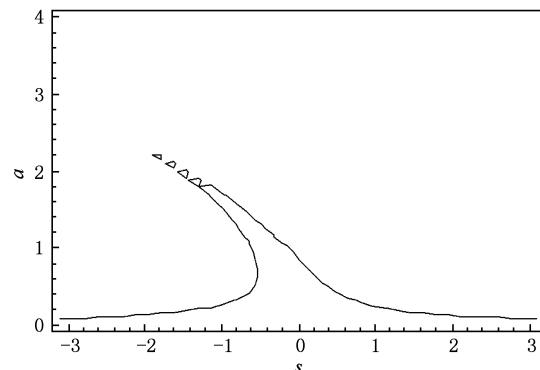


图3 当 $f = 0.5$ 时, 系统的频率响应曲线

次级联分岔后进入混沌。当然,适当调节系统参数,分岔和混沌是可以控制或避免的。事实上,只需另外选择 f (比如 $f < 0.5$) ,这种情况就不会出现。

3.3. 稳定性

为了讨论静态解的稳定性,令

$$a = a_0 + a_1, \gamma = \gamma_0 + \gamma_1, \quad (18)$$

式中 a_0 和 γ_0 是系统的静态解,满足方程(15),而 a_1 和 γ_1 是与静态解任意小的偏离。把方程(18)代入方程(14),并按小量 a_1 和 γ_1 展开,保留线性项可得

$$a'_1 = -\mu a_1 + \left(\frac{f}{2\omega_0}\cos\gamma_0\right)\gamma_1,$$

$$\gamma'_1 = \left(\frac{3\alpha a_0}{4\omega_0} - \frac{f}{2\omega_0 a_0^2}\cos\gamma_0\right)a_1 - \left(\frac{f}{2\omega_0 a_0}\sin\gamma_0\right)\gamma_1, \quad (19)$$

系统的稳定性与本征方程

$$\lambda^2 + 2\mu\lambda + \Gamma = 0 \quad (20)$$

的本征值有关,其中

$$\Gamma = \left(s + \frac{3\alpha a_0^3}{8\omega_0}\right)\left(s + \frac{9\alpha a_0^2}{8\omega_0}\right) + \mu^2. \quad (21)$$

当 $\Gamma > 0$ 时系统是稳定的;当 $\Gamma < 0$ 时(曲线后弯部分)系统不稳定;而当 $\Gamma = 0$ (后弯曲线的拐点)时系统处于临界状态。将(6)式代入,可将系统的临界条件用原始参数表示为

$$|\mu|_c = \sqrt{\left(s + \frac{\pi}{8d}(E_0/m)^{1/2}a_0^3\right)\left(s + \frac{3\pi}{8d}(E_0/m)^{1/2}a_0^2\right)}, \quad (22)$$

当 $|\mu| > |\mu|_c$ 时,系统是稳定的, $|\mu| < |\mu|_c$ 系统不稳定。上式表明,材料的势垒高度 E_0 越低或晶格常数 d 越大,材料的临界阻尼越小,稳定性条件越容易满足,系统越稳定。事实上,如果势垒高度比较低,位错就容易翻越。而势垒容易翻越就越容易释放能量,系统就显得越稳定。

4. 超共振与子共振

如果方程(7)中的受迫项不是小量,而是 $O(1)$ 量级时,系统将存在超共振 $\Omega = \frac{1}{3}\omega_0$ 和子共振 $\Omega = 3\omega_0$ 。

4.1. 超共振 $\Omega \approx \frac{1}{3}\omega_0$

注意到方程(7)中的 $f = O(1)$,利用上面类似的方法可以导出超共振的一阶近似解

$$\xi = \text{acos}\{\mathbf{3}(\Omega t - \gamma)\} + \frac{f}{\omega_0^2 - \Omega^2}\cos\Omega t + O(\varepsilon), \quad (23)$$

相应的频率响应曲线由方程(24)给出

$$s = -\alpha\left(\frac{3\Lambda^2}{\omega_0^2} + \frac{3a^2}{8\omega_0}\right) \pm \left(\frac{\alpha^2\Lambda^6}{\omega_0^2 a^2} - \mu^2\right)^{1/2}, \quad (24)$$

其中

$$\Lambda = \frac{f}{2}(\omega_0^2 - \Omega^2)^{-1}, \quad (25)$$

而系统的临界参数则可表示为

$$f_c = \frac{2}{\sqrt{3}}(\omega_0^2 - \Omega^2)\left(\frac{s\omega_0}{\alpha} - \frac{9a_0^2}{16}\right)^{1/2}. \quad (26)$$

将(6)式代入,可将系统的临界条件用原始参数进一步表示为

$$(b\sigma_0)_c = \left(\frac{2\pi E_0}{d} - \frac{md}{2\pi}\Omega^2\right) \times \sqrt{\frac{3sd}{\pi}(m/E_0)^{1/2} - \frac{9a_0^2}{16}}. \quad (27)$$

当 $b\sigma_0 < (b\sigma_0)_c$ 时,系统是稳定的, $b\sigma_0 > (b\sigma_0)_c$ 系统不稳定。从(26)和(27)式可以看出,应力场频率 Ω 越接近系统的固有频率 ω_0 ,临界值就越小,不稳定条件就越容易满足,系统越不稳定。尽量远离共振频率是保证系统稳定性的重要条件之一。

4.2. 子共振, $\Omega \approx 3\omega_0$

同样,利用类似方法可以导出系统子共振的一阶近似解

$$\xi = \text{acos}\left\{\frac{1}{3}(\Omega t - \gamma)\right\} + \frac{f}{\omega_0^2 - \Omega^2}\cos\Omega t + O(\varepsilon), \quad (28)$$

