

螺旋纳米带中的声子输运*

金蔚 惠宁菊 屈世显†

(陕西师范大学理论与计算物理所, 物理与信息技术学院, 西安 710062)

(2010年3月4日收到; 2010年4月9日收到修改稿)

运用微分几何方法及形式散射理论, 研究螺旋纳米带中的标量声子输运问题, 计算了声子透射系数及热导率. 数值结果表明, 弯曲导致了声子模式之间的量子干涉, 使总透射系数随能量变化的量子化台阶呈现振荡行为, 有效地抑制了热导率.

关键词: 螺旋纳米带, 声子输运, 形式散射理论, 微分几何方法

PACS: 63.22.-m, 68.65.-k, 65.80.+n

1. 引言

现代微制造技术及超低温技术的发展使得人们探索介观体系的物理性质成为可能. 随着器件尺寸减小到纳米量级, 人们发现了一系列特殊的新现象. 纳米尺度物理现象的研究已经成为凝聚态物理学的热点问题^[1-3], 而低温下纳米结构中的声子输运现象研究是其非常活跃的领域之一. 介观体系中声子输运是一种弹道学传输过程, 并且声子和声子间发生弹性散射而不是非弹性散射, 因此描述热输运性质的经典傅里叶定律和热传导方程已经不成立了, 必须代之以量子理论. 介观热传输更多地显示出量子效应, 如热导量子化, 量子涨落, 量子相干等^[4-6]. 这些新奇的特征激发了理论工作者的极大兴趣, 人们广泛研究了诸如纳米管^[7-9], 纳米线^[10-13], 超晶格^[14], 以及量子波导^[15-23]等纳米结构中的声子输运问题.

随着各种基于蒸发沉积技术的合成方法之使用, 科学家可以方便地制备各种形态的纳米带结构, 例如弯曲纳米带, 螺旋状纳米带, 扭曲纳米带等^[24]. 纳米带结构具有非常独特的物理性质, 在电子力学传感器和光电器件等领域具有潜在的应用前景^[19-27]. 纳米带实际上是典型的量子波导, 其中的电子和声子输运行为研究是其物理性质研究的重要方面. 纳米波导和弯曲纳米结构中电子输运行

为的研究已经有大量的工作^[28], 但其中声子输运现象的研究却相对稀少, 近年来已经引起研究者的重视^[15-23]. 与电导率的 Landauer 公式类似, 研究者已经得到了低温下弹道学声子输运的热导率计算方法, 并且发现了以 $\pi^2 k_B^2 T/3h$ 为单位的量子化热导率^[5,6]. 该方法通过波导中声子的传输概率计算热导率. 在声子传输概率的计算中, 研究者通常应用模式匹配方法和转移矩阵方法^[16-23]. 这些方法主要局限于由分段结构组成的波导. 对于本文所感兴趣的螺旋纳米带中标量声子输运问题, 这些方法很难实现. 因此, 引入了沿纳米带边缘的移动坐标系, 借助微分几何方法可将弯曲结构中的声子输运转化为一个平直结构上有效势场中的声子散射问题^[29]. 通过数值求解李普曼-许温格方程计算散射矩阵, 从而计算声子传输概率. 该方法提供了解决空间中连续弯曲波导结构中声子输运问题的一个通用方法.

在文章的第2部分, 我们首先给出模型和局部移动坐标系, 并导出由弯曲所导致的有效势; 然后借助形式散射理论求解李普曼-许温格方程, 得到散射矩阵; 最后导出散射矩阵与透射系数的关系, 给出热导率的计算公式. 第3部分为数值结果及讨论. 结论在第4部分给出.

2. 模型及理论方法

利用纳米合成技术, 研究者已经可以制备螺旋

* 教育部重点基金(批准号:108118)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: sxqu@snnu.edu.cn

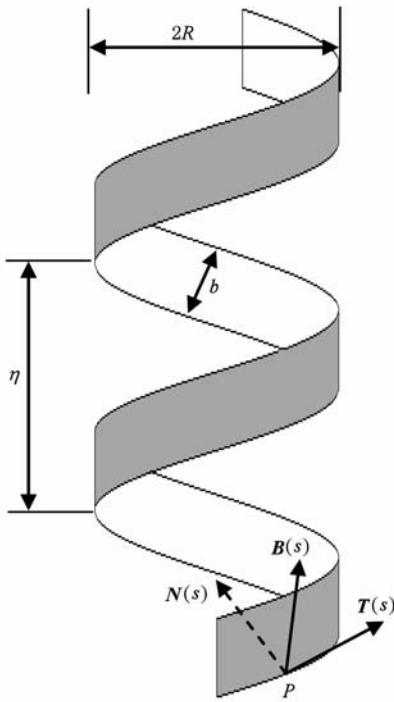


图1 螺旋纳米带结构

纳米带^[24,25],使得相应的力学性质及输运性质研究成为可能. 本文所涉及的螺旋纳米带的结构如图1所示. 其中, b 为带宽, R 为螺旋半径, η 为螺距. 人工合成的纳米带的厚度 d 通常很小, 在低温下其振动能量尺度远小于 u/d , 因此可以合理地假定该纳米带为2维流形. 一般来讲, 纳米带中可以出现弯曲振动、伸展振动、扭转振动等振动模式. 原则上可以将振动方程分解为不同方向上的标量方程, 即亥姆霍兹方程. 为方便起见, 我们仅考虑标量声子问题, 其满足的亥姆霍兹方程为

