ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 7, № 3 (2006) С. 485-489

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 7, № 3 (2006) P. 485-489

PACS numbers: 43.35.-c, 43.35+d, 63.32.+m, 72.50+b

ISSN 1729-4428

Б.М. Рувінський[1], М.А. Рувінський[2]

Енергетичний спектр акустичних фононів у прямокутному квантовому дроті GaAs

[1]Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, вул. Карпатська, 15, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна, bruvinsky@gmail.com
[2]Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна,

Розглянуто акустичні коливання в моделі прямокутного квантового дроту з вільною поверхнею. Розраховано дисперсійні криві обмежених акустичних фононів для гібридних "ширинних" і "товщинних" мод в прямокутному дроті GaAs. Крім дисперсії фазової швидкості, характерним для гібридних мод є наявність одночасно поздовжніх і поперечних компонент вектора зміщень. Визначено енергетичний спектр акустичних фононів для різних поперечних розмірів дроту з GaAs.

Ключові слова: квантовий прямокутний дріт, обмежені акустичні фонони, енергетичний спектр, GaAs.

Стаття поступила до редакції 15.02.2006; прийнята до друку 21.05.2006.

Вступ

Досягнення сучасних технологій зробило актуальним дослідження різноманітних фізичних властивостей мезоскопічних і наноструктурних матеріалів. Квантовий напівпровідниковий дріт на основі GaAs є одним із перспективних об'єктів для досліджень і прогнозованого практичного використання. Найбільш вивчені електричні і оптичні властивості одномірного квантового дроту, а також дроту циліндричної геометрії (електропровідність, квантовий ефект Холла, спектр оптичних фононів, поглинання світла). На даний час немає детальних досліджень випадку прямокутного квантового дроту, зокрема, спектра акустичних фононів, який є необхідним для багатьох задач фізичної кінетики. Метою даної роботи є визначення законів дисперсії акустичних фононів в прямокутному квантовому дроті GaAs різних поперечних перерізів.

I. Зміщення і напруження для акустичних коливань прямокутного дроту

Отримані нижче результати стосуються моделі прямокутного дроту з вільною поверхнею і необмеженою довжиною в напрямку осі z, товщиною $2a$ вздовж осі x і шириною $2d$ в напрямку осі y. Початок координат обрано в площині xy, в геометричному центрі поперечного перерізу прямокутного дроту ($-a \le x \le a$, $-d \le x \le d$). Точного аналітичного розв'язку задачі теорії пружності для довільної прямокутної геометрії дроту не існує. Скористаємось ефективним методом Морса (див., напр., [1,2]) наближеного розділення змінних, справедливого для випадку $(d/a) \ge 2$. При цьому акустичні моди поділяють на "ширинні" і "товщинні". Складові вектора зміщень "ширинної" моди шукаємо у вигляді:

$$u_x = \left(\frac{q}{k_1} A\cos(k_1 y) + C\cos(k_2 y) \right) \sin(qx) e^{i\gamma(z-ct)}, \quad (1)$$

$$u_y = (A\sin(k_1 y) + B\sin(k_2 y))\cos(qx) e^{i\gamma(z-ct)}, \quad (2)$$

$$u_z = i\left(-\frac{\gamma}{k_1} A\cos(k_1 y) + \frac{1}{\gamma}(k_2 B + qC)\cos(k_2 y) \right) \cos(qx) e^{i\gamma(z-ct)}, \quad (3)$$

де $\gamma = 2\pi/\lambda$, λ – довжина хвилі, γ – складова хвильового вектора в напрямку осі z дроту, c – фазова швидкість звуку,

$$k_1^2 + q^2 = \gamma^2[(c/c_d)^2 - 1], \quad k_2^2 + q^2 = \gamma^2[(c/c_s)^2 - 1], \tag{4}$$

c_d і c_s – швидкість поздовжнього і поперечного звуку. Для вільної поверхні дроту "ширинні" моди визначаються відповідними граничними умовами: нульовими значеннями компонент тензора напружень [3]

$$\sigma_{yy},\ \sigma_{xy} \text{ і } \sigma_{zy} \text{ при } y = \pm d \tag{5}$$

і

$$\sigma_{xx},\ \sigma_{yx} \text{ і } \sigma_{zx} \text{ при } x = \pm a, \tag{6}$$

