

# 边界条件对介电量子波导中声子输运性质的影响<sup>\*</sup>

唐黎明 王 艳 王 丹 王玲玲<sup>†</sup>

(湖南大学应用物理系,长沙 410082)

(2006 年 3 月 14 日收到,2006 年 4 月 3 日收到修改稿)

运用散射矩阵方法,研究了 Neumann 边界条件和 Dirichlet 边界条件在低温下对结构不连续的纳米结构中的声学声子输运系数的影响.数值结果表明,当边界条件不同时,声学声子输运系数会有极大的不同.在一定的结构条件下,由于声子模与模的耦合作用,出现了共振透射和禁止频带.

关键词:声子输运,介观体系,边界效应

PACC:6322,7335,4210F

## 1. 引 言

近年来,电子元器件的特征尺寸不断减小,尺寸效应对器件的热导率的影响在器件设计中非常重要<sup>[1-4]</sup>,而热导率又强烈依赖于声子的色散关系和声子态密度.这样,介观体系声子输运受到了极大的关注<sup>[5-13]</sup>.迄今为止,在各种纳米结构中,包括纳米薄膜<sup>[8,9]</sup>、量子阱<sup>[10]</sup>、超晶格<sup>[11]</sup>、纳米线<sup>[12,13]</sup>等的声子输运研究取得了引人注目的成果.散射矩阵方法是研究弹道输运的有效途径<sup>[14,15]</sup>,最近,运用散射矩阵方法,Li 等研究了量子波导结构中的声子透射<sup>[16,17]</sup>,发现了一些有趣的现象,如在不对称  $y$  分支三终端接口中声学声子的模分离,双弯曲量子波导结构中存在禁止频带,T 形纳米结构中声子的输运可由侧面的端线来控制等.这些结构中声子的散射是由结构不连续引起的.而约束材料的不同与结构不连续一样会导致各种概率波的输运特性改变,从而影响器件的热导<sup>[18,19]</sup>.这样人们不仅可以通过改变形状,也可以通过改变约束材料,来调制得到所需要的输运特性,从而制备出具有特定功能的量子器件.

器件中的结构存在多种不连续,如接口、弯曲、表面粗糙、分支、收窄以及相互耦合的量子线等<sup>[20-22]</sup>,而约束材料则可以分为硬壁材料和弹性材料两大类,对应数学上的 Dirichlet 边界条件和 Neumann 边界条件.无论是结构不连续还是边界条

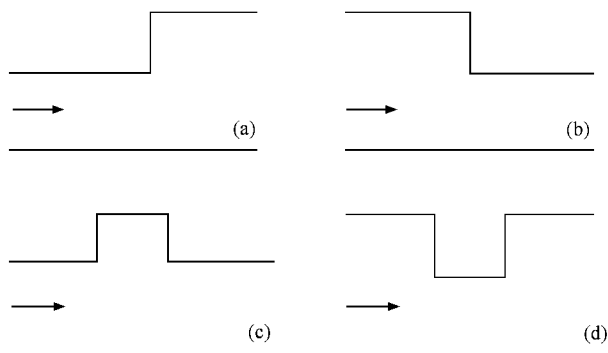


图 1 四种不同类型的 discontinuous 结构 (a)(b)(c)(d) 分别对应放大、收窄、T 形和倒 T 形

件对声子输运性质的影响都没有被完全揭示.本文运用散射矩阵方法,比较并讨论了如图 1(a)-(d)所示,声子波从左向右传播,介电波导的放大与收窄、波导为 T 形与倒 T 形,不同的约束条件对声学声子输运性质的影响.

