

КВАНТОВАНИЕ СПЕКТРА ФОНОНОВ В ТОНКИХ ПРОВОЛОКАХ (НИТЯХ)

В. Г. ГРИГОРЯН, Д. Г. СЕДРАКЯН

Исследуется вопрос о нахождении спектра акустических фононов в проволоке со свободными границами в дебаевском приближении. На ЭВМ выполнено решение полученного секулярного уравнения и проведен анализ дисперсионных кривых для различных типов колебаний, результаты которого представлены графически. Аналитически исследованы некоторые частные случаи. Найдена плотность состояний фононов в проволоке. Рассмотрен вопрос о температурной зависимости теплоемкости фононного газа в проволоке при низких температурах.

В последнее время стало возможным получать и экспериментально и теоретически исследовать тонкие кристаллические проволоки (нити). Так, например, в [1] сообщалось об обнаружении размерного осцилляционного продольного магнетосопротивления в тонких цилиндрических монокристаллах с диаметром $\approx 0,1$ мкм. В [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 работы [3]. Известно, что наряду с электронами и дырками важную роль в различных явлениях, происходящих в твердых телах (процессы теплопроводности, электропроводности и т. д.), играют фононы. В связи с этим представляет несомненный интерес исследование влияния 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 ($2ag \ll 1$, a — радиус стержня, g — волновое число), для которых 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 осуществляются крайне редко.

В настоящей работе исследуется 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 $T \ll \theta$, и найденные решения для спектра и плотности состояний фононов дают возможность находить связанные с решеточными колебаниями термодинамические и кинетические характеристики тонких нитевидных кристаллов в условиях, когда нельзя считать, что проволока колеблется подобно массивному образцу.

Следует отметить также, что рассматриваемая задача может оказаться полезной и в технике при расчете вибраций цилиндров, которые необходимо учитывать в различных инженерных конструкциях.

1. Колебания проволоки со свободными границами

Вектор смещения u упругой среды удовлетворяет следующему уравнению:

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

где c_l и c_t — соответственно продольная и поперечная скорости звука в массивном образце, ω — частота колебаний. Согласно методу Лемба, изложенному, например, в [4], решение (1) можно представить в виде $u = u_1 + u_2$, где

$$u_1 = -\frac{c_l^2}{\omega^2} \text{grad } \varphi; \quad (2)$$

здесь φ — функция, удовлетворяющая скалярному уравнению Гельмгольца:

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

а u_2 удовлетворяет следующей системе:

$$\Delta u_2 + \frac{\omega^2}{c_t^2} u_2 = 0, \quad \text{div } u_2 = 0, \quad (4)$$

т. е. поле смещений u_1 представляет фактически волну сжатия ($\text{div } u_1 \neq 0$), а u_2 — волну сдвига ($\text{div } u_2 = 0$).

Решения (3) и (4) естественно искать в цилиндрических координатах. Решения (3) хорошо известны [6], и для компонент волны сжатия u_1 получаем следующие выражения:

$$\begin{aligned} u_{1r} &= B \frac{\partial J_m(\beta r)}{\partial r} e^{igz} \sin(m\theta), \\ u_{1\theta} &= Bm \frac{J_m(\beta r)}{r} e^{igz} \cos(m\theta), \\ u_{1z} &= B ig J_m(\beta r) e^{igz} \sin(m\theta); \end{aligned} \quad (5)$$

здесь $\beta^2 = \omega^2/c_l^2 - g^2$, g — волновое число, m принимает целые значения ($0, \pm 1, \pm 2, \dots$), $J_m(\beta r)$ — функция Бесселя порядка m , B — константа.

