Влияние собственной нелинейности среды на распространение предельно коротких оптических импульсов в углеродных нанотрубках в диспергирующих немагнитных диэлектрических средах

© Н.Н. Янюшкина,¹ М.Б. Белоненко^{2,3}

 ¹ Волгоградский государственный университет, 400062 Волгоград, Россия
 ² Волгоградский институт бизнеса, 400048 Волгоград, Россия
 ³ Entropique Inc., London, N6J 3S2, ON, Canada e-mail: yana_nn@inbox.ru

(Поступило в Редакцию 5 декабря 2011 г. В окончательной редакции 11 мая 2012 г.)

Рассмотрены уравнения Максвелла для электромагнитного поля, распространяющегося в углеродных нанотрубках, помещенных в диспергирующие немагнитные диэлектрические среды с учетом собственной нелинейности среды. Выявлены зависимости импульса от начальной амплитуды импульса, от констант дисперсии и нелинейности среды.

Введение

09

Распространение ультракоротких импульсов длительностью 10^{-15} s в оптических средах без разрушения вещества дало возможность наблюдать и исследовать нелинейные явления, которые в поле импульсов больших длительностей достаточно редки [1]. К таким явлениям можно, например, отнести явление сверхуширения временно́го спектра.

В настоящей работе рассмотрена динамика предельно коротких импульсов, распространяющихся в углеродных нанотрубках (УНТ), способных проявлять нелинейные свойства в диспергирующих немагнитных средах. Под предельно короткими импульсами мы будем понимать импульсы, состоящие из нескольких колебаний поля [2–4]. Уникальные электрофизические характеристики УНТ позволяют использовать их в различных электронных устройствах (диоды, транзисторы и др.) [5-8]. В работе [9] рассмотрен практически важный случай (применяемый при анализе распространения импульсов в волноведущих структурах), в котором учитывается собственная дисперсия среды, но без учета нелинейной поляризации этой среды. В настоящей работе анализируется поведение электромагнитного импульса, распространяющегося в УНТ, с учетом как собственной нелинейности, так и дисперсии среды.

Основные уравнения

Рассмотрим переменное электрическое поле, распространяющееся в системе углеродных нанотрубок, в геометрии, представленной на рис. 1. Среда заполняет пространство между нанотрубками. Отметим, что на самом деле упаковка не плотная и между углеродными нанотрубками есть промежутки.

Гамильтониан системы электронов можно записать в виде

$$H = \sum_{l\Delta\sigma} t_0 d^+_{l\sigma} d_{l+\Delta\sigma} + h.c.,$$

где $c_{l\sigma}^+$, $c_{l\sigma}$ — операторы рождения уничтожения электронов на узле l со спином σ , t_0 — интеграл перескока, определяемый перекрытием волновых функций электронов в соседних узлах.

При помощи фурье-преобразования

$$d_{n\sigma}^{+} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{l} d_{l\sigma}^{+} \exp(iln),$$

$$d_{n\sigma} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{l} d_{l\sigma} \exp(-iln), \qquad (1)$$

которое диагонализирует гамильтониан *H*, легко получить спектр электронов, описывающий свойства элек-



Рис. 1. Геометрия задачи.

тронной подсистемы в отсутствие кулоновского отталкивания $\varepsilon_s(p)$. Для УНТ типа zig-zag он имеет вид [10]

$$\varepsilon_s(p) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4\cos(qp)\cos(\pi s/m) + 4\cos^2(\pi s/m)},$$
(2)

где s = 1, 2, ..., m, нанотрубка имеет тип (m, 0), $\gamma \approx 2.7 \text{ eV}, q = 3r/2\hbar$, r = 0.142 nm — расстояние между соседними атомами углерода.

