

文章编号: 1007- 2985(2009) 06- 0059- 05

放大和收窄量子波导中的声学声子输运和热导率*

叶伏秋^{1,2}, 彭小方²

(1. 吉首大学物理科学与信息工程学院, 湖南 吉首 416000; 2. 湖南大学应用物理系, 湖南 长沙 410082)

摘 要: 运用散射矩阵方法, 研究了在低温下量子波导宽度变化和长度 L 的变化对声学声子输运系数的影响. 数值结果表明: 当介电量子波导的宽度变化不大时, 声学声子透射系数几乎不随宽度变化长度 L 的变化而变化; 当介电量子波导的宽度变化比较大时, 声学声子透射系数随长度 L 的增大而增大; 当温度很低时, 介电量子波导的宽度变化对热导率几乎没有影响, 当温度升高时, 热导率随长度 L 的增大而增大.

关键词: 声子输运; 热导率; 散射矩阵法

中图分类号: O422

文献标识码: A

随着微加工工艺和技术的发展, 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^[1-4], 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^[5-13]. 近几年来, 在各种纳米结构中, 包括纳米薄膜^[8-9]、量子阱^[10]、超晶格^[11]、纳米线^[12-13] 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运输的有效途径^[14-15]. 最近 Li 等运用散射矩阵方法研究了量子波导结构中的声子透射^[16-17], 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^[18-19], 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^[20-22], 结构不连续对声子输运性质的影响都没有被完全揭示. 笔者运用散射矩阵方法研究了如图 1 所示的量子波导宽度的放大和收窄对声学声子输运性质的影响.

1 模型的建立

在图 1 所示的量子波导结构中, 笔者分别考虑了由宽到窄的收窄波导和由窄到宽的放大波导, 其横向宽度为 a_1 、 a_2 , 宽度变化处的纵向长度为 L .

在这种量子波导中, 存在着 3 种声学模式: 纵向偏振的 P 模式、垂直方向偏振的 SV 模式和水平方向偏振的剪切 SH 模式. 在量子波导中传播时, P 模式和 SV 模式由于界面的反射而发生模式转换, 从而在反射波和透射波中出现 P 模式和 SV 模式的模式混合, 而模式混合在低温下对热导率的影响非常小. 因此笔者只讨论在低温下 SH 模式的声学声子热输运特

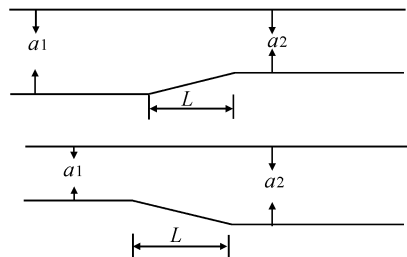


图 1 收窄和放大量子波导结构示意图

* 收稿日期: 2009- 07- 11

作者简介: 叶伏秋(1967-), 男, 湖南益阳人, 吉首大学物理科学与信息工程学院副教授, 湖南大学硕士生, 主要从事凝聚态物理研究.

性.

对于由宽到窄的收窄波导和由窄到宽的放大波导,其热导率可采用如下形式^[20-21]:

$$K = \frac{2}{k_B T^2} \frac{1}{m} \sum_m \left(\frac{e^{-\beta \hbar \omega_m}}{(e^{-\beta \hbar \omega_m} - 1)^2} \right) \quad (1)$$

其中: $m(\omega)$ 是频率为 ω 的 m 模式的透射系数; ω_m 是第 m 个模式的截止频率; $\beta = 1/(k_B T)$; k_B 是波耳兹曼常数; T 是温度; \hbar 是普朗克常数. 显然只要知道了透射系数 $m(\omega)$, 就能确定热导率 K .

在弹性近似下, SH 波的波动方程为

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} = 0. \quad (2)$$

其中: SH 波速 $v_{SH} = \sqrt{C_{44}/\rho}$, 且 C_{44} 是弹性硬度系数, ρ 是物质密度. 按照应力自由边界条件 $\hat{n} = 0$, SH 波在任意区域 Ω 的波函数为

$$\psi_n(x, y) = - \frac{1}{k_n} (A_n e^{i k_n x} + B_n e^{-i k_n x}) \psi_n(y). \quad (3)$$

其中: k_n 满足能量守恒关系式 $k_n = \sqrt{(v_{SH}/a_i)^2 - (n/a_i)^2}$ ($i = 1, 2$); $\psi_n(y)$ 表示第 n 模在区域 Ω 的横向波函数, 且