Ввиду того, что $\text{div } u_2 = 0$, первое уравнение системы (4) принимает вид

$$-\text{rot rot } u_2 + \frac{\omega^2}{c_t^2} u_2 = 0. \quad (6)$$

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

$$\Delta u_{2z} + \frac{\omega^2}{c_i^2} u_{2z} = 0, \quad (7a)$$

$$\Delta u_{2r} + \frac{2}{r} \frac{\partial u_{2r}}{\partial r} + \left(\frac{1}{r^2} + \frac{\omega^2}{c_i^2} \right) u_{2r} + \frac{2ig}{r} u_{2z} = 0. \quad (7b)$$

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

$$\frac{d^2 W}{dr^2} + \frac{3}{r} \frac{dW}{dr} + \left(\frac{1-m^2}{r^2} + \alpha^2 \right) W + A \frac{2ig}{r} J_m(\alpha r) = 0, \quad (8)$$

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

$$\begin{aligned} u_{2r} &= \left[Cm \frac{J_m(\alpha r)}{r} + A ig \frac{\partial J_m(\alpha r)}{\partial r} \right] e^{igz} \sin(m\theta), \\ u_{2\theta} &= \left[C \frac{\partial J_m(\alpha r)}{\partial r} + A igm \frac{J_m(\alpha r)}{r} \right] e^{igz} \cos(m\theta), \\ u_{2z} &= A \alpha^2 J_m(\alpha r) e^{igz} \sin(m\theta), \end{aligned} \quad (9)$$

которые вместе с (5) образуют полное решение уравнения (1). В выражениях (9) $\alpha^2 = \omega^2/c_i^2 - g^2$, 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:

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

где ρ — плотность кристалла.

С учетом условий (10) и найденных выше решений уравнения (1), для нахождения спектра фононов получаем секулярное уравнение

$$\det P = 0, \quad (11)$$

где P определяется следующей матрицей 3×3 :

$$P \equiv \begin{vmatrix} 2ig\Phi' & (\alpha^2 - g^2)F' & \frac{igm}{a}F \\ \frac{m}{a} \left[\Phi' + \alpha^2 \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{\Phi}{\alpha^2} \right) \right] & \frac{igm}{a} \left[F' + \alpha^2 \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{F}{\alpha^2} \right) \right] & a \left[\frac{m^2}{\alpha^3} F + \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{F'}{a} \right) \right] \\ \Phi'' - \left(\frac{\omega^2}{2c_i^2} - \frac{\omega^2}{c_i^2} \right) \Phi & igF'' & m \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{F}{a} \right) \end{vmatrix}. \quad (12)$$

Здесь использованы обозначения:

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

2. Спектр фононов и плотность состояний

В общем случае уравнение (11) аналитически не решается. В связи с этим для получения дисперсионных соотношений уравнение (11) было решено на ЭВМ БЭСМ-6 для случаев $m=0-4$. На рис. 1 представлены результаты для $m=0; 1$. Ввиду того, что величины α и β могут принимать как вещественные, так и мнимые значения, что приводит в (12) к за-

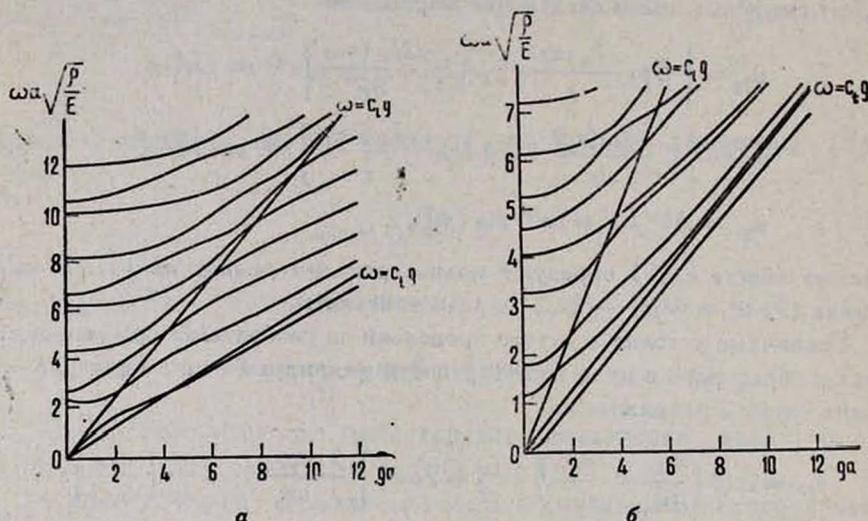


Рис. 1. а) Дисперсионные соотношения для волн с $m=0$; б) дисперсионные соотношения для волн с $m=1$.

