

Динамика предельно коротких электромагнитных импульсов в хиральных углеродных нанотрубках

© Н.Н. Конобеева¹, М.Б. Белоненко²

¹ Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

² Волгоградский институт бизнеса, Волгоград, Россия

E-mail: yana_nn@inbox.ru

(Поступила в Редакцию 15 января 2013 г.
В окончательной редакции 22 марта 2013 г.)

Проанализировано волновое уравнение для электромагнитного поля, распространяющегося в хиральных углеродных нанотрубках. Получено феноменологическое уравнение, имеющее вид аналога уравнения синус-Гордона. Изучена динамика электромагнитного импульса.

Работа поддержана РФФИ (грант № 12-02-31654).

1. Введение

Настоящая работа посвящена исследованию динамики предельно коротких импульсов, распространяющихся в хиральных углеродных нанотрубках (УНТ). Как известно, в зависимости от симметрии нанотрубки подразделяются на два вида: хиральные и ахиральные. Хиральные УНТ имеют винтовую симметрию, ахиральные — аксиальную. Уникальные электрофизические свойства нанотрубок привлекают к ним большое внимание как теоретиков, так и практиков в области современной микро- и нанoeлектроники, нелинейной оптики [1,2]. В работе [3] рассмотрен случай распространения предельно коротких импульсов в графене. Обнаружено явление усиления импульсов при приложении к системе внешнего однородного электромагнитного поля, период которого много меньше характерной длительности импульса. В настоящей работе анализируется поведение электромагнитного импульса, распространяющегося в УНТ с винтовой симметрией, что очень важно для практических приложений. Целесообразно проводить теоретические исследования свойств именно таких УНТ, так как учет хиральности может приводить к существенному изменению накопленных знаний о свойствах исследуемых материалов и предсказанию новых эффектов. Например, в силу того, что хиральные УНТ не имеют аксиальной симметрии, в них возможен эффект оптического детектирования или генерации второй гармоники. В противоположность этому в ахиральных УНТ для оптического детектирования или генерации второй гармоники необходимо приложить к нанотрубке дополнительное постоянное электрическое поле, которое нарушает симметрию. Соображения такого рода делают хиральные нанотрубки весьма перспективными в устройствах генерации терагерцевых импульсов на основе фемтосекундных оптических импульсов, где терагерцевый импульс возникает вследствие оптического детектирования [4,5].

2. Постановка задачи

Рассмотрим переменное электрическое поле, распространяющееся в системе хиральных УНТ в геометрии, когда электромагнитное поле линейно поляризовано и направлено вдоль оси нанотрубок.

В случае такого типа (N_x, N_y) нанотрубки имеем следующие периодические граничные условия [6]:

$$\sqrt{3}N_x k_x a + N_y k_y a = C_h \mathbf{k} = 2\pi q, \quad (1)$$

где a — постоянная решетки, $N_y a$ соответствует операции трансляции, $\sqrt{3}N_x a$ — операции вращения, q — целое число, \mathbf{k} — волновой вектор, C_h — хиральный вектор, определяемый единичными векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 (рис. 1).

Дисперсионное соотношение для одномерной структуры хиральных нанотрубок имеет вид [6]:

$$E_q(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \left\{ 1 + 4 \cos \left(\frac{q\pi}{N_x} - \frac{N_y \mathbf{k} a}{N_x 2} \right) \cos \left(\frac{\mathbf{k} a}{2} \right) + 4 \cos^2 \left(\frac{q\pi}{N_x} - \frac{N_y \mathbf{k} a}{N_x 2} \right) \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

где $\gamma_0 \approx 2.7$ eV, $\mathbf{k} a$ принадлежит диапазону $[-\pi, \pi]$, одномерный волновой вектор \mathbf{k} вдоль оси нанотрубки $(n, m) = (N_x, N_y)$ определяется согласно уравнению (1), $a = 3b/2\hbar$, $b = 0.142$ nm — расстояние между соседними атомами углерода.