$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{2/a_i} \cos \frac{n}{a_i} y & n \neq 0, \\ \sqrt{1/a_i} & n = 0. \end{cases} \quad (4)$$

在界面处, 根据波函数和其一阶导数连续性, 要求:

$$(A_n + B_n) \psi_n(y) = (A_{n+1} + B_{n+1}) \psi_{n+1}(y), \quad (5)$$

$$K_n (A_n - B_n) \psi_n(y) = K_{n+1} (A_{n+1} - B_{n+1}) \psi_{n+1}(y). \quad (6)$$

用 $\psi_n(y)$ 和 $\psi_{n+1}(y)$ 分别乘以 (5), (6) 式的两边, 积分可得

$$D_{nm} [A_n + B_n] = A_{n+1} + B_{n+1}, \quad (7)$$

$$K_n (A_n - B_n) = D_{nm} K_{n+1} (A_{n+1} - B_{n+1}), \quad (8)$$

其中 $D_{nm} = \int_0^{a_i} \psi_n(y) \psi_{n+1}(y) dy$.

将 (7), (8) 式表示成矩阵的形式, 并用矩阵散射方法就可以求得计算热导率所需的透射系数 m .

2 计算结果与讨论

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, 其弹性常数和质量密度分别为 $C_{44} = 5.99 \times 10^{10} \text{ N m}^{-2}$ 和 $\rho = 5317.6 \text{ kg m}^{-3}$.

图 2 描述了声学声子的透射系数随长度 L 的变化关系. 其中图 2- a, b 为 0 模的透射系数随长度 L 的变化, 实线、划线、点线分别对应频率为 $\omega = 0.5, 1, 1.5 \text{ Hz}$; 图 2- a 对应的结构为 $a_1 = 24 \text{ nm}, a_2 = 20 \text{ nm}$, 图 2- b 对应的结构为 $a_1 = 20 \text{ nm}, a_2 = 24 \text{ nm}$. 图 2- c, d 为 0 模的透射系数随长度 L 的变化, 其中实线、划线、点线分别对应频率为 $\omega = 0.5, 1, 1.5 \text{ Hz}$; 图 2- c 对应的结构为 $a_1 = 30 \text{ nm}, a_2 = 15 \text{ nm}$; 图 2- d 对应的结构为 $a_1 = 15 \text{ nm}, a_2 = 30 \text{ nm}$.

从图 2 中可以看到对于 0 模, 当 $\omega = 0.5 \text{ Hz}$ 时, 声子透射系数几乎不随 L 发生变化; 当 $\omega = 1 \text{ Hz}$ 时, 且波导宽度变化不大时, 声子透射系数也几乎不随 L 发生变化, 但当波导宽度变化比较大时, 声子透射系数随 L 增大趋近 1; 当 $\omega = 1.5 \text{ Hz}$ 时, 声子透射系数在 L 很小时也很小, 随 L 增大急剧趋近 1, 特别是量子波导宽度从窄到宽时表现更甚. 这些结果说明量子波导的宽窄变化对声子有滤波作用.

图 3 描述了宽窄变化的量子波导在不同 L 值时热导率随温度的变化情况. 图 3- a, b 结构分别为 $a_1 = 30 \text{ nm}, a_2 = 15 \text{ nm}$ 和 $a_1 = 15 \text{ nm}, a_2 = 30 \text{ nm}$ 时热导率随温度的变化, 其中的实线、划线、点线分别对应 $L = 1, 5, 10 \text{ nm}$. 从图中发现量子波导宽度从宽到窄时, 对于不同的 L 值, 热导率随温度的变化情况差别不