$$[\nabla^2 + \varepsilon^2 \pi^2] \Phi(\mathbf{r}) = 0, \mathbf{r} = (x, y, z), \quad (1)$$

且波函数满足无应力边界条件

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2)$$

式中, $\varepsilon = \omega b / \pi u$ 为无量纲声子能量, ω 为声子频率, u 为声速, $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ 为纳米带两边线的局部外向法线且平行于带面方向. 在本文中, 我们已经用带宽 b 重标度所有的长度量.

不难发现, 尽管亥姆霍兹方程(1)形式很简单, 但纳米带的弯曲结构使得边界条件(2)很难在直角坐标系中具体地表达. 为简化问题, 沿纳米带底边建立移动坐标系 $(\mathbf{T}(s), \mathbf{N}(s), \mathbf{B}(s))$, 借助简单的微分几何学推导, 我们将该纳米带变换为平面上宽度为 b 的2维带, 纳米带之弯曲和扭转的唯一效应是引入有效势 \hat{V} . 这样, 就可以将螺旋纳米中的声

子输运转化为平直纳米带中声子在有效势场中的散射问题, 从而可方便地利用散射理论处理. 详细的推导见下述部分.

2.1. 移动坐标系和有效势

纳米带底边任一点 P 的位置可表示为

$$\mathbf{P}(s) = (R \cos(\mu s), R \sin(\mu s), H \mu s), \quad (3)$$

式中 $H = \frac{\eta}{2\pi}$, $\mu = \frac{1}{\sqrt{R^2 + H^2}}$, s 为弧长参数. 由于

(3)式所描述的曲线是关于弧长参数的正则曲线, P 点的切向量 $\mathbf{T}(s)$, 主法向量 $\mathbf{N}(s)$, 副法向量 $\mathbf{B}(s)$ 可表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(s) &= \frac{d\mathbf{P}(s)}{ds} \\ &= (-R\mu \sin(\mu s), R\mu \cos(\mu s), H\mu), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}(s) &= \frac{d\mathbf{T}(s)/ds}{\left| \frac{d\mathbf{T}(s)}{ds} \right|} \\ &= (-\cos(\mu s), -\sin(\mu s), 0), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(s) &= \mathbf{T}(s) \times \mathbf{N}(s) \\ &= (H\mu \sin(\mu s), -H\mu \cos(\mu s), R\mu). \end{aligned} \quad (6)$$

曲率和挠率分别定义为

$$\kappa = \mu^2 R, \quad (7)$$

$$\tau = \mu^2 H. \quad (8)$$

在以 $\mathbf{T}(s), \mathbf{N}(s)$ 和 $\mathbf{B}(s)$ 为方向矢量的移动坐标系下, 如图1所示, 纳米带中任意点位移微元的模方可表示如下^[30]:

$$\begin{aligned} |\mathbf{dr}|^2 &= (dn)^2 + (db)^2 + [(1 - \kappa n)^2 \\ &\quad + \tau^2(n^2 + b^2)](ds)^2 \\ &\quad + 2\tau(ndb - bdn)ds, \end{aligned} \quad (9)$$

式中 n, b, s 分别为与矢量 $\mathbf{N}, \mathbf{B}, \mathbf{T}$ 方向对应的位置坐标. 显然, 挠率的存在造成坐标系 $(\mathbf{T}(s), \mathbf{N}(s), \mathbf{B}(s))$ 的非正交性. 为得到正交坐标系下的拉普拉斯算符, 我们作如下坐标变换:

$$\begin{aligned} n &= \nu \cos \varphi - \beta \sin \varphi, \\ b &= \nu \sin \varphi + \beta \cos \varphi, \end{aligned} \quad (10)$$

上式扭角 φ 满足 $\varphi(s) = -\tau \cdot s$. 这样, (9)式可变为

$$(\mathbf{dr})^2 = h_1^2 (d\nu)^2 + h_2^2 (d\beta)^2$$

$$+ h_3^2 (ds)^2, \quad (11)$$

其中, 度规因子可表示为

$$\begin{aligned} h_1 &= 1, \quad h_2 = 1, \\ h_3 &= 1 - \kappa(\nu \cos \varphi - \beta \sin \varphi). \end{aligned} \quad (12)$$