Уравнения Максвелла для случая немагнитных диэлектрических сред приводятся к виду [11]

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P_L}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P_{NL}}}{\partial t^2}, \quad (3)$$

где Е — электрическое поле световой волны, $P_L = \alpha E$ — линейный по полю поляризационный отклик среды, $P_{NL} = \eta |E|^2 E$ — нелинейная часть поляризационного отклика, t — время, c — скорость света в вакууме. Здесь взята простейшая модель для нелинейности среды, когда считается, что вектор поляризации параллелен вектору Е. Отметим, что электромагнитное поле импульса рассматривается классически в силу того, что обычно в эксперименте [12] нанотрубки зондируются лазерным импульсом, который содержит большое число фотонов в моде и, следовательно, не нуждается в квантовомеханическом описании.

Модифицируем уравнение (3) для описания распространения импульсов с широким спектром в линейной среде (в случае, когда $\eta = 0$) [13]. Зависимость линейного показателя преломления изотропных оптических сред *n* от частоты света ω в диапазоне их прозрачности с практически сколь угодной точностью может быть описана соотношением вида [14]

$$n^{2}(\omega) = N_{0}^{2} + 2cN_{0}a\omega^{2} + 2cN_{0}a_{1}\omega^{4} + \dots$$
$$- 2cN_{0}b\omega^{-2} - 2cN_{0}b_{1}\omega^{-4}, \qquad (4)$$

где $N_0, a, a_1, \ldots, b, b_1, \ldots$ — эмпирические константы дисперсии среды. Дисперсионное соотношение (4) порождает волновое уравнение вида

$$\frac{\partial^{2}\mathbf{E}}{\partial x^{2}} - \frac{N_{0}^{2}}{c^{2}} \frac{\partial^{2}\mathbf{E}}{\partial t^{2}} = -\frac{2N_{0}}{c} a \frac{\partial^{4}\mathbf{E}}{\partial t^{4}} + \frac{2N_{0}}{c} a_{1} \frac{\partial^{6}\mathbf{E}}{\partial t^{6}} - \dots + \frac{2N_{0}}{c} b\mathbf{E} - \frac{2N_{0}}{c} b_{1} \int_{-\infty}^{t} dt' \int_{-\infty}^{t'} \mathbf{E} dt'' + \dots$$
(5)

Уравнение (5) описывает распространение импульсов вдоль оси x в прямом и обратном направлениях. Здесь приведен наиболее общий случай, который может быть полезен в случае, когда спектр лазерного импульса "накрывает" одну из спектральных линий среды и необходимо учитывать дисперсию высших порядков. Отметим, что далее в работе исследуется более простой случай, но проведенное рассмотрение может быть легко распространено и на более общую ситуацию. Сопоставляя

уравнения (3) и (5), учитывая кулоновскую калибровку

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \, \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

и ограничиваясь четвертой производной, несложно убедиться в том, что обобщением уравнения (5) с учетом собственной нелинейности среды является уравнение вида

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} + \frac{2N_0}{c} a \frac{\partial^4 \mathbf{A}}{\partial t^4} - \frac{2N_0}{c} b\mathbf{A} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}$$
$$-\frac{1}{c^2} (1 + 4\pi\alpha) \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \frac{12\pi\eta}{c^4} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right)^2 = 0. \quad (6)$$

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

Запишем стандартное выражение для плотности то-ка [15]

$$i_0 = e \sum_{ps} v_s \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle d_{ps}^+ d_{ps} \rangle, \tag{7}$$

где $v_s(p) = \frac{\partial \varepsilon_s(p)}{\partial p}$, а скобки означают усреднение с неравновесной матрицей плотности $\rho(t)$: $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(t))$. Учитывая, что $[d^+_{ps}d_{ps}, H] = 0$, из уравнений движения для матрицы плотности сразу получаем, что $\langle d^+_{ps}d_{ps} \rangle = \langle d^+_{ps}d_{ps} \rangle_0$, где $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(0))$.