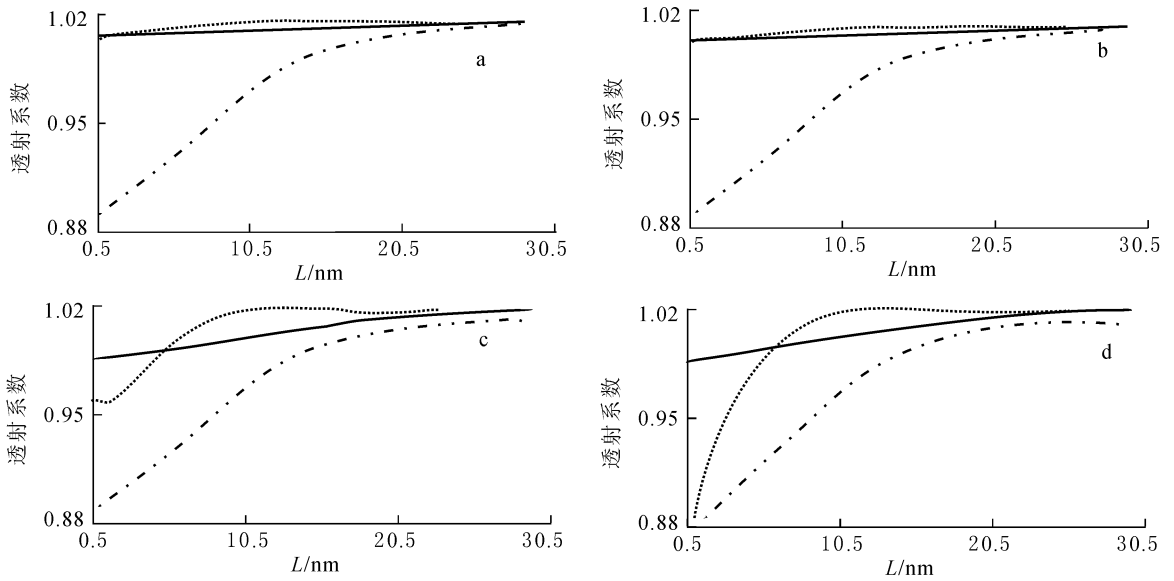


图 2 透射系数随长度 L 的变化图

大, 都随温度线性地增加, L 值越小, 热导率越小, 这是由于 L 值越小, 声子透射系数越小. 而量子波导宽度从窄到宽时, 热导率随温度的变化情况的差别远远大于从宽到窄时的情况, 这是由于量子波导宽度从窄到宽时, L 值越小, 量子波导宽度变化越甚, 声子被反射越多, 声子透射系数越小, 因而热导率越低.

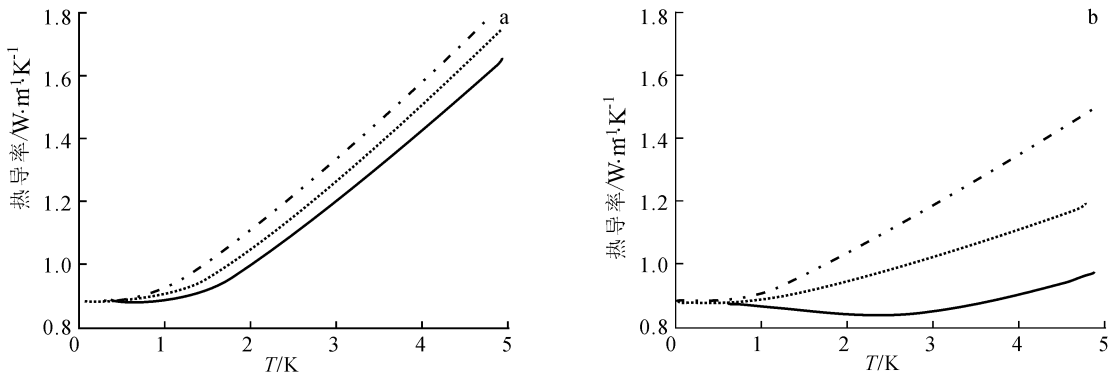


图 3 在不同的 L 值下热导值温度的变化

图 4 描述了宽窄变化的量子波导在不同温度时热导率随 L 值的变化情况. 图 4- a, b 结构分别为 $a_1 = 30 \text{ nm}$, $a_2 = 15 \text{ nm}$ 和 $a_1 = 15 \text{ nm}$, $a_2 = 30 \text{ nm}$ 时热导随长度 L 的变化, 其中的实线、划线、点线分别对应 $T = 1, 2, 3 \text{ K}$. 从这个图中可以看到, 在温度 $T = 1 \text{ K}$ 时, 热导率几乎不随 L 值的变化而变化; 在温度 $T = 2, 3 \text{ K}$ 时, 对于量子波导宽度从宽到窄的情况热导率随 L 值的变化不大, 对于量子波导宽度从窄到宽的情况热导率随 L 值的变化就比较明显. 这和图 3 的结果一样. 这些结果表明可以通过采用不同宽窄变化的量子波导和改变长度 L 的值来调节热导率.

