

07

## **Динамика распространения световой пули в массиве углеродных нанотрубок с металлическими неоднородностями**

© М.Б. Белоненко, А.С. Попов, Н.Г. Лебедев

Волгоградский институт бизнеса  
Волгоградский государственный университет  
E-mail: A. Popov. VolSU@gmail.com

*Поступило в Редакцию 24 сентября 2010 г.*

Рассматривается задача о распространении двумерного аналога световой пули в массиве углеродных нанотрубок с металлическими неоднородностями. Было получено и численно проанализировано эффективное уравнение для вектор-потенциала. Кроме того, выявлено биение электромагнитного поля при рассеянии световой пули на двух металлических неоднородностях.

В последнее время применение мощных лазеров и уникальная точность оптических измерений позволили существенно продвинуться в изучении нелинейных явлений, которые наблюдаются в широком круге веществ, зачастую с весьма далекими физическими свойствами [1,2]. Это связано как с быстрым прогрессом вычислительной техники, так и с заинтересованностью современной физики изучением нелинейных динамических процессов. Объектом исследования должно выступать вещество с ярко выраженными нелинейными свойствами и важное с точки зрения практических приложений. В последнее десятилетие в качестве такого вещества исследователей все больше привлекают углеродные нанотрубки (УНТ), являющиеся уникальными макромолекулярными системами [3]. Нанометровый диаметр и микронная длина УНТ делают их привлекательными для использования в области нано- и микроэлектроники, так как позволяют считать их наиболее близкими по своей структуре к идеальным одномерным системам. Изучение распространения оптических солитонов в УНТ является одним из перспективных направлений исследований [4-9]. Несмотря на то что в упомянутых работах были предсказаны возможность существования электромагнитных солитонов и зависимость их характеристик от параметров УНТ, остался ряд вопросов, которые требуют дальнейшего

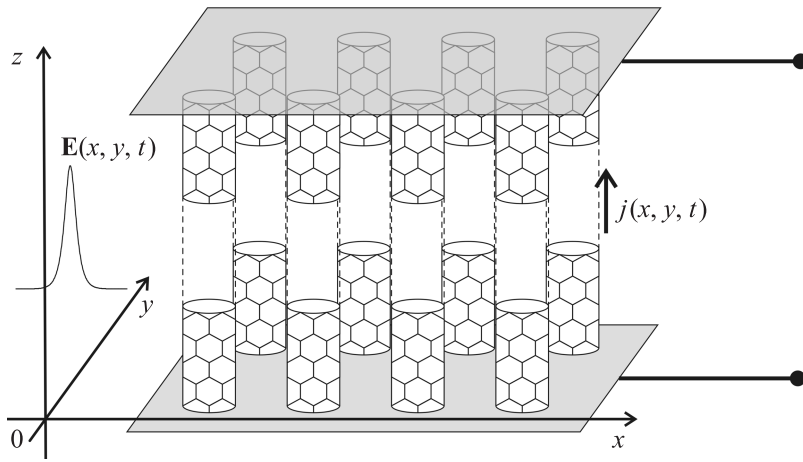


Рис. 1. Геометрия задачи.

уточнения. Это и вопрос, связанный с выходом за рамки одномерного приближения, и вопрос о распространении оптического импульса с учетом дифракции, и вопрос о рассеянии оптического импульса в неоднородном случае на неоднородностях различного вида. Далее в работе такие структуры, локализованные в двух пространственных измерениях, будут, по аналогии с трехмерным случаем, называться „световыми пучками“, хотя в рассматриваемой в работе задаче локализация происходит только в двух измерениях. Все перечисленные выше обстоятельства делают проблему исследования нелинейных динамических процессов в УНТ актуальной как для теории, так и для практики.

При построении модели считаем, что вектор напряженности электрического поля  $\mathbf{E}(x, y, t)$  направлен вдоль оси трубки  $z$ , а электромагнитная волна движется в поперечном направлении (рис. 1). Для определенности и упрощения расчетов углеродные нанотрубки считаем идеальными, имеющими структурную модификацию типа „зигзаг“ и расположенными на одинаковых межатомных расстояниях, равных  $0.34 \text{ nm}$  [3]. Способ упаковки в массив не важен, так как не учитывается взаимодействие между УНТ, поэтому использовалась тетрагональная упаковка однослойных УНТ в двумерный массив с пространственной группой  $P4_2/mc(D_{4h}^9)$  (рис. 1) [3].