Учтем, что $\rho_0 = \exp(-H/k_{\rm B}T)/Sp(\exp(-H/k_{\rm B}T))$ ($k_{\rm B}$ — постоянная Больцмана, T — температура), запишем разложение $v_s(p)$ в ряд Фурье

$$u_s(p) = \sum_k A_{ks} \sin(kp),$$
 $A_{ks} = \frac{1}{2\pi} \sum_p v_s(p) \sin(kp).$

Тогда

$$\nu_s \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) = \sum_k A_{ks} \sin(kp) \cos\left(\frac{ke}{c} A(t)\right)$$
$$- \cos(kp) \sin\left(\frac{ke}{c} A(t)\right),$$

и учитывая, что функция распределения $\rho(0)$ четная функция квазиимпульса p, которая при усреднении $\sin(kp)$ даст нуль, можно записать

$$\nu_s\left(p - \frac{e}{c}A(t)\right) = -\sum_k A_{ks}\cos(kp)\sin\left(\frac{ke}{c}A(t)\right).$$
 (8)

Подставляя получившийся результат в (7) и выполнив суммирование по *s* и *p*:

$$j_{0} = -en_{0} \sum_{k} B_{k} \sin\left(\frac{ke}{c}A(t)\right),$$
$$B_{k} = \sum_{s=1}^{m} \int_{-\pi/q}^{\pi/q} dp A_{ks} \cos(kp) \frac{\exp\left(-\beta\varepsilon_{s}(p)\right)}{1 + \exp\left(-\beta\varepsilon_{s}(p)\right)}, \quad (9)$$

где n_0 — концентрация равновесных электронов в графене, $\beta = 1/kT_{\rm B}$. Учитывая все вышесказанное, уравнение (5) в безразмерном виде может быть представлено как

$$\frac{\partial^2 B}{\partial x'^2} - (1 + 4\pi\alpha) \frac{\partial^2 B}{\partial t'^2} - 12\pi\eta \frac{\partial^2 B}{\partial t'^2} \left(\frac{\partial B}{\partial t'}\right)^2 + \frac{2N_0}{c} a \frac{\partial^4 B}{\partial t^4} - \frac{2N_0}{c} bB + \sin(B) + \sum_{k=2}^{\infty} B_k \sin(kB) = 0,$$
(10)
$$B = \frac{eaA}{c}, \quad x' = \frac{ea}{c} \sqrt{8\pi\gamma}, \quad t' = t \frac{ea}{c} \sqrt{8\pi n_0 \gamma |B_1|}.$$

Численное исследование

Исследуемое уравнение (10) решалось численно при помощи прямой разностной схемы типа крест [16]. Шаги



Рис. 2. Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (10) от времени. По оси *x* обезразмеренное время (единица соответствует $3 \cdot 10^{-16}$ s), по оси *y* обезразмеренная величина электрического поля (единица соответствует 10^8 V/m). Для штриховой кривой пройденное импульсом расстояние в 1.5 раза больше, чем для сплошной кривой, а для пунктирной в 2 раза больше, чем для сплошной кривой. *a* — случай нулевых дисперсионных констант (*a* = *b* = 0), *b* — *b* = 0.3, *a* = 0.1. Все величины в безразмереных единицах.



Рис. 3. Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (10) от времени для различных величин начальной амплитуды импульса. По оси *x* обезразмеренное время (единица соответствует $1 \cdot 10^{-16}$ s), по оси *y* обезразмеренная величина электрического поля (единица соответствует 10^7 V/m). a - Q = 2, b - Q = 4, c - Q = 6.



Рис. 4. Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (10) от времени для различных значений дисперсионных констант. По оси *x* обезразмеренное время (единица соответствует $1 \cdot 10^{-16}$ s), по оси *y* обезразмеренная величина электрического поля (единица соответствует 10^7 V/m). Для кривой *a* — дисперсионные константы среды: a = 0.0, b = 0.0; b - a = 0.1, b = 0.0; c - a = 0.1, b = 0.3.

по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости. Шаги разностной схемы уменьшались последовательно в 2 раза, до тех пор пока решение не изменялось в 8-м значащем знаке. Начальное условие выбиралось в виде

$$B(x, t) = Q \cdot \exp\left(-(x - \nu t)^2/\gamma\right)$$
$$\gamma = (1 - \nu^2)^{1/2},$$

где Q — амплитуда импульса.

