

结构缺陷对量子波导腔中热导的调控*

聂六英[†] 李春先 周晓萍 程芳 王成志

(长沙理工大学物理与电子科学学院,长沙 410114)

(2010年11月23日收到;2011年1月28日收到修改稿)

利用散射矩阵方法和标量模型,研究了低温下可调缺陷对量子波导腔的热导的影响. 改变缺陷的参数能控制热导,缺陷的尺寸和位置能导致热导的改变,而且不同种类的缺陷也能导致热导随温度的变化.

关键词: 声学声子输运, 热导, 量子结构

PACS: 63.22.+m, 44.10.+i, 73.23.Ad

1. 引言

近年来,随着纳米技术的不断进步,制造各种纳米尺度量子器件成为可能. 尺寸与电子平均自由程相比拟的介观系统的电子输运在实验和理论中都比较广泛地研究了. 在器件设计中,尺寸效应对器件的热导率的影响很重要^[1,2]. 相比之下,纳米尺度热输运,尤其是低温下的热输运,研究得还不是很多. 对于极低温度的半导体,热输运主要来自于声子的贡献. 在低温条件下,热输运的实验观察和评价都很难进行. 随着纳米科技的进步,在实验上研究纳米尺度弹道系统中的热输运是可行的.

在半导体纳米结构中热导是一个重要的参量. 近年来,发展新的纳米仪器用来探测纳米尺度范围内的热导的基本性质受到了越来越多的关注. 各种纳米结构如超晶格^[3,4], 纳米线^[5-11], 一维链^[12,13], 纳米管^[14-19], 量子阱^[20,21], 石墨^[22,23]等,热导的研究取得了引人注目的成果. 电子元器件的尺寸在不断减小,导致器件每单位面积散发的热量在增加是介观系统中声学声子热输运受到关注的主要原因之一. 纳米线结构尤其受到重视,原因在于低温下一维量子线中声子的热导是量子化的. 理论上,一些研究者推导出低温下弹道热输运的热导表达,发现温度 $T \rightarrow 0$ 时,热导由截止频率为零的最低模决定,与结构无关,并且量子化单元为 $\pi^2 k_B^2 T/3h$ ^[24]. 实验上, Schwab 等^[25]证明了量子化热导的预测. 然

而,实验表明热导随温度的增加在低温区出乎意料地减小,量子化平台并没有出现. 量子化热导平台仅在理想的一维量子线中出现. 对于那些不连续的量子结构,或者在主量子波导中存在对声子有散射作用的区域,如突变结^[26-28], 表面粗糙的量子线^[29,30], 含结构缺陷的量子线^[31,32], 侧端结构^[33-35], 不光滑连接^[36-42]等,量子化热导平台不会出现.

在本文中,基于标量模型^[43],我们研究结构缺陷对量子波导腔中热导的调控. 标量模型已经应用到很多纳米结构的声学声子输运和热导的计算中^[27,31-35,37-41]. Joe 等^[44]研究了含可控杂质的量子盒中电导,发现由于干涉效应导致电导出现振荡. Chen 等^[31]研究了结构缺陷对纳米线中热导的影响. 在本文中,我们讨论量子波导腔中的结构缺陷对热导的调控.

2. 理论模型和公式

在弹道区,热导由下式表示:

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

求和包括结构中所有的输运模 m , $\tau_m(\omega)$ 代表透射系数. 考虑如图 1 所示模型结构. 该模型结构分为 I—V 五个区域. I 区和 V 区的宽度为 w_1 , II 区和 IV 区的宽度为 $w_c + t + w_d$, III 区为杂质区. 对于三维量子结构如纳米线,基本的声子模应该有 6 支,即一

* 湖南省自然科学基金(批准号: 09JJ5005)和国家自然科学基金(批准号: 10947134, 11004019)资助的课题.