## 2. 模型与公式

### 2.1. 散射矩阵方法

对于介电纳米线结构,运用散射矩阵方法来求声子的输运系数,其关键是求得各个区域和它们的边界处的散射矩阵<sup>[16-19]</sup>.对于任意  $\zeta$ ,将区域  $\zeta$  和  $\zeta + 1$  的界面  $X_k$  处看成一散射体,假设波由左向右传播,可以用一散射矩阵将相对该散射体而言的出射

<sup>\*</sup> 高等学校博士点学科专项基金(批准号:20050532013),湖南省自然科学基金(批准号:04JJ20007)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: llwang@hnu.cn

波(  $B^\zeta, A^{\zeta+1}$  )和入射波(  $A^\zeta, B^{\zeta+1}$  )相关联

$$\begin{pmatrix} B^\zeta \\ A^{\zeta+1} \end{pmatrix} = \mathcal{S}(\zeta, \zeta+1) \times \begin{pmatrix} A^\zeta \\ B^{\zeta+1} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

其中  $\mathcal{S}(\zeta, \zeta+1)$  为一个  $N^\zeta + N^{\zeta+1}$  维的方阵(  $N^\zeta, N^{\zeta+1}$  分别为区域  $\zeta$  和  $\zeta+1$  中传播模的数目). 同样把区域  $\zeta$  看成一个散射体, 其散射矩阵为  $\mathcal{S}(\zeta, \zeta)$ . 由于区域  $\zeta$  的内部是均匀的, 所以区域  $\zeta$  内的散射矩阵可以写为

$$\begin{pmatrix} B^\zeta \\ A^\zeta \end{pmatrix} = \mathcal{S}(\zeta, \zeta) \begin{pmatrix} A^\zeta \\ B^\zeta \end{pmatrix},$$

$$\text{有 } \mathcal{S}(\zeta, \zeta) = \begin{pmatrix} 0 & P^\zeta \\ P^\zeta & 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中  $P$  为一对角矩阵, 其对角元为  $P_{mm}^\zeta = e^{ik_n^\zeta L_\zeta}, K_n^\zeta$  为区域  $\zeta$  内的波数. 所有均匀区域散射矩阵都可以根据该原则得出. 这样, 对于上述两个相邻的散射体而言, 总的散射矩阵就可以根据文献[15]的合成法则得出, 即

$$S = \mathcal{S}(\zeta, \zeta) \otimes \mathcal{S}(\zeta, \zeta+1). \quad (3)$$

下面来推导不同边界条件时, 介电纳米线结构中两相邻区域界面处声学声子的输运散射矩阵.

## 2.2. 声子在界面处的散射矩阵

对于介电纳米线结构, 由于结构很薄, 可以只考虑纵模的传播<sup>[16]</sup>. 纵模在任意区域  $\zeta$  的波函数为

$$\phi_n^\zeta(x, y) = \sum_n a_n^\zeta e^{ik_n^\zeta x} + b_n^\zeta e^{-ik_n^\zeta x} \phi_n^\zeta(y), \quad (4)$$

其中  $k_n^\zeta$  满足能量守恒关系式  $k_n^2 = \frac{\omega^2}{v_L^2} - \frac{n^2 \pi^2}{w_\zeta^2}$  ( $\omega$  为波的圆频率,  $v_L$  是纵声学波的速度, 与质量密度  $\rho$  和应力常数  $C_{11}$  的关系为  $v_L = \frac{C_{11}}{\rho}$ );  $\phi_n^\zeta(y)$  表示第  $n$  模在区域  $\zeta$  的横向波函数.

对于声学波, 若内部结构与外界接触的边界满足 Dirichlet 边界条件  $\phi = 0$ . 根据这一边界条件, 可以写出区域  $\zeta$  的横向波函数为

$$\phi_n^\zeta(y) = \sqrt{\frac{2}{w_\zeta}} \sin \frac{n\pi}{w_\zeta} y \quad (n \neq 0, 0 < y < w_\zeta) \quad (5)$$

其中  $w_\zeta$  为横向宽度, 若内部结构与外界接触的边界满足 Neumann 边界条件  $\mathbf{n} \cdot \nabla \phi = 0$ . 根据这一边界条件, 则区域  $\zeta$  的横向波函数为

$$\phi_n^\zeta(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{w_\zeta}} \cos \frac{n\pi}{w_\zeta} y & (n \neq 0, 0 < y < w_\zeta), \\ \sqrt{\frac{1}{w_\zeta}} & (n = 0, 0 < y < w_\zeta). \end{cases} \quad (6)$$

