

# Колебательные моды и электронно-фононное взаимодействие в полупроводниковых нанотрубках

© А.И. Ведерников<sup>¶</sup>, А.В. Чаплик<sup>¶¶</sup>

Новосибирский государственный университет,  
630090 Новосибирск, Россия

\* Институт физики полупроводников, Сибирское отделение Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

(Получена 19 января 2004 г. Принята к печати 21 апреля 2004 г.)

Найдены собственные моды колебаний полупроводниковой  $A^{III}B^V$  нанотрубки с учетом кристаллической структуры и пьезоэффекта. Исследовано электронно-фононное взаимодействие и показано, что его пьезоэлектрическая часть сложным образом зависит от частоты фонона, что отличает нанотрубку от объемного образца.

## 1. Введение

Нанотрубки (НТ) продолжают оставаться одним из самых актуальных объектов исследований в физике низкоразмерных систем. Большая часть литературы по этому вопросу посвящена углеродным НТ (см. напр. [1] и имеющиеся в нем ссылки). Однако последние годы отмечены успехами в технологии получения полупроводниковых НТ соединений  $A^{III}B^V$ , Ge и Si. Предложенная В.Я. Принцем с сотрудниками методика самосворачивания двойных слоев [2–4] позволяет получать НТ, в которых радиус и толщина стенок является контролируемыми параметрами и могут изменяться в весьма широких пределах. Электронные процессы в полупроводниковых НТ при всем сходстве их с аналогичными процессами в углеродных НТ, имеют и ряд существенных отличий. В предлагаемой работе мы исследуем электронно-фононное взаимодействие в полупроводниковых  $A^{III}B^V$  НТ, для чего, естественно, необходимо сначала найти собственные колебательные моды НТ. Применительно к углеродным НТ этот вопрос рассматривался в недавней работе Сузуры и Андо [5]. Наша работа имеет ряд существенных отличий от [5]. Во-первых, благодаря упругой изотропии слоя двумерного графита, колебательную задачу для углеродных нанотрубок можно решать в изотропном, континуальном приближении, что и сделано авторами в [5] (среда описывается лишь двумя модулями упругости). В случае же свернутых квантовых ям  $A^{III}B^V$  мы учитываем три упругих модуля кубического кристалла. Во-вторых, как в колебательной задаче, так и в электронно-фононном взаимодействии нами учтен пьезоэффект, существенный в кристаллах  $A^{III}B^V$ . В-третьих, как будет показано, пьезоэлектрическое взаимодействие акустических фононов с двумерными электронами, „привязанными“ к поверхности полого цилиндра, существенно отличается от аналогичного электронно-фононного взаимодействия в объемных образцах. Этот вопрос, насколько нам известно, до сих пор не обсуждался в литературе.

## 2. Собственные колебания полого цилиндра

Мы рассматриваем нанотрубку, полученную свертыванием квантовой пленки кубического кристалла. Нормаль к поверхности пленки соответствует направлению [100], ось трубки — направлению [001] (рис. 1). Введем цилиндрическую систему координат, в которой ось  $z$  совпадает с осью цилиндрической оболочки, а  $r$  и  $\alpha$  — полярные координаты в плоскости, перпендикулярной оси цилиндра. Пусть  $R$  — радиус срединной поверхности трубки,  $h$  — ее толщина. Таким образом, в отсутствие колебаний трубка занимает объем  $-h/2 \leq r \leq h/2$  (координата  $r$  отсчитывается от срединной поверхности),  $0 \leq z \leq L$ , где  $L$  — длина трубки. Получившаяся при сворачивании пленки цилиндрическая оболочка, строго говоря, напряжена и в ней существуют деформации типа одноосного растяжения–сжатия (знак деформации различен по разные стороны от срединной поверхности). Очевидно, что при условии  $R \gg a_0$  ( $a_0$  — постоянная решетки) эти деформации малы. Из очевидных соображений симметрии следует, что связь между тензором напряжений и тензором деформации будет такой же, как и в плоской пленке кубического кристалла: существует всего три независимые компоненты тензора модулей упругости и одна независимая компонента тензора пьезомодулей, хотя абсолютные значения констант могут отличаться от плоского случая (отличие мало при  $R \gg a_0$ ). В силу сказанного тензор напряжений можно

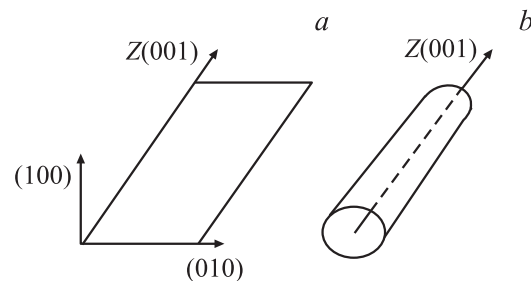


Рис. 1.  $a$  — квантовая пленка,  $b$  — свернутая нанотрубка.