[†] E-mail: nieliuying@163.com

支膨胀 (dilatational) 模、一支扭转 (torsional) 模、两支弯曲 (flexural) 模和两支剪切 (shear) 模。然而, 对于二维量子结构来说, 可用纵向极化 P 模, 垂直激化 SV 模和水平极化 SH 模来描述。它们的极化方向分别为 x, y, z 方向。为简单起见, 假定区域 I—V 有相同的厚度, 并且厚度比纳米线的宽度及长度及弹性波的波长小得多。因此, z 方向极化的 SH 模与 x - y 平面的声学模 P 模和 SV 模是退耦合的。先前研究 T 型结构中 P 模和 SV 模混合情况对热导的影响的结果表明, 低温下模混合对热导的影响较小, SH 模的热导与 P 模和 SV 模有相似的特征, 在本文中, 我们只讨论 SH 模的热导。

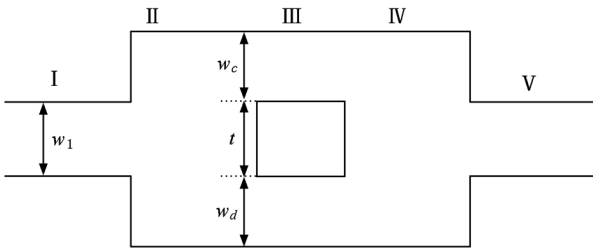


图1 含缺陷的量子波导腔的示意图

采用弹性模型计算声学声子的透射系数。在弹性近似下, SH 模的弹性运动方程为

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - v_L^2 \nabla^2 \psi = 0, \quad (2)$$

其中 v_L 是纵声学波的速度, 与质量密度 ρ 和弹性应力常数 C_{44} 的关系为

$$v_L^2 = \frac{C_{44}}{\rho}. \quad (3)$$

弹性运动方程在 I, V 区域的解为

$$\Psi^\alpha(x, y) = \sum_{m=1}^{N_1} [A_m^\alpha e^{ik_m^\alpha x} + B_m^\alpha e^{-ik_m^\alpha x}] \phi_m^\alpha(y) \quad (\alpha = \text{I, V}), \quad (4)$$

在应力自由边界条件下, 区域 I, V 的横向波函数为

$$\phi_m^\alpha(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{w_1}} \cos \frac{m\pi}{w_1} y & (m \neq 0), \\ \sqrt{\frac{1}{w_1}} & (m = 0), \end{cases} \quad (5)$$

波数通过能量守恒条件得到

$$\kappa_m^\alpha = \sqrt{\frac{\omega^2}{v_1^2} - \frac{m^2 \pi^2}{w_1^2}}, \quad (6)$$

其中 ω 表示入射声子频率。

对于区域 II 和 IV, 弹性运动方程在这两个区域

的解为

$$\Psi^\beta(x, y) = \sum_{n=1}^{N_2} [A_n^\beta e^{ik_n^\beta x} + B_n^\beta e^{-ik_n^\beta x}] \phi_n^\beta(y) \quad (\beta = \text{II, IV}).$$

在应力自由边界条件下, 波函数和波数分别为

$$\phi_n^\beta(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{w_2}} \cos \frac{n\pi}{w_2} y & (n \neq 0), \\ \sqrt{\frac{1}{w_2}} & (n = 0), \end{cases}$$

$$\kappa_n^\beta = \sqrt{\frac{\omega^2}{v_\parallel^2} - \frac{n^2 \pi^2}{w_2^2}}.$$

对于区域 III, 弹性运动方程的解为

$$\Psi^\gamma(x, y) = \sum_{s=1}^{N_3} [C_s^\gamma e^{ik_s^\gamma x} + D_s^\gamma e^{-ik_s^\gamma x}] \phi_s^\gamma(y) + \sum_{s=1}^{N_3} [C_s^{\gamma 2} e^{ik_s^{\gamma 2} x} + D_s^{\gamma 2} e^{-ik_s^{\gamma 2} x}] \phi_s^{\gamma 2}(y) \quad (\gamma = \text{III}).$$

如果 C 部分是空的, 通道应用自由应力边界条件, 横向波函数和波数可以表达为

$w_b + t \leq y \leq w_2$ 时,

$$\phi_s^{\gamma 1}(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{w_a}} \cos \frac{s\pi}{w_a} (y - w_2) & (s \neq 0), \\ \sqrt{\frac{1}{w_a}} & (s = 0), \end{cases}$$

$$\kappa_s^{\gamma 1} = \sqrt{\frac{\omega^2}{v_1^2} - \frac{s^2 \pi^2}{w_a^2}}.$$

