04,06

Генерация электрических волн терагерцевых частот поступательным движением полярона в диэлектрической нанонити

© К.В. Городнов, З.П. Мастропас, Э.Н. Мясников

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия E-mail: alhimik kg@mail.ru

(Поступила в Редакцию 1 июля 2013 г.)

Теоретически исследован квазиклассический случай движения локализованного электрического заряда в цилиндрической нанонити с учетом временной дисперсии диэлектрической проницаемости. К системе приложено сильное электрическое поле, что позволяет поддерживать скорость заряда постоянной. Проанализированы зависимости потенциала от времени для различных значений скорости заряда и приведено сравнение результатов, полученных численным и аналитическим методами. Получено соотношение, выражающее мощность, выделяемую системой при излучении фононов.

1. Введение

Фундаментальным, имманентным свойством любой диэлектрической среды является наличие в ней собственных поляризационных колебаний. Иными словами, диэлектрическая среда представляет собой систему осцилляторов электрического поля. Тогда воздействие на диэлектрик всякого внешнего электрического поля приводит к взаимодействию этого поля с упомянутыми выше осцилляциями.

Подобный эффект взаимодействия поля локализованного заряда со средой впервые был обнаружен при экспериментальном исследовании потерь энергии заряда, движущегося в диэлектрической пленке Al₂O₃, представляющей собой покрытие катодов в лампах с холодными катодами, и исследовано в работе Фейнмана и Торнбера [1]. Потери энергии, обнаруженные экспериментально, были весьма велики, что позволило сделать вывод о формировании вокруг движущегося заряда оболочки, создаваемой поляризационным зарядом среды. То есть было доказано, что носитель заряда находится в поляронном состоянии, а потеря энергии происходит за счет излучения фононов. Движение заряда с постоянной скоростью возможно, когда к среде приложено сильное внешнее электрическое поле (порядка 10⁶ V/cm), которое компенсирует потери энергии, вызванные излучением фононов.

Проблема резонансного взаимодействия поля локализованного заряда с собственными поляризационными колебаниями изотропной диэлектрической среды представляется чрезвычайно важной, поскольку возникающие в результате осцилляции лежат в терагерцевом диапазоне частот. Существует целый ряд работ, посвященный данному эффекту, например [2,3] и другие. Одна из моделей генератора электрических волн терагерцевых частот была предложена нами в [4,5]. В настоящей работе продолжено теоретическое исследование, основы которого были заложены в упомянутых статьях. Здесь изложены результаты численного расчета зависимости потенциала, генерируемого поляроном на поверхности нанонити, которые представляются значительно более точными по сравнению с [4,5]. Более высокая точность достигнута благодаря новому подходу к подсчету значений потенциала. Кроме того, здесь приводится аналитический вид зависимости потенциала от координаты и сравнение результатов численного и аналитического интегрирования, чего ранее сделано не было, а также произведен расчет мощности электрического поля, расходуемой на поддержание постоянной скорости полярона.

2. Генерация электрических волн локализованным зарядом

Пусть вдоль оси диэлектрической нанонити радиуса R движется локализованный заряд q со скоростью v, значительно превосходящей скорость распространения поляризационных колебаний в материале, из которого построена нанонить. Для описания движения заряда зададим декартову систему координат таким образом, чтобы ось O_z совпадала с осью нанонити и была сонаправлена с вектором скорости заряда, а оси O_x и O_y , следовательно, перпендикулярны последнему. Уравнение движения свободного заряда может быть записано как

$$\rho_0(\mathbf{r}, t) = q\delta(x)\delta(y)\delta(z - vt). \tag{1}$$

Диэлектрическая проницаемость среды, окружающей заряд, не является постоянной величиной. Она зависит от частоты действующего поля и волнового вектора **k**. Известно [6,7], что зависимость диэлектрической проницаемости от ω имеет вид

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\parallel}^2}{\omega^2 - \omega_{\parallel}^2}.$$
 (2)

Здесь ω_{\parallel} и ω_{\perp} — продольная и поперечная частоты поляризационных колебаний среды, а ε_{∞} — значение диэлектрической проницаемости на частотах $\omega \ll \omega_{\parallel}, \omega_{\perp}$.



