АКУСТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Том XXIX 1983 Вып. 4

УДК 537.311.33

КВАНТОВАНИЕ СПЕКТРА ФОНОНОВ В ТОНКИХ ПРОВОЛОКАХ (НИТЯХ)

Григорян В. Г., Седракян Д. Г.

Найдены спектр и плотность состояний акустических фононов в проволоке со свободными границами в дебаевском приближении. На ЭВМ решено полученное секулярное уравнение и дан анализ дисперсионных кривых для различных типов колебаний, которые представлены графически.

В последнее время получают и исследуют экспериментально и теоретически тонкие кристаллические проволоки (нити). Так, в работе [1] сообщалось об обнаружении размерных осцилляций продольного магнетосопротивления тонких цилиндрических монокристаллов Bi с диаметрами ~0,1 мкм. В работе [2] проведено теоретическое исследование кулоновского взаимодействия электрона и дырки в нитевидных кристаллах.

Теория квантового размерного эффекта для носителей зарядов в полупроводниковых и полуметаллических проволоках была впервые развита авторами [3]. Известно, что наряду с электронами и дырками важную роль в различных явлениях, происходящих в твердых телах (процессы тепло- и электропроводности и т. д.), играют фононы. В связи с этим интересно исследовать влияние ограничивающих свободных поверхностей проволоки на спектр акустических фононов. В классических работах Похгаммера и Кри, сводку основных результатов которых можно найти в книге Лява [4], исследовались свободные колебания тонких стержней ($2aq \ll 1$, где a — радиус стержня, q — волновое число), для которых и были получены дисперсионные соотношения. Колебания такого типа играют существенную роль при очень низких температурах $T<\theta/n$ (θ — температура Дебая, n — число атомов вдоль диаметра проволоки), которые выполняются крайне редко.

Нами исследовалась задача о нахождении спектра акустических фононов в приближении упругого континуума в тонкой нити круглого сечения со свободными границами (аналогичная задача для пленки решена в [5]). Такие фононы играют существенную роль в физических процессах, происходящих при низких температурах $T \ll \theta$, а найденные решения для спектра и плотности состояний фононов дают возможность находить связанное с решеточными колебаниями термодинамические и кинетические характеристики тонких нитевидных кристаллов в условиях, когда нельзя считать, что проволока колеблется подобно массивному образцу. Задача может оказаться полезной и в технике при расчете вибраций цилиндров, которые необходимо учитывать в различных инженерных конструкциях.

Вектор смещения $\mathbf{u}$ упругой среды удовлетворяет следующему уравнению:

$$-\omega^2\mathbf{u}=c_t^2\Delta\mathbf{u}+(c_l^2-c_t^2)\,\mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\mathbf{u}, \tag{1}$$

где c_l и c_t — продольная и поперечная скорости звука, ω — частота колебаний. Согласно методу Лэмба [4], решение (1) можно представить в виде $\mathbf{u}=\mathbf{u}_1+\mathbf{u}_2$, где

$$\mathbf{u}_1=-(c_l^2/\omega^2)\,\mathrm{grad}\,\varphi. \tag{2}$$

Здесь φ — функция, удовлетворяющая скалярному уравнению Гельмгольца

$$\Delta\varphi+(\omega^2/c_l^2)\varphi=0, \tag{3}$$

а u_2 удовлетворяет следующей системе:

$$\Delta \mathbf{u}_2 + (\omega^2/c_t^2)\mathbf{u}_2 = 0, \qquad \operatorname{div} \mathbf{u}_2 = 0, \tag{4}$$

т. е. поле смещений $\mathbf{u}_1$ представляет фактически волну сжатия ($\operatorname{div} \mathbf{u}_1 \neq 0$), а $\mathbf{u}_2$ — волну сдвига ($\operatorname{div} \mathbf{u}_2 = 0$).

Решения (3) и (4) естественно искать в цилиндрических координатах. Решение (3) хорошо известно [6] — отсюда для компонент волны сжатия $\mathbf{u}_1$ получаем следующие выражения:

$$\begin{aligned} u_{1r} &= B(\partial J_m(\beta r)/\partial r)\, e^{iqz} \sin(m\theta), \\ u_{1\theta} &= Bm(J_m(\beta r)/r)\, e^{iqz} \cos(m\theta), \\ u_{1z} &= BiqJ_m(\beta r)\, e^{izq} \sin(m\theta), \end{aligned} \tag{5}$$

здесь $\beta^2 = (\omega^2/c_t^2) - q^2$; q — волновое число, m принимает значения 0; ± 1; $\pm 2; \ldots$; $J_m(\beta r)$ — обыкновенная функция Бесселя порядка m, B — константа.