$0 \leq y \leq w_b$ 时,

$$\phi_s^{\gamma 2}(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{w_b}} \cos \frac{s\pi}{w_b} y & (s \neq 0), \\ \sqrt{\frac{1}{w_b}} & (s = 0), \end{cases}$$

$$\kappa_s^{\gamma 2} = \sqrt{\frac{\omega^2}{v_2^2} - \frac{s^2 \pi^2}{w_b^2}}.$$

如果 C 部分是硬材料, 当通道应用应力自由边界条件而 A(B) 与 C 之间的界面应用硬壁边界条件, 横向波函数与波数与 C 部分是空的情况不同, 表达如下:

$$\phi_s^{\gamma 1}(y) = \sqrt{\frac{2}{w_a}} \cos \frac{(2s+1)\pi}{2w_a} (y - w_2)$$

$$w_b + t \leq y \leq w_2,$$

$$\phi_s^{\gamma 2}(y) = \sqrt{\frac{2}{w_b}} \cos \frac{(2s+1)\pi}{2w_b} y \quad 0 \leq y \leq w_b,$$

$$\kappa_s^\mu = \sqrt{\frac{\omega^2}{v_\mu^2} - \frac{(2s+1)^2 \pi^2}{4w_\mu^2}} \quad \mu = a, b.$$

散射的影响体现在透射系数中, 散射矩阵通过界面处位移和应力连续的边界条件推导出来.

3. 数值结果和分析

为研究缺陷类型对热导的影响, 在图 2 中我们考虑了缺陷为空的和硬物质时的两种情况. 其中 K 为热导率, T 为温度, $\Delta = \omega_{n+1} - \omega_n = \pi v_1/w$ (v_1 是区域 I 的声速). 为了清楚地观察到低温下声子弹道热运输的基本量子化单元 $\pi^2 k_B^2 T/3h$, 通常研究约化热导随约化温度的变化关系. 图 2(a), (b) 分别表示 $t=6$ nm 时总模和零模在缺陷为空和硬物质时的热导, 总的热导是前 6 支声学声子模的和. 图 2(c), (d) 分别表示 $t=12$ nm 时总模和零模在缺陷为空和硬物质时的热导. 缺陷类型不同, 通道与缺陷的界面满足的边界条件不同. 当缺陷为空时, 缺陷与通道之间的界面满足应力自由边界条件. 当缺陷为硬物质时, 缺陷与通道之间的界面满足硬壁边界条件. 从图中可以看出, 缺陷为空时的热导, 不管是总的还是 0 模的热导, 都大于缺陷为硬物质时的

热导. 当 $T \rightarrow 0$ 时, 缺陷为空时的热导接近普适量子化热导 $\pi^2 k_B^2 T/3h$. 而在缺陷为硬物质时, 普适量子化热导看不到. 这主要是因为缺陷为硬材料, 通道和缺陷之间的界面满足硬壁边界条件, 截止频率的存在, 导致 0 模只能在一定的温度下激发. 我们还发现, 在低温区, 缺陷为空时的热导随温度的升高而减小, 而缺陷为硬物质时没有看到这种现象. 当 $T \rightarrow 0$ 时, 入射声子波长比缺陷尺寸要大, 缺陷引起的声子散射可以忽略.

接下来我们讨论缺陷大小对热导的影响. 图 3 中点线, 虚线, 实线分别代表 $t=6$ nm, $t=12$ nm, $t=18$ nm 的情形. 图 3(a), (b) 分别表示通道与缺陷之间的界面满足硬壁边界条件时总的和零模的热导. 图 3(c), (d) 分别表示通道与缺陷之间的界面满足应力自由边界条件时总的和零模的热导. 我们首先看图(a)和(b), 通道与缺陷之间的界面满足硬壁边界条件时总的和零模的热导的变化情况, 总的和 0 模的 K/T 随长度缺陷大小的增加而减小, 并且 0 模对热导的变化更敏感. 这容易理解, 因为缺陷越大, III 区对入射声子的散射越大, 声子输运系数减小, 相应地热导率减小. 随着模的指数的增加, 热导率对缺陷大小的依赖减小. 然而, 图 3(c),