при цьому розглядається випадок, коли в (6) для "ширинних" мод дві останні умови для σ_{yx} і σ_{zx} при $x = \pm a$ виконуються наближено. Тензор напружень σ_{ik} ($i, k = x, y, z$) визначається через тензор деформації u_{ik} згідно [3]:

$$\sigma_{ik} = \frac{E}{1+\sigma}\left(u_{ik} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} u_{\ell\ell}\delta_{ik}\right), \tag{7}$$

де E – модуль Юнга, σ – коефіцієнт Пуассона; в (7) за "німим" індексом $\ell = x, y, z$ відбувається підсумовування. У випадку малих деформацій тензор деформації

$$u_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right). \tag{8}$$

З граничних умов (5) і формул (7), (8) випливає лінійна система однорідних рівнянь для амплітуд A, B і C "ширинних" мод:

$$-A(\gamma^2 + q^2 - k_2^2)\cos(k_1 d) + 2Bk_1k_2\cos(k_2 d) = 0, \tag{9}$$

$$2Aq\sin(k_1 d) + Bq\sin(k_2 d) + Ck_2\sin(k_2 d) = 0, \tag{10}$$

$$2A(\gamma^2 + q^2)\sin(k_1 d) + B(\gamma^2 + q^2 - k_2^2)\sin(k_2 d) = 0. \tag{11}$$

Значення q можна визначити лише з однієї умови (6) $\sigma_{xx}\big|_{x=\pm a} = 0$, оскільки для випадку $(d/a) \geq 2$ вже наближено виконуються дві інші умови $\sigma_{yx}\big|_{x=\pm a} \approx 0$ і $\sigma_{zx}\big|_{x=\pm a} \approx 0$. Тоді

$$qa = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, ..., \tag{12}$$

і основній "ширинній" моді відповідає $n = 0$, тобто $q = 0$.

Складові вектора зміщень **v** для "товщинних" мод наведено в роботі [2] (форм. (4)-(8), де розглянуто електрон-фононне розсіяння в прямокутному квантовому дроті):

$$v_x = \{A\sin(k_1 x) + B\sin(k_2 x)\}\cos(qy)e^{i\gamma(z-ct)}, \tag{13}$$

$$v_y = \left\{\frac{q}{k_1}A\cos(k_1 x) + C\cos(k_2 x)\right\}\sin(qy)e^{i\gamma(z-ct)}, \tag{14}$$

$$v_z = i\left\{-\frac{\gamma}{k_1}A\cos(k_1 x) + \frac{1}{\gamma}(k_2 B + qC)\cos(k_2 x)\right\}\cos(qy)e^{i\gamma(z-ct)}. \tag{15}$$

Аналог величини q для "товщинних" мод визначається рівністю

$$qd = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad n = 0, 1, 2, ..., \tag{16}$$

і основній моді відповідає значення $n = 0$, тобто $q = \pi/2d$. При $(d/a) \geq 2$ умові (16) відповідає точне виконання $\sigma_{yy}\big|_{y=\pm d} = 0$ і наближене – двох інших рівностей $\sigma_{xy}\big|_{y=\pm d} \approx 0$ і $\sigma_{zy}\big|_{y=\pm d} \approx 0$. Амплітуди "товщинних" мод визначаються нульовими значеннями компонент тензора напружень

$$\sigma_{xx},\ \sigma_{yx} \text{ і } \sigma_{zx} \text{ при } x = \pm a. \tag{17}$$

II. Квантування і закони дисперсії обмежених акустичних фононів у прямокутному дроті GaAs

Умова квантування акустичних фононних мод з векторами зміщень **u** і **v** має вигляд [2]

$$\frac{1}{4ad}\int_{-a}^{a}dx\int_{-d}^{d}dy \cdot \begin{cases} |\mathbf{u}|^2 \\ |\mathbf{v}|^2 \end{cases} = \frac{\hbar}{2M\omega_\gamma}, \tag{18}$$

де $\omega_\gamma = \gamma c$ – частоти "ширинної" або "товщинної" моди з хвильовим вектором γ, M – маса прямокутного дроту,

$$|\mathbf{u}|^2 = u_x^* u_x + u_y^* u_y + u_z^* u_z,$$
$$|\mathbf{v}|^2 = v_x^* v_x + v_y^* v_y + v_z^* v_z. \quad (19)$$