Ввиду того что $\operatorname{div} \mathbf{u}_2 = 0$, первое уравнение системы (4) принимает вид

$$-\operatorname{rot}\operatorname{rot} \mathbf{u}_2 + (\omega^2/c_t^2)\mathbf{u}_2 = 0. \tag{6}$$

Из векторного уравнения (6) можно получить следующие скалярные уравнения для компонент u_{2r}, u_{2z}:

$$\Delta u_{2z} + (\omega^2/c_t^2) u_{2z} = 0, \tag{7а}$$

$$\Delta u_{2r} + \frac{2}{r}\frac{\partial u_{2r}}{\partial r} + \left(\frac{1}{r^2} + \frac{\omega^2}{c_t^2}\right) u_{2r} + \frac{2iq}{r} u_{2z} = 0. \tag{7б}$$

Из системы (7) для радиальной функции компоненты u_{2r} ($u_{2r} = W(r) \cdot F(\theta, z)$) получается уравнение

$$\frac{d^2W}{dr^2} + \frac{3}{r}\frac{dW}{dr} + \left(\frac{1-m^2}{r^2} + \alpha^2\right) W + \frac{2iq}{r} AJ_m(\alpha r) = 0, \tag{8}$$

решение которого можно найти, используя, например, [7]. Составляющая $u_{2\theta}$ определяется из условия $\operatorname{div} \mathbf{u}_2 = 0$. Окончательно для сдвиговых компонент смещения имеем следующие выражения:

$$\begin{aligned} u_{2r} &= \left[Cm\frac{J_m(\alpha r)}{r} + Aiq\frac{\partial J_m(\alpha r)}{\partial r} \right] e^{iqz} \sin(m\theta), \\ u_{2\theta} &= \left[C\frac{\partial J_m(\alpha r)}{\partial r} + Aiqm\frac{J_m(\alpha r)}{r} \right] e^{iqz} \cos(m\theta), \\ u_{2z} &= A\alpha^2 J_m(\alpha r) \cdot e^{iqz} \cdot \sin(m\theta), \end{aligned} \tag{9}$$

которые вместе с (5) и составят полное решение уравнения (1). В выражениях (9) $\alpha^2 = (\omega^2/c_t^2) - q^2$; A и C — константы.

Граничные условия в случае проволоки со свободными границами сводятся к обращению в нуль на поверхности цилиндра $r = a$ следующих компонент тензора напряжения:

$$\begin{aligned} \sigma_{rz} &= 2\rho c_t^2 \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right); \\ \sigma_{r\theta} &= 2\rho c_t^2 \left[\frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial \theta} + r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{u_\theta}{r}\right) \right]; \\ \sigma_{rr} &= \rho(c_l^2 - 2c_t^2) \operatorname{div} \mathbf{u} + 2\rho c_t^2 \frac{\partial u_r}{\partial r}, \end{aligned} \tag{10}$$

где ρ — плотность кристалла. С учетом условий (10) и найденных выше решений уравнения (1) для нахождения спектра фононов получаем секулярное уравнение

$$\det P = 0, \tag{11}$$

где P определяется следующей матрицей 3×3:

$$\begin{Vmatrix} 2iq\Phi' & (\alpha^2-q^2)F' & \frac{iqm}{a}F \\ \frac{m}{a}\left[\Phi'+a^2\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{\Phi}{a^2}\right)\right] & \frac{iqm}{a}\left[F'+a^2\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{F}{a^2}\right)\right. & a\left[\frac{m^2}{a^3}F+\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{F'}{a}\right)\right] \\ \Phi''-\left(\frac{\omega^2}{2c_t^2}-\frac{\omega^2}{c_l^2}\right)\Phi & iqF'' & m\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{F}{a}\right) \end{Vmatrix} \tag{12}$$

Здесь введены обозначения: $\Phi=J_m(\beta a)$, $\Phi'=\dfrac{\partial J_m(\beta a)}{\partial a}$,

