

01

## Исследование динамики распространения предельно короткого импульса в тройном слое графена—нитрида бора—графена

© А.В. Пак, М.Б. Белоненко

Волгоградский государственный университет, Россия  
Entropique Inc., London, N6J 3S2, ON, Canada  
Волгоградский институт бизнеса, Россия  
E-mail: pak.anastasia@gmail.com

Поступило в Редакцию 26 сентября 2012 г.

Рассмотрено распространение предельно короткого оптического импульса в слоистой структуре, образованной графеном, нитридом бора и графеном, причем электроны проводимости такой системы описывались в рамках длинноволнового эффективного гамильтониана в случае низких температур, а электромагнитное поле учитывалось на основании классических уравнений Максвелла. Выявлена зависимость от скорости и от максимальной амплитуды предельно короткого импульса.

В последнее время наблюдается увеличение числа работ, посвященных исследованию графена, выращенного на подложке их гексагонального нитрида бора [1–10]. Это обусловлено прежде всего необычайными свойствами, которыми в таком случае обладает графен [11]. Описанные эффекты обычно связываются со сходством кристаллической структуры графена и *h*-BN, а также с тем, что ионный характер межатомных связей в *h*-BN приводит к отсутствию на его поверхности „болтающихся“ ковалентных связей и зарядовых ловушек [12]. В работе [12] установлено, что шероховатость графена на *h*-BN гораздо меньше, чем у графена на SiO<sub>2</sub>, а зарядовые флуктуации слабее на два порядка величины. В целом же электронные характеристики графена на *h*-BN оказываются практически такими же, как и у свободного графена. А исследовать и использовать графен на подложке гораздо проще и удобнее [12]. Распространение ультракоротких импульсов длительностью 10<sup>-15</sup> с в оптических средах без разрушения вещества дало возможность наблюдать и исследовать нелинейные явления, которые в поле импульсов больших длительностей достаточно редки [13]. К таким явлениям

можно, например, отнести явление сверхуширения временного спектра. Под предельно короткими импульсами мы будем понимать импульсы, состоящие из нескольких колебаний поля [13].

В данной работе исследовалась динамика прохождения короткого оптического импульса сквозь трехслойную структуру графена–нитрида бора–графена. Рассмотрение нашей задачи будем вести в системе единиц Хартри ( $m = 1, \hbar = 1$ ).

В работе будем рассматривать слоистую структуру, состоящую из чередующихся слоев графена, нитрида бора и графена, гамильтониан для которой можно получить, записав его предварительно для двух слоев графена–нитрида бора. В длинноволновом приближении, в базе  $\phi_{g1}, \phi_{g2}, \phi_{nb1}, \phi_{nb2}$ , где волновые функции соответствуют электрону, локализованному на одной подрешетке графена, на другой подрешетке графена, на одной подрешетке нитрида бора, на другой подрешетке нитрида бора соответственно, этот гамильтониан запишем в матричном виде:

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & k^* & 0 & t \\ k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & f^* \\ t & 0 & f & -\Delta \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Здесь  $t$  — интеграл перескока электрона между слоями графена и нитрида бора;  $\Delta$  — величина запрещенной щели для нитрида бора;  $k = v_{fg}(k_x + ik_y)$ ,  $v_{fg}$  — скорость Ферми для графена;  $k_x, k_y$  — компоненты импульса электрона;  $f = v_{fnb}(k_x + ik_y)$ ;  $v_{fnb}$  — скорость Ферми для нитрида бора.

Гамильтониан (1) можно переписать, используя структуру блочных матриц [14]:

$$H^1(k) = \begin{pmatrix} 0 & k^* & 0 & t \\ k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & f^* \\ t & 0 & f & -\Delta \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_{11}^1 & H_{12}^1 \\ H_{21}^1 & H_{22}^1 \end{pmatrix}.$$

Для случая, когда величина щели в нитриде бора велика в сравнении с энергией электронов, рассматриваемых в длинноволновом приближении, можно записать по аналогии с биграфеном эффективный гамильтониан [14]:

$$H_{eff}^1 \equiv H_{11}^1 - H_{12}^1 (H_{22}^1)^{-1} H_{21}^1 = -\frac{1}{t} \begin{pmatrix} \Delta & -\frac{1}{t} f^* k^* \\ -\frac{1}{t} f k & -\frac{1}{t^2} |k|^2 \Delta \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Используемое приближение фактически является дополнительным ограничением на предельный импульс электронов, который мы можем рассматривать в рамках длинноволнового приближения, и согласуется с уже используемым первоначально длинноволновым приближением для электронной подсистемы графена.

