含半圆弧形腔的量子波导中 声学声子输运和热导特性

姚凌江* 王玲玲

(湖南大学物理与微电子科学学院,长沙 410082) (2007 年 5 月 28 日收到 2007 年 9 月 14 日收到修改稿)

采用散射矩阵方法,研究了在应力自由和硬壁两种典型的边界条件下含半圆弧形腔的量子波导中声学声子输运和热导性质,结果表明在两种边界条件下声子透射谱和热导有着不同的特征,在应力自由边界条件下,能观察到 普适的量子化热导现象,当结构为一理想的量子线时,在低温区域有一个量子化平台出现,而当半圆弧形结构存在时,非均匀横向宽度引发的弹性散射使得量子化平台被破坏,在硬壁边界条件下,不可能观察到量子化热导现象, 热导随温度的增加单调上升,计算结果表明还可以通过调节半圆弧形结构的半径来调控声子的输运概率和热导.

关键词: 声学声子输运, 热导, 量子体系 PACC: 6322, 7430E, 0365

1.引 言

低维纳米尺度结构和器件中的电子态及其输运 性质自 20 世纪 80 年代以来已被广泛地研究 了[1-15]. 众所周知,当微结构的尺寸可以与结构的特 征尺寸(相干长度)相比拟或更小时,就会发生电子 相干输运 在量子相干输运中 ,一个非常有趣的物理 现象是在准一维结构里观察到了量子化电导,在理 想情况下,每个自旋简并通道对电导贡献一个量子 单元 $2e^2/h$ (e 是电子的电荷 ,h 是布朗克常数). 当 量子化电导现象发现以后 ,当时有人从理论上预测 低温下一维量子线中声子的热导也是量子化的,但 是热导量子化是一种什么形式 热导量子化单元是 什么均没有明确的报道.直到 1998 年 Rego 等采用 Landauer 输运理论,从理论上预言[16,17]:低温下一维 量子线中声子的热导是量子化的 热导的基本量子 化单元是 $\pi^2 k_B^2 T/3h(k_B$ 是玻尔兹曼常数 ,h 是布朗 克常数, T 是温度). 实验方面, Tighe 等^{18]}设计了一 种测量悬空纳米结构的声子热导的装置 成功地测 量了低温下的热导,他们测量的温度达到 1.5 K 但 没有发现量子化热导现象 受理论工作的启发 同样 是这个研究组,改进了实验,Schwab等证实了理论

物理学家关于低温下纳米线中热导量子化的预 言^[19].这些令人兴奋的实验结果大大激发了理论工 作者的研究兴趣,从此量子体系中的声学声子输运 和热导性质的研究成为研究人员关注的研究热点. 各种理论模型和计算方法相继被提出研究各种纳米 结构的声子输运和热导机理.分子动力学方法被用 来模拟硅纳米线^[20]、碳纳米管^[21]和一维链^[22]中的 热导;基于 Fourier 定律、Boltzmann 输运方程和 Landauer 公式的各种计算模型被提出研究一维晶 格^[23]、碳纳米管^[24]、量子线^[25,26]、以及准一维介观体 系^[27]中的热导性质.

对于一个理想的量子线结构,理论上已经预言 在非常低的温度区域内会出现一个量子化平 台^[16,17],然而在实验上并没有观察到一个完整的量 子化热导平台,而是随温度的升高反而出现热导下 降的现象^[19],这个原因是什么呢?据分析,可能的 原因是由于接触端,表面粗糙或者是杂质和缺陷对 声子的散射引起的.但是引起热导下降的深层次的 物理原因是什么呢?为了解答这个问题,科学家们 研究了在主量子线上有着附加声子散射的量子结构 中的声学声子输运和热导.例如,有着粗糙表面^[25] 或结构缺陷^[26]的量子线、T型量子波导^[28—30]、双弯 曲量子结构^[31]、或热库与量子线之间有着不完全的 声子耦合^[32,33]、以及多通道量子波导^[34,35]、以及周期 性量子结构^[35-37]中的声学声子输运和热导已被报 道了.这些研究表明完整的量子化平台仅仅在理想 的量子线中才能观察到,当结构中含有附加的非均 匀结构时随着温度的上升,热导首先会出现下降现 象 随着温度进一步增加,热导再开始上升,量子平 台由于非均匀结构的散射被破坏了.这些前人的工 作使我们对有着非均匀几何结构散射的量子线中的 热输运性质有一个比较深入的了解.