在界面处, 根据波函数和其一阶导数连续性, 要求

$$\sum_{n=1}^{N^\zeta} (a_n^\zeta + b_n^\zeta) \phi_n^\zeta(y) = \sum_{n=1}^{N^{\zeta+1}} (a_n^{\zeta+1} + b_n^{\zeta+1}) \phi_n^{\zeta+1}(y), \quad (7)$$

$$\sum_{n=1}^{N^\zeta} K_n^\zeta (a_n^\zeta - b_n^\zeta) \phi_n^\zeta(y) = \sum_{n=1}^{N^{\zeta+1}} K_n^{\zeta+1} (a_n^{\zeta+1} - b_n^{\zeta+1}) \phi_n^{\zeta+1}(y). \quad (8)$$

上面两式若边界满足 Neumann 边界条件, 声子的零模能够被激发,  $n$  可以为零.

在 Dirichlet 边界条件下, 当  $w_\zeta < w_{\zeta+1}$  时, 将方程(7)两边同时乘  $\phi_m^{\zeta+1}(y)$ , 然后从 0 至  $w_{\zeta+1}$  积分, 可得

$$\sum_{n=1}^{N^\zeta} D_{nm} [a_n^\zeta + b_n^\zeta] = a_m^{\zeta+1} + b_m^{\zeta+1}, \quad (9)$$

其中

$$D_{nm} = \int_0^{w_\zeta} \phi_n^\zeta(y) \phi_m^{\zeta+1}(y) dy. \quad (10)$$

积分上限已变为  $w_\zeta$ , 因为当  $w_\zeta < y < w_{\zeta+1}$  时波函数为零.

我们不能以同样的方式处理方程(8), 因为当  $w_\zeta < y < w_{\zeta+1}$  时波函数的一阶导数并不为零. 因此在方程(8)的两边同时乘上  $\phi_m^\zeta(y)$ , 然后从 0 至  $w_\zeta$  积分后可得到

$$K_m^\zeta (a_m^\zeta - b_m^\zeta) = \sum_{n=1}^{N^{\zeta+1}} D_{mn} K_n^{\zeta+1} (a_n^{\zeta+1} - b_n^{\zeta+1}). \quad (11)$$

将方程(9)(11)用矩阵的形式重新表述为

$$D^T (A^\zeta + B^\zeta) = A^{\zeta+1} + B^{\zeta+1}, \quad (12)$$

$$K^\zeta (A^\zeta - B^\zeta) = DK^{\zeta+1} (A^{\zeta+1} - B^{\zeta+1}), \quad (13)$$

其中,  $A^\zeta = (a_1^\zeta, a_2^\zeta, \dots, a_{N^\zeta}^\zeta)^T$ ,  $B^\zeta = (b_1^\zeta, b_2^\zeta, \dots, b_{N^\zeta}^\zeta)^T$ ;  $K^\zeta$  为  $N^\zeta \times N^\zeta$  维对角矩阵, 其对角元为  $(K^\zeta)_{mm} = K_m^\zeta$ ;  $K^{\zeta+1}$  为  $N^{\zeta+1} \times N^{\zeta+1}$  维对角矩阵, 其对角元为  $(K^{\zeta+1})_{mm} = K_m^{\zeta+1}$ ;  $D$  为  $N^\zeta \times N^{\zeta+1}$  维矩阵, 其矩阵元为  $D_{nm}$ .