Сразу отметим, что за пределами работы по-прежнему остаются вопросы, связанные с наличием подложки, на которой выращиваются нанотрубки. Это может привести, в частности, к появлению в данной системе аналогов поверхностных волн, рассмотрение которых выходит за рамки этой статьи.

Электронное строение зигзагообразных углеродных нанотрубок характеризуется хиральными индексами  $(n, 0)$  и описывается хорошо известным дисперсионным соотношением, полученным в рамках хюккелевского  $\pi$ -электронного приближения [3]:

$$E(\mathbf{p}) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(ap_z) \cos\left(\frac{\pi s}{n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi s}{n}\right)}, \quad (1)$$

где  $a = 3b/2\hbar$ ,  $b = 0.142 \text{ nm}$  — расстояние между соседними атомами углерода,  $\gamma \approx 2.7 \text{ eV}$ , квазиимпульс  $\mathbf{p}$  задается как  $(p_z, s)$ , где  $p_z$  — компонента импульса электрона вдоль оси нанотрубки,  $s = 1, 2, \dots$ ,  $n$  — число, характеризующее квантование импульса вдоль периметра нанотрубки. Разные знаки относятся к зоне проводимости и валентной зоне.

Электромагнитное поле импульса описываем классически на основании уравнений Максвелла. С учетом диэлектрических и магнитных свойств УНТ [10] и двумерности задачи уравнения Максвелла для векторного потенциала  $\mathbf{A}$  в калибровке  $\mathbf{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$  будут иметь известный вид

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial y^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (2)$$

В уравнении (2) пренебрегаем дифракционным расплыванием лазерного пучка в направлении оси  $z$ . Вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  выбираем в виде  $\mathbf{A} = (0, 0, A_z(x, y, t))$ .

Используя аппарат, представленный в работах [4–9], из (1) несложно получить эффективное уравнение для вектор-потенциала:

$$\frac{\partial^2 A_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A_z}{\partial y^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A_z}{\partial t^2} + \frac{q}{\pi \hbar} \sum_m c_m \sin\left(\frac{maq}{c} A_z(t)\right) = 0,$$

$$c_m = \sum_s a_{ms} b_{ms}, \quad b_{ms} = \int_{-q_0}^{q_0} \cos(ma p_z) F_0(\mathbf{p}) dp_z, \quad (3)$$

где  $F_0$  — равновесная функция распределения Ферми,  $q$  — элементарный заряд электрона,  $q_0$  — импульс на границе зоны Бриллюэна  $q_0 = \frac{2\pi\hbar}{3b}$ . Коэффициент  $a_{ms}$  определяется разложением в ряд Фурье компоненты скорости  $v_z(s, p)$ , получаемой из (1) как  $v_z = \partial E(\mathbf{p})/\partial p_z$ .

При получении были сделаны следующие упрощающие предположения: а) не учитываются межзонные переходы, что накладывает ограничение на максимальную частоту лазерных импульсов, которая для УНТ лежит в ближней инфракрасной области [11]; б) решение для компоненты поля  $A_z(t)$  ищется в классе быстроубывающих функций; в) время релаксации  $\tau$  достаточно велико при типичных длительностях ультракоротких лазерных импульсов.

Неоднородность двумерного массива углеродных нанотрубок моделировалась металлической проволокой малого диаметра, помещенной в рассматриваемый массив углеродных нанотрубок, причем ось проволоки совпадает с осью нанотрубок. Для определения тока в области, занимаемой металлической проволокой, использовалась наиболее простая модель: считалось, что в области, занимаемой проволокой, выполняется закон Ома:  $j = \sigma E = -\sigma/c \partial A/\partial t$ , где  $\sigma$  — комплексная проводимость, которая в общем случае зависит от частоты приложенного поля.