Використовуючи рівняння (9)-(11), знаходимо вирази для амплітуд "ширинних" мод B і C через A:

$$B = -\frac{\sin(k_1 d)}{\sin(k_2 d)} \cdot \frac{2(q^2+\gamma^2)}{(\gamma^2+q^2-k_2^2)} A, \quad (20)$$

$$C = \frac{\sin(k_1 d)}{\sin(k_2 d)} \cdot \frac{2k_2 q}{(\gamma^2+q^2-k_2^2)} A. \quad (21)$$

З (18) з урахуванням (1)-(3), (13)-(15) і (19)-(21) отримаємо для амплітуди

$$A_\gamma^2 = \frac{2\hbar}{M\omega_\gamma B_\gamma}, \quad (22)$$

де вирази $B_\gamma^{(w)}$ і $B_\gamma^{(th)}$ для найнижчої "ширинної" і "товщинної" мод наведено в Додатку (форм. (Д.1)-(Д.7)).

Умова існування нетривіального розв'язку лінійної системи однорідних рівнянь (9)-(11) при $k_2 \neq 0$ дає можливість визначити закони дисперсії обмежених акустичних фононів у прямокутному квантовому дроті:

$$\frac{tg(\pi\sqrt{\chi-\psi})}{tg(\pi\sqrt{\delta\chi-\psi})} = -\frac{\psi\sqrt{\chi-\psi}\sqrt{\delta\chi-\psi}}{(0{,}5\chi-\psi)^2}, \quad (23)$$

де для "ширинних" мод

$$\omega_\gamma = \frac{\pi c_s}{d}\sqrt{\chi}, \ \gamma = \frac{\pi}{d}\sqrt{\psi - \left(\frac{dq}{\pi}\right)^2}. \quad (24)$$

Для "товщинних" мод в (24) слід провести заміну $d \to a$. В форм (23) $\delta = (c_s/c_d)^2 = (1-2\sigma)/2(1-\sigma)$. Завдяки періодичності тригонометричних функцій в (23) існують кратні розв'язки для частоти обмежених фононів $\omega_{\gamma m} = c_m\gamma$ (m = 1,2,…) при фіксованому γ і n (тобто q). На рис. 1 a, b, c, d, e, f наведено дисперсійні криві, розраховані з (23) і (24) для найнижчих "ширинних" (при q = 0, m = 1,2,…,6) і "товщинних" мод (при q = π / 2d, m = 1,2,…,6) гібридних акустичних фононів прямокутного хвилеводу – квантового дроту з поперечними розмірами 28,3Å×56,6Å, 28,3Å×84,9Å, 28,3Å×113,2Å, 50Å×100Å, 50Å×150Å, 100Å×200Å ($c_d = 5{,}3\cdot10^5$ см/с, $c_s = 3{,}0\cdot10^5$ см/с [4,5]). Крім дисперсії фазової швидкості $c_m(\gamma)$, характерним для гібридних мод є наявність одночасно поздовжніх і поперечних компонент вектора зміщень (**u** і **v,** див. форм. (1)-(3), (13)-(15)). На рис. 1 "ширинні" моди розташовані при нижчих енергіях, ніж "товщинні" моди, як і повинно бути [1,2], оскільки ширина є більшою за товщину розглянутих дротів.

Висновки

1. Підтверджено існування системи "ширинних" і "товщинних" мод хвильоводу в моделі прямокутного дроту.
2. З'ясовані характерні особливості спектра $\omega_{\gamma m} = c_m\gamma$ (m = 1,2,…) гібридних обмежених акустичних фононів: наявність одночасно поздовжніх і поперечних компонент вектора зміщень, дисперсії фазової швидкості $c_m(\gamma)$, залежних від геометричних розмірів дроту.
3. Визначені дисперсійні криві для найнижчих "ширинних" і "товщинних" акустичних мод в прямокутному дроті GaAs свідчать про важливість квантово-розмірних обмежень для фононів дроту.