本文研究了如图 1 所示的半圆弧形量子波导中 的声学声子输运和热导性质.关于量子波导与外界 接触的边界,我们考虑了两种典型的情形,一种情形 是结构置身于空气中,另一种情形是将结构镶嵌在 硬材料中,对第一种情形,量子波导结构与外界在边 界处满足应力自由边界条件,也就是弹性边界条件; 对第二种情形,边界条件是硬壁边界条件.由于不同 的边界条件,波导内的横向波函数具有不同的形式. 通过计算,我们发现这两种不同的情形,声子输运谱 和热导随温度的变化有着本质的不同.此外,研究发 现半径能在一定的程度上对热导进行调节.我们认 为这些结果为这个领域提供了新的内容,将有助于 研究人员从理论和实验更深入地理解相关结构中的 声学声子输运和热导性质.



图1 半圆弧形量子波导结构

2. 理论模型和公式

考虑如图 1 所示由 GaAs 材料组成的半圆弧形 量子波导结构.区域 I 和 III 是主量子线,有着相同的 宽度 d 区域 II 是半径为 R 的半圆弧形结构.这里 我们假定区域 I 和 III 的温度分别是 T_1 和 T_2 ,且其 温度差 $\delta T(\delta T = T_1 - T_2 > 0)$ 很小,在计算中我们能 够用平均温度 $T[T = (T_1 + T_2)^2$]代替区域 I ,II 和 III 的温度.对于图 1 所示的结构,在弹性散射近似 下,计算热导的公式可写为^[16,38]

$$K = \frac{\hbar^2}{k_{\rm B}T^2} \sum_m \frac{1}{2\pi} \int_{\omega}^{\infty} \tau_m (\omega) \frac{\omega^2 e^{\beta \omega}}{(e^{\beta \omega} - 1)^2} d\omega , \quad (1)$$

其中 $\tau_m(\omega)$ 是区域 I 的第 m 个模穿越半圆弧形后 进入区域 III 的透射概率 , ω_m 是第 m 个模的截止频 率.计算热导的中心问题是计算透射概率 $\tau_m(\omega)$, 本文将采用弹性模型计算声学声子的透射概率.对 于图 1 所示结构,存在三种极化的声学声子模 纵向 极化 P 模,垂直极化 SV 模和水平极化的 SH 模,它 们的极化方向分别为 x,y 和 z 方向^[39],x-y 平面极 化的声学模 P和 SV)与 z 方向极化的 SH 模是退耦 合的^[37].如同前面的工作^[26—37]本文也主要讨论 SH 模的传播.实际上其他模式也有着类似的传输性 质^[28].在弹性散射近似下 SH 模的运动方程为

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - v_{\rm SH}^2 \nabla^2 \Psi = 0 , \qquad (2)$$

其中 $v_{\rm SH}$ 是纵声学波的速度 ,与质量密度 ρ 和弹性 常数 $C_{\rm H}$ 的关系为

$$v_{\rm SH}^2 = \frac{C_{44}}{\rho}.$$
 (3)