将(12)(13)式变形并写为

$$\begin{pmatrix} D^T & -I \\ -K^\zeta & -DK^{\zeta+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B^\zeta \\ A^{\zeta+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -D^T & I \\ -K^\zeta & -DK^{\zeta+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^\zeta \\ B^{\zeta+1} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

则有

$$\begin{pmatrix} B^\zeta \\ A^{\zeta+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D^T & -I \\ -K^\zeta & -DK^{\zeta+1} \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} -D^T & I \\ -K^\zeta & -DK^{\zeta+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^\zeta \\ B^{\zeta+1} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

比较(1)式,即得到了两区域界面处的散射矩阵

$$S(\zeta, \zeta+1) = \begin{pmatrix} D^T & -I \\ -K^\zeta & -DK^{\zeta+1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -D^T & I \\ -K^\zeta & -DK^{\zeta+1} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

若  $w_\zeta > w_{\zeta+1}$ ,其散射矩阵的解法与  $w_\zeta < w_{\zeta+1}$  的情形类似,值得注意的是因为波函数一阶导数在  $w_{\zeta+1} < y < w_\zeta$  处不为零,积分顺序发生改变,此时方程(9)(11)两式应变为

$$A^\zeta + B^\zeta = D(A^{\zeta+1} + B^{\zeta+1}), \quad (17)$$

$$D^T K^\zeta (A^\zeta - B^\zeta) = K^{\zeta+1} (A^{\zeta+1} - B^{\zeta+1}), \quad (18)$$

其中

$$D_{nm} = \int_0^{w_{\zeta+1}} \phi_n^\zeta(y) \phi_m^{\zeta+1}(y) dy, \quad (19)$$

此时散射矩阵

$$S(\zeta, \zeta+1) = \begin{pmatrix} I & -D \\ -D^T K^\zeta & -K^{\zeta+1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -I & D \\ -D^T K^\zeta & -K^{\zeta+1} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

在 Neumann 边界条件下,当  $w_\zeta < w_{\zeta+1}$  时,由于  $w_\zeta < y < w_{\zeta+1}$  时波函数不为零,在方程(7)两边只能同时乘上  $\phi_m^\zeta(y)$ ,然后从 0 至  $w_\zeta$  积分,而方程(8)两边同时乘上  $\phi_m^{\zeta+1}(y)$ ,然后从 0 至  $w_{\zeta+1}$  积分,此时得到的散射矩阵形式与 Dirichlet 边界条件中  $w_\zeta > w_{\zeta+1}$  的情形一致.同理,当  $w_\zeta > w_{\zeta+1}$  时其散射矩阵的形式与 Dirichlet 边界条件中  $w_\zeta < w_{\zeta+1}$  的情形一致, $m$  和  $n$  均可为零.所有界面上的散射矩阵均可根据以上原则求得.

### 3. 结果与讨论

在下面的数值计算中,假定声子波在半导体电介质材料 GaAs 中传播,其弹性应力常数和密度分别为  $C_{11} = 12.21(10^{10} \text{ Nm}^{-2})$  和  $\rho = 5317.6$