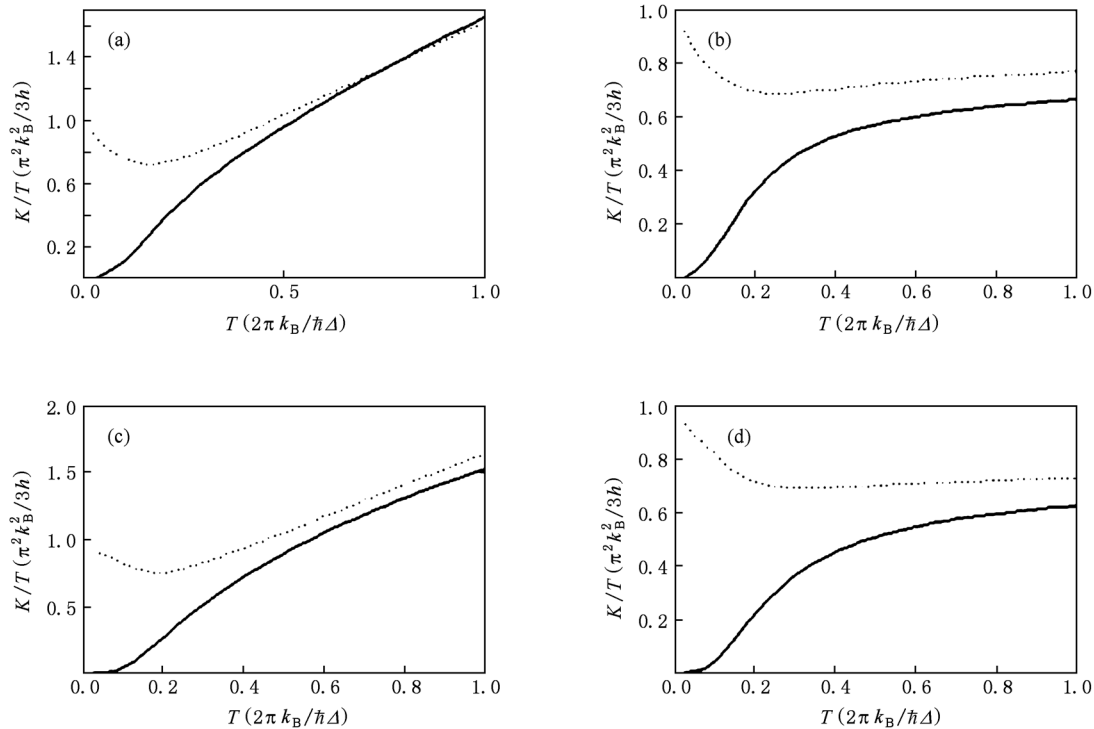


图 2 缺陷和通道之间的界面分别满足应力自由边界条件和硬壁边界条件下约化热导随约化温度的变化关系. 点线为应力自由边界条件, 虚线为硬壁边界条件. (a)和(b)表示 $t=6$ nm 时的情形; (c)和(d)表示 $t=12$ nm 时的情形