为了便于求解,我们把区域 [] 分解成 M 个子区域, 每个子区域可以视为一个均匀的长方形结构,这样 弹性运动方程在各个区域 ε :区域 [,]]和区域 [] 的各个子区域 $m(m = 1, 2, 3, ..., N_{\varepsilon})$]中的解可写成 如下形式:

$$\Psi^{(\varepsilon)}(x,y) = \sum_{m=0}^{N_{\varepsilon}} [A_m^{\varepsilon} e^{i k_m^{(\varepsilon)} x} + B_m^{\varepsilon} e^{-i k_m^{(\varepsilon)} x}]$$

$$\times \Phi^{(\varepsilon)}(x) = (4)$$

其中 $\Phi_m^{(\varepsilon)}(y)$ 表示在区域 ε 中第 m 个模的横向波函 数 ,它的具体形式决定于结构与外界的边界条件. N_{ε} 根据能量守恒 $K_m^{(\varepsilon)}$ 与入射声子频率 ω ,SH 声学 波的速度 v_{SH} 和区域 ε 的横向宽度 d_{ε} 满足如下 关系:

$$\omega^{2} = k_{m}^{(\varepsilon)} v_{\rm SH}^{(\varepsilon)} + \frac{m^{2} \pi^{2} v_{\rm SH}^{(\varepsilon)}}{d_{\varepsilon}^{2}} , \qquad (5)$$

当在边界取应力自由边界条件即 $\hat{n} \cdot \nabla \Psi = 0$ 其中 \hat{n} 是边界法线方向的单位矢量)时 ,各区域的横向波函 数应满足如下方程:

$$\Phi_{m}^{(\varepsilon)}(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{d_{\varepsilon}}}\cos\frac{m\pi}{d_{\varepsilon}}y, & (m \neq 0), \\ \sqrt{\frac{1}{d_{\varepsilon}}}, & (m = 0). \end{cases}$$
(6)

而当在边界取硬壁边界条件时 ,各区域的横向波函

数应满足如下方程:

$$\Phi_m^{(\varepsilon)}(y) = \sqrt{\frac{1}{d_{\varepsilon}}} \sin \frac{m\pi}{d_{\varepsilon}} y , \quad (m = 1 \ 2 \ \dots), (7)$$

这里,值得特别指出的是(4)式中的求和需包括所有 的传播模和衰减模,但在实际运算中,一般只需要包 括所有的传播模和有限个衰减模即可.根据相邻两 个区域之间的边界条件:位移 Ψ 和应力 $C_{44} \partial \Psi / \partial x$ 连续,可以得出相邻两个区域系数之间的关系,然后 应用散射矩阵方法求出透射概率 $\tau_m(\omega)$,再由(1) 式可求出热导.散射矩阵方法的计算细节在文献 [33]中详细报道了.在数值计算中,我们采用下列弹 性常数和质量密度等参数^[40]:对 GaAs, $C_{44} = 5.99$ (10^{10} Nm⁻²), $\rho = 5317.6$ (kgm⁻³).

3. 数值结果和分析

下面我们将运用上面导出的计算公式,从数值 上讨论取不同的边界条件时引进半圆弧形腔结构时 对量子线中的声子输运和热导的影响.





图 2 应力自由边界条件下半圆弧形腔的半径 *R* 取不同值时总的透射概率随 ω/Δ 的变化 (a)-(d)分别对应 *R* = 10 nm, 11 nm,15 nm和 20 nn(这里, d = 10 nm, $\Delta = \pi v_1/d(v_1 \oplus n d)$ 分别是区域 [的声速和横向宽度))

会发生声波的散射,散射实际上源于在两个不同区 域之间的不同声学模之间的耦合.随着半径的增加, 在区域Ⅱ的每个子区域,有更多的声子模被激发,这 些模将与区域Ⅰ的入射模以及区域Ⅲ的透射模发生 强烈耦合,加上子区域之间的多重散射,导致复杂声 子输运谱的形成.然而,从图2,我们能发现,当温度 趋近于零,无论半径取何值,输运概率总是为1,这 是因为波长远大于腔半径尺寸,从而不均匀结构对