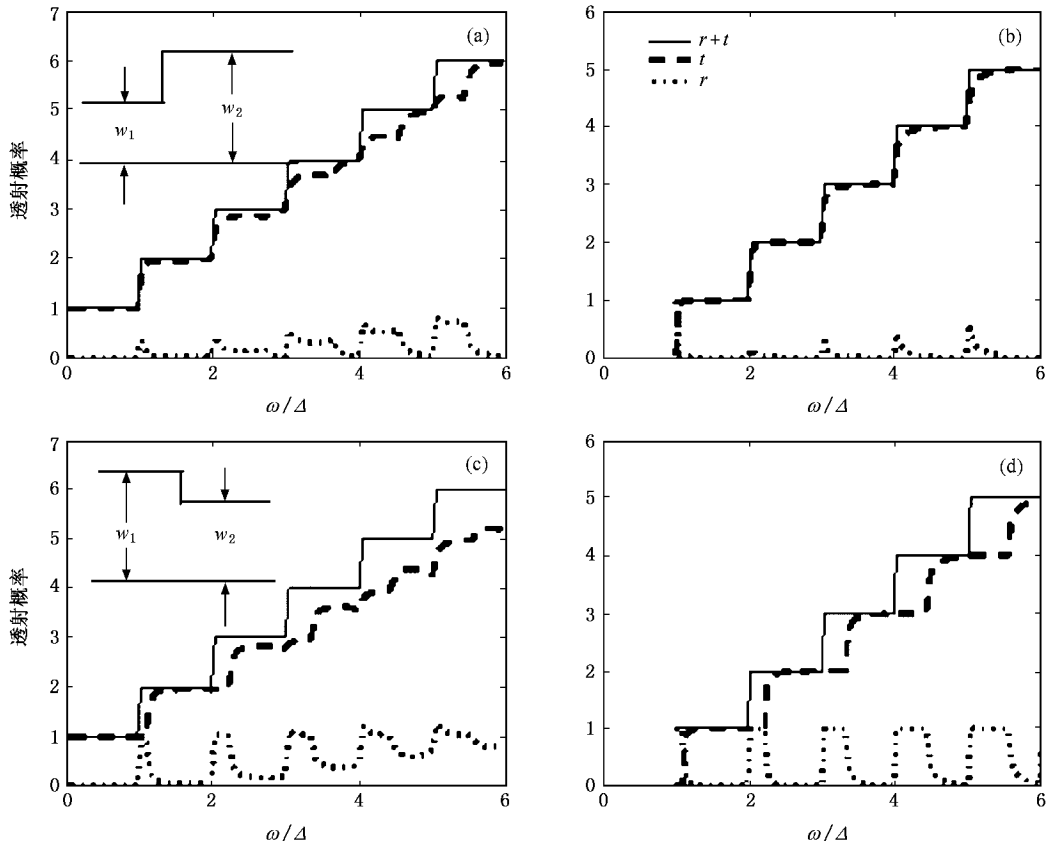


图2 声学声子总的透射概率、反射概率随约化频率  $\omega/\Delta$  ( $\Delta = \pi v/w_1$ ) 的变化关系((a)(b)对应  $w_1 = 10 \text{ nm}, w_2 = 11 \text{ nm}$  (由窄到宽))((c)(d)对应  $w_1 = 10 \text{ nm}, w_2 = 9 \text{ nm}$  (由宽到窄))((a)(c)为 Neumann 边界条件((b)(d)为 Dirichlet 边界条件.划线表示声学声子的透射概率,点线表示反射概率,实线为它们之和)

( $\text{kgm}^{-3}$ ); 声子散射是在极低的温度下进行的, 满足弹道输运理论; 取 40 个传播模数及有限个衰减模数.

图 2 描述了声学声子的透射系数、反射系数随约化频率  $\omega/\Delta$  的变化关系. 图中  $\Delta = \omega_{n+1} - \omega_n = \pi v/w_1$  表示主量子波导中第  $n+1$  和第  $n$  模的截止频率之差, 划线表示声学声子的透射概率, 点线表示反射概率, 实线为它们之和.

由图可知: 1) 在每个整数约化频率处, 由于一个新的模被激发, 透射系数和反射系数之和出现一个单位的垂直跳跃. 这些完美的台阶表明, 所有的结果都满足幺正关系  $\sum_n (\bar{t}_{mn} + \bar{r}_{mn}) = 1$ , 说明散射矩阵方法能够用来处理声子在量子波导中的弹道输运问题, 其中  $\bar{t}_{mn}$  和  $\bar{r}_{mn}$  分别表示从入射模  $m$  到终态模  $n$  的入射和反射概率. 2) 波导结构由宽变窄 ( $w_2/w_1 = 9/10$ ) 比结构由窄变宽 ( $w_2/w_1 = 11/10$ ) 的反射系数要大. 3) 在 Neumann 边界条件下, 当约化频率趋于无限小, 即温度趋于绝对零度时, 不论结构如何, 零模都能被激发, 并且透射系数趋于 1, 说明此时声子传播与结构无关, 而在 Dirichlet 边界条件下, 声子是从一

模才开始被激发的, 激发后, 其透射概率从零开始迅速趋于 1, 此时声子很少被反射, 且反射系数似乎与频率呈一种近似的周期性.