$$F=J_m(\alpha a),\quad F'=\frac{\partial J_m(\alpha a)}{\partial a}.$$

В общем случае уравнение (11) аналитически не решается; в связи с этим для получения дисперсионных соотношений уравнение (11) было решено на ЭВМ БСМ-6 для $m=0$; 1; 2; 3; 4. На фиг. 1, 2 представлены результаты для $m=0$, 1. Ввиду того, что величины α и β могут принимать как вещественные, так и мнимые значения (что приводит в матрице (12) к замене обыкновенных функций Бесселя на модифицированные), фактически приходилось решать разные уравнения в разных областях плоскости (ω, q). Эти три области выделены на фиг. 1, 2 прямыми $\omega=c_tq$ и $\omega=c_lq$. Из (11) также следует, что вид дисперсионных кривых $\omega(q)$ зависит от скоростей c_l и c_t, которые в свою очередь определяются упругими константами кристалла: модулем Юнга E, коэффициентом Пуассона σ и плотностью ρ. Уравнение решалось для случая $(c_l/c_t)=2$ $(\sigma={}^1/_3)$. Выбор значения $\sigma={}^1/_3$ объясняется двумя причинами. Во-первых, это значение отвечает материалу Bi, тонкие монокристаллические нити которого получают и экспериментально исследуют в настоящее время [1]. С другой стороны, значение коэффициента Пуассона для многих применяемых материалов, таких, как Al, Zn, Cu, Ge, близко к выбранному значению $\sigma={}^1/_3$. Что касается численных значений E и ρ, то как видно из фигур, их выбор отражается лишь на масштабе по оси ординат, и следовательно полученные графики могут быть использованы для материалов с $\sigma={}^1/_3$ и любых E, ρ при любом радиусе a нити.

При $m=0$ дисперсионное уравнение (11) распадается на два. Одно из них будет:

$$\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{J_1(\alpha a)}{a}\right)=-\frac{\alpha}{a}J_2(\alpha a)=0. \tag{13}$$

Отсюда $J_2(\alpha a)=0$, или $(\alpha a)=0$; 5,136; 8,417; ... $f_{2,s}$, где f_{2s} — s-тый корень уравнения $J_2(z)=0$. Отсюда для закона дисперсии получаем следующее соотношение:

$$\omega=c_t\sqrt{q^2+f_{2,s}^2/a^2}, \tag{14}$$

т. е. дисперсионные кривые представляют собой набор ветвей, исходящих из оси ординат; случай $f_{2,s}=0$ соответствует крутильным колебаниям, рассмотренным в [4], а также в [8]. При больших q или a все ветви асимптотически стремятся к дисперсионной кривой для массивного образца, соответствующей поперечной волне.

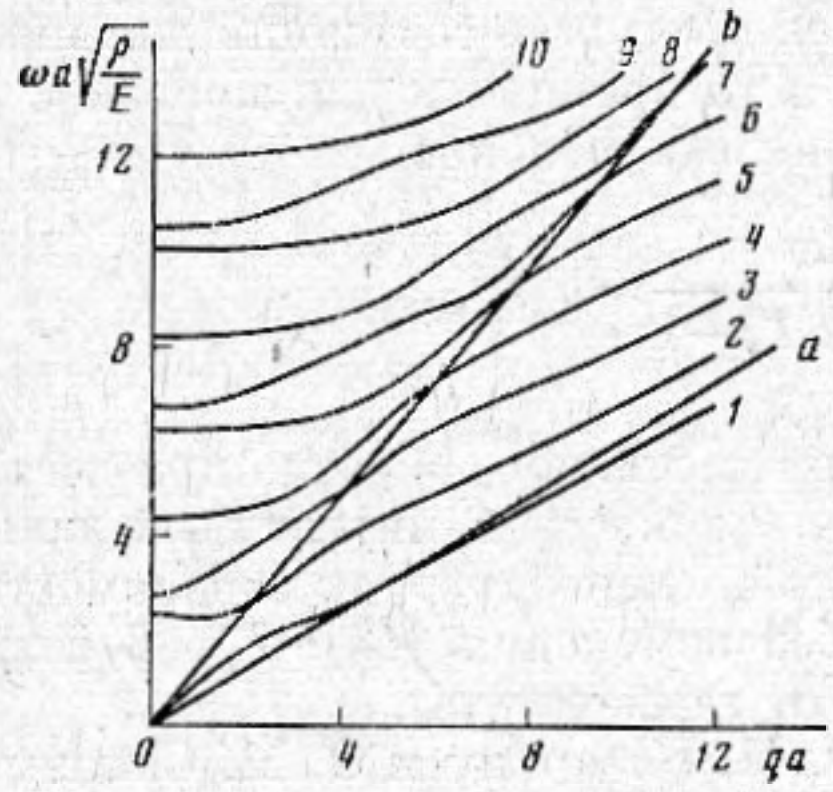
Второе дисперсионное уравнение, соответствующее случаю $m=0$ и представляющее собой равенство нулю детерминанта 2×2, решено численно (фиг. 1).