则在正交坐标系 (ν, β, s) 下的拉普拉斯算符可

表示为

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \nu^2} + \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \frac{\partial^2}{\partial s^2} - \hat{V}(\nu, \beta, s), \quad (13)$$

其中算符 $\hat{V}(\nu, \beta, s)$ 为有效势, 其表达式如下:

$$\begin{aligned} \hat{V}(\nu, \beta, s) = & \left\{ 1 - \frac{1}{[1 - \kappa(\nu \cos \varphi - \beta \sin \varphi)]^2} \right\} \frac{\partial^2}{\partial s^2} \\ & - \frac{\kappa \tau (\beta \cos \varphi + \nu \sin \varphi)}{[1 - \kappa(\nu \cos \varphi - \beta \sin \varphi)]^3} \frac{\partial}{\partial s} \\ & + \frac{\kappa \cos \varphi}{1 - \kappa(\nu \cos \varphi - \beta \sin \varphi)} \frac{\partial}{\partial \nu} \\ & - \frac{\kappa \sin \varphi}{1 - \kappa(\nu \cos \varphi - \beta \sin \varphi)} \frac{\partial}{\partial \beta}. \end{aligned} \quad (14)$$

对于纳米带, 可以忽略 ν 维度, 则声子所满足的亥姆霍兹方程变为

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \right) \Phi(s, \beta) + \varepsilon^2 \pi^2 \Phi(s, \beta) \\ = \hat{V} \Phi(s, \beta), \end{aligned} \quad (15)$$

相应的边界条件变为

$$\frac{\partial \Phi(s, \beta)}{\partial \beta} \Big|_{\beta=0} = \frac{\partial \Phi(s, \beta)}{\partial \beta} \Big|_{\beta=1} = 0. \quad (16)$$

这里, 有效势 \hat{V} 的表达式变为

$$\begin{aligned} \hat{V} = & \left\{ 1 - \frac{1}{[1 - \kappa \beta \sin(\tau s)]^2} \right\} \frac{\partial^2}{\partial s^2} \\ & + \frac{\kappa \sin(\tau s)}{1 - \kappa \beta \sin(\tau s)} \frac{\partial}{\partial \beta} \\ & - \frac{\kappa \tau \beta \cos(\tau s)}{[1 - \kappa \beta \sin(\tau s)]^3} \frac{\partial}{\partial s}, \end{aligned} \quad (17)$$

在小曲率近似下, 即 $\kappa \ll 1$ 时, 对上式进行泰勒展可得近似的有效势

$$\begin{aligned} \hat{V} \approx & -2\kappa \beta \sin(\tau s) \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \kappa \sin(\tau s) \frac{\partial}{\partial \beta} \\ & - \kappa \tau \beta \cos(\tau s) \frac{\partial}{\partial s}. \end{aligned} \quad (18)$$

2.2. 非微扰态的函数

在无有效势场情况下, 方程(15)给出非微扰态的波函数

$$|n\sigma\varepsilon\rangle = c_{n\varepsilon} \cdot \cos(n\pi\beta) \cdot e^{i\sigma k_{n\varepsilon}s}. \quad (19)$$

满足如下正交完备关系:

$$|n'\sigma'\varepsilon'\rangle |n\sigma\varepsilon\rangle = \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (20)$$

$$|n\sigma\varepsilon\rangle \langle n\sigma\varepsilon| = 1. \quad (21)$$

其中, n, σ, ε 为三个量子数. 沿弧长方向的波数为

$$k_{n\varepsilon} = \pi \sqrt{\varepsilon^2 - n^2}, \quad (22)$$

归一化系数为

$$c_{n\varepsilon} = \sqrt{\frac{2 - \delta_{n,0}}{2}} \left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - n^2}} \right)^{1/2}, \quad (23)$$

手性标记为

$$\sigma = \begin{cases} +1, & \text{向} +s \text{ 方向传播,} \\ -1, & \text{向} -s \text{ 方向传播,} \end{cases} \quad (24)$$

色散关系如图2所示. 对给定能量 ε 的声子, 其通道指标 n 可以取如下整数:

$$n = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (25)$$

其中

$$N(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta[(\varepsilon^2 - n^2)\pi^2] - 1. \quad (26)$$

式中 $\Theta(x)$ 是单位阶跃函数.