Гамильтониан системы элементарных возбуждений в данном случае в присутствии внешнего переменного электрического поля, записанного в калибровке $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$, имеет вид (c — скорость света в вакууме, t — время)

$$H = \sum_{kq} E_q \left(\mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t) \right) C_{kq}^+ C_{kq}, \quad (3)$$

где C_{kq}^+ , C_{kq} — операторы рождения, уничтожения возбуждений с квазиимпульсом (k, q) ; $\mathbf{A}(t)$ — величина

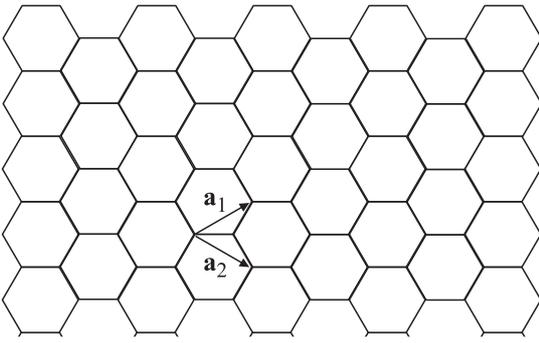


Рис. 1. Единичные векторы гексагональной решетки УНТ.

на вектор-потенциала электромагнитного поля, который имеет одну компоненту и направлен вдоль оси нанотрубки; $E_q(\mathbf{k})$ — закон дисперсии возбуждений, определяемый формулой (2).

Запишем стандартное выражение для плотности тока j

$$j = e \sum_{kq} v_q \left(\mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t) \right) \langle C_{kq}^+ C_{kq} \rangle, \quad (4)$$

где $v_q(\mathbf{k}) = \frac{\partial E_q(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$, e — заряд электрона, а $\langle C_{kq}^+ C_{kq} \rangle$ означает усреднение с неравновесной матрицей плотности

$$\langle C_{kq}^+ C_{kq} \rangle = \text{Sp}(C_{kq}^+(0) C_{kq}(0) \rho(t)).$$

Волновое уравнение можно записать в виде [7]

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = 0. \quad (5)$$

Учитывая, что $[C_{kq}^+ C_{kq}, H] = 0$, из уравнений движения для матрицы плотности сразу получаем

$$\langle C_{kq}^+ C_{kq} \rangle = \langle C_{kq}^+ C_{kq} \rangle_0,$$

где

$$\langle C_{kq}^+ C_{kq} \rangle_0 = \text{Sp}(C_{kq}^+(0) C_{kq}(0) \rho(0)),$$

$$\rho(0) = \exp(-H/k_B T) / \text{Sp}(\exp(-H/k_B T))$$

(k_B — постоянная Больцмана, T — температура). Закон дисперсии хиральных УНТ можно представить в виде ряда Фурье:

$$E_q(k) = \frac{1}{2\pi} \sum_s a_{sq} \cos(aks) + \sum_s b_{sq} \sin(aks),$$

$$a_{sq} = \int dk \cos(aks) E_q(k),$$

$$b_{sq} = \int dk \sin(aks) E_q(k), \quad (6)$$

где интегрирование проводится по первой зоне Бриллюэна, а s — натуральное число. Тогда скорость носителей

заряда может быть определена как

$$v_q(k) = -\frac{1}{2\pi} \sum_s a_{sq} \sin(aks) + \frac{1}{2\pi} \sum_s a_{sq} b_{sq} \cos(aks).$$

Из формулы (4) при $\mathbf{A} = 0$ следует выражение для коэффициентов a_{sq} и b_{sq} , которое обязано своим происхождением наличию в правой части (4) полной производной:

$$\int_0^d v_q(k) \frac{\exp(-E_q(k))}{\exp(-E_q(k)) + 1} dk = \int_0^d \frac{dE_q(k)}{dk} F_0(E_q(k)) dk = \int_0^d F_0(E_q(k)) dE_q(k) = 0, \quad (7)$$

где d соответствует импульсу на границе зоны Бриллюэна хиральной нанотрубки,

$$F_0 = \frac{\exp(-E_q(k))}{\exp(-E_q(k)) + 1}.$$

Выражение для $j_q(A)$ принимает вид

$$j_q(A) = \frac{1}{2\pi} \int_0^d dk F_0(E_q(k)) \times \left[\sum_s -a_{sq} \sin(as(k-A)) + \sum_s a_{sq} b_{sq} \cos(as(k-A)) \right]$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^d F_0(E_q(k)) \sum_s \left[-a_{sq} \sin(ask) \cos(asA) - a_{sq} \cos(ask) (-\sin(asA)) + a_{sq} b_{sq} \cos(ask) \cos(asA) + a_{sq} b_{sq} \sin(ask) \sin(asA) \right]$$

$$= \sum_s B_s^q \sin(asA) + \sum_s R_s^q (\cos(asA) - 1),$$

$$B_s^q = \frac{1}{2\pi} \int_0^d dk F_0(E_q(k)) \times [a_{sq} \cos(ask) + a_{sq} b_{sq} \sin(ask)],$$

$$R_s^q = \frac{1}{2\pi} \int_0^d dk F_0(E_q(k)) \times [-a_{sq} \sin(ask) + a_{sq} b_{sq} \cos(ask)].$$

Здесь было учтено тождество (7).