(d) 显

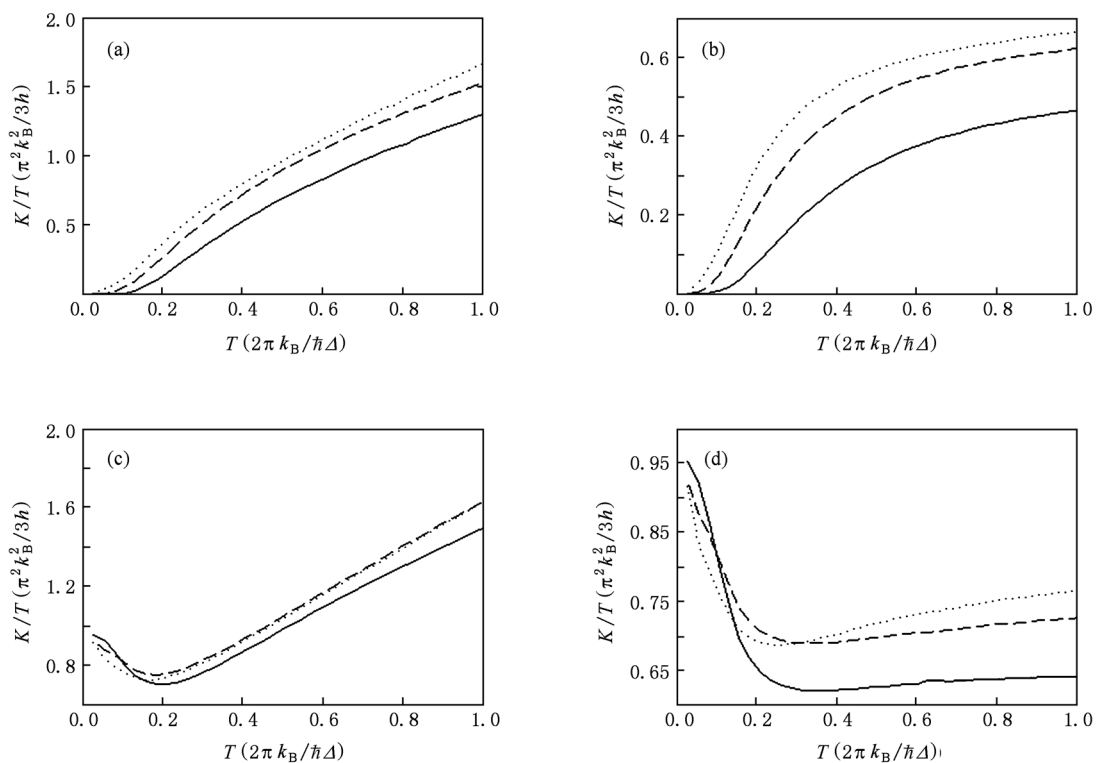


图3 量子波导腔中缺陷大小不同时约化热导随约化温度的变化关系. 点线,虚线,实线分别代表 $t=6\text{ nm}$, $t=12\text{ nm}$ 和 $t=18\text{ nm}$ (a)与(b)分别表示通道与缺陷之间的界面满足硬壁边界条件时总的和零模的热导; (c)与(d)分别表示通道与缺陷之间的界面满足应力自由边界条件时总的和零模的热导

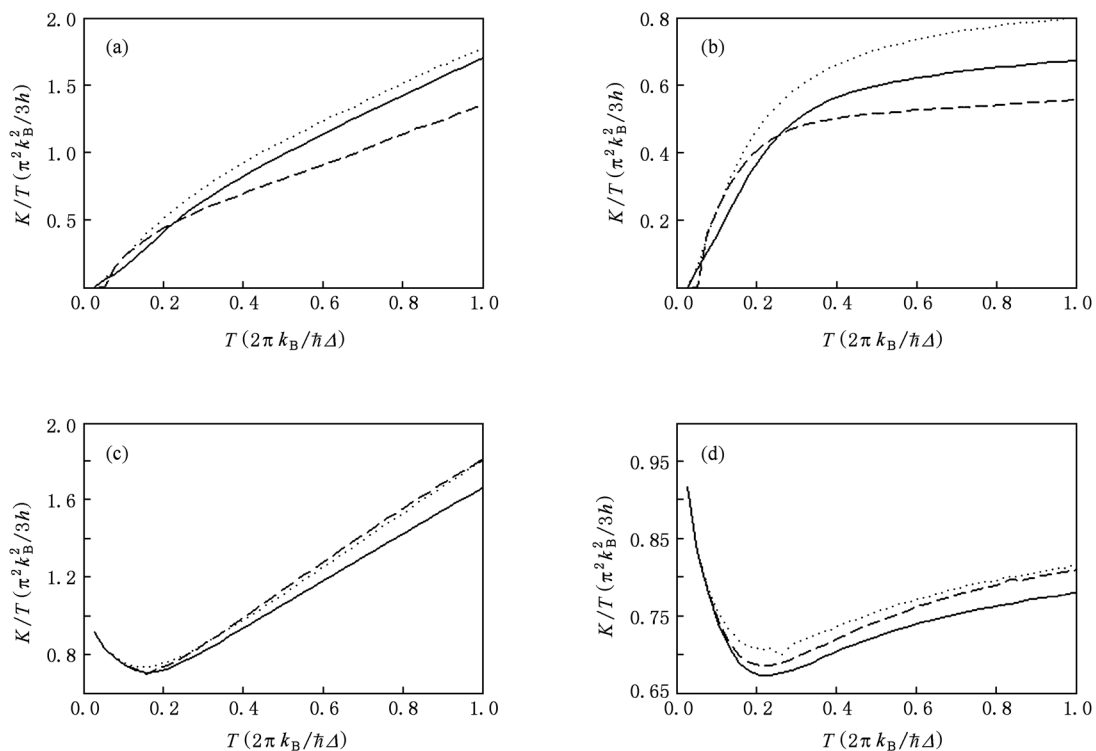


图4 量子波导腔中缺陷位置不同时约化热导随约化温度的变化关系. 点线,虚线,实线分别代表 $w_c:w_d=1:10$, $w_c:w_d=1:3$ 和 $w_c:w_d=1:1$. (a),(b)分别表示通道与缺陷之间的界面满足硬壁边界条件时总的和零模的热导; (c),(d)分别表示通道与缺陷之间的界面满足应力自由边界条件时总的和零模的热导