Для произвольного m дисперсионные кривые представляют семейство ветвей, берущих начало на оси ординат (происходит квантование спектра акустических фононов). Это хорошо видно из приведенных фигур. Частоты для некоторых ветвей при $q=0$ можно определить из уравнения

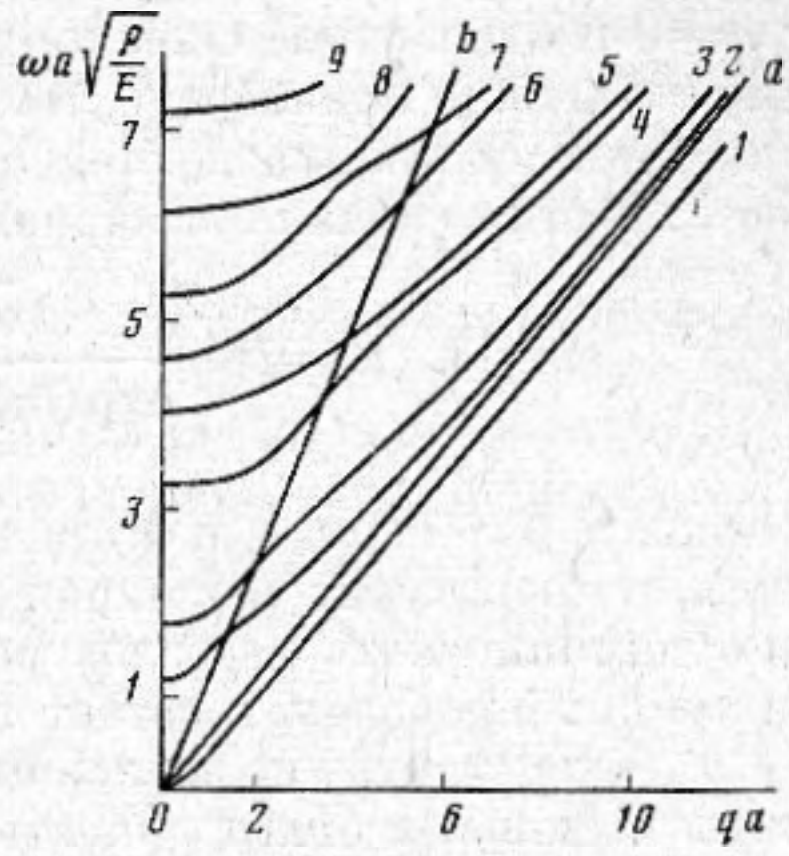
$$\partial J_m(\alpha a)/\partial a=0, \tag{15}$$

решения которого протабулированы в [7]. Например, значения частот для ветвей 1, 2, 4, 5, 7, 8, 10 ($m=0$) и ветвей 2, 4, 7, 9 ($m=1$) при $q=0$ получаются из уравнения (15). Частоты для остальных кривых аналитически не определяются.

Спектральные ветви, как видно из фиг. 1, 2, при $q=0$ имеют нулевой наклон. Это легко показать аналитически, подставив в уравнение (11) разложение $\omega(q)$ по степеням q: $\omega=\omega_n+\gamma_1 q+\gamma_2 q^2$; при этом получается $\gamma_1=0$. Следует отметить также, что в случае нити снимается «случайное» вырождение (связанное с численным значением $\sigma={}^1/_3$) некоторых дисперсионных кривых, которое наблюдалось в [5] для симметричных колебаний в пленке, что объясняется общим понижением симметрии задачи.



Фиг. 1



Фиг. 2

Фиг. 1. Дисперсионные соотношения для волн с $m=0$. Прямая a соответствует закону дисперсии $\omega=c_l q$, b — $\omega=c_t q$

Фиг. 2. Дисперсионные соотношения для волн с $m=1$. Прямая a соответствует закону дисперсии $\omega=c_t q$, $b-\omega=c_l q$

В области $\omega>c_l q$ α и β являются вещественными числами и зависимость смещений от r носит осциллирующий характер. В области, лежащей между прямыми $\omega=c_l q$ и $\omega=c_t q$, β становится чисто мнимым, а α продолжает оставаться вещественным числом. В этом случае обыкновенная функция Бесселя в волне сжатия заменяется на модифицированную, которая является монотонно возрастающей функцией аргумента. В нижней области α и β — чисто мнимые числа и смещение возрастает (при больших значениях аргумента по показательному закону) с увеличением расстояния от центра проволоки.