Додаток

$$B_\gamma^{(w)} = \frac{2}{d}\left\{ f_2(k_1,d) + 2\beta^{(w)} g_1(k_1,k_2,d) + (\beta^{(w)})^2 f_2(k_2,d) + \frac{\gamma^2}{k_1^2} f_1(k_1,d) - \right.$$
$$\left. -\frac{2k_2}{k_1}\beta^{(w)} g_2(k_1,k_2,d) + \frac{k_2^2}{\gamma^2}(\beta^{(w)})^2 f_1(k_2,d) \right\}, \quad (Д.1)$$

$$\beta^{(w)} = -\frac{\sin(k_1 d)}{\sin(k_2 d)} \frac{2\gamma^2}{(\gamma^2-k_2^2)}; \quad (Д.2)$$

$$f_i(k_j,d) = d\left[1-(-1)^i \frac{\sin(2k_j d)}{2k_j d}\right], \ \mathrm{i,j} = 1,2; \quad (Д.3)$$

$$g_i(k_1,k_2,d) = \frac{\sin(k_1-k_2)d}{(k_1-k_2)} + (-1)^i \frac{\sin(k_1+k_2)d}{(k_1+k_2)}; \quad (Д.4)$$

де k_j визначаються форм. (4) при $q = 0$.

$$B_\gamma^{(th)} = \frac{1}{a}\left\{ f_2(k_1,a) + 2\beta^{(th)} g_1(k_1,k_2,a) + (\beta^{(th)})^2 f_2(k_2,a) - \frac{\pi^2}{4k_1^2 d^2} f_1(k_1,a) - \right.$$
$$-\frac{\beta_1\pi}{k_1 d} g_2(k_1,k_2,a) - \beta_1^2 f_1(k_2,a) + \frac{\gamma^2}{k_1^2} f_1(k_1,a) - \frac{2}{k_1}\left(k_2\beta^{(th)} + \frac{\beta_1\pi}{2d}\right) g_2(k_1,k_2,a) +$$