мене обыкновенных функций Бесселя на модифицированные, то фактически приходилось решать разные уравнения в разных областях плоскости (ω, g) . Эти три области выделены на рис. 1 прямыми $\omega=c_1g$ и $\omega=c_2g$. Из (11) также следует, что вид дисперсионных кривых $\omega(g)$ зависит от скоростей c_1 и c_2 , которые, в свою очередь, определяются упругими константами кристалла: модулем Юнга E , коэффициентом Пуассона σ и плотностью ρ . Уравнение решалось для случая $c_1/c_2 = 2$ ($\sigma = 1/3$). Выбор значения $\sigma = 1/3$ объясняется двумя причинами: во-первых, значение $\sigma = 1/3$ 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, Cd* и др., близко к выбранному значению $\sigma = 1/3$. Что касается численных значений E и ρ , то, как видно из рис. 1, их выбор отражается лишь на масштабе вдоль оси ординат, и, следовательно, полученные графики могут быть использованы для материалов с $\sigma = 1/3$ и любых E и ρ при любом радиусе a нити.

При $m = 0$ дисперсионное уравнение (11) распадается на два уравнения, одно из которых есть

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

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

$$\omega = c_l \sqrt{g^2 + \frac{f_{2s}^2}{a^2}}, \quad (14)$$

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

Второе дисперсионное уравнение, соответствующее случаю $m = 0$ и получающееся из условия равенства нулю детерминанта 2×2 , решено численно (рис. 1а).

Для произвольного m дисперсионные кривые представляют собой семейство ветвей, берущих начало на оси ординат (происходит квантование спектра акустических фононов). Это хорошо видно из кривых рис. 1. Частоты для некоторых ветвей при $g=0$ можно определить из уравнения

$$\frac{\partial J_m(\alpha a)}{\partial \alpha} = 0, \quad (15)$$

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 ($m = 1$) (нумерация кривых идет снизу) при $g=0$ получаются из уравнения (15). Частоты для остальных кривых рис. 1 аналитически определить не удастся.

Спектральные ветви, как видно из рис. 1, при $g=0$ имеют нулевой наклон. Это легко показать аналитически, подставив в уравнение (11) разложение $\omega(g)$ по степеням g : $\omega = \omega_0 + \gamma_1 g + \gamma_2 g^2$; 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.

В области $\omega > c_l g$ α и β являются вещественными числами, и зависимость смещений от g носит осцилляционный характер. В области, лежащей между прямыми $\omega = c_l g$ и $\omega = c_l \beta$, 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 являются чисто мнимыми числами, и смещение возрастает (при больших значениях аргумента по показательному закону) с увеличением расстояния от центра проволоки.

При больших значениях g , как видно из рис. 1, наклоны ветвей близки к наклону прямых $\omega = c_1 g$ или $\omega = c_2 g$. Это соответствует переходу к случаю массивного образца (при $2\alpha g \gg 1$ границы проволоки не должны чувствоваться), т. е. разделению волн на волны сдвига и сжатия. Что касается самых нижних ветвей, то при больших g они переходят в поверхностные волны.

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

В одномерном случае число состояний для одной ветви в интервале dg равно $ldg/(2\pi)$, где l — длина проволоки, т. е. плотность состояний $G(\omega) \sim dg/d\omega$. Таким образом, из-за отсутствия явной зависимости $\omega(g)$ вычислить плотность состояний фононов в общем случае аналитически невозможно. Для вычисления $G(\omega)$ в этом случае надо воспользоваться рассчитанными дисперсионными кривыми. На рис. 2 для краткости при-