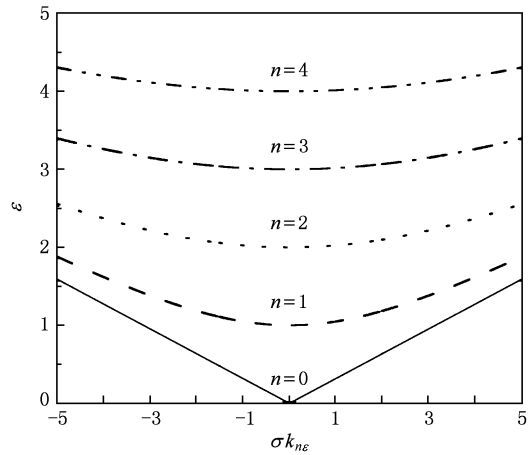


图2 非微扰态的色散关系

2.3. 李普曼-许温格方程和散射矩阵

根据形式散射理论, 方程(15)的出射态和入射态满足的李普曼-许温格方程如下:

$$|\Psi^+\rangle = |\Phi\rangle + \hat{G}_0(\varepsilon) \hat{V} |\Psi^+\rangle, \quad (27)$$

$$\langle\Psi^-| = \langle\Phi| + \langle\Psi^-| \hat{V} \hat{G}_0(\varepsilon), \quad (28)$$

它们分别由 $\pm\infty$ 处的未受扰动的态矢量 $|\Phi\rangle$ 和 $\langle\Phi|$ 演化而来. 此处的非微扰格林算符 \hat{G}_0 为

$$\hat{G}_0(\varepsilon) = \frac{1}{\nabla^2 + \varepsilon^2 \pi^2 + i\gamma}, \quad \gamma \rightarrow 0^+. \quad (29)$$

自洽迭代方程(28)可得

$$\langle\Psi^-| = \langle\Phi| + \langle\Phi| \hat{V} \hat{G}(\varepsilon), \quad (30)$$

其中全格林算符 \hat{G} 为

$$\hat{G}(\varepsilon) = \frac{1}{(\nabla^2 - \hat{V}) + \varepsilon^2 \pi^2 + i\gamma}. \quad (31)$$

定义 S 矩阵

$$\langle \Phi' | \hat{S} | \Phi \rangle = \langle \Psi^- | \Psi^+ \rangle. \quad (32)$$

利用(27)式, (30)式, 及恒等式 $\lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \gamma/x^2 + \gamma^2 = \pi\delta(x)$ 可以得到散射矩阵

$$\begin{aligned} & \langle \Phi' | \hat{S} | \Phi \rangle \\ &= \langle \Phi' | \Phi \rangle - \frac{i}{\pi\varepsilon} \langle \Phi' | \hat{T} | \Phi \rangle \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \end{aligned} \quad (33)$$

其中算符 \hat{T} 满足 Dyson 方程

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{T}. \quad (34)$$

在本文中我们选择 2.2 节所得的非微扰态函数为基矢, 得到相应的矩阵形式

$$\begin{aligned} & \langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{S} | n\sigma\varepsilon \rangle \\ &= \delta_{nn'}\delta_{\sigma\sigma'}\delta(\varepsilon - \varepsilon') \\ & - \frac{i}{\pi\varepsilon} \langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{T} | n\sigma\varepsilon \rangle \delta(\varepsilon - \varepsilon') \end{aligned} \quad (35)$$

和

$$\begin{aligned} & \langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{T} | n\sigma\varepsilon \rangle \\ &= \langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{V} | n\sigma\varepsilon \rangle + \langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{V}\hat{G}_0(\varepsilon)\hat{T} | n\sigma\varepsilon \rangle \\ &= \langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{V} | n\sigma\varepsilon \rangle \\ & + \frac{1}{\pi^2} \sum_{n\sigma} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{V} | \tilde{n}\tilde{\sigma}\tilde{\varepsilon} \rangle \langle \tilde{n}\tilde{\sigma}\tilde{\varepsilon} | \hat{T} | n\sigma\varepsilon \rangle}{-\tilde{\varepsilon}^2 + \varepsilon^2 + i\gamma}. \end{aligned} \quad (36)$$

2.4. 透射系数及热导

需指出的是, (35)式的 S 矩阵关于能量是对角的, 因此可写为

$$\begin{aligned} & \langle n'\sigma'\varepsilon' | \hat{S} | n\sigma\varepsilon \rangle \\ &= \langle n'\sigma' | \tilde{S}(\varepsilon) | n\sigma \rangle \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \end{aligned} \quad (37)$$

这样, 在(35)式两边对能量积分后得到

$$\begin{aligned} & \langle n'\sigma' | \tilde{S}(\varepsilon) | n\sigma \rangle \\ &= \delta_{nn'}\delta_{\sigma\sigma'} - \frac{i}{\pi\varepsilon} \langle n'\sigma'\varepsilon | \hat{T} | n\sigma\varepsilon \rangle. \end{aligned} \quad (38)$$