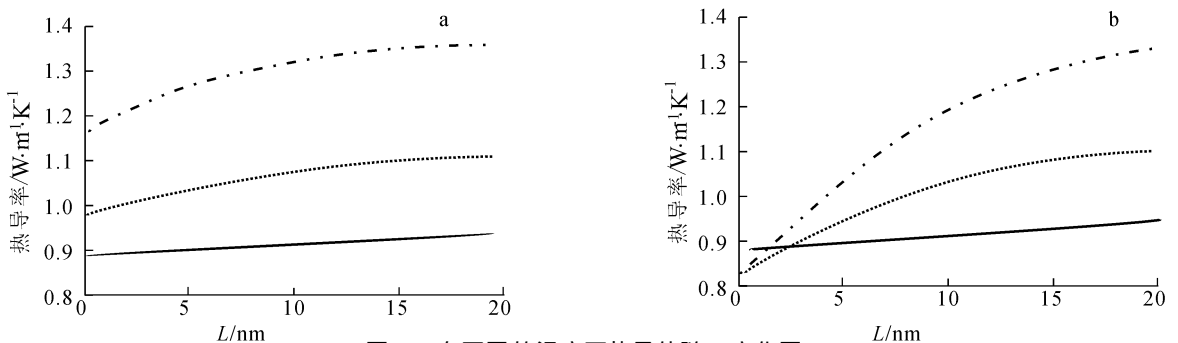


图 4 在不同的温度下热导值随 L 变化图

3 结语

研究了在低温下放大和收窄的介电量子波导中的声学声子透射系数和热导率. 当介电量子波导的宽度变化不大时, 声学声子透射系数几乎不随宽度变化长度 L 的变化而变化, 但当介电量子波导的宽度变化比较大时, 声学声子透射系数随长度 L 的增大而增大, 特别是宽度由窄变到宽时, 声学声子透射系数随长度 L 的增大而增大的更多. 当温度 $T = 1$ K 时, 介电量子波导的宽度变化对热导率几乎没有影响, 当温度 $T = 2, 3$ K 时, 介电量子波导的宽度由宽变到窄对热导率的影响也很小, 但介电量子波导的宽度由窄变到宽使得热导率随长度 L 的增大而增大, 温度越高增大得越多. 结果表明可以通过调节介电量子波导的结构参数来控制声子透射和热导率, 这对声子器件设计是非常有用的.

参考文献:

- [1] CHEN K Q, WANG X H, GU B Y. Localized Folded Acoustic Phonon Modes in Coupled Superlattices with Structural Defects [J]. Phys. Rev. B., 2000, 61(18): 12 075– 12 081.
- [2] WANG J S, WANG J, ZENG N. Nonequilibrium Green's Function Approach to Mesoscopic Thermal Transport [J]. Phys. Rev. B., 2006, 74(3): 033 408– 033 411.
- [3] WANG X J, WANG L L, CHEN K Q et al. The Localized Electronic States and Transmission Spectra in N-Layer Superlattice with Structural Defects in Finite Magnetic Fields [J]. Acta. Phys. Sin., 2006, 55(7): 3 649– 3 655.
- [4] HUANG W Q, WANG L L, SHUAI Z G, et al. Magnet-Coupling Effect on Surface Electron States in a Semi-Infinite Superlattice [J]. Acta. Phys. Sin., 2004, 53(7): 2 330– 2 335.
- [5] YANG J Y, DENG H Q, HU W Y. Surface Phonons on Ag(110): A Study by Means of Analytic Embedded-Atom Method [J]. Acta. Phys. Sin., 2004, 53(6): 1 946– 1 951.
- [6] WANG J, WANG J S. Carbon Nanotube Thermal Transport: Ballistic to Diffusive [J]. Appl. Phys. Lett., 2006, 88(11): 111 909– 111 911.
- [7] SANTAMORE D H, CROSS M C. Effect of Surface Roughness on the Universal Thermal Conductance [J]. Phys. Rev. B., 2001, 63(18): 184 306– 184 311.
- [8] JU Y S. Phonon Heat Transport in Silicon Nanostructures [J]. Appl. Phys. Lett., 2005, 7(15): 153 106– 153 108.
- [9] LIANG L H, LI B W. Size-Dependent Thermal Conductivity of Nanoscale Semiconducting Systems [J]. Phys. Rev. B, 2006, 73(15): 153 301– 153 306.
- [10] BALANDIN A, WANG K L. Significant Decrease of the Lattice Thermal Conductivity Due to Phonon Confinement in a Free-Standing Semiconductor Quantum Well [J]. Phys. Rev. B., 1998, 58(3): 1 544– 1 549.
- [11] HEINO P. Thermal Conductivity and Temperature in Solid Argon by Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations [J]. Phys. Rev. B, 2005, 71(14): 144 302– 144 308.
- [12] ZOU J, BALANDIN A. Phonon Heat Conduction in a Semiconductor Nanowire [J]. J. Appl. Phys., 2001, 89(5): 2 932– 2 938.
- [13] JU Y S. Phonon Heat Transport in Silicon Nanostructures [J]. Appl. Phys. Lett., 2005, 87(15): 153 106– 153 108.
- [14] SHENG W D. The Scattering Matrix Method for Quantum Waveguides [J]. J. Phys.: Condens. Matter, 1997, 9: 8 369 – 8 380.
- [15] LENG M H, LENT C S. Recovery of Quantized Ballistic Conductance in a Periodically Modulated Channel [J]. Phys. Rev. Lett., 1993, 71(1): 137– 140.
- [16] LI W X, CHEN K Q, DUAN W H, et al. Phonon Transport and Thermal Conductivity in Dielectric Quantum Wire [J]. J. Phys. D: Appl. Phys., 2003, 36(3): 3 027– 3 033.
- [17] HUANG W Q, CHEN K Q. Acoustic Phonon Transmission and Thermal Conductance in a Double-Bend Quantum Wave Guide [J]. J. Appl. Phys., 2005, 98(9): 93 524– 93 530.
- [18] CHEN K Q, LI W X, DUAN W H, et al. Effect of Defects on the Thermal Conductivity in a Nanowire [J]. Phys. Rev. B., 2005, 72(4): 045 422– 045 426.
- [19] TANG L M, WANG L L, CHEN K Q, et al. Coupling Effect on Phonon Thermal Transport in a Double-Stub Quantum Wire [J]. Appl. Phys. Lett., 2006, 88(16): 163 505– 163 507.