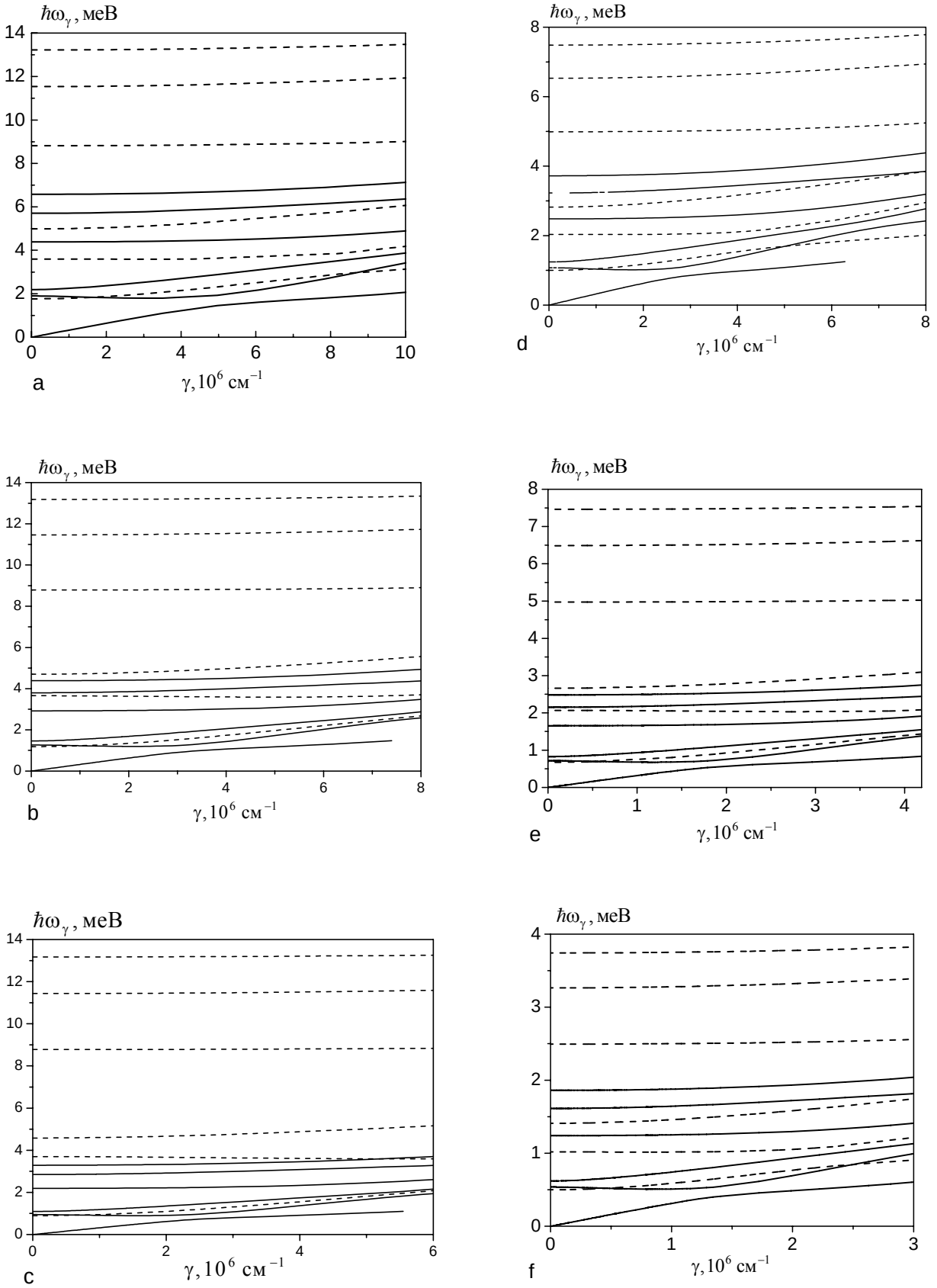

Рис. 1. Дисперсійні криві для найнижчих "ширинних" і "товщинних" мод акустичних фононів (m=1,2,…6) квантового дроту GaAs: a)28,3Å×56,6Å; b)28,3Å×84,9Å; c) 28,3Å×113,2Å; d)50Å×100Å; e)50Å×150Å, f)100Å×200Å. Суцільні лінії – "ширинні" моди, пунктирні лінії – "товщинні" моди.

$$+\frac{\left(k_2\beta^{(th)}+\frac{\beta_1\pi}{2d}\right)^2}{\gamma^2}f_1(k_2,a)+2\left[\frac{\pi^2}{4k_1^2d^2}f_1(k_1,a)+\frac{\beta_1\pi}{k_1d}g_2(k_1,k_2,a)+\beta_1^2f_1(k_2,a)\right]\Bigg\}; \qquad (Д.5)$$

$$\beta^{(th)}=-\frac{\sin(k_1a)}{\sin(k_2a)}\frac{2\left(\frac{\pi^2}{4d^2}+\gamma^2\right)}{\left[\gamma^2+\frac{\pi^2}{4d^2}-k_2^2\right]}; \qquad (Д.6)$$

$$\beta_1=\frac{\sin(k_1a)}{\sin(k_2a)}\frac{k_2\pi/d}{\left[\gamma^2+\frac{\pi^2}{4d^2}-k_2^2\right]}; \qquad (Д.7)$$

в (Д.5)-(Д.6) k_j визначаються форм. (4) при $q=\pi/2d$.

Рувінський Б.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедри фізики новітніх технологій.
Рувінський М.А. – д.ф.-м.н., професор кафедри фізики і хімії твердого тіла.

[1] M. Redwood, *Mechanical Waveguides***.** Pergamon. Oxford. (1960); R.W. Morse // *J.Acoust.Soc.Am,* **20.** p.833 (1948); **22.** p.219 (1950).
[2] SeGi Yu, K.W. Kim, M.A. Stroscio, G.F. Iafrate, A. Ballato. Electron–acoustic-phonon scattering rates in rectangular wires // *Phys.Rev.B.,* **50**(3), pp. 1733-1738 (1994).
[3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости.* Наука. М. 248 с. (1987).
[4] H. Bruus, K. Flensberg, H. Smith. Magnetoconductivity of quantum wires with elastic and inelastic scattering // *Phys. Rev. B.,* **48**(15), pp. 11144-11155 (1993).
[5] А.А. Блистанов, В.С. Бондаренко, Н.В. Переломова, Ф.Н. Стрижевская, В.В. Чкалова, М.П. Шаскольская. *Акустические кристаллы. Справочник.* Наука, М. 632 с. (1982).

B.M. Ruvinskii[1], M.A. Ruvinskii[2]

Energy Spectrum of Acoustic Phonons in Rectangular Quantum Wire

[1]Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,
15, Carpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, bruvinsky@gmail.com
[2]Vasyl Stefanyk' Precarpathian National University,
57 Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

The acoustic vibrations into the model of rectangular quantum wire with free surface have been considered. The dispersion curves for the confined acoustic phonons of the hybrid width and thickness modes in rectangular GaAs wire have been calculated. Besides the dispersion of phase velocity, the simultaneous existence of the longitudinal and transverse vector components of displacements is characteristic of the hybrid modes. The energy spectrum of acoustic phonons has determined for the different cross-sectional dimensions of GaAs wire.