从入射态 $|n\sigma\varepsilon\rangle$ 散射到出射态 $|n'\sigma'\varepsilon\rangle$ 和 $\langle n'\sigma'\varepsilon |$ 的透射和反射概率幅分别为

$$t_{n'n}(\varepsilon) = \langle +1n' | \tilde{S}(\varepsilon) | +1n \rangle, \quad (39)$$

$$r_{n'n}(\varepsilon) = \langle -1n' | \tilde{S}(\varepsilon) | +1n \rangle, \quad (40)$$

它们满足以下关系:

$$\sum_{n'} (|t_{n'n}|^2 + |r_{n'n}|^2) = 1. \quad (41)$$

对于声子来说, 我们关注的是决定其热传输性质的透射系数^[4]

$$T_{n'n}(\varepsilon) = \frac{k_{n\varepsilon}}{k_{n'\varepsilon}} |t_{n'n}|^2. \quad (42)$$

其总透射系数为

$$\Gamma = \sum_{n,n'} T_{n'n}(\varepsilon). \quad (43)$$

至此, 我们就可以利用文献[6]中的公式计算声子的热导率, 即

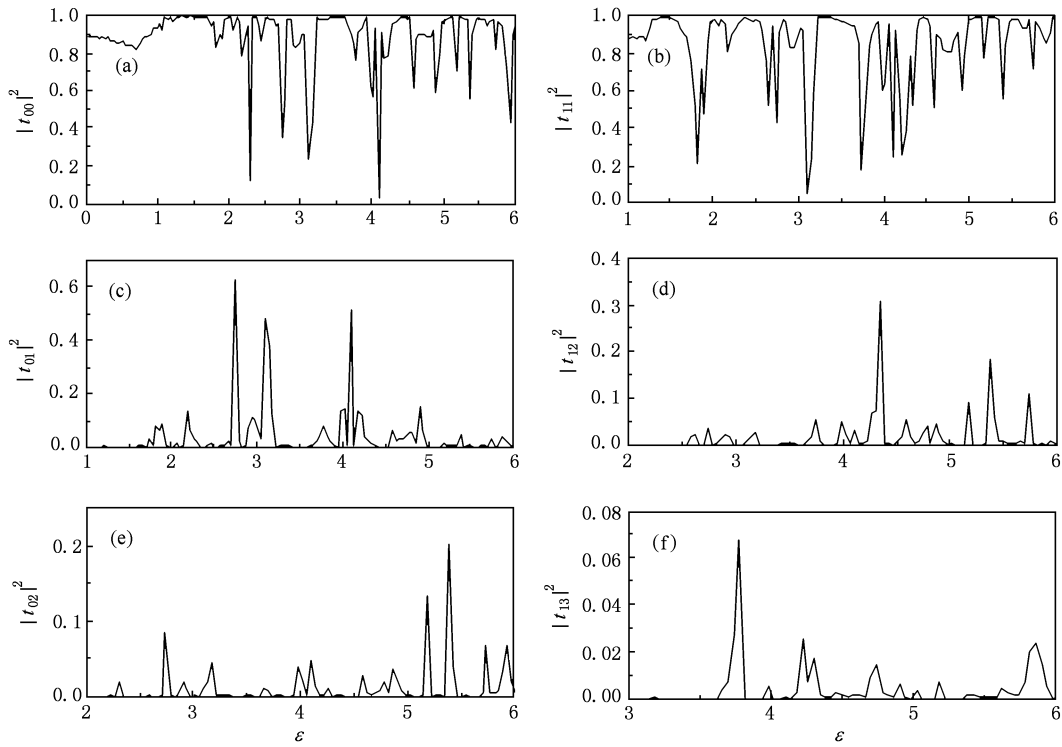
$$G_{\text{th}} = \frac{\pi k_B^2 T}{6\hbar} \sum_{n,n'} \int_0^\infty dx \frac{3xe^x}{\pi^2(e^x - 1)^2} T_{n',n}(x), \quad (44)$$

式中 $x = \varepsilon/k_B T$, T 为平均温度.

3. 结果与讨论

在数值计算中我们选定的材料参数如下: 声速选为 $u = 8.5 \times 10^5$ cm/s (硅中的声速), 弧长 s 设定在 $[-L/2, L/2]$ 范围内, 其中, $L = 100$, 纳米带宽 $b = 200$ nm. 能量间隔为 $\Delta\varepsilon = 0.04$, 截断能量为 $\varepsilon_c = 15$. 图 3 给出了 $R = 3, H = 4$ (此时 $\kappa = 0.12, \tau = 0.16$) 情况下, 透射概率 $|t_{n'n}|^2$ 随能量的变化图. 可以看出, 透射概率随能量增加呈振荡变化, 明显地展示了声子模式之间的量子干涉. 如果使用本文的语言, 则该结果显示了声子在弯曲所造成的有效势场中的共振透射结构. 仔细观察图中所示结果, 我们发现透射主要发生在具有相同模式的态之间, 即 $n = n'$ 的情况. $|n - n'|$ 较小的两个模式间具有较大的透射概率, 况且 $|n - n'|$ 为偶数的两个模式间透射概率较 $|n - n'|$ 为奇数的两个模式间的透射概率值小. 这种结果是由于有效散射势(18)式的奇宇称性质决定的. 为说明这一点, 我们考虑一级玻恩近似情况下的透射概率