(下转第 70 页)

Initialization and Control of SAA7113 Based on CPLD

ZENG Qing-li, MENG Fan-bing, CHEN Shan-rong

(College of Physics Science & Information Engineering, Jishou University, Jishou 416000, Hunan China)

Abstract: In order to achieve the right video image acquisition and multi-format output, images collected by low-speed memory are usually used. This article describes the characteristics and application of SAA 7113 video decoder chip. Implementation of the SA 7113 hardware circuit configuration structure is researched based on CPLD. Through I²C bus, the VHDL language is used to initialize the control of programming. Therefore, video acquisition, image information collection by 8 MHz/s low-speed memory, and multi-format output can be achieved.

Key words: VHDL; SAA7113; I²C bus; CPLD

(责任编辑 陈炳权)

(上接第 62 页)

- [20] DONG J J, SANKEY O F, MYLES C M. Theoretical Study of the Lattice Thermal Conductivity in Ge Framework Semiconductors [J]. Phys. Rev. Lett., 2001, 86(11): 2 361- 2 364.
- [21] DAI Z H, NI J. Electron Transport in Multi-Terminal Quantum Chain Systems Based on the Green's Functions [J]. Acta. Phys. Sin., 2005, 54(7): 3 342- 3 345.
- [22] LU X, CHU J H, SHEN W Z. Modification of the Lattice Thermal Conductivity in Semiconductor Rectangular Nanowires [J]. J. Appl. Phys., 2003, 93(2): 1 219- 1 229.

Acoustic-Phonon Transmission and Thermal Conductance in a Width-Change Quantum Waveguide

YE Fu-qiu^{1,2}, PENG Xiao-fang²

(1. College of Physics Science & Information Engineering, Jishou University, Jishou 416000, Hunan China;

2. Department of Applied Physics, Hunan University, Changsha 410082, China)

Abstract: The authors investigate the effect of the value change of L on low temperature phonon transport in a width-change quantum waveguide by using the scattering-matrix method. The calculated results show that the transmission coefficient almost doesn't change when the width of the quantum waveguide changes small, but it will become large with the value increase of L when the width of the quantum waveguide changes more. And at low temperature, the thermal conductance almost doesn't change with the width-change of the quantum waveguide, but it will become large with the value increase of L when the temperature hoists.

Key words: phonon transport; thermal conductance; scattering-matrix method

(责任编辑 陈炳权)