示的现象与图 3(a), (b) 显示的有所不同: 对较低的温度, 缺陷越大, 热导率反而越大. 对较高的温度, 零模对缺陷的大小更敏感一些, 与缺陷为硬物质类似, 缺陷越大, 热导率越小. 在较高的温度下, 缺陷为硬物质时总的 K/T 在 $t = 6 \text{ nm}$, $t = 12 \text{ nm}$ 基本上没有什么变化, 这些现象与模与模之间的耦合有关.

图 4 描述了结构缺陷从上移动到中部时时 K/T 随 $k_B T/\hbar\Delta$ 的变化: 图 4(a), (b) 分别表示通道与缺陷之间的界面满足硬壁边界条件时总的和零模的热导. 图 4(c), (d) 分别表示通道与缺陷之间的界面满足应力自由边界条件时总的和零模的热导. 从图 4 可清楚地看出, 缺陷在中央位置时热导最小, 越靠近边上, 热导越大. 这比较好理解: 缺陷在中央时, 散射是最强的, 缺陷越靠近边上, 热导越小. 对于不同的缺陷来说, 情况又有所不同. 当缺陷为硬物质时, $w_c:w_d = 1:10$ 时是最大的, 总的热导和 0 模的热导都是如此. 在低温区, $w_c:w_d = 1:1$ 时的热导小于 $w_c:w_d = 1:3$ 时的热导, 而在高一点的温度下,

$w_c:w_d = 1:1$ 时的热导大于 $w_c:w_d = 1:3$ 时的热导. 当缺陷为空时, 当结构缺陷 C 放在主线的中央位置时的热导率始终是最小的. 对 0 模来说, 缺陷越靠边, 热导越大. 而对总的热导来说, $w_c:w_d = 1:10$ 时与 $w_c:w_d = 1:3$ 时的热导没有大的差别. 与这些现象表明热导率的大小与结构缺陷 C 在主线的位 置并没有一定的规律, 它与模的指数、温度和结构参数相关.

4. 结 论

本文研究了可调缺陷对量子波导腔的热导的影响. 缺陷类型、缺陷大小及缺陷在纳米线中的位置都能改变纳米线中的热导. 当 $T \rightarrow 0$ 时, 缺陷为空的热导接近普适量子化热导. 而缺陷为硬物质时, 截止频率的存在, 0 模只能在一定的温度激发, 不能看到量子化热导. 总的说来, 缺陷越大, 热导越小, 这是因为缺陷越大, 散射越强. 缺陷位置的变化对热导的影响与温度和结构参数有关.