В этом случае получаем эффективное уравнение для вектор-потенциала

$$\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4e}{c} \sum_{s=1}^{\infty} B_s \sin\left(\frac{aeA}{c} s\right) - 2R_s \sin^2\left(\frac{aeA}{c} s\right) = 0,$$

$$B_s = \sum_q B_s^q, \quad R_s = \sum_q R_s^q, \quad (8)$$

интегрирование ведется в пределах первой зоны Бриллюэна. Отметим, что вследствие убывания (начиная с некоторого значения, определяемого типом УНТ) коэффициентов B_s и R_s с ростом s в сумме в уравнении (8) можно ограничиться несколькими слагаемыми и получить широко применяемое в приложениях обобщение уравнения синус-Гордона (конкретный вид коэффициентов и детали расчета можно посмотреть в [8,9]). Другой способ получения уравнения синус-Гордона был предложен при помощи метода многомасштабных разложений [10].

3. Численный анализ эффективного уравнения

Исследуемое уравнение решалось численно с помощью прямой разностной схемы типа „крест“ [11]. Шаги по времени и координате выбирались из стандартных условий устойчивости. Начальное условие выбиралось в гауссовой форме

$$A(0, t) = Qe^{-(ut)^2/\gamma},$$

$$\frac{dA(0, t)}{dx} = \frac{2Qut}{\gamma} e^{-(ut)^2/\gamma}. \quad (9)$$

Здесь Q — амплитуда импульса, $\gamma^2 = 1/(1 - u^2/c^2)$, u — скорость импульса.

Эволюционная зависимость предельно короткого импульса от времени для различных значений пройденного импульсом расстояния представлена на рис. 2.

Из приведенной зависимости видно, что при увеличении пройденного расстояния происходит увеличение „хвоста“ за основным импульсом, причем амплитуда основного импульса также увеличивается. Отметим, что амплитуда импульса увеличивается асимметрично, что связано с последним слагаемым в уравнении (8) и является свидетельством эффекта оптического детектирования, когда происходит нарушение симметрии относительно направления вектора E в системе.

Возникающее изменение формы импульса электромагнитного поля в зависимости от времени для различных значений начальной скорости импульса представлено на рис. 3.

Подобное поведение неоднократно наблюдалось в ряде работ (например, в [8] и других работах этих же авторов), и его можно связать с лоренц-инвариантностью

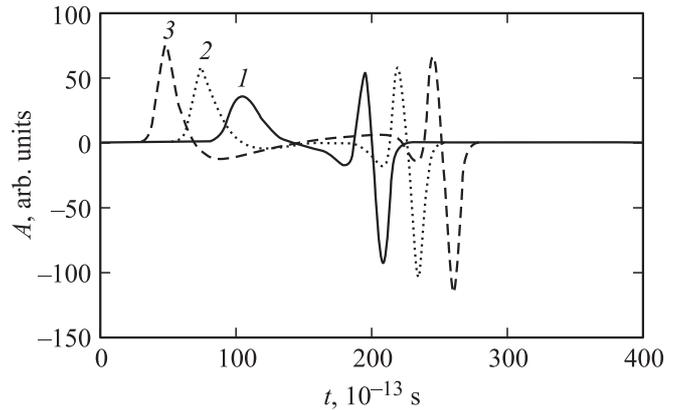


Рис. 2. Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (7), от времени для УНТ (12.2). Для кривых 2 и 3 пройденное импульсом расстояние соответственно в 1.5 и 2 раза больше, чем для кривой 1. $u/c = 0.95$.

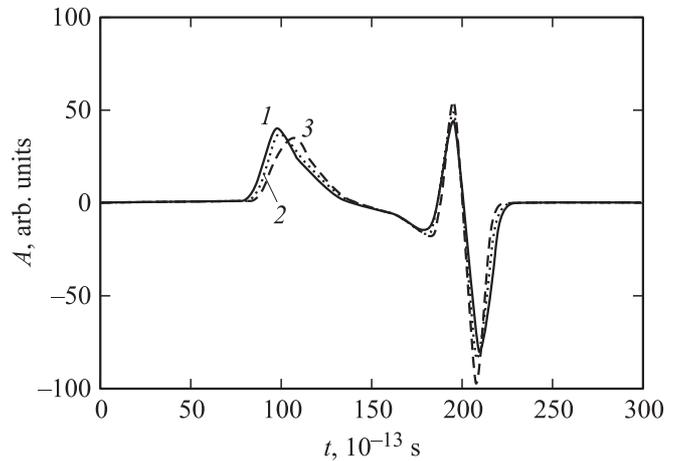


Рис. 3. Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (7), от времени. Начальная скорость импульса u/c : 1 — 0.90, 2 — 0.93, 3 — 0.96.