<sup>¶</sup> E-mail: ahtoh@ngs.ru

<sup>¶¶</sup> E-mail: chaplik@isp.nsc.ru

записать в виде

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijkl} \cdot u_{kl} - e_{kij} \cdot E_k, \quad (1)$$

где  $\lambda_{ijkl}$  — тензор модулей упругости,  $e_{kij}$  — тензор пьезомодулей,  $E_k$  — вектор напряженности электрического поля,  $u_{kl}$  — тензор деформации. Независимые компоненты тензора модулей упругости  $\lambda_{iiii} \equiv \lambda_{11}$ ,  $\lambda_{iijj} \equiv \lambda_{12}$ ,  $\lambda_{ijjj} \equiv \lambda_{44}$ , где индексы  $i$  и  $j$  могут принимать любое их трех значений  $z, r, \alpha$  ( $i \neq j$ ). Независимая компонента тензора пьезомодулей  $e_{ijk} \equiv e_{14}$ , где  $i, j, k$  — также могут принимать любые три значения  $z, r, \alpha$ , при этом все три индекса должны быть различными.

В общем случае решение полной трехмерной задачи является чрезвычайно сложным. Тем не менее существуют способы приведения трехмерной задачи к двумерной, применимые к достаточно тонким оболочкам ( $h \ll R$ ). Одним из таких путей является принятие гипотезы недеформируемых нормалей (гипотезы Кирхгофа–Лява, см., например, [6]). Она состоит в том, что любое волокно, нормальное к срединной поверхности до деформации, остается после деформации прямым и нормальным к срединной поверхности в ее новом очертании; вместе с тем длина волокна вдоль толщины оболочки остается неизменной.

Рассмотрим слой оболочки, отстоящий на расстоянии  $r$  от срединной поверхности ( $-h/2 \leq r \leq h/2$ ). Будем учитывать изменение кривизны для данного слоя по сравнению с кривизной срединной поверхности. Тогда выражения для деформации будут следующими:

$$\begin{aligned} u_{\alpha\alpha}^r &= \frac{1}{R+r} \frac{\partial u^r}{\partial \alpha} + \frac{w^r}{R+r}, \\ u_{zz}^r &= \frac{\partial v^r}{\partial z}, \\ u_{z\alpha}^r &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u^r}{\partial z} + \frac{1}{R+r} \frac{\partial v^r}{\partial \alpha} \right), \\ u_{r\alpha}^r &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u^r}{\partial r} - \frac{u^r}{R+r} + \frac{1}{R+r} \frac{\partial w^r}{\partial \alpha} \right), \\ u_{rr}^r &= \frac{\partial w^r}{\partial r}, \\ u_{rz}^r &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v^r}{\partial r} + \frac{\partial w^r}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $u_{ij}^r$  — компоненты тензора деформации, а  $(u^r, v^r, w^r)$  — компоненты вектора смещения соответственно по азимутальному углу, вдоль трубки и по радиусу трубки. Те же величины без верхнего индекса  $r$  будут относиться к срединному слою.

По гипотезе прямых нормалей мы должны принять:  $\sigma_{r\alpha} = \sigma_{rz} = \sigma_{rr} = 0$ . Развертывая эти выражения,

получим

$$\begin{aligned} 2\lambda_{44} u_{r\alpha}^r + e_{14} \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0, \\ 2\lambda_{44} u_{rz}^r + e_{14} \frac{1}{R+r} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha} &= 0, \\ \lambda_{11} u_{rr}^r + \lambda_{12} (u_{zz}^r + u_{\alpha\alpha}^r) &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\varphi$  — электростатический потенциал. Перепишем первые два уравнения системы (3), через вектор смещения:

$$\begin{aligned} \lambda_{44} \left( \frac{\partial u^r}{\partial r} - \frac{u^r}{R+r} + \frac{1}{R+r} \frac{\partial w^r}{\partial \alpha} \right) + e_{14} \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0, \\ \lambda_{44} \left( \frac{\partial w^r}{\partial z} + \frac{\partial v^r}{\partial r} \right) + e_{14} \frac{1}{R+r} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha} &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Для точек прямого волокна, нормального к срединной поверхности, производные  $\frac{\partial u^r}{\partial r}$  и  $\frac{\partial v^r}{\partial r}$  должны сохранять постоянные значения, равные

$$\frac{\partial u^r}{\partial r} = \frac{u^r - u}{r}, \quad \frac{\partial v^r}{\partial r} = \frac{v^r - v}{r}. \quad (5)$$