При больших значениях q, как видно из приведенных фигур, наклоны ветвей близки к наклону прямых $\omega=c_l q$ или $\omega=c_t q$. Это соответствует переходу к случаю массивного образца (при $2aq\gg1$ границы проволоки не должны чувствоваться), т. е. разделению волн на волны сдвига и сжатия. Что касается самых нижних ветвей, то при больших q они переходят в поверхностные волны.

Заметим также, что при $m>1$ отсутствуют ветви, выходящие из начала координат. При $m=0$ закон дисперсии линеен ($\omega=\sqrt{E/\rho}\cdot q$) и нижняя ветвь соответствует продольным волнам в очень тонких стержнях [4, 8]. В случае $m=1$ закон дисперсии при $q\to0$ квадратичен ($\omega=a\sqrt{E/\rho}q^2/2$) и нижняя ветвь совпадает с волной изгиба в очень тонких стержнях ($2aq\ll1$). Все эти результаты легко можно получить, разлагая в (12) бесселевы функции в ряд.

В одномерном случае число состояний для одной ветви в интервале dq равно $ldq/2\pi$, где l — длина проволоки, т. е. плотность состояния $G(\omega)\sim\sim dq/d\omega$. Таким образом, из-за отсутствия явной зависимости $\omega(q)$ вычислить плотность состояний фононов в общем случае аналитическим путем невозможно. Для вычисления $G(\omega)$ в этом случае надо воспользоваться

рассчитанными дисперсионными кривыми. На полученных графиках, которые для краткости не приводятся, наблюдается ряд бесконечных скачков, связанных с увеличением плотности состояний при прохождении новой ветви. Эти вклады в плотность состояний от новых ветвей можно вычислить аналитически. Как мы выяснили, дисперсионные кривые при $q=0$ имеют нулевой наклон, т. е. для n-ой ветви $\omega(q)=\omega_n+\gamma_2 q^2$, или произвольная $dq/d\omega\sim(\omega-\omega_n)^{-1/2}$, т. е. имеет коренную особенность, что является, вообще говоря, характерной чертой одномерного движения.

В заключение рассмотрим вопрос о температурной зависимости теплоемкости фононного газа в нитях при очень низких температурах ($T<\theta/n$). Очевидно, при данной температуре эффективно возбуждаются только ветви, исходящие из начала координат. Таких ветвей у нас три: две соответствуют $m=0$ и одна $m=1$. Однако вкладом ветвей с $m=0$ в фононную теплоемкость можно пренебречь, так как плотность состояний для них при малых частотах постоянна и конечна, в то время как для кривой с $m=1$ $G(\omega)\sim\omega^{-1/2}$. В этом случае суммарная энергия фононов

$$E_{\text{ф}}=b\int_0^\infty\frac{\sqrt{\omega}\,d\omega}{\exp(\hbar\omega/k_{\text{б}}T)-1}=b'T^{3/2}, \tag{16}$$

а теплоемкость $C_{\text{ф}}\sim T^{3/2}$, т. е. в отличие от массивного образца при достаточно низких температурах фононная теплоемкость в нитевидных кристаллах будет доминировать над электронной, температурная зависимость которой в тонких проволоках остается без изменения ($C_{\text{эл}}\sim T$). В формуле (16) b и b' — константы, не зависящие от температуры.

Авторы выражают благодарность Э. М. Казаряну и О. М. Сапонджяну за полезные консультации, а С. К. Данагуляну за помощь в численных расчетах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Брандт Н. Б., Гицу Д. В., Николаев А. А., Пономарев Я. Г.* Исследование размерных эффектов в магнитном поле у тонких цилиндрических монокристаллов висмута.– ЖЭТФ, 1977, т. 72, № 6, с. 2332–2344.
2. *Бабиченко В. С., Келдыш Л. В., Силин А. П.* Кулоновское взаимодействие в тонких полупроводниковых и полуметаллических нитях.– ФТТ, 1980, т. 22, № 4, с. 1238–1240.
3. *Тавгер Б. А., Блох М. Д., Фишман Е. Л.* Теория продольных гальваномагнитных явлений в тонких (квантующих) проволоках.– ФММ, 1972, т. 33, № 6, с. 1137–1144.
4. *Ляв А.* Математическая теория упругости. М.-Л.: ОНТИ, 1935.
5. *Тавгер Б. А., Демиховский В. Я.* Фононы в пленках.– Изв. вузов. Физика, 1966, № 4, с. 130–137.
6. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. М.: Наука, 1973.
7. Справочник по специальным функциям / Под ред. Абрамовица М., Стиган И. М.: Наука, 1979.
8. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория упругости. М.: Наука, 1965.

Ереванский политехнический институт им. К. Маркса

Поступила в редакцию 23.III.1982