Для трехслойной структуры „графен–нитрид бора–графен“ гамильтониан (2) можно преобразовать, используя методику, аналогичную [14]:

$$H^2(k) = \begin{pmatrix} \Delta & -\frac{1}{t}f^*k^* & 0 & t \\ -\frac{1}{t}kf & -\frac{1}{t^2}|k|^2\Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k^* \\ t & 0 & k & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_{11}^2 & H_{12}^2 \\ H_{21}^2 & H_{22}^2 \end{pmatrix}.$$

Для случая, когда величина щели в нитриде бора велика в сравнении с энергией электронов, рассматриваемых в длинноволновом приближении, можно записать эффективный гамильтониан для трехслойной структуры [13]:

$$H_{eff}^2 \equiv H_{11}^2 - H_{12}^2(H_{22}^2)^{-1}H_{21}^2 = \begin{pmatrix} \frac{|k|^2\Delta}{t^2} & -\frac{f^*(k^*)^2}{t^2} \\ \frac{fk^2}{t^2} & -\frac{|k|^2\Delta}{t^2} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Гамильтониан (3) легко диагонализуется и задает спектр электронов исследуемой системы:

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \pm \frac{|k|^2}{t^2} \sqrt{\Delta^2 - |f|^2}, \quad (4)$$

где все параметры имеют тот же смысл, что и в (1).

Как следует из правил квантовой механики в присутствии внешнего электрического поля  $\mathbf{E}$ , которое для определенности направлено вдоль оси  $x$  и будет далее рассматриваться в калибровке  $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ , необходимо заменить импульс на обобщенный импульс  $p \rightarrow p - \frac{e}{c} A$  ( $e$  — заряд электрона). В этом случае эффективный гамильтониан (2) можно

переписать как:

$$H = \sum_{p\sigma} \varepsilon \left( p - \frac{e}{c} A(t) \right) a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}, \quad (5)$$

где  $a_{p\sigma}^+$ ,  $a_{p\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения электронов с квазиимпульсом  $p$  и спином  $\sigma$ .

Уравнения Максвелла с учетом диэлектрических и магнитных свойств, с учетом калибровки, в квазиодномерном приближении можно записать в следующем виде [15]:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = 0. \quad (6)$$

Вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  считается имеющим вид  $\mathbf{A} = (0, \mathbf{A}(x, t), 0)$ , а ток  $\mathbf{j}$  есть  $\mathbf{j} = (0, j, 0)$ .

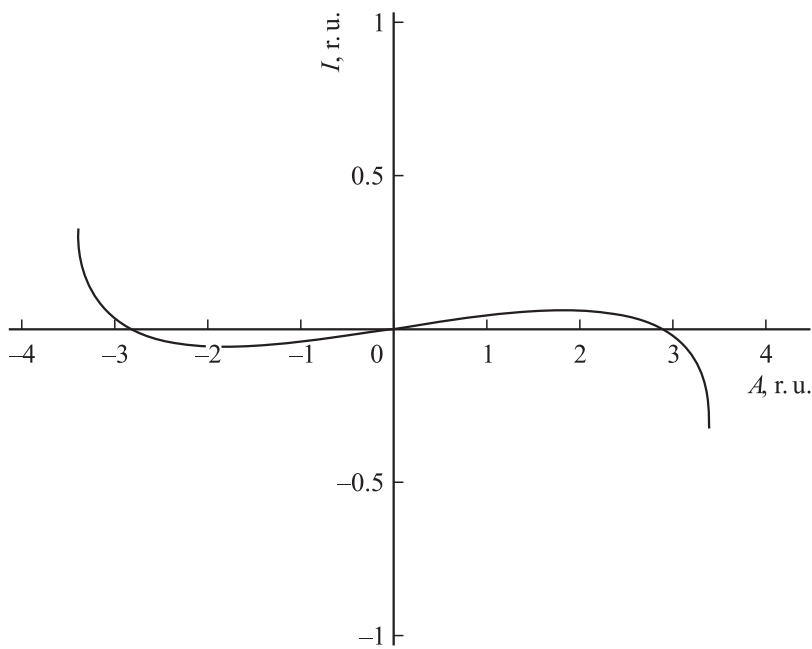
Запишем стандартное выражение для плотности тока:

$$j = e \sum_p v_y \left( p - \frac{e}{c} A(x, t) \right) \langle a_p^+ a_p \rangle, \quad (7)$$