图 3 描述了在 T 形和倒 T 形波导中(结构如图 3(b) 左上角所示), 在不同边界条件和不同的区域中(区域横向长度  $w_2$  取不同值), 声学声子总的透射系数随约化频率  $\omega/\Delta$  的变化关系.  $w_1 = 10 \text{ nm}$ ,  $d = 10 \text{ nm}$ , 曲线 a—d 分别对应  $w_2 = 7, 9, 13, 23 \text{ nm}$ . 当  $w_2$  的值偏离  $w_1$  的值时, 透射曲线将由近似平台分解为一系列的峰谷结构; 进一步增加横向长度  $w_2$  的值, 透射谱变成越来越复杂的共振曲线. 横向长度  $w_2$  的增加将使宽区域内声学传播波的截止频率减小, 导致宽区域内存在更多的声学模, 且在宽区域内发生多重反射, 这些模将与主量子波导中的入射模相互干涉, 发生耦合. 区域内参加耦合的模越多, 透射谱越复杂. 图中出现了一个有趣的现象, 即当  $w_2/w_1 > 1$  时, 无论是 Neumann 还是 Dirichlet 边界条件, 在最低阶模都出现了禁止频率; 而在  $w_2/w_1 < 1$  时, 不会出现禁止频率. 所谓禁止频率是指某些频率的声子全部被散射区域反射, 不能在结构中传播. 详细

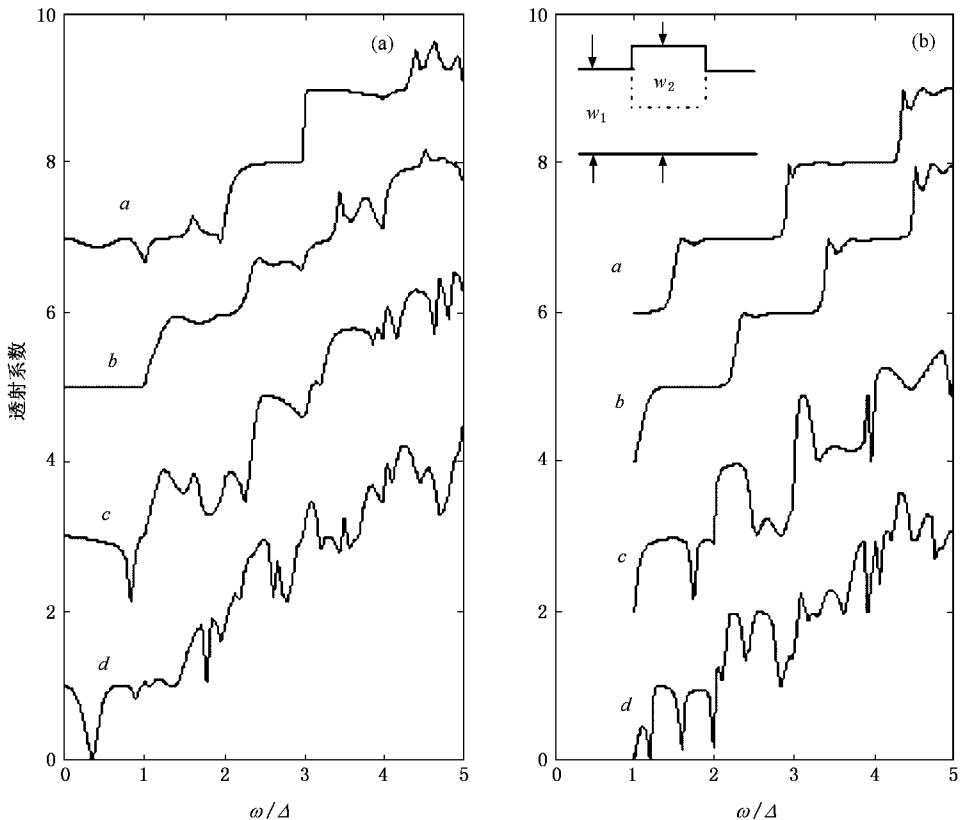


图 3 声学声子总的透射系数随约化频率  $\omega/\Delta$  的变化关系 ( $w_1 = 10 \text{ nm}$ ,  $d = 10 \text{ nm}$ , 曲线 a—d 分别对应  $w_2 = 7, 9, 13, 23 \text{ nm}$ ). (a) 为 Neumann 边界条件 (b) 为 Dirichlet 边界条件. 为清楚起见, 相邻曲线垂直平移了一个单位)

的计算发现,禁止频率的数目随着横向长度的增加而增多,如图 4 所示.事实上,禁止频率的出现是共振反射的结果,此时满足驻波条件.