Рис. 1. Зависимость $\varphi(z)$ при $v = 10^3$ m/s.

Фурье-образ [8] функции (1) $\rho_0(\mathbf{r}, t) \rightarrow \rho_0(\mathbf{k}, \omega)$ связан простым соотношением с плотностью заряда в диэлектрической среде $\rho(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\rho_0(\mathbf{k}, \omega)}{\varepsilon(\omega)}$. Используя правила интегрирования δ -функций, найдем $\rho_0(\mathbf{k}, \omega)$ из соотношения (1)

$$\rho_0(\mathbf{k},\omega) = 2\pi q \delta(\omega - k_z v). \tag{3}$$

Поделив равенство (3) на равенство (2), получим

$$\rho(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\varepsilon_{\infty}} 2\pi q \delta(\omega - k_z \upsilon). \tag{4}$$

Выражение (4) позволяет установить вид зависимости плотности заряда в среде от координат и времени путем обратного Фурье-преобразования. Интегрируя (4) по переменным ω и k_z с использованием леммы Жордана [8], получим

$$\rho(\mathbf{r},t) = \frac{q\delta(x)\delta(y)}{\varepsilon_{\infty}} \frac{\omega_{\perp}^2 - \omega_{\parallel}^2}{v\omega_{\parallel}} \sin \omega_{\parallel} \left(\frac{z}{v} - t\right). \quad (5)$$

Для момента времени t = 0

$$\rho(\mathbf{r},t) = \frac{q\left(\omega_{\perp}^2 - \omega_{\parallel}^2\right)}{v\varepsilon_{\infty}\omega_{\parallel}}\,\delta(x)\delta(y)\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z\right).\tag{6}$$

Потенциал связан с плотностью заряда соотношением

$$\varphi(z) = \int_{-\infty}^{0} \frac{\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'}{4\pi\varepsilon_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$
 (7)

Подставив в (7) правую часть уравнения (6), получим

$$\varphi(z) = \frac{q(\omega_{\perp}^2 - \omega_{\parallel}^2)}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_\infty v\omega_{\parallel}} \int_{-\infty}^0 \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)dz'}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - z')^2}}.$$
 (8)

При решении задачи на плоскости, перпендикулярной оси Ox (вполне естественно x = 0, y = R), уравнение (8) примет вид

$$\varphi(z) = \frac{q\omega_{\parallel}(\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2)}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\infty}v\omega_{\parallel}^2} \int_{-\infty}^0 \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)dz'}{\sqrt{R^2 + (z-z')^2}}.$$
 (9)

Физика твердого тела, 2014, том 56, вып. 8

Для построения графика зависимости $\varphi(z)$ используем методы численного интегрирования. Для того чтобы выяснить характер зависимости потенциала от координаты, достаточно знать значения подынтегрального выражения в безразмерном виде, поскольку множитель $\frac{q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_\infty}$ — суть константа. А безразмерная постоянная $\frac{\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2}{\omega_{\parallel}^2}$ является параметром среды. Поскольку из соотношения Лиддена–Сакса–Теллера $\frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega_{\perp}^2} \gg 1$ [7] напрямую следует, что ω_{\parallel}^2 значительно превосходит ω_{\perp}^2 , то величину $\frac{\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2}{\omega_{\parallel}^2}$ можно положить равной 0.1. Таким образом, (ω_{\parallel})

заменим $\int_{-\infty}^{0} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)dz'}{\sqrt{R^2+(z-z')^2}}$ на интегральную сумму, приведя предварительно все ее члены к безразмерному виду

$$f = 0.1 \sum_{i=1}^{N} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)\frac{\omega_{\parallel}}{v}\Delta z'}{\sqrt{\left(R\frac{\omega_{\parallel}}{v}\right)^{2} + \left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}(z-z')\right)^{2}}}.$$
 (10)

Каждое отдельное значение функции, стоящей под знаком суммы в (10), вычисляется для фиксированного *z* и изменяющегося *z'*. Для расчетов примем, в качестве начальных, следующие значения параметров: R = 1 nm, v = 1000 m/s, $\omega_{\parallel} = 2\pi v$, где $v = 10^{12}$ Hz. В результате построения получим график, представленный на рис. 1.