Подставим в уравнения (4) выражения (5); учитывая также, что в первом приближении можно положить  $w^r = w$ , получим

$$\begin{aligned} u^r &= \left( 1 + \frac{r}{R} \right) u - \frac{r}{R} \frac{\partial w}{\partial \alpha} - \frac{r(R+r)}{R} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \\ v^r &= v - r \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{r}{R+r} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha}. \end{aligned} \quad (6)$$

Найдем компоненты тензора деформации через смещения в срединной поверхности:

$$\begin{aligned} u_{\alpha\alpha}^r &= \frac{1}{R} \frac{\partial u}{\partial \alpha} - \frac{r}{R(R+r)} \frac{\partial^2 w}{\partial \alpha^2} - \frac{r}{R} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z \partial \alpha} + \frac{w}{R+r}, \\ u_{zz}^r &= \frac{\partial v}{\partial z} - r \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \frac{r}{R+r} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z \partial \alpha}, \\ u_{z\alpha}^r &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{R+r} \frac{\partial v}{\partial \alpha} + \left( 1 + \frac{r}{R} \right) \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{r(2R+r)}{R(R+r)} \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial \alpha} - \frac{r}{(R+r)^2} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \alpha^2} - \frac{r(R+r)}{R} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right), \\ u_{r\alpha}^r &= -\frac{e_{14}}{2\lambda_{44}} \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \\ u_{rr}^r &= -\frac{\lambda_{12}}{\lambda_{11}} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial u}{\partial \alpha} + \frac{\partial v}{\partial z} - r \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \frac{r}{R(R+r)} \frac{\partial^2 w}{\partial \alpha^2} + \frac{w}{R+r} - \frac{r(2R+r)}{R(R+r)} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z \partial \alpha} \right), \\ u_{rz}^r &= -\frac{e_{14}}{2\lambda_{44}} \frac{1}{R+r} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha}. \end{aligned} \quad (7)$$

Теперь можно найти ненулевые компоненты тензора напряжений:

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^r &= \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial u}{\partial \alpha} + \frac{w}{R+r} - \frac{r}{R(R+r)} \frac{\partial^2 w}{\partial \alpha^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{r}{R} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial \varphi}{\partial z \partial \alpha} \right) + \frac{\lambda_{12}(\lambda_{11} - \lambda_{12})}{\lambda_{11}} \\ &\quad \times \left( \frac{\partial v}{\partial z} - r \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \frac{r}{R+r} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z \partial \alpha} \right), \\ \sigma_{zz}^r &= \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \left( \frac{\partial v}{\partial z} - r \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \frac{r}{R+r} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial \varphi}{\partial z \partial \alpha} \right) \\ &\quad + \frac{\lambda_{12}(\lambda_{11} - \lambda_{12})}{\lambda_{11}} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial u}{\partial \alpha} + \frac{w}{R+r} \right. \\ &\quad \left. - \frac{r}{R(R+r)} \frac{\partial^2 w}{\partial \alpha^2} - \frac{r}{R} \frac{e_{14}}{\lambda_{44}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z \partial \alpha} \right), \\ \sigma_{z\alpha}^r &= \lambda_{44} \left( \left(1 + \frac{r}{R}\right) \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{R+r} \frac{\partial v}{\partial \alpha} - \frac{r(2R+r)}{R(R+r)} \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial \alpha} \right) \\ &\quad - \frac{r}{(R+r)^2} e_{14} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \alpha^2} - \frac{r(R+r)}{R} e_{14} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + e_{14} \frac{\partial \varphi}{\partial r}.\end{aligned}\quad (8)$$

Нам необходимо далее найти связь между смещениями срединного слоя и потенциалом  $\varphi$ . Деформации пьезоэлектрических полупроводников сопровождаются поляризацией  $\mathbf{P}$ , которая связана с тензором деформации:

$$P_i = e_{ijk} u_{jk}. \quad (9)$$

Электрический потенциал  $\varphi(\mathbf{r})$  может быть найден из уравнения Пуассона  $\text{div } \mathbf{D} = 0$ , где вектор электрической индукции равен  $D_i = \varepsilon E_i + 4\pi e_{ijk} u_{jk}$ . Таким образом, уравнение Пуассона примет вид

$$-\varepsilon \Delta \varphi + 4\pi e_{ijk} \frac{\partial u_{jk}}{\partial x_i} = 0. \quad (10)$$