$$|t_{nn'}|^2 = \begin{cases} \left[1 - \frac{\kappa \sin(\tau L/2)}{2}\right]^2, & n = n', \\ 0, & n \neq n' \text{ 且 } |n - n'| \text{ 为偶数,} \\ A^2 \cos^2\left(\frac{\tau L}{2}\right) \sin^2\left[\frac{(k - k')L}{2}\right] + B^2 \sin^2\left(\frac{\tau L}{2}\right) \cos^2\left[\frac{(k - k')L}{2}\right] \\ \quad + \frac{AB}{2} \sin(\tau L) \sin[(k - k')L], & n \neq n' \text{ 且 } |n - n'| \text{ 为奇数,} \end{cases} \quad (45)$$


 图3 $R=3, H=4$ 情况下透射概率随声子能量变化图

其中, k' 和 k 分别对应于能量本征态 $|n'\sigma'\epsilon\rangle$ 和 $|n\sigma\epsilon\rangle$ 的沿传播方向的波数, 系数 A 和 B 分别为

$$\begin{aligned}
 A &= - \frac{(2 - \delta_{n0})(2 - \delta_{n'0})}{kk'} \\
 &\times \frac{2\kappa\tau}{(k - k')^2 - \tau^2} \left[n^2 - \frac{k(k + k')}{(n'^2 - n^2)\pi^2} \right], \\
 B &= \frac{(2 - \delta_{n0})(2 - \delta_{n'0})}{kk'} \frac{2\kappa}{(k - k')^2 - \tau^2} \\
 &\times \frac{1}{(n'^2 - n^2)^2 \pi^2} \\
 &\times \{ k\tau^2(n'^2 + n^2) \\
 &- [(k - k')[2k^2(n'^2 + n^2) \\
 &- n^2(n'^2 - n^2)\pi^2] \}.
 \end{aligned}$$

上述解析结果告诉我们, 在一级玻恩近似下, 具有相同模式的态之间具有较大的透射概率; $|n - n'|$ 为奇数的两个模式间的透射呈现量子干涉效应, $|n - n'|$ 为偶数的两个模式间的透射是禁戒的. 需要指出的是, 在一级玻恩近似下相同模式的态之间的透射概率不随能量变化显然与实际情况不符. 但当加入更多的高阶项后, 将像数值结果一样显示出量子干涉效应. 而这里所得到的 $|n - n'|$ 为偶数的两个模式间的禁戒透射对应于数

值结果中 $|n - n'|$ 为偶数时较小的透射概率.

为了显示弯曲对总透射系数的影响, 图 4 给出 $R = 3, H = 3, 4, 5, 6$ 时 (其曲率和挠率分别为 $\kappa_1 = 0.1667, \tau_1 = 0.1667; \kappa_2 = 0.12, \tau_2 = 0.16; \kappa_3 = 0.0882, \tau_3 = 0.1471, \kappa_4 = 0.0667, \tau_4 = 0.1333$). 总的透射系数 Γ 随能量的变化图, 分别对应图 4 (d), (c), (b) 和 (a). 由图可知, 总透射系数随能量 ϵ 的变化呈现具有振荡行为的台阶状结构, 且在整数能量处出现跃变. 这里台阶结构的出现是由于能量每增加一个单位, 一个新的振动模式就会出现, 更多的散射通道被打开, 因而造成透射系数的跃升. 比较图 4(a), (b), (c) 和 (d) 可知, 随着弯曲程度的增加 (即曲率和挠率的同时增大) 透射系数随能量的振荡变得剧烈, 量子台阶也逐渐模糊, 并且透射系数随之变小. 这是由于弯曲的增强促使有效势场变强, 从而造成入射声子更多地被反射, 更多的人射与反射模式间发生量子干涉所致.

在图 5 中, 我们给出 $R = 3, H = 4, 5, 6$ 情况下的总热导率随温度的变化情况, 其中 $G_q = \pi^2 k_B^2 T / 3h \approx 0.95T \text{ pW K}^{-2}$ 为热导量子. 可以发现, 弯曲纳米带中的总热导率总是小于直纳米带中的热导率, 表明弯曲会抑制纳米带中的热导. 在 $T \rightarrow 0$