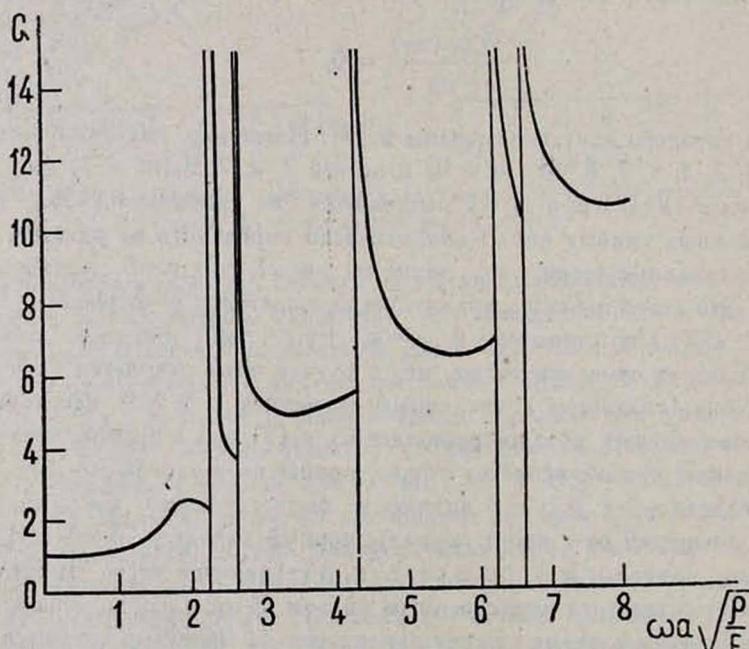


Рис. 2. Плотность состояний фононов при $m=0$ ($G' = 2\pi G/l$).

водится вычисленный график производных $dg/d\omega$ лишь для $m = 0$. 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 в предыдущем пункте, дисперсионные кривые при $g=0$ имеют нулевой наклон, т. е. для n -ой ветви $\omega = \omega_n + \gamma_2 g^2$ или производная $dg/d\omega \sim \frac{1}{\sqrt{\omega - \omega_n}}$, т. е. имеет корневую 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 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 $m = 1$ $G(\omega) \sim 1/\sqrt{\omega}$. В этом случае суммарная энергия фононов есть

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

а теплоемкость $C_{\text{ф}} \sim T^{1/2}$, т. е. в отличие от массивного образца при достаточно низких температурах фононная теплоемкость в нитевидных кристаллах будет доминировать над электронной теплоемкостью, температурная зависимость которой в тонких проволоках остается без изменения ($C_{\text{эл}} \sim T$). В (16) b и b' — константы, не зависящие от температуры.

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность Э. М. Казаряну и О. М. Сапонджяну за ценные советы и полезные консультации, а также С. К. Данагуляну за помощь при проведении численных расчетов.

Ереванский политехнический институт им. К. Маркса

Поступила 25. III. 1981

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Б. Брандт и др. ЖЭТФ, 72, 2332 (1977).
2. В. С. Бабиченко, Л. В. Келдыш, А. П. Силин. ФТТ, 22, 1238 (1980).
3. Б. А. Тавгер, М. Д. Блох, Е. Л. Фишман. ФММ, 33, 1137 (1972).
4. А. Ляв. Математическая теория упругости. М.—Л., 1934.
5. Б. А. Тавгер, В. Я. Демиковский. Изв. ВУЭ, Физика, 4, 130 (1966).
6. Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике, Изд. Наука, М., 1973.
7. Справочник по специальным функциям. Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, Изд. Наука, М., 1979.
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теория упругости, Изд. Наука, М., 1965.

ՅՈՒՆԵՍԿՈՒԻ ԲՎԱՆՏԱՑՈՒՄԸ ԹԵԼԱՆՄԱՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Վ. Գ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Դ. Գ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ

Դերսյի մոտավորությամբ հետազոտված է ազատ սահմաններիով թելանման բյուրեղում ձախյալին ֆոնոնների սպեկտրը: Ստացված սեկուլյար հավասարումը լուծված է էՆՄ-ի վրա

և հետազոտված են տարբեր տիպի տատանումների դիսպերսիոն կորերը: Անալիտիկորեն հետազոտված են որոշ սահմանային դեպքեր: Ստացված է թելանման բյուրեղում ֆոնոնների վիճակների խտությունը: Քննարկված է ֆոնոնային գազի շերտունակության շերտաստիճանային կախման հարցը ցածր շերտաստիճաններում:

QUANTIZATION OF PHONON SPECTRA IN THIN WIRES (THREADS)

V. G. GRIGORYAN, D. G. SEDRAKYAN

The problem of determination of acoustic phonons spectra in a wire with free boundaries was studied in the Debye approximation. The obtained secular equation was solved with a computer and the analysis of dispersion curves for various kinds of oscillations was carried out. The density of phonon states in a wire was determined. The temperature dependence of the heat capacity of a phonon gas at low temperatures was investigated.