Предположим, что в НТ возбуждена акустическая волна с квазипульсом  $q$  вдоль НТ и азимутальным квантовым числом  $m$ . Вектор смещения в этом случае равен  $(u, v, w) \exp(iqz + im\alpha - i\omega t)$ . Имея ввиду, что толщина стенок НТ много меньше ее радиуса, будем искать решение в виде разложения:

$$\begin{aligned}\varphi &= \left( \varphi_0(q, m) + \varphi_1(q, m) \frac{r}{R} + \varphi_2(q, m) \frac{r^2}{R^2} \right) \\ &\quad \times \exp[iqz + im\alpha - i\omega t].\end{aligned}\quad (11)$$

После подстановки потенциала в форме (11) в уравнение Пуассона (10) получим в нулевом приближении по  $r$ :

$$\begin{aligned}-\left( \varepsilon + \frac{8\pi e_{14}^2}{\lambda_{44}} \right) \left( q^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) \varphi_0 + \varepsilon \frac{\varphi_1 + 2\varphi_2}{R^2} \\ = 4\pi e_{14} \left( -\frac{im}{R^2} v + \frac{iq}{R} u + \frac{2mq}{R} w \right).\end{aligned}\quad (12)$$

К этому уравнению необходимо добавить граничные условия:

$$\begin{aligned}q \frac{I'_m(qR - qh/2)}{I_m(qR - qh/2)} \left( \varphi_0 - \varphi_1 \frac{h}{2R} + \varphi_2 \frac{h^2}{4R^2} \right) \\ = \varepsilon \left( \frac{\varphi_1}{R} - \varphi_2 \frac{h}{R^2} \right) - 8\pi e_{14} u_{\alpha z} \Big|_{r=-h/2},\end{aligned}\quad (13)$$

$$\begin{aligned}q \frac{K'_m(qR + qh/2)}{K_m(qR + qh/2)} \left( \varphi_0 + \varphi_1 \frac{h}{2R} + \varphi_2 \frac{h^2}{4R^2} \right) \\ = \varepsilon \left( \frac{\varphi_1}{R} + \varphi_2 \frac{h}{R^2} \right) - 8\pi e_{14} u_{\alpha z} \Big|_{r=h/2},\end{aligned}\quad (14)$$

где  $I_m, K_m$  — бесселевы функции мнимого аргумента первого и третьего рода соответственно, а  $I'_m, K'_m$  — их производные. Компоненты тензора деформации  $u_{\alpha z}$  в уравнениях (13), (14) берутся на внутренней ( $r = -h/2$ ) и внешней ( $r = h/2$ ) поверхности НТ соответственно. Из уравнений (12)–(14) находим  $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2$  в главном по  $h$  приближении:

$$\varphi_0 = \frac{2\pi e_{14} h}{\varepsilon} (qR(I'_m K_m + I_m K'_m) + 2\varepsilon I_m K_m) \left( \frac{im}{R} v + iqu \right),$$

$$\varphi_1 = \frac{4\pi e_{14} R}{\varepsilon} \left( \frac{im}{R} v + iqu \right), \quad (15)$$

$$\varphi_2 = -\frac{4\pi e_{14} R}{\varepsilon} \left( \frac{im}{R} v - mqw \right).$$

В формулах (15) аргументами бесселевых функций и их производных является  $qR$ . Окончательные выражения для  $\varphi$  получаем подстановкой (15) в (11). Далее, мы воспользуемся известными из теории колебаний упругих оболочек формулами для усилий, моментов, а также уравнениями движения элемента оболочки (см., например, [6]). Получим уравнения движения с учетом пьезоэффекта, в которых переменными являются только смещения срединного слоя:

$$\begin{aligned}\frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \left( \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \alpha^2} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial w}{\partial \alpha} \right) \\ + \frac{\lambda_{12}(\lambda_{11} - \lambda_{12})}{\lambda_{11}} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial^2 v}{\partial z \partial \alpha} - \frac{h^2}{12R^2} \frac{\partial^3 w}{\partial z^2 \partial \alpha} \right) \\ + \lambda_{44} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial^2 v}{\partial z \partial \alpha} + \left(1 + \frac{h^2}{4R^2}\right) \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{h^2}{4R^2} \frac{\partial^3 w}{\partial z^2 \partial \alpha} \right) \\ + \frac{4\pi e_{14}^2}{\varepsilon} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial^2 v}{\partial z \partial \alpha} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - \frac{h^2}{12R^2} \frac{\partial^3 w}{\partial z^3} \right) \\
 & + \frac{\lambda_{12}(\lambda_{11} - \lambda_{12})}{\lambda_{11}} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial \alpha} + \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \lambda_{44} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial \alpha} \right) \\
 & + \left( 1 + \frac{h^2}{12R^2} \right) \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \alpha^2} + \frac{h^2}{12R^3} \frac{\partial^3 w}{\partial z \partial \alpha^2} \\
 & + \frac{4\pi e_{14}^2}{\varepsilon} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial \alpha} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \alpha^2} \right) = \rho \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}, \\
 & \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \left( -\frac{h^2}{12} \left( \frac{1}{R^4} \frac{\partial^4 w}{\partial \alpha^4} + \frac{\partial^4 w}{\partial z^4} \right) - \frac{h^2}{6R^4} \frac{\partial^2 w}{\partial \alpha^2} \right) \\
 & - \frac{1}{R^2} \left( 1 + \frac{h^2}{12R^2} \right) w - \frac{1}{R^2} \frac{\partial u}{\partial \alpha} + \frac{h^2}{12R} \frac{\partial^3 v}{\partial z^3} \\
 & + \frac{\lambda_{12}(\lambda_{11} - \lambda_{12})}{\lambda_{11}} \left( -\frac{1}{R} \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{h^2}{6R^2} \frac{\partial^4 w}{\partial z^2 \partial \alpha^2} \right) \\
 & + \frac{h^2}{12R^2} \frac{\partial^3 u}{\partial z^2 \partial \alpha} + \lambda_{44} \left( -\frac{h^2}{3R^2} \frac{\partial^4 w}{\partial z^2 \partial \alpha^2} \right) \\
 & + \frac{h^2}{4R^2} \frac{\partial^3 u}{\partial z^2 \partial \alpha} - \frac{h^2}{12R^3} \frac{\partial^3 v}{\partial z \partial \alpha^2} = \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}. \quad (16)
 \end{aligned}$$

Таким образом, нам удалось привести трехмерную задачу к двумерной. Эти уравнения полностью определяют малые колебания кристаллических тонких цилиндрических оболочек. Подставляя решение в виде бегущих волн, получим три линейных алгебраических уравнения на амплитуды смещений срединного слоя ( $u, v, w$ ). Условие существования нетривиального решения полученной однородной системы уравнений определяет закон дисперсии акустоэлектрических колебаний. Общее выражение достаточно громоздко; мы рассмотрим здесь два частных случая:  $m = 0$  и  $m = 1$ , где  $m$  — азимутальное квантовое число акустических фононов, определяющее зависимость смещений от  $\alpha$  через множитель  $\exp(im\alpha)$ .

Для  $m = 0$  частота поперечной волны (*in-plane*) в длинноволновом пределе равна

$\omega_1 = q\sqrt{\lambda_{44}/\rho + 4\pi e_{14}^2/\varepsilon\rho}$ . Собственный вектор смещения такой крутильной моды направлен по азимуту —  $\xi = (1, 0, 0)$ . Частота радиальной, так называемой „дышащей“ моды (*radial breathing mode*), также остается конечной в длинноволновом пределе и равна  $\omega_2 = 1/R\sqrt{(\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2)/\rho\lambda_{11}}$ . Ее вектор поляризации направлен по радиусу —  $\xi = (0, 0, 1)$ . И наконец, третья мода — это продольная акустическая волна, частота которой равна  $\omega_3 = q\sqrt{(\lambda_{11} - \lambda_{12})(\lambda_{11} + 2\lambda_{12})/\rho(\lambda_{11} + \lambda_{12})}$ . Собственный вектор направлен вдоль оси трубки —  $\xi = (0, 1, 0)$ .

Для  $m = 1$  в длинноволновом пределе ( $qR \ll 1$ ) также получаются три независимые колебательные моды:

$$\begin{aligned}
 \omega_1 &= \frac{1}{R} \sqrt{2 \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\rho\lambda_{11}}}, & \xi &= (1/\sqrt{2}, 0, i/\sqrt{2}); \\
 \omega_2 &= \frac{1}{R} \sqrt{\frac{\lambda_{44}}{\rho} + \frac{4\pi e_{14}^2}{\varepsilon\rho}}, & \xi &= (0, 1, 0); \\
 \omega_3 &= \sqrt{\frac{(\lambda_{11} - \lambda_{12})(\lambda_{11} + 2\lambda_{12})}{\rho(\lambda_{11} + \lambda_{12})}} q^2 R, \\
 \xi &= (1/\sqrt{2}, 0, -i/\sqrt{2}).
 \end{aligned} \quad (17)$$