Возникающая эволюция электромагнитного поля с течением времени представлена на рис. 2.

Сравнивая рис. 2, *a* и *b*, можно утверждать, что учет дисперсионных констант приводит к уменьшению амплитуды импульса, а также выравниванию по величине двух пиков импульса.

Наиболее сильно эволюция ультракороткого оптического импульса зависит от начальной амплитуды импульса. Пример такой зависимости приведен на рис. 3. Этот эффект связан, на наш взгляд, с характером нелинейности в эффективном уравнении (10), а именно с ее периодическим характером.

Зависимость электрического поля от констант дисперсии приведена на рис. 4.

Из рис. 4 видно, что на величину электрического поля оказывают влияние дисперсионные константы а и b, но это влияние проявляется гораздо слабее, чем зависимость от констант нелинейности среды.

Таким образом, исходя из результатов численных расчетов, можно сделать вывод, что учет дисперсии среды оказывает влияние на распространение предельно коротких импульсов в УНТ, но нелинейные процессы оказываются более существенными, чем дисперсионные.

Заключение

В заключении сформулируем основные выводы из настоящей работы.

1. Получено эффективное уравнение для динамики предельно коротких оптических импульсов в УНТ с учетом дисперсии и собственной нелинейности среды.

2. На форму предельно коротких оптических импульсов влияет величина начальной амплитуды импульса, что связано с характером нелинейности УНТ и нелинейности среды, в которой распространяется импульс.

3. Показано, что распространение предельно коротких оптических импульсов в диспергирующей немагнитной среде с учетом собственной нелинейности среды определяется в основном нелинейными процессами и гораздо слабее зависит от дисперсионных констант a и b.

4. Учет нелинейности среды, в которой находятся УНТ приводит к значительному изменению формы оптического импульса, что не учитывалось ранее.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 11-02-97054р_поволжье_а).

Список литературы

- [1] Von der Linde D., Schuler H. // J. Opt. Soc. Am. B. 1999. Vol. 13. N 1. P. 216–222.
- Baltuska A., Wei Z., Pshenichnikov M.S., Wiersma D.A. // Opt. Lett. 1997. Vol. 22. N 2. P. 102–104.
- [3] Nisoli M., De Silvestri S., Svelto O., Szipocs R., Ferencz K., Spielmann Ch., Sartania S., Krausz F. // Opt. Lett. 1997. Vol. 22. N 8. P. 522–524.

- [4] Brabec Th., Krausz F. // Rev. Mod. Phys. 2000. Vol. 72. N 2.
 P. 545–591.
- 5] Novoselov K.S. et al. // Science. 2004. Vol. 306. P. 666–669.
- [6] Novoselov K.S. et al. // Nature. 2005. Vol. 438. P. 197-200.
- [7] Zhang Y., Tan J.W., Stormer H.L., Kim P. // Nature. 2005.
 Vol. 438. P. 201–223.
- [8] Stankovich S., Dikin K.A. et al. // Nature. 2006. Vol. 442. N 7.
 P. 282–286.
- [9] Янюшкина Н.Н., Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г. // Опт. и спектр. 2011. Т. 111. № 1. С. 92–97.
- [10] Slepyan G.Ya., Maksimenko S.A., Kalosha V.P. et al. // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 60. N 2. P. R777.
- [11] Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухоруков А.П. Теория волн. М.: Наука, 1990. 432 с.
- [12] Михеев Г.М., Могилева Т.Н., Окотруб А.В., Ванюков В.В. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. С. 1.
- [13] Козлов С.А.// Вестн. молодых ученых. Сер. Физическая. 2000. Т. 1. С. 7.
- [14] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с.
- [15] Nemilentsau A.M., Slepyan G.Ya., Khrutchinskii A.A., Maksimenko S.A. // Carbon. 2006. Vol. 44. P. 2246–2253.
- [16] Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.