频率响应曲线由方程

$$9\mu^2 + \left(s + \frac{9\alpha\Lambda^2}{\omega_0} + \frac{9\alpha a^2}{8\omega_0}\right) = \frac{81\alpha^2\Lambda^2}{16\omega_0^2}a^2 \quad (29)$$

给出,而临界参数则可表示为

$$f_c = \left|2(\omega_0^2 - \Omega^2)\sqrt{\frac{s\omega_0}{9\alpha}}\right| \approx 4\omega_0 s \sqrt{\frac{s\omega_0}{9\alpha}}. \quad (30)$$

将(6)式代入,可将系统的临界条件用原始参数进一步表示为

$$(b\sigma_0)_c = \frac{2smd}{\pi} \sqrt{\frac{sd}{3\pi}} (m/E_0)^{1/2}. \quad (31)$$

当 $b\sigma_0 < (b\sigma_0)_c$ 时,系统是稳定的, $b\sigma_0 > (b\sigma_0)_c$ 时系统不稳定. 上式表明,材料的势垒高度 E_0 越低或晶格常数 d 越大,材料的临界值越大,稳定性条件越容易满足,系统越稳定.

5. 结 论

从经典的 Seeger 方程出发,在小振幅近似下讨

论了应变超晶格界面附近的位错动力学行为,指出了系统的非线性共振将导致位错的运动与堆积,造成超晶格的分层或断裂. 首先,在经典力学框架内和 Seeger 方程基础上,引入阻尼项,把描述位错运动的 Seeger 方程化为了广义 Duffing 方程. 利用多尺度法分析了系统的主共振、超共振和子共振;讨论了粒子在共振线附近运动的非线性行为和它的临界特征. 结果表明,系统的临界条件与它的物理参数有关,只需适当调节这些参数就可以原则上避免跳跃、分岔或混沌的出现. 分析表明,选择弹性势垒高度比较低、晶格常数比较大或者尽量远离共振频率,就可以有效地增加生长过程中超晶格的稳定性.

-
- [1] Korol A V, Solovyov A V, Greiner W 2008 *Nucl. Inst. and Methods in Physics Research B* **266** 1173
 - [2] Kubankin A S, Nasonov N N. 2008 *Journal of surface investigation* **2** 317
 - [3] Tabrizi M, Korol A V, Solovyov A V 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 164801
 - [4] Korol A V, Solovyov A V, Greiner W 2004 *Int. J. Mod. Phys. E* **13** 867
 - [5] Korol A V, Andrey V, Solovyov A V, Greiner W 2000 *Int. J. Mod. Phys. E* **9** 77
 - [6] Luo S Y, Shao M Z 2005 *High Energy Physics and Nuclear Physics* **29** 193 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 2005 高能物理与核物理 **29** 193]
 - [7] Luo S Y, Shao M Z 2009 *Chin. Laser* **36** 378 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 2009 中国激光 **36** 1378]
 - [8] Luo S Y, Shao M Z 2003 *Chin. Semi.* **24** 485 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 2003 半导体学报 **24** 485]
 - [9] Luo S Y, Shao M Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1336 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 2006 物理学报 **55** 1324]
 - [10] Shao M Z, Luo S Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4092 (in Chinese) [邵明珠、罗诗裕 2005 物理学报 **54** 4092]
 - [11] Shao M Z, Luo S Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3407 (in Chinese) [邵明珠、罗诗裕 2007 物理学报 **56** 3407]
 - [12] Luo S Y, Shao M Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1157 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 2004 物理学报 **53** 1157]
 - [13] Luo S Y, Shao M Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1940 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠、韦洛霞 2004 物理学报 **53** 1940]
 - [14] Deng C L, Shao M Z, Luo S Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2422 (in Chinese) [邓成良、邵明珠、罗诗裕 2006 物理学报 **55** 2422]
 - [15] Seeger A 1956 *Philos. Mag.* **1** 651
 - [16] Nayfeh A H 1981 *Introduction to Perturbation Techniques* (New York, John Wiley and Sons)

The resonance behaviour and dynamic stabilities of strained superlattice^{*}

Luo Shi-Yu[†] Li Hong-Tao Wu Mu-Ying Wang Shan-Jin Ling Dong-Xiong Zhang Wei-Feng Shao Ming-Zhu

(College of Electronic Engineering, Dongguan University of Technology, Dongguan 523106, China)

(Received 8 November 2009; revised manuscript received 1 December 2009)

Abstract

The dynamic behaviour in the vicinity of the interface for the strained superlattice is discussed in the classical mechanics frame based on the Seeger equation. We found that the motion and the accumulation of the dislocations by the non-linear resonance may give rise to the lamination or the fracture of the superlattice. At first, by introducing the damping term, the Seeger equation describing the dislocation motion is reduced to the generalized Duffing equation describing superlattice in the small amplitude approximation. Secondly, the main resonance, the super-harmonic resonance and the sub-harmonic resonance of the system are analysed by the multiscale method. The critical condition for the system to enter into resonance is found. It shows that the critical condition is related to the parameters of the system, by adequately regulating the parameters of the system, the resonance can be avoided in principle, then the stability and the perfection of the superlattice materials may be believ ensured.

Keywords: dislocation dynamics, strained superlattice, resonance, bifurcation

PACC: 7550R, 4620, 0545

* Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province (Grant No. 8151170003000010).

† E-mail: bgluoshy@dgut.edu.cn