Все эти ветви двукратно вырождены, так как в случае  $m = -1$  ответ получается тот же, за исключением векторов поляризации, которые нужно заменить на их комплексно сопряженные значения. Результат для  $\omega_3$  из (17) соответствует закону дисперсии изгибных волн в упругих стержнях (см. [7]). Уравнения (16) с  $e_{14} = 0, h = 0$  переходят в уравнения (2.5) работы [5] при выполнении следующих соотношений (в обозначениях работы [5]):

$$\begin{aligned}
 \frac{\mu}{M} &= \frac{\lambda_{44}}{\rho}, & \frac{B + \mu}{M} &= \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\rho\lambda_{11}}, \\
 \frac{B}{M} &= \frac{\lambda_{12}(\lambda_{11} - \lambda_{12})}{\rho\lambda_{11}} + \frac{\lambda_{44}}{\rho}. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Условие совместности указанных соотношений имеет вид  $\lambda_{11} - \lambda_{12} - 2\lambda_{44} = 0$ , что, как раз, и соответствует переходу к изотропной упругой среде.

На рис. 2 изображены спектры колебательных мод с  $m = 0; 1$  в длинноволновом пределе. Мы видим, что существует волна с квадратичной дисперсией при малых  $q$ . При предельно низких температурах  $T \ll s/R$ , где  $s$  — величина порядка скорости звука, именно эти колебания будут играть доминирующую роль в термодинамике и кинетике НТ. В отличие от изгибных волн тонкой пластинки, имеющих также квадратичную связь  $\omega$  и  $q$ , найденное решение  $\omega_3$  не содержит толщины оболочки  $h$ .

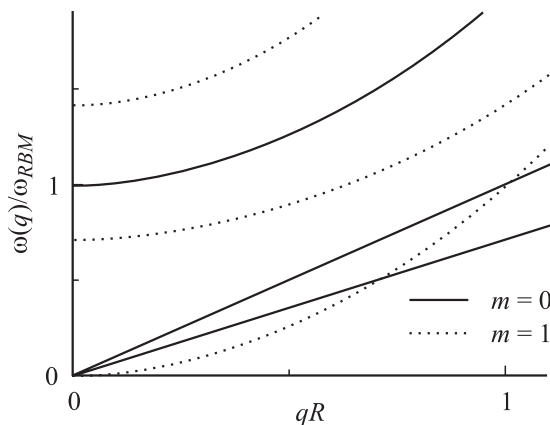


Рис. 2. Частоты колебательных мод в длинноволновом пределе с  $m = 0$  и  $m = 1$  как функции  $q$ .

Обсудим теперь решения с  $m > 1$ . Характеристический детерминант при  $k = 0$  имеет вид

$$\begin{vmatrix} \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \frac{m^2}{R^2} - \rho\omega^2 & 0 & -\frac{im}{R^2} \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \\ 0 & \left(\lambda_{44} \left(1 + \frac{h^2}{12R^2}\right) + \frac{4\pi e_{14}^2}{\varepsilon}\right) \frac{m^2}{R^2} - \rho\omega^2 & 0 \\ \frac{im}{R^2} \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} & 0 & \frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\lambda_{11}} \left(\frac{h^2(m^2-1)^2}{12R^4} + \frac{1}{R^2}\right) - \rho\omega^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (19)$$

В пределе  $h/R \ll 1$  легко получить:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \sqrt{\frac{\lambda_{44}}{\rho} \left(1 + \frac{h^2}{12R^2}\right) + \frac{4\pi e_{14}^2}{\varepsilon\rho}} \frac{m}{R}, \\ \omega_2 &= \sqrt{\frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\rho\lambda_{11}}} \frac{\sqrt{m^2 + 1}}{R}, \\ \omega_3 &= \sqrt{\frac{\lambda_{11}^2 - \lambda_{12}^2}{\rho\lambda_{11}}} \frac{m(m^2 - 1)}{\sqrt{m^2 + 1}} \frac{h}{2\sqrt{3}R}. \end{aligned} \quad (20)$$

Таким образом, все волны с  $m > 1$  характеризуются щелевой дисперсией ( $\omega \neq 0$  при  $k = 0$ ), хотя щель в  $\omega_3$  имеет дополнительную малость  $h/R$ .

### 3. Электронно-фононное взаимодействие

Рассмотрим взаимодействие акустических фононов с электронами через пьезоэлектрический потенциал. Гамильтониан взаимодействия имеет вид  $H_{piezo} = -e\varphi(\mathbf{r})$ . Это выражение следует усреднить по основному состоянию радиального движения электронов НТ. При этом линейный по  $r$  вклад в формуле (11) обращается в нуль, квадратичный относительно мал по  $h/R \ll 1$ , т. е. в главном порядке  $\langle \varphi \rangle = \varphi_0$ .