где  $v_y(p) = \frac{\partial \varepsilon(p_x, p_y)}{\partial p_y}$ , а скобки означают усреднение с неравновесной матрицей плотности  $\rho(t)$ :  $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(t))$ . Учитывая, что  $[a_p^+ a_p, H] = 0$ , из уравнений движения для матрицы плотности получается, что  $\langle a_p^+ a_p \rangle = \langle a_p^+ a_p \rangle_0$ , где  $\langle B \rangle_0 = Sp(B(0)\rho(0))$ . Таким образом, в выражении для плотности тока можно использовать число частиц, которое следует из распределения Ферми–Дирака. Далее мы будем рассматривать случай низких температур, когда в сумму (интеграл) (7) дает вклад лишь небольшая область в импульсном пространстве вблизи уровня Ферми. Соответственно этому запишем формулу (7) в виде:

$$j = e \int_{-\Delta}^{\Delta} \int_{-\Delta}^{\Delta} v_y \left( p - \frac{e}{c} A(x, t) \right) dp_x dp_y. \quad (8)$$

Область интегрирования по импульсам в [8] определим из условия равенства числа частиц. Число частиц, вычисленное с функцией распределения Ферми с интегрированием по всей зоне Бриллюэна, должно совпадать с числом частиц, вычисленным вдоль узкого слоя дельта вблизи уровня Ферми с равномерной функцией распределения.



**Рис. 1.** Зависимость силы тока от вектор-потенциала. Все величины в безразмерных единицах.

Интегрирование проводилось по зоне Бриллюэна:

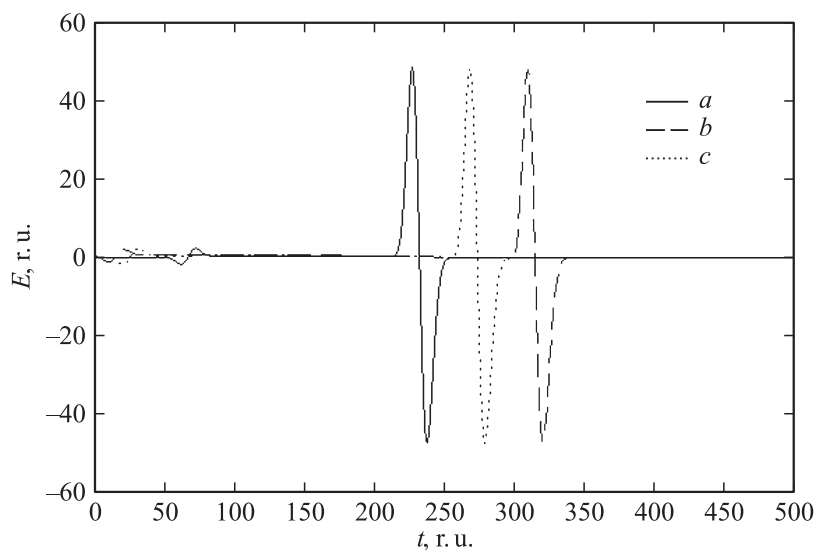
$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \int_{-\Delta}^{\Delta} dp_x dp_y = \int_0^{\frac{\pi}{3a}} \int_0^{\frac{\sqrt{3}}{3} p_x} dp_x dp_y \langle a_{p_x, p_y}^+ a_{p_x, p_y} \rangle.$$

При этом уравнение на распространение предельно короткого импульса можно записать как:

$$\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \Phi(A) = 0, \quad (9)$$

а  $\Phi(A)$  определяется интегрированием в (9).

Типичная зависимость нелинейности, присутствующей в уравнении (9), от величины поля  $A$  представлена на рис. 1.



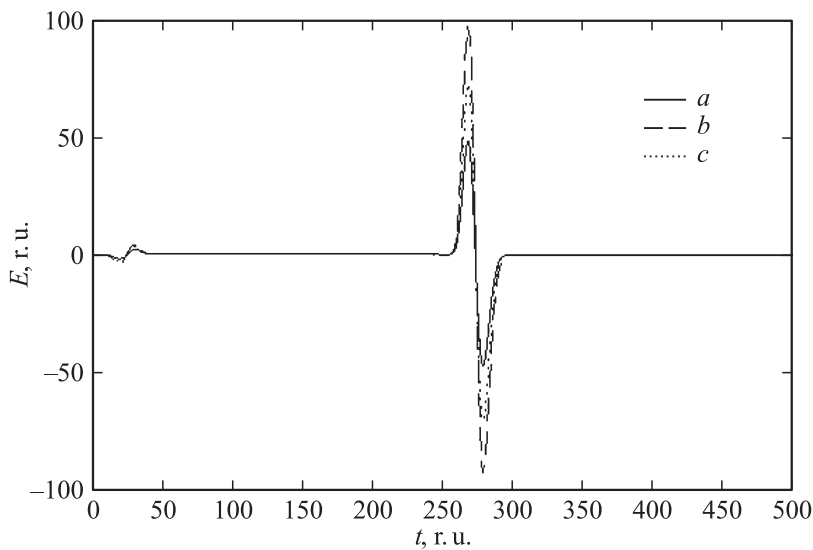
**Рис. 2.** Зависимость вектор-потенциала от времени для разных точек пространства: —  $x = 10^{-5}$  м;  $b$  —  $x = 1.5 \cdot 10^{-5}$  м;  $c$  —  $x = 2 \cdot 10^{-5}$  м.