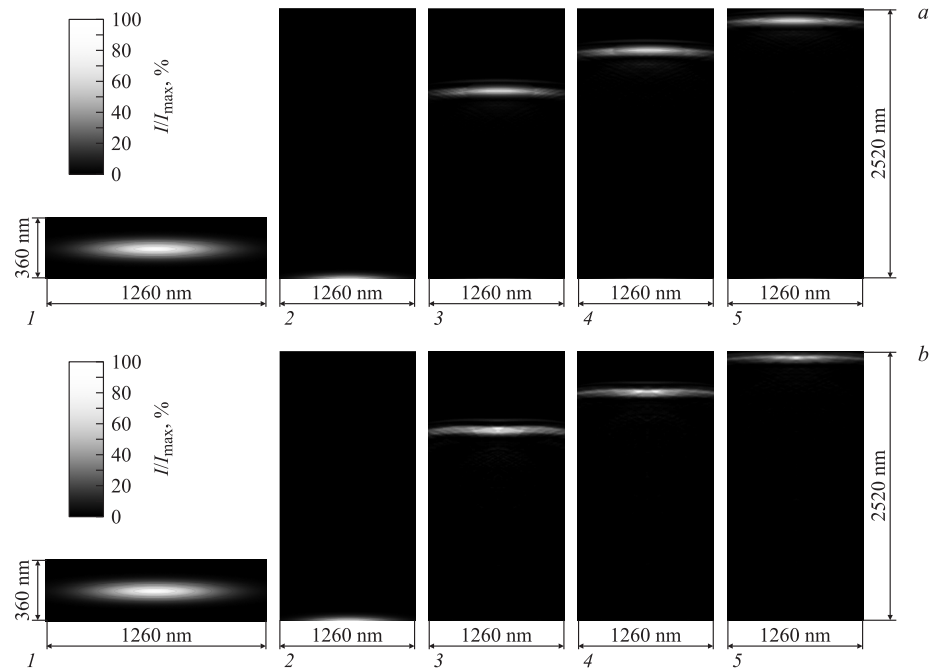
Уравнения (3) решались численно при помощи прямой разностной схемы „крест“ [12]. Шаги по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости  $\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$  и уменьшались последовательно в 2 раза до тех пор, пока решение не изменялось в восьмом знаке после запятой. Данные расчетов для одномерного случая представлены в работах [4–9]. Рассматривалась эволюция начального условия во времени (по переменной  $t$ ). Начальный профиль импульса имел гауссов вид:

$$E(x, y, 0) = E_{max} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\mu_x}\right) \exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{\mu_y}\right),$$

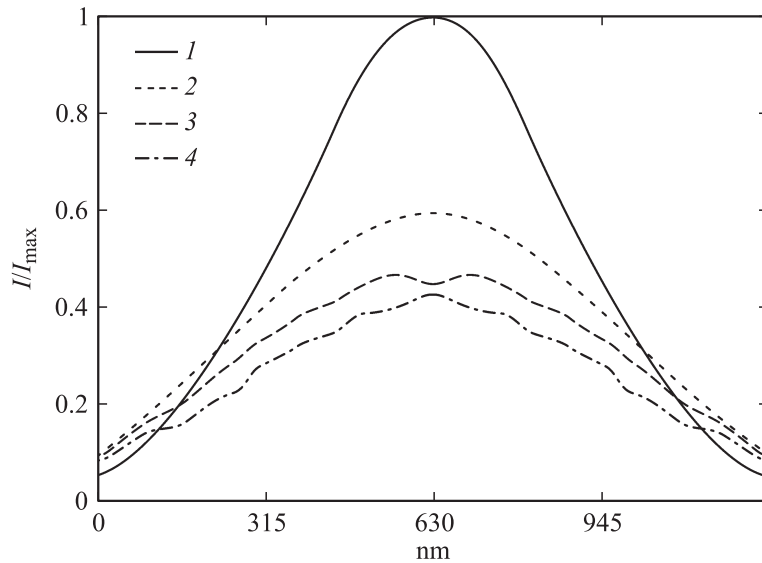
где  $E_{max}$  — максимальная амплитуда поля,  $x_0$  — положение максимума по координате  $x$ ,  $y_0$  — положение максимума по координате  $y$ ,  $\mu_x$  и  $\mu_y$  — параметры, определяющие ширину импульса по координатам  $x$  и  $y$  соответственно.

В процессе эволюции ультракороткий импульс разделяется на два, и амплитуда импульсов различна.

На рис. 2, *a* и *b* соответственно приведены результаты численного моделирования эволюции импульса в двумерном массиве УНТ без



**Рис. 2.** Прохождение световой пули через массив нанотрубок типа (8,0) (a), то же с двумя неоднородностями с  $\sigma > 1$ , щель между неоднородностями по величине соответствует их поперечному размеру (b). Изображена зависимость  $I(x, y, t) = E^2(x, y, t)$  в различные моменты времени: 1 — исходная форма импульса, 2 — вид импульса при  $t = 0.1 \cdot 10^{-12}$  s, 3 —  $t = 2.2 \cdot 10^{-12}$  s, 4 —  $t = 2.6 \cdot 10^{-12}$  s, 5 —  $t = 2.9 \cdot 10^{-12}$  s. Интенсивность выражена в градациях серого.