图 3 边界条件下半径 *R* 取不同值时总的透射概率随约化频率 ω/Δ 的变化 (a)—(d)分别对应 *R* = 10 nm ,11 nm ,15 nm 和 20 nm (这里 ,d = 10 nm $\Delta = \pi v_1/d$)

同值时总的以及最低阶的三个模的约化热导随约化 温度的变化规律.图4(a)给出了总的K/T随 $k_BT/$ $h\Delta$ 的变化,其中K是热导,T为温度, $\Delta = \pi v_1/d$,图 4(b)--(d)分别对应0阶模、1阶模和2阶模的K/T. 根据计算,对于所给定的温度范围内,仅仅前六支声 子模对总的热导作出贡献,其中最低阶的三个模特 别是零阶模对热导做出主要贡献.从图4(a)可以看 出,当 $T \rightarrow 0$ 时,只有零阶模被激发,总热导就是零 阶模的热导,其值K/T接近理想的量子化热导单元 $\pi^2 k_B^2 T/3h$,且与结构的几何参数无关.这说明半圆 弧形结构对长波长极限($\omega \rightarrow 0, k \rightarrow 0$)的声学振动的 散射极小.比较图4(b)(c)与(d),发现1阶模和2 阶模的 K/T 随温度线性地增加,而对于零阶模,在 很低的温度区域,随温度的上升反而有一个明显地 下降,在较高的温度区域,似乎对温度并不敏感.我 们认为在很低的温度区域零阶模热导下降是由于主 量子线中的零阶模和半圆弧形结构中被激发的声子 模的共振耦合引起透射系数的减小而造成的.从图 4,我们发现随着半圆弧形结构半径的增加热导出现 下降的现象,这一现象容易理解:随着半径的增加, 半圆弧形结构对主量子线中的入射模的散射更强, 导致输运概率下降,从而引起热导的降低.这一现象 也告诉我们,通过调节半径,可以在一定程度上调控 热导的大小.

长波长声子的散射很小.

从图 3 发现,在硬壁边界条件下,声学声子输运 谱不同于应力自由边界条件下的输运谱.在硬壁边 界条件下,零模不能被激发,所以只有当温度高于阈 值温度,此时最低的1阶模被激发,才有声子输运发 生,而且也没有同样边界条件下的电子输运谱那么 平滑.

图4,给出了应力自由边界条件下半径R取不



图 4 应力自由边界条件下半径 *R* 取不同值时 约化 *K*/*T* 随约化温度 $k_{\rm B}T/\hbar\Delta$ 的变化关系 (a)表示总的约化 *K*/*T*(b)—(d)分别对应 0 阶模、1 阶模和 2 阶模的约化 *K*/*T*(B中实线、虚线和点线分别对应 *R* = 10,11 和 15 nm.这里 ,*d* = 10 nm)

作为对比,在图 5 给出了硬壁边界条件下半径 R 取不同值时总的以及最低阶的三个模的约化热 导随约化温度的变化规律.图 5(a)给出了总的 K/T 随k_BT/ħ△ 的变化,而图 5(b)-(d)分别对应 1 阶 模、2 阶模和 3 阶模的 K/T.因为在硬壁边界条件下 零模不能被激发,最低阶的模是 1 模,要激发 1 模, 需要达到相应的阈值温度,所以在很低的温度区域, 热导为零.在这样的情形下,观察不到热导量子化现 象.从图 4 和图 5 发现只有在弹性边界条件下,才能 观察到热导量子化现象,而且在无半圆弧形腔所引 发的不均匀几何结构散射的情况下,才能观察到完 整的热导量子化平台.