Оператор относительного смещения в представлении взаимодействия имеет вид

$$\eta(\mathbf{r}) = \sum_{q,m,s} \sqrt{\frac{\hbar}{2S\rho\omega_s(q,m)}} c_s(q,m) \xi(q,m) + c. c., \quad (21)$$

где  $\xi$  — нормированный на единицу собственный вектор колебаний. Его компоненты для разных мод выписаны в (17). Теперь можно найти гамильтониан взаимодействия:

$$H_{piezo} = \sum_{q,m,s} V(q,m) c_s(q,m) + c. c.,$$

где

$$\begin{aligned} V(q,m) &= \frac{2\pi e e_{14} h}{\varepsilon} (qR(I'_m K_m + I_m K'_m) + 2\varepsilon I_m K_m) \\ &\times \left( qu_0 + \frac{m}{R} v_0 \right) \sqrt{\frac{\hbar}{2S\rho\omega_s(q,m)}}. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь  $u_0$  и  $v_0$  — компоненты вектора поляризации  $\xi = (u_0, v_0, w_0)$ . Как видно из (22), в отличие от объемной ситуации пьезовзаимодействие в НТ весьма сложным образом зависит от волнового вектора фонона.

Электронно-фононное взаимодействие через деформационный потенциал имеет обычный вид:  $H_{def} = E_a \operatorname{div} \eta$ , где  $E_a$  — постоянная деформационного потенциала. Подставляя  $\eta(\mathbf{r})$  в это выражение, получим

$$H_{def} = \sum_{q,m,s} \Gamma(q,m) c_s(q,m) + c. c.,$$

где

$$\Gamma(q,m) = \left( iqv_0 + i \frac{m}{R} u_0 \right) \sqrt{\frac{\hbar E_a^2}{2S\rho\omega_s(q,m)}}. \quad (23)$$

Для аксиально-симметричной ( $m = 0$ ) колебательной моды электроны взаимодействуют по пьезоэлектрическому механизму только с поперечными фононами (вектор поляризации  $\xi = (1, 0, 0)$ ). Взаимодействие с такими фононами через деформационный потенциал отсутствует ( $\operatorname{div} \xi = 0$ ), но имеется деформационное электронно-фононное взаимодействие с другими ветвями колебательного спектра. Для  $m = 1$  электроны взаимодействуют со всеми фононными ветвями как через деформационный потенциал, так и по пьезоэлектрическому механизму.

Рассмотрим пьезовзаимодействие в предельных случаях  $qR \gg 1$  и  $qR \ll 1$  и сравним его вклад с деформационным взаимодействием. Кроме того, мы будем интересоваться отличием пьезовзаимодействия в НТ от 3D случая.

В пределе больших радиусов  $qR \gg 1$ , электроны взаимодействуют с поперечными фононами ( $m = 0, 1$ ). Матричный элемент (22) принимает асимптотический вид:

$$V(q,m) = \frac{\pi e e_{14} h}{R} \frac{2\varepsilon - 1}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\hbar}{2S\rho\omega_s(q,m)}}. \quad (24)$$

Как видно из (24), частотная зависимость амплитуды взаимодействия такая же, как и в 3D случае:

$$V_{3D} = \frac{4\pi e e_{14}}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\rho_{3D}\omega}}. \quad (25)$$

Здесь  $V$  — объем, а  $\rho_{3D}$  — объемная плотность.

В рассматриваемом предельном случае взаимодействие через пьезопотенциал менее существенно, чем деформационное. Отношение соответствующих матричных элементов порядка  $\frac{2\pi e e_{14} h}{qR E_a}$ . Для НТ на основе

GaAs с толщиной стенки  $h = 10 \text{ \AA}$  этот параметр порядка  $1/qR \ll 1$ . При  $h/R \rightarrow 0$  пьезовзаимодействие исчезает, как это имеет место для пластинок.

Рассмотрим теперь случай  $qR \ll 1$ . Для аксиально-симметричного фонона ( $m = 0$ ) в этом, длинноволновом пределе, электроны взаимодействуют через деформационный потенциал только с продольной волной, а через пьезопотенциал — только с поперечной волной. В этом случае для величины  $V(q, 0)$  из формулы (22) можно получить

$$V(q, 0) \approx 4\pi e e_{14} h \left( \ln \frac{2}{qR} - C - \frac{1}{2\varepsilon} \right) q \sqrt{\frac{\hbar}{2S\rho\omega_1(q, 0)}}, \quad (26)$$