**Рис. 3.** Срезы интенсивностей  $I/I_{\max}$  пули по сечению, параллельному плоскости  $ZOY$  и проходящему через максимум импульса. По оси ординат отложено отношение  $I/I_{\max}$ . Вид импульса: 1 — исходный, 2 — в массиве без неоднородностей в момент  $t = 2.6 \cdot 10^{-12}$  s, 3 — в массиве с неоднородностями в момент  $t = 2.6 \cdot 10^{-12}$  s, 4 — в массиве с неоднородностями в момент  $t = 2.9 \cdot 10^{-12}$  s.

металлических включений и для случая двух близко расположенных металлических проволок. В приведенных ниже расчетах металлические включения расположены на расстоянии 570 nm от начального положения профиля импульса и на расстоянии 60 nm от центра в каждую сторону.

Показано распределение интенсивностей  $I(x, y, t) = E^2(x, y, t)$  в различные моменты времени.

Обращает на себя внимание принципиально новый эффект, который был обнаружен при рассеянии импульса на двух близко расположенных проволоках, а именно: периодическое разбиение максимума импульса на два близко расположенных максимума и их последующее слияние в один максимум (рис. 3). На наш взгляд, этот эффект родствен динамике

внутренних мод (см. [13,14]) и состоит в возбуждении внутренних мод колебаний „световой пули“ при рассеянии импульса на системе проволок, что приводит к появлению периодически разделяющегося максимума при их интерференции собственно с самой „пулей“.

Данное обстоятельство позволяет предположить, что возможны аналоги бумерона и в других сильно нелинейных двумерных системах. Также необходимо заметить, что такое состояние не возникает при рассеянии на одной металлической проволоке, что дает принципиальную возможность определять тип дефекта в среде, хотя его размер и меньше размера импульса (который имеет величину порядка длины световой волны).

На основании проведенного исследования можно сделать следующие выводы.

1. Предложена модель и получено эффективное уравнение, описывающее динамику ультракороткого лазерного импульса в пучках УНТ. Указаны приближения, используемые при построении модели.

2. Численные расчеты показали, что в двумерном случае возможны устойчивые нелинейные волны, локализованные в двух направлениях световые импульсы, которые являются аналогами „световых пуль“.

3. При рассеянии светового импульса на двух близко расположенных металлических дефектах происходят периодическое разделение пика импульса на два и последующее их слияние.

Работа проведена в рамках реализации ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 годы (проект № НК-16(3)), а также поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 08-02-00663).

## Список литературы

- [1] Желтиков А.М. // УФН. 2007. Т. 177. № 7. С. 737.
- [2] Maksimenko S.A., Slepyan G.Ya. // Handbook of nanotechnology. Nanometer structure: theory, modelling, and simulation. SPIE Press. Bellingham, 2004. P. 145.
- [3] Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.
- [4] Belonenko M.B., Demushkina E.V., Lebedev N.G. // J. Russian Laser Res. 2006. N 27. P. 457.
- [5] Белоненко М.Б., Демушкина Е.В., Лебедев Н.Г. // Изв. РАН. Сер. Физ. 2008. № 72. С. 28.

- [6] Белоненко М.Б., Демушкина Е.В., Лебедев Н.Г. // ФТТ. 2008. В. 50. С. 367.
- [7] Белоненко М.Б., Демушкина Е.В., Лебедев Н.Г. // Изв. РАН. Сер. физ. 2008. № 72. С. 711.
- [8] Белоненко М.Б., Демушкина Е.В., Лебедев Н.Г. // ЖТФ. 2008. В. 78. С. 1.
- [9] Белоненко М.Б., Демушкина Е.В., Лебедев Н.Г. // Хим. физика. 2008. № 27. С. 97.
- [10] Ильинский Ю.А., Келдыш Л.В. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. М.: Изд-во МГУ, 1989. 304 с.
- [11] Эпштейн Э.М. // ФТТ. 1976. В. 19. С. 3456.
- [12] Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 630 с.
- [13] Крепостнов П.И., Попов В.О., Розанов Н.Н. // Оптика и спектроскопия. 2000. В. 89. С. 964.
- [14] Виттенберг А.Б., Крепостнов П.И., Попов В.О., Розанов Н.Н. // Оптика и спектроскопия. 2002. В. 92. С. 603.