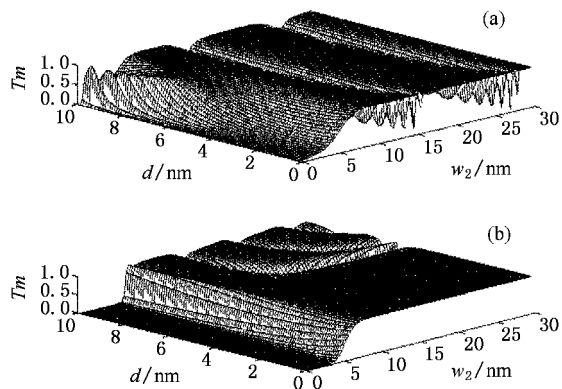


图 4 在不同类型的边界条件时,声学声子的透射概率  $T_m$  随端子的宽度和长度的变化关系 (a)为 Neumann 边界条件 (b)为 Dirichlet 边界条件(固定(a)的约化频率为  $\omega/\Delta = 0.8317$  (b)的约化频率为  $\omega/\Delta = 1.7624$ ,即选定图 3 中  $w_2 = 13$  nm 时出现的两个最初的禁止频率)

为了更详细地揭示声子的输运性质,计算中取  $w_2/w_1 = 13/10$ ,即图 3 中的曲线  $c$ .选出曲线  $c$  中两类边界条件下的禁止频率,其约化频率分别是  $\omega/\Delta = 0.8317$  和  $\omega/\Delta = 1.7624$ ,此时,声学声子的透射概率随端子的宽度和长度的变化关系分别如图 4(a), (b)所示.显然,一定的频率在两类边界条件下输运表现极为不同.在 Neumann 边界条件下二维空腔的纵向宽度对声学声子透射系数几乎没有影响;而透

射系数却与  $w_2$  成周期性变化,  $\omega/\Delta = \frac{\omega w_1}{\pi v} = \frac{2\pi v w_1}{\pi \lambda v} = \frac{2w_1}{\lambda} = 0.8317$ ,则  $\lambda = 2w_1/0.8317 = 24.0471$ ,而图中出现相邻两个共振反射,此频率的波被全反射,的距离为 12.0236,其周期长度正是驻波形成的条件,为半波长的整数倍.只是在  $w_2$  很小和  $d$  较大时,其周期性被破坏.而在 Dirichlet 边界条件下,二维空腔的纵向宽度对透射系数有很大的影响,当  $d/w_1 < \frac{1}{2}$ ,  $d w_2/w_1 > \frac{1}{2}$  时,透射系数趋向 1.只有当  $d/w_1 > \frac{1}{2}$  时,透射系数才与横向长度  $w_2$  呈周期性变化,同时纵向宽度  $d$  对透射系数的影响逐渐变小.

## 4. 结 论

本文的中心问题是得到在低温下,含结构缺陷的量子波导中声学声子输运系数与边界条件的关系.运用散射矩阵方法很好地解决了此问题,说明散射矩阵方法是研究声子弹道输运的有效方法.在不同的边界条件下,对具体的纳米结构的声子输运性质进行了研究,发现了如声子共振透射和共振反射等有趣的输运现象,指出了存在禁止频率的原因是主量子波与反射波耦合的结果,给出了固有频率出现共振反射的条件,也就是耦合波形成驻波的条件.以上结果对设计以声子为传播子的量子器件是非常有用的.