Из графика с очевидностью следует, что локализованный заряд, находясь в процессе движения в точке с координатами (0, 0, 0), должен генерировать позади себя колебания потенциала электрического поля, в то время как впереди колебаний не наблюдается и потенциал просто убывает.

Зависимость характера колебаний от скорости движения заряда

Большой интерес представляет влияние скорости движения заряда на характеристики генерируемых электрических волн: амплитуду и длину волны, поскольку это, с одной стороны, позволит выяснить значение энергии, расходуемое на генерацию волн, а с другой — установить, наблюдаются подобные колебания потенциала при любых скоростях или же существуют некоторые предельные значения (если модель верна, то, очевидно, такой границей будет скорость распространения поляризационных колебаний в среде) скорости заряда.

Построим график зависимости $\varphi(z)$, используя тот же алгоритм, но положив значение скорости $v = 10^4$ m/s. Вид такого графика приведен на рис. 2.

Таким образом, становится очевидно, что с увеличением скорости длина волны и особенно амплитуда увеличиваются. Построим для большей наглядности графики зависимости $\varphi(z)$ для скоростей $v = 10^4$ m/s и $v = 5 \cdot 10^4$ m/s в одной системе координат (рис. 3).

Данная модель предполагает наличие нижней границы эффекта. Действительно, пусть скорость принимает значение v = 300 m/s. График представлен на рис. 4.

Следует отметить отдельно, что, по-видимому, существует и верхняя граница рассматриваемого эффекта. Построим график для $v = 10^6$ m/s (рис. 5).

Очевидно, для данного значения скорости колебания не наблюдаются. Подведем краткий итог сказанному выше: локализованный заряд, двигаясь вдоль оси на-



Рис. 2. Зависимость $\varphi(z)$ при $v = 10^4$ m/s.



Рис. 3. Зависимость $\varphi(z)$ при $v = 10^4$ и 5 · 10⁴ m/s.







Рис. 5. Зависимость $\varphi(z)$ при $v = 10^6$ m/s.

нонити, должен генерировать электрические волны на ее поверхности. Вид колебаний зависит от скорости заряда — с увеличением скорости амплитуда и длина волны увеличиваются. У данного эффекта существуют верхняя и нижняя границы, накладываемые значением скорости.

4. Добавка от локализованного заряда

Помимо поляризационного заряда, за счет которого и возникают рассматриваемые осцилляции, свой вклад в суммарное значение потенциала вносит локализованный заряд. Добавка от локализованного заряда может быть получена довольно просто

$$\varphi'(z) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_\infty} \int_0^\infty \frac{dz'}{\sqrt{R^2 + (z-z')^2}}.$$
 (11)

Найти явный вид выражения (11) не представляет трудности

$$\varphi'(z) = \frac{q\omega_{\parallel}}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\infty}v} \frac{1}{\sqrt{R^2 + z^2}}.$$
 (12)

Таким образом, для того чтобы найти вид потенциала с учетом локализованного заряда, необходимо сложить равенства (9) и (12). Заменив интеграл в (9) на сумму, окончательно получим

$$\varphi + \varphi' = \frac{q\omega_{\parallel}}{v4\pi\varepsilon_{0}\varepsilon_{\infty}} \left(\frac{1}{\sqrt{\left(R\frac{\omega_{\parallel}}{v}\right)^{2} + \left(z\frac{\omega_{\parallel}}{v}\right)^{2}}} + \frac{\omega_{\parallel}^{2} - \omega_{\perp}^{2}}{\omega_{\parallel}^{2}}\sum_{i=1}^{N}\frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)\frac{\omega_{\parallel}}{v}\Delta z'}{\sqrt{\left(R\frac{\omega_{\parallel}}{v}\right)^{2} + \left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}(z-z')\right)^{2}}}\right).$$
(13)

Выражение в скобках соотношения (13) вновь безразмерно. Можно построить график зависимости общего потенциала $\varphi + \varphi'$ от координаты z (рис. 6).