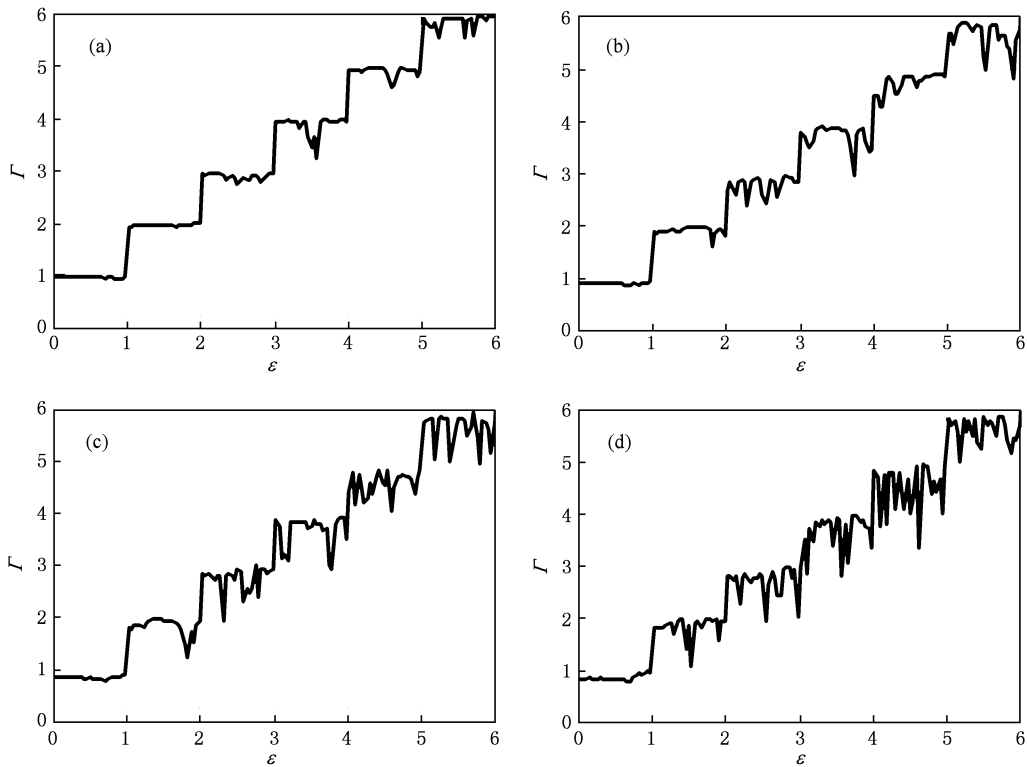


图4 总透射系数随声子能量的变化 (a),(b),(c),(d)分别对应 $H=6,5,4,3$ 情况(这里 $R=3$)

K 时,弯曲纳米带的约化热导趋于 1. 这是由于在极低温下,只有 $n = 0$ 模式的声子被激发,况且由于其波长远远大于有效散射长度,因而有效势场对于声子的散射可以忽略^[16,21,22]. 实际上,当声子的能量趋于零时的振动相当于一种刚体运动^[29],因而没有散射发生. 随着温度的升高,有效势(弯曲)对于 $n = 0$ 模式声子的反射逐渐加强,因此我们可以在图 5 中观察到热导率随温度的下降. 当温度进一步升高时,更多 $n > 0$ 的声子模式开通,将抵制这种下降,因此我们可以观察到热导率极小值. 当温度进一步增加的时候,出现热导率随温度的单调增加.

4. 结 论

本文通过建立沿纳米带边缘的移动坐标系,借助微分几何方法将螺旋纳米带中标量声子输运问题转化为一个平直纳米带内有效势场中的声子散射问题. 通过数值求解李普曼-许温格方程、计算散射矩阵和声子传输概率. 尽管该方法是以螺旋纳米带为基础给出的,但它可以直接应用于解决空间中连续弯曲纳米带中的声子输运问题,是一个通用方法. 实例计算显示:螺旋纳米带中声子透射呈现量

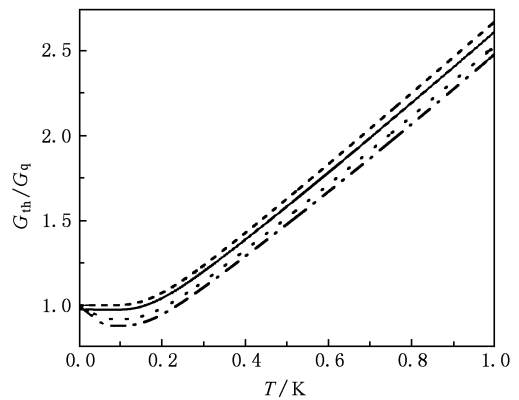


图5 约化热导率随温度的变化(虚线为理想情况下,即直带中的热导;实线、点画线和虚点线分别对应 $H=6,5,4$. 其中 $R=3$, G_q 为热导量子)