- [1] Wang X J, Wang L L, Huang W Q, Tang L M, Chen K Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3649 (in Chinese) [王新军、王玲玲、黄维清、唐黎明、陈克求 2006 物理学报 **55** 3649]
- [2] Huang W Q, Chen K Q, Shuai Z G, Wang L L, Hu W Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2330 (in Chinese) [黄维清、陈克求、帅志刚、王玲玲、胡望宇 2004 物理学报 **53** 2330]
- [3] Chen G 1998 *Phys. Rev. B* **57** 14958
- [4] Simkin M V, Mahan G D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 927
- [5] Glavin B A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 4318
- [6] Zou J, Balandin A 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 2932
- [7] Fon W, Schwab K C, Worlock J M, Roukes M L 2002 *Phys. Rev. B* **66** 045302
- [8] Li D Y, Wu Y Y, Kim P, Shi L, Yang P D, Majumdar A 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 2934
- [9] Chiatti O, Nicholls J T, Proskuryakov Y Y, Lumpkin N, Farrer I, Ritchie D A 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 056601
- [10] Wang J, Wang J S 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 241908
- [11] Peng X F, Chen K Q, Wan Q, Zou B S, Duan W H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 195317
- [12] Li B W, Wang L, Hu B B 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 223901
- [13] Wang J S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 160601
- [14] Kim P, Shi L, Majumdar A, McEuen P L 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 215502
- [15] Mingo N, Broido D A 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 096105
- [16] Chiu H Y, Deshpande V V, Ch. Postma H W, Lau C N, Miko C, Forro L, Bockrath M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226101
- [17] Wang J S, Wang J, Zeng N 2006 *Phys. Rev. B* **74** 033408
- [18] Yamamoto T, Nakazawa Y, Watanabe K 2007 *New J. Phys.* **9** 245
- [19] Mingo N, Stewart D A, Broido D A, Srivastava D 2008 *Phys. Rev. B* **77** 033418
- [20] Song D, Chen G 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 687
- [21] Chen D Z A, Narayanaswamy A, Chen G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 155435
- [22] Satio K, Nakamura J, Natori A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 115409
- [23] Morooka M, Yamamoto T, Watanabe K 2008 *Phys. Rev. B* **77** 033412
- [24] Rego L G C, Kirczenow G 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 232
- [25] Schwab K, Henriksen E A, Worlock J M, Roukes M L 2000 *Nature (London)* **404** 974
- [26] Cross M C, Lifshitz R 2001 *Phys. Rev. B* **64** 85324
- [27] Li W X, Chen K Q, Duan W H, Wu J, Gu B L 2003 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** 3027
- [28] Chang C M, Geller M R 2005 *Phys. Rev. B* **71** 125304
- [29] Santamore D H, Cross M C 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 115502
- [30] Santamore D H, Cross M C 2001 *Phys. Rev. B* **63** 184306
- [31] Chen K Q, Li W X, Duan W H, Shuai Z, Gu B L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045422
- [32] Nie L Y, Wang L L, Zhao L H, Huang W Q, Tang L M, Wang X J, Chen K Q 2006 *Phys. Lett. A* **359** 234
- [33] Li W X, Chen K Q, Duan W H, Wu J, Gu B L 2004 *J. Phys. : Condens. Matter* **16** 5049

- [34] Huang W Q, Chen K Q, Shuai Z, Wang L L, Hu W Y, Zou B S 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 093524
- [35] Tang L M, Wang L L, Chen K Q, Huang W Q, Zou B S 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 163505
- [36] Cross M C, Lifshitz R 2001 *Phys. Rev. B* **64** 85324
- [37] Huang W Q, Chen K Q, Shuai Z, Wang L L, Hu W Y 2005 *Phys. Lett. A* **336** 245
- [38] Peng X F, Chen K Q, Zou B S, Zhang Y 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 193502
- [39] Tang L M, Wang Y, Wang D, Wang L L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 437 (in Chinese) [唐黎明、王艳、王丹、王玲玲 2007 物理学报 **56** 437]
- [40] Xie F, Chen K Q, Wang Y G, Zhang Y 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 084501
- [41] Xie F, Chen K Q, Wang Y G, Wan Q, Zou B S, Zhang Y 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 054312
- [42] Yao L J, Wang L L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3100 (in Chinese) [姚凌江、王玲玲 2008 物理学报 **57** 3100]
- [43] Blencowe M P 1999 *Phys. Rev. B* **59** 4992
- [44] Joe Y S, Cosby R M, Dharma-Wardana M W C, Ulloa S E 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 4676

Effects of controllable defects on thermal conductance in a nanowire with a quantum box*

Nie Liu-Ying[†] Li Chun-Xian Zhou Xiao-Ping Cheng Fang Wang Cheng-Zhi

(School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 23 November 2010; revised manuscript received 28 January 2011)

Abstract

By using the scattering-matrix method and the scalar model of elasticity, we investigate the effect of controllable defects on low temperature thermal conductance in a nanowire with a quantum box geometry. It is found that the thermal conductance can be controlled by adjusting the parameters of the defects. The size and the position of the defect can induce the variation in thermal conductance. It is also found that the behavior of the thermal conductance versus temperature is different for different types of defects.

Keywords: acoustic phonon transport, thermal conductance, quantum structure

PACS: 63.22.+m, 44.10.+i, 73.23.Ad

* Project supported by the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 09JJ5005) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10947134, 11004017).

[†] E-mail: nieliuying@163.com