4.结 论

总之 本文应用散射矩阵方法研究了在应力自 由和硬壁两种典型的边界条件下含半圆弧形腔的量 子波导结构中的声学声子输运和热导性质.观察到 一些有趣的物理现象:1)当量子波导为一理想的量 子线时 声学声子输运谱显示完整的量子化台阶 类 似电子输运谱,然而由于应力自由边界条件允许零 阶模的传播 导致声子输运谱与电子输运谱有着不 同的特征,也与硬壁边界条件下声子输运谱不同,当 引入半圆弧形腔结构时 ,由于不均匀横向宽度导致 强的模-模耦合及多重散射,导致声子输运谱呈复杂 的峰-谷结构 .2) 在应力自由边界条件下,当温度趋 于零时,可观察到量子化热导现象,且热导量子化基 本单元为 π² k_a² T/3h 随着温度的升高 热导下降 在 更高的温度,由于高阶横模的激发,热导随温度单调 上升 当结构为一理想的均匀量子线时 在低温区域 有一个量子化平台出现,当半圆弧形结构存在时,附 加的散射使得量子化平台被破坏,这些结果与以前 的实验和理论报道一致 .3)在硬壁边界条件下,观 察不到量子化热导现象 .4)计算结果表明可以通过 调节半圆弧形腔结构的半径来控制声子的透射概率 和热导.



图 5 硬壁边界条件下半径 R 取不同值时,约化 K/T 随约化温度 k_BT/t₄ 的变化关系(其他参数和说明同图 4)

- [1] van Wees B J van Houten H ,Beenakker C W J ,Williamson J G , Kouwenhoven L P ,van der Marel D ,Foxon C T 1988 Phys. Rev. Lett. 60 848
- [2] Muller J E 1992 Phys. Rev. Lett. 68 385
- [3] Duan W Zhu J L Gu B L 1994 Phys. Rev. B 49 14403
- [4] Chklovsii D B 1995 Phys. Rev. B 51 9895
- [5] Li J B ,Zhang Z Q ,Liu Y Y 1997 Phys. Rev. B 55 5337
- [6] Gu B Y Sheng W D , Wang X H , Wang J 1997 Phys. Rev. B 56 13434
- [7] Sim H S ,Ahn K H ,Chang K J ,Ihm G ,Kim N ,Lee S J 1998 Phys . Rev. Lett. 80 1501
- [8] Wang X H ,Gu B Y ,Yang G Z 1998 Phys. Rev. B 58 4629
- [9] Chen K Q ,Gu B Y ,Lin Y K ,Chuu D S 1999 Int. J. Mod. Phys. B 13 903
- [10] Xu H Q 2002 Phys. Rev. B 66 165305
- [11] Wu H B Chang K Xia J B 2002 Phys. Rev. B 65 195204
- [12] Zhu J L ,Dai Z S ,Hu X 2003 Phys. Rev. B 68 45324
- [13] Xia J B ,Li S S 2003 *Phys* . *Rev* . B **68** 75310
- [14] Huang W Q, Chen K Q, Shuai Z G et al 2004 Acta Phys. Sin. 53 2330 (in Chinese)[黄维清、陈克求、帅志刚等 2004 物理学报 53 2330]

- [15] Wang X J, Wang L L, Huang W Q et al 2006 Acta Phys. Sin. 55 3649 (in Chinese)[王新军、王玲玲、黄维清等 2006 物理学报 55 3649]
- [16] Rego L G C ,Kirczenow G 1998 Phys. Rev. Lett. 81 232
- [17] Rego L G C ,Kirczenow G 1999 Phys. Rev. B 59 13080
- [18] Tighe T S ,Worlock J M ,Roukes M L 1997 Appl. Phys. Lett. 70 2687
- [19] Schwab K ,Henriksen E A ,Norlock J M ,Roukes M L 2000 Nature 404 974
- [20] Volz S G Chen G 1999 Appl. Phys. Lett. 75 2056
- [21] Cummings A , Qsman M , Srivastava D et al 2004 Phys. Rev. B 70 115405

Wu G ,Dong J M 2005 Phys. Rev. B 71 115410

- [22] Wang J S ,Li B W 2004 Phys. Rev. Lett. 92 74302
- [23] Lepri S, Livi R, Politi A 2003 Physics Reports 377 1
 Li B, Lan J H, Wang L 2005 Phys. Rev. Lett. 95 104302
- [24] Yamamoto T , Watanabe S , Watanabe K 2004 Phys. Rev. Lett. 92 75502