子干涉效应,声子透射主要发生在任意 $n = n'$ 的声子模式间. 由于有效势场的奇宇称性质, $|n - n'|$ 为偶数的模式间透射概率较 $|n - n'|$ 为奇数的透射概率值小. 弯曲(有效势场)造成了声子的反射,拟制其透射过程,从而拟制热导率;入射和反射声子间的量子干涉导致总透射系数随能量的变化呈现具有振荡行为的台阶状结构. 这些结果表明我们可以通过调节螺旋带的参数来控制纳米结

构的热导,从而可以为设计和应用具有特定功能的量子器件提供理论参考依据。

- [1] Datta S 1997 *Electronic Transport in Mesoscopic System* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [2] Imry Y 1997 *Introduction to Mesoscopic Physics* (New York: Oxford Press)
- [3] Ma Z S 2006 *Physics* **28** 753 (in Chinese) [马中水 2006 物理 **28** 753]
- [4] Schwab K, Henriksen E A, Worlock J M, Roukes M L 2000 *Nature* **404** 974
- [5] Cross M C, Lifshitz R 2001 *Phys. Rev. B* **64** 085324
- [6] Blencowe M P 1999 *Phys. Rev. B* **59** 4992
- [7] Kim P, Shi L, Majumdar A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 215502
- [8] Hou Q W, Cao B Y, Guo Z Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7809 [侯泉文、曹炳阳、过增元 2009 物理学报 **58** 7809]
- [9] Wang J L, Xiong G P, Gu M, Zhagn X, Liang J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4536 [王建立、熊国平、顾明、张兴、梁吉 2009 物理学报 **58** 4536]
- [10] Zou J, Balandin A 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 2932
- [11] Yang R G, Chen G, Dresselhaus M S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 125418
- [12] Gu X K, Cao B Y 2007 *Chin. J. Phys.* **B 16** 3777
- [13] Zhang Y Q, Shi Y, Fu L, Zhang R, Zheng Y D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5198 [张轶群、施毅、濮林、张荣、郑有焘 2008 物理学报 **57** 5198]
- [14] Simkin M V, Mahan G D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 927
- [15] Yang P, Sun Q F, Guo H, Hu B 2007 *Phys. Rev. B* **75** 235319
- [16] 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]
- [17] Tang L M, Wang Y, Wang D, Wang L L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 437 [唐黎明、王艳、王丹、王玲玲 2007 物理学报 **56** 437]
- [18] Huang W Q, Chen K Q, Shuai Z, Wang L L, Hu W Y 2005 *Phys. Lett. A* **336** 245
- [19] Wang X J, Gong Z Q, He M D, Chen K Q, Wang L L 2008 *Physica E* **40**, 3014
- [20] Lu J D, Yi L, Li J X, Sun Y Z, Zhao H 2006 *Commun. Theor. Phys.* **46** 568
- [21] Lu J D, Hou Y L, Shao L, Yi L 2008 *Solid-State Elect.* **52** 37
- [22] Ming Y, Wang Z X, Ding Z J 2006 *Phys. Lett. A* **350** 302
- [23] Li W X, Chen K Q 2006 *Phys. Lett. A* **357** 378
- [24] Wang Z L 2004 *Materials Today* **7** 26
- [25] Wang Z L 2004 *Nanowires and Nanobelts* (Beijing: Tinghua University Press)
- [26] Zhang Y Z, Wu L X, Xu L L 2008 *J. Chem. Phys.* **129** 164702.
- [27] Bao L H, Li C, Tian Y 2008 *Chin. J. Phys.* **B 17** 4247
- [28] Londergan J T, Carini J P, and Murdock D P 1999 *Binding and Scattering in Two-Dimensional Systems: Applications to Quantum Wires, Waveguides, and Photonic Crystals* (Berlin: Springer-Verlag)
- [29] Qu S X, Geller M R 2004 *Phys. Rev. B* **70** 085414
- [30] Lewin L, Chang D C, Kuester E F 1977 *Electromagnetic waves and curved structures* (Stevenage: Peter Peregrinus Ltd)

Phonon transport through helix nanobelts^{*}

Jin Wei Hui Ning-Ju Qu Shi-Xian[†]

(Institute of Theoretical & Computational Physics, School of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China)

(Received 4 March 2010; revised manuscript received 9 April 2010)

Abstract

Scalar phonon transport in helix nanobelts is studied by employing differential geometry method and formal scattering theory. Phonon transmission coefficients and thermal conductance are calculated. The numerical results reveal that curvature and torsion induce quantum interference between phonon modes, which makes the quantized stairs of the total transmission coefficient exhibit oscillation behavior which in turn suppresses the thermal conductance considerably.

Keywords: helix nanobelt, phonon transport, formal scattering theory, differential geometry method

PACS: 63.22.-m, 68.65.-k, 65.80.+n

^{*} Project supported by the Research Foundation from the Ministry of Education of China (Grant No. 108118).

[†] Corresponding author. E-mail: sxqu@snnu.edu.cn