[ 1 ] Chen K Q, Wang X H, Gu B Y 2000 *Phys. Rev. B* **61** 12075  
 [ 2 ] Wang X H, Chen K Q, Gu B Y 2002 *Phys. Rev. B* **92** 5113  
 [ 3 ] Wang X J, Wang L L, Chen K Q *et al* 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3655 (in Chinese) [ 王新军、王玲玲、陈克求等 2006 物理学报 **55** 3655 ]  
 [ 4 ] Huang W Q, Wang L L, Shuai Z G *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2330 (in Chinese) [ 黄维清、王玲玲、帅志刚等 2004 物理学报 **53** 2330 ]  
 [ 5 ] Yang J Y, Deng H Q, Hu W Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1946 (in Chinese) [ 杨剑瑜、邓辉球、胡望宇 2004 物理学报 **53** 1946 ]  
 [ 6 ] Wang Z G, Duan S Q, Zhao X G 2005 *Chin. Phys.* **14** 2320  
 [ 7 ] Santamore D H, Cross M C 2001 *Phys. Rev. B* **63** 184306; 2001 *Phys. Rev. Lett.* **63** 115502  
 Santamore D H, Cross M C 2002 *Phys. Rev. B* **66** 144302  
 [ 8 ] Ju Y S, Goodson K E 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 3005  
 [ 9 ] Liu W, Asheghi M 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 3819

[ 10 ] Balandin A, Wang K L 1998 *Phys. Rev. B* **58** 1544  
 [ 11 ] Huxtable S T, Abramson A R, Tien C L *et al* 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 1737  
 [ 12 ] Zou j, Balandin A 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 2932  
 [ 13 ] Mingo N 2003 *Phys. Rev. B* **68** 113308  
 Mingo N 2003 *Nano Letters* **3** 1713  
 [ 14 ] Sheng W D 1997 *J. Phys. : Condens. Matter* **9** 8369  
 [ 15 ] Leng M H, Lent C S 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 137  
 Leng M H, Lent C S 1994 *Phys. Rev. B* **50** 10823  
 [ 16 ] Li W X, Chen K Q, Duan W H *et al* 2003 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **36** 3027  
 Li W X, Chen K Q, Duan W H *et al* 2004 *J. Phys. : Condens. Matter* **16** 5049  
 Li W X, Chen K Q, Duan W H *et al* 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 822

- [ 17 ] Huang W Q , Chen K Q , Shuai Z G *et al* 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 1  
Huang W Q , Chen K Q , Shuai Z G *et al* 2005 *Physics Letters A* **336** 245
- [ 18 ] Chen K Q , Li W X , Duan W H *et al* 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045422
- [ 19 ] Tang L M , Wang L L , Chen K Q *et al* 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 163505
- [ 20 ] Duan S Q , Wu B Y , Wang Z G , Zhao X G 2004 *Chin. Phys.* **13** 1339
- [ 21 ] Dai Z H and Ni J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3342 ( in Chinese ) [ 戴振宏、倪 军 2005 物理学报 **54** 3342 ]
- [ 22 ] Luo H M , Liu G , Xu L 2004 *Chin. Phys.* **13** 1766

## Effect of boundary conditions on phonon transmission in a dielectric quantum waveguide

Tang Li-Ming Wang Yan Wang Dan Wang Ling-Ling<sup>†</sup>  
( *Department of Applied Physics , Hunan University , Changsha 410082 , China* )  
( Received 14 March 2006 ; revised manuscript received 3 April 2006 )

### Abstract

We investigate the effect of boundary conditions on the low temperature phonon transport in a quantum waveguide with structural defects by using the scattering-matrix method. A comparison between transmission coefficients is made when Neumann and Dirichlet boundary conditions are applied for acoustic modes , respectively. The result indicates that the behavior of the transmission coefficient versus reduced phonon frequency is qualitatively different for different boundary conditions. The stop-frequency gap and the transmission resonance are observed for certain structural parameters due to mode-mode coupling.

**Keywords** : phonon transport , mesoscopic systems , boundary effect

**PACC** : 6322 , 7335 , 4210F

\* Project supported by the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China ( Grant No. 20050532013 ) and the Natural Science Foundation of Hunan Province , China ( Grant No. 04JJ20007 ).

<sup>†</sup> E-mail : llwang@hnu.cn