Рис. 6. Зависимость $\varphi(z) + \varphi'(z)$ при $v = 10^4$ m/s.



Рис. 7. Зависимость $\varphi(z)$ и $\varphi(z) + \varphi'(z)$ при $v = 10^4$ m/s.

Поскольку добавка от локализованного заряда, как видно из графика, не влияет на колебательный характер потенциала, то эффект должен наблюдаться несмотря на эту добавку. Полезно сравнить вид кривых φ и $\varphi + \varphi'$. Это сделано на рис. 7. Колебания с учетом добавки и без нее фактически совпадают по фазе.

Явный вид зависимости потенциала от координаты

Задача нахождения явного вида интеграла в уравнении (9) не вполне тривиальна. Возникает ряд математических трудностей при использовании традиционных методов интегрирования, включая методы теории вычетов: при решении вычетов целочисленных порядков попросту не получается. Не приводят к окончательному результату ни замена переменной, ни интегрирование по частям, ни другие методы. Тем не менее, как будет показано ниже, эта задача может быть решена. Запишем отдельно интеграл из уравнения (9)

$$\int_{-\infty}^{0} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)dz'}{\sqrt{R^2 + (z-z')^2}}.$$
(14)

Произведем замену переменной: n = z - z', тогда z' = z - n, а dz' = -dn. Перепишем интеграл (14) с учетом этой замены

$$-\int_{-\infty}^{0} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}\left(z-n\right)\right) dn}{\sqrt{R^{2}+n^{2}}}.$$
 (15)

Раскрывая скобки в аргументе синуса в (15), получим

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z - \frac{\omega_{\parallel}}{v}n\right)dn}{\sqrt{R^2 + n^2}}.$$
 (16)

Выражение (16) легко может быть представлено как

$$\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z\right)\int_{0}^{\infty}\frac{\cos\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}n\right)dn}{\sqrt{R^{2}+n^{2}}}-\cos\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z\right)\int_{0}^{\infty}\frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}n\right)dn}{\sqrt{R^{2}+n^{2}}}.$$
(17)

Вид интегралов в (17) схож с (14), но не тождественен ему — в подкоренном выражении отсутствует квадрат разности. Результат интегрирования в обоих случаях выражения (17) известен [9]

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\cos(xy)dx}{\sqrt{x^2 + \alpha^2}} = K_0(\alpha y), \tag{I}$$

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\sin(xy)dx}{\sqrt{x^2 + \alpha^2}} = \frac{\pi}{2} \left[I_0(\alpha y) - L_0(\alpha y) \right].$$
(II)

Здесь I_0 и K_0 — модифицированные функции Бесселя первого и третьего рода соответственно, а L_0 — модифицированная функция Струве. Надо заметить, что на переменные в (I) и (II) накладываются ограничения $\operatorname{Re} \alpha > 0$ и y > 0, которые в нашем случае естественным образом удовлетворяются. Соотнося параметры из (I), (II) и (17), окончательно получим

$$\int_{-\infty}^{0} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right) dz}{\sqrt{R^{2} + (z - z')^{2}}} = \sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z\right) K_{0}\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}R\right)$$
$$-\frac{\pi}{2}\cos\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z\right) \left[I_{0}\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}R\right) - L_{0}\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}R\right)\right]. \quad (18)$$

Значения функций I_0 , K_0 и L_0 для некоторых значений аргумента рассчитаны в [10].

Построим график зависимости $\varphi(z)$, используя равенство (18) с учетом коэффициента $\frac{\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2}{\omega_{\parallel}^2} = 0.1$. Скорость будем полагать равной $v = 2\pi \cdot 10^3$ m/s. Такое



Рис. 8. Зависимость $\varphi(z)$, полученная путем аналитического интегрирования при $v = 2\pi \cdot 10^3$ m/s.



Рис. 9. Зависимости $\varphi(z) + \varphi'(z)$, полученные путем численного и аналитического интегрирования при $v = 2\pi \cdot 10^3$ m/s.

"странное" значение скорости выбрано исключительно с целью получить единицу в качестве аргумента функций I_0 , K_0 и L_0 , поскольку величины этих функций для данного аргумента известны [10].