где  $C$  — постоянная Эйлера. Как видно из (24) и (26), частотная зависимость пьезовзаимодействия в НТ, в длинноволновом пределе, отличается от объемного случая. Отношение амплитуды электронно-фононного взаимодействия через пьезопотенциал в НТ к соответствующей величине в объемном образце равно

$$\frac{V_{NP}}{V_{3D}} = \varepsilon q h \ln \frac{2}{qR}. \quad (27)$$

Таким образом, пьезовзаимодействие в НТ меньше, чем в объеме. Тем не менее при увеличении длины волны роль пьезовзаимодействия возрастает по сравнению с деформационным. Действительно, амплитуда деформационного потенциала дается формулой

$$\Gamma(q, 0) = iq \sqrt{\frac{\hbar E_a^2}{2S\rho\omega_s(q, 0)}}. \quad (28)$$

Отношение этих амплитуд равно

$$\left| \frac{V}{\Gamma} \right| \approx \frac{4\pi e e_{14} h}{E_a} \left( \ln \frac{2}{qR} - C - \frac{1}{2\varepsilon} \right) \sqrt{\frac{s_{\parallel}}{s_{\perp}}}, \quad (29)$$

где  $s_{\parallel}$ ,  $s_{\perp}$  — продольная и поперечная скорости акустического фонона.

Для фононов с  $m = 1$  в длинноволновом пределе электроны взаимодействуют через деформационный потенциал только с изгибной волной, а через пьезопотенциал — с изгибной и продольной волнами. В этих трех случаях получим для амплитуд деформационного потенциала и пьезопотенциала соответственно:

$$\begin{aligned} \Gamma(q, 1) &= \frac{i}{R\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar E_a^2}{2S\rho\omega_3(q, 1)}}, \\ V_b(q, 1) &\approx 2\pi e e_{14} h \frac{q}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2S\rho\omega_3(q, 1)}}, \\ V_{\parallel}(q, 1) &\approx 2\pi e e_{14} h \frac{1}{R} \sqrt{\frac{\hbar}{2S\rho\omega_2(q, 1)}}. \end{aligned} \quad (30)$$

При  $T \ll s/R$  электроны взаимодействуют только с изгибной волной, так как ее частота квадратично по  $k$  стремится к нулю. Тогда получим отношение амплитуд:

$$\left| \frac{V}{\Gamma} \right| = \frac{2\pi e e_{14} h}{E_a} qR. \quad (31)$$

Из формул (29), (31) видно, что в длинноволновом пределе при низких температурах ( $T \ll s/R$ ) вклад в электронно-фононное взаимодействие через пьезопотенциал для межподзонных переходов существенно меньше, чем для внутриволновых.

Таким образом, мы нашли собственные моды колебаний полупроводниковой НТ с учетом кристаллической структуры соединений  $A^{III}B^V$  и пьезоэффекта. Выявлены особенности пьезоэлектрического электронно-фононного взаимодействия, отличающие нанотрубки от объемного образца.

Работа поддержана грантом РФФИ № 02-02-16377, Советом по грантам Президента РФ для поддержки ведущих научных школ РФ (грант НШ-593.2003.2) и грантом Министерства образования РФ А03-2.9-861.

### Список литературы

- [1] H. Ajiki, T. Ando. J. Phys. Soc. Jap., **62**, 1255 (1993).
- [2] V.Ya. Prinz, V.A. Seleznev, A.K. Gutakovskiy. *The Physics of Semiconductors* (World Scientific ISBN, 1999).
- [3] A.K. Gutakovskiy, V.V. Preobrazhenskii, M.A. Putyato, V.Y. Prinz, V.A. Seleznev, A.V. Chehovskiy, T.A. GavriloVA. *Physica E*, **6**, 828 (2000).
- [4] V.Ya. Prinz. *Microelectron. Eng.*, **69**, 466 (2003).
- [5] H. Suzuura, T. Ando. *Phys. Rev. B*, **65**, 235 412 (2002).
- [6] A.C. Вольмир. *Нелинейная динамика пластинок и оболочек* (М., Наука, 1972).
- [7] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика*, т. 7. *Теория упругости* (М., Наука, 1987) § 25.

Редактор Л.В. Беляков

### Vibration modes and electron-phonon interaction in semiconductor nanotubes

A.I. Vedernikov, A.V. Chaplik\*

Novosibirsk State University,  
630090 Novosibirsk, Russia  
\* Institute of Semiconductor Physics,  
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract** Vibration eigen-modes of a semiconductor  $A^{III}B^V$  nanotube are found taking into account both the crystal structure and the piezoelectric effect. Electron-phonon interaction has been considered and it is shown that its piezoelectric contribution essentially depends on the phonon frequency unlike that in bulk specimens.