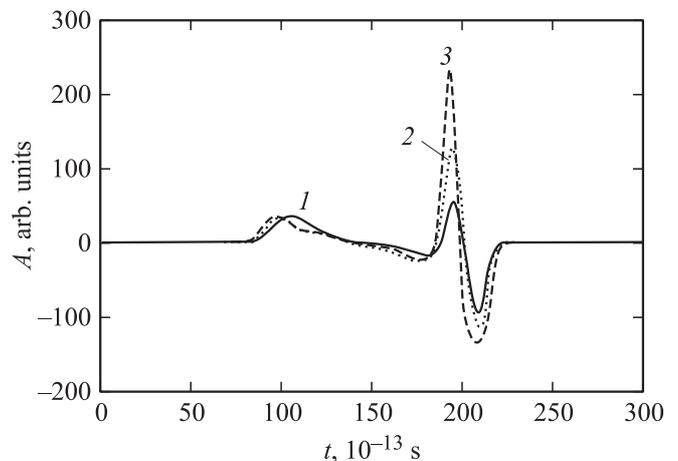


Рис. 4. Зависимость формы импульса от времени при различных значениях амплитуды импульса. Для кривых 2 и 3 значения амплитуды соответственно в 2 и 4 раза больше, чем для кривой 1.

уравнения (8) и с эффектом „сжатия“ импульса при переходе в движущуюся систему координат. Также следует отметить не только эффект „сжатия“, но и смещение импульса, следующего за основным.

Зависимость электрического поля от времени для различных значений от первоначальной амплитуды импульса приведена на рис. 4.

Как и следовало ожидать, импульсы малой амплитуды распространяются практически без искажений, испытывая только „расширение“ за счет дисперсии, в то время как импульсы большей амплитуды испытывают большее искажение, обусловленное, как отмечалось выше, эффектами интерференции фронта импульса с его спадом и особенностями нелинейности.

4. Заключение

Таким образом, исходя из результатов численных расчетов, можно сделать вывод, что хиральность углеродных нанотрубок оказывает существенное влияние на процесс распространения и форму предельно коротких импульсов в УНТ. Это связано с наличием хиральной симметрии, что делает возможным как генерацию второй гармоники, так и оптическое детектирование. Математически это описывается слагаемым с квадратом синуса в уравнении (8). Подобный тип симметрии не встречался в ранее рассмотренных задачах. Важность изученного в работе случая для приложений также можно связать с тем, что оптическое детектирование рассматривается как перспективный способ получения терагерцевых импульсов.

Список литературы

- [1] T.Yu. Astakhova, O.D. Gurin, M. Menon, G.A. Vinogradov. *Phys. Rev. B*, **64**, 035 418 (2001).
- [2] S.A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan. In: *Handbook of nanotechnology. Nanometer structure: theory, modeling, and simulation*. SPIE Press, Bellingham (2004). P. 145.
- [3] Н.Н. Янюшкина, М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев. *Опт. и спектр.* **108**, 658 (2010).
- [4] С.А. Козлов. *Вестн. молодых ученых. Сер. Физ. науки* **1**, 7 (2000).
- [5] С.А. Козлов, С.В. Сазонов. *ЖЭТФ*. **111**, 404 (1997).
- [6] П. Харрис. *Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. Техносфера, М.* (2003). 336 с.
- [7] М.Б. Виноградова, О.В. Руденко, А.П. Сухоруков. *Теория волн. Наука, М.* (1990). 432 с.
- [8] М.Б. Белоненко, Е.В. Демушкина, Н.Г. Лебедев. *ФТТ* **50**, 367 (2008).
- [9] М.Б. Белоненко, С.Ю. Глазов, Н.Г. Лебедев, Н.Е. Мещерякова. *ФТТ* **51**, 1657 (2009).
- [10] H. Leblond, D. Mihalache. *Phys. Rev. A*. **86**, 043 832 (2012).
- [11] Н.С. Бахвалов. *Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения)*. Наука, М. (1975). 632 с.