Исследуемое уравнение (9) решалось численно при помощи прямой разностной схемы типа крест [16]. Шаги по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости, при этом шаги разностной схемы уменьшались последовательно в 2 раза, до тех пор пока решение не изменялось в восьмом значащем знаке. Начальное условие выбиралось в виде предельно короткого импульса, состоящего из одного колебания поля нулевой ширины, что соответственно можно задать, задав потенциал  $A$  как:

$$A(x, t) = Q \exp(-(x - vt)^2/\gamma),$$

$$\gamma = (1 - v^2)^{1/2}, \quad (10)$$

где  $Q$  — амплитуда, а  $v$  — начальная скорость предельно короткого импульса на входе в образец. Данное начальное условие соответствует тому, что на образец подается предельно короткий импульс, состоящий из одного колебания электрического поля. Значения энергетических параметров выражались в единицах  $\Delta$ . Возникающая эволюция элек-



**Рис. 3.** Зависимость формы импульса от времени в случае различных значений первоначальной амплитуды импульса:  $a$  —  $Q = 2$ ,  $b$  —  $Q = 3$ ,  $c$  —  $Q = 4$ . Все величины в безразмерных единицах.

тромагнитного поля при его распространении по образцу представлена на рис. 2.

Такое поведение импульса связано с дисперсией, возникающей при рассмотрении линеаризованного уравнения (9), которая приводит к уширению оптического импульса, а также с нелинейностью в том же уравнении, которая приводит к „сужению“ импульса. Конкуренция этих двух слагаемых приводит как к деформации первоначальной формы импульса, так и к появлению его устойчивой формы. Наиболее ярко влияние нелинейности представлено на рис. 3, показывающем зависимость формы импульса от начальной амплитуды.

Особенно ярко эффекты, связанные с нелинейностью, проявляются на фронте импульса и приводят, в частности, к уширению импульса, что можно объяснить нарушением баланса между дисперсией и нелинейностью в рассматриваемой системе (рис. 3).

Из результатов, полученных в данной работе, следует, что возможно устойчивое распространение предельно коротких оптических импульсов в графене, выращенном на подложке гексагонального нитрида бора.

При увеличении амплитуды первоначального импульса происходит уширение фронта волны, а также возникает второй импульс меньшей интенсивности. Данный эффект может оказаться полезным при разработке гибридных устройств, основанных на эффекте взаимодействия света с электронами графена.

Работа проведена в рамках реализации госконтракта Министерства образования и науки № 14.740.11.0374, а также поддержана РФФИ (гранты № 11-02-97054, 12-02-31654).

## Список литературы

- [1] *Giovannetti G., Khomyakov P.A., Brocks G., Kelly P.J., van den Brink J.* // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 073 103.
- [2] *Greber T.* // Handbook of Nanophysics, Graphene and Boron Nitride Single Layers. 2010.
- [3] *Partoens B., Peeters F.M.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 075 404.
- [4] *Avetisyan A.A., Partoens B., Peeters F.M.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 035 421.
- [5] *Avetisyan A.A., Partoens B., Peeters F.M.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 195 401.
- [6] *Wakabayashi K., Takane Y., Sigrist M.* // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. P. 036 601.
- [7] *Blase X., Rubio A., Louie S.G., Cohen M.L.* // Europhys. Lett. 1994. V. 28. P. 355.
- [8] *Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A.* // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 4502.
- [9] *Chen Y., Zou J., Cambell S.J., Le Caer G.* // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. P. 2430.
- [10] *Suryavanshi A.P., Yu.M., Wen J., Tang C., Bando Y.* // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. P. 2527.
- [11] *Breshenan M.S., Hollander M.J.* et al. // ACN Nano. DOI: 10.1021/nn300996t
- [12] *Xue J., Sanche-Yamagishi J., Bulmash D., Jacquad Ph., Deshpande A., Watanabe K., Taniguchi T., Jarillo-Herrero P., LeRoy B.J.* // Nature Mater. 2011. V. 10. P. 282.
- [13] *Von der Linde D., Schuler H.J.* // Opt. Soc. Am. B. 1999. V. 13. N 1. P. 216–222.
- [14] *Cortijo A., Guinea F., Vozmediano M.A.H.* // 2011. arXiv: 1112.2054v1.
- [15] *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. II. Теория поля. М.: Наука, 1988. 512 с.
- [16] *Бахвалов Н.С.* Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.