Mingo N ,Broido D A 2005 Phys. Rev. Lett. 95 96105

[25] Santamore D H ,Cross M C 2001 Phys. Rev. Lett. 87 115502

- [26] Chen K Q ,Li W X ,Duan W H ,Gu B L 2005 Phys. Rev. B 72 45422
- [27] Sun Q F , Yang P , Guo H 2002 Phys. Rev. Lett. 89 175901
- [28] Li W X , Chen K Q , Duan W H , Wu J , Gu B L 2004 J. Phys. : Condens. Matter 16 5049
- [29] Tang L M ,Wang L L ,Chen K Q ,Huang W Q Zou B S 2006 Appl. Phys. Lett. 88 163505
- [30] Peng X F ,Chen K Q ,Zou B S ,Zhang Y 2007 Appl. Phys. Lett. 90 193502
- [31] Huang W Q , Chen K Q , Shuai Z , Wang L L , Hu W Y , Zou B S 2005 J. Appl. Phys. 98 93524
- [32] Lu X ,Chu J H ,Shen W Z 2003 J. Appl. Phys. 93 1219
- [33] Li W X , Chen K Q , Duan W H , Wu J , Gu B L 2003 J. Phys. : Appl. Phys. 36 3027

[34] Li W X , Chen K Q , Duan W H , Wu J , Gu B L 2004 Appl . Phys .

Lett. 85 822

- [35] Tang L M ,Wang L L ,Zou B S ,Chen K Q 2007 J. Phys. D : Appl. Phys. 40 1497
- [36] Li W X , Chen K Q 2006 Phys. Lett. A 357 378
- [37] Tang L M, Wang Y, Wang D et al 2007 Acta Phys. Sin. 56 437
 (in Chinese)[唐黎明、王 艳、王 丹等 2007 物理学报 56 437]
- [38] Cross M C ,Lifshitz R 2001 Phys. Rev. B 64 853204
- [39] Graff K , Wave Motion in Elastic Solids (Dover , New York , 1991)
- [40] Chen K Q , Wang X H , Gu B Y 2000 Phys. Rev. Lett. 61 12075
- [41] Wu H Sprung D W L ,Martorell J ,Klarsfeld S 1991 Phys. Rev. B 44 6351

Characteristics of acoustic phonon transport and thermal conductance in quasi-one-dimensional quantum waveguides with semi-circular-arc cavity

Yao Ling-Jiang[†] Wang Ling-Ling

(College of Physics and Microelectronics Science ,Hunan University ,Changsha 410082 ,China)

(Received 28 May 2007; revised manuscript received 14 September 2007)

Abstract

By using the scattering matrix method the transmission coefficient and thermal conductance of acoustic phonon through a quantum waveguide with semi-circular-arc cavity under both stress-free and hard-wall boundary conditions at low temperatures are studied. The results show that the transmission spectra and thermal conductance exhibit different characteristics under two different boundary conditions. Under the stress-free boundary condition, the universal quantum thermal conductance can be observed regardless of the geometry details in the limit $T \rightarrow 0$. The quantized plateau is observed only on assuming that the quantum wire is perfect (uniform). For quantum structures with semi-circular-arc cavity, the plateau is destroyed due to the additional scattering induced by the nonuniform waveguide widths to the phonon. When the hard-wall boundary condition is applied, the universal quantum thermal conductance disappears. The thermal conductance increases with the increase of temperature. Moreover *i*t is found that both the transmission coefficient and thermal conductance can be adjusted by changing the radius of the semi-circular-arc cavity.

Keywords : acoustic phonon transport , thermal conductance , quantum system PACC: 6322 , 7430E , 0365

[†] E-mail :ljyao@hnu.cn