На рис. 8 представлен вид функции (18). Ее осциллирующий характер вполне очевиден, но особый интерес, конечно, представляет сравнение вида потенциала, полученного в результате аналитического интегрирования, с тем, что дает численный расчет. Построим в одних осях координат эти две функции для значения скорости $v = 2\pi \cdot 10^3$ m/s. Для полноты картины учтем вклад, вносимый локализованным зарядом (рис. 9). На рис. 9 видно некоторое расхождение в фазе колебаний и амплитуде, однако в целом можно утверждать, что оба метода дают схожие результаты.

Расчет мощности, выделяемой при движении полярона

Нахождение мощности, которая выделяется при равномерном движении локализованного заряда в нанонити, представляется крайне важной задачей, поскольку это позволит установить значение мощности электрического поля, необходимое для поддержания постоянной скорости полярона. Кроме того, выделяемая мощность при таком движении может быть установлена в эксперименте, что позволит эмпирически проверить предложенную модель.

Напряженность электрического поля можно найти как $E = -\text{grad } \varphi$. Применяя этот закон к (9), получим

$$E = -\frac{q\omega_{\parallel}}{4\pi\varepsilon_{0}\varepsilon_{\infty}\upsilon} \frac{\left(\omega_{\parallel}^{2} - \omega_{\perp}^{2}\right)}{\omega_{\parallel}^{2}} \int_{-\infty}^{0} \frac{\left(z - z'\right)\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{\upsilon}z'\right)dz}{\sqrt{\left(R^{2} + (z - z')^{2}\right)^{3}}}.$$
(19)

Сила, действующая со стороны электрического поля на поляризационный заряд со стороны локализованного, есть произведение напряженности поля локализованного заряда на поляризационный заряд. Следует заметить, что поляризационный заряд равен по величине локализованному, т.е. F = qE. Используя (19), в явном виде запишем

$$F = -\frac{q^2\omega_{\parallel}}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_\infty v} \frac{\left(\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2\right)}{\omega_{\parallel}^2} \int_{-\infty}^0 \frac{\left(z - z'\right)\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)dz}{\sqrt{\left(R^2 + (z - z')^2\right)^3}}.$$
(20)

Для того чтобы найти мощность, теперь достаточно умножить (20) на скорость заряда

$$P = -\frac{q^2\omega_{\parallel}}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\infty}} \frac{\left(\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2\right)}{\omega_{\parallel}^2} \int\limits_{-\infty}^0 \frac{\left(z - z'\right)\sin\left(\frac{\omega_{\parallel}}{v}z'\right)dz}{\sqrt{\left(R^2 + (z - z')^2\right)^3}}.$$
(21)

Подставляя, с учетом того, что заряд находится в точке (0, 0, 0), в формулу (21) величины: $q = 1.6 \cdot 10^{-19}$ С, $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ F/m, $\varepsilon_{\infty} = 10$, а скорость полагая $v = 10^3$ m/s, легко получить значение мощности P = 0.3 MeV/s.

7. Заключение

Предложенное в настоящей работе теоретическое исследование показывает, что локализованный заряд, двигаясь поступательно вдоль оси диэлектрической нанонити, должен генерировать колебания потенциала. Построенные по уравнениям (10) и (13) графики демонстрируют, что амплитуда и длина волны таких электрических волн увеличиваются с ростом скорости заряда. Полученные численными методами результаты в целом коррелируют с установленной в работе аналитической зависимостью (17). Используя уравнение (9) и общеизвестные соотношения между потенциалом, напряженностью, силой и мощностью, получено равенство (21), которое позволяет вычислить мощность, выделяемую при движении локализованного заряда с постоянной скоростью.

Список литературы

- [1] K.K. Thornber, R.P. Feynman. Phys. Rev. B 1, 4099 (1970).
- [2] Э.Н. Мясников, А.Э. Мясникова, З.П. Мастропас. ЖЭТФ 129, 3, 548 (2006).
- [3] Э.Н. Мясников, З.П. Мастропас. ФТТ 51, 966 (2009).
- [4] К.В. Городнов. Сб. науч. тр. по матер. Междунар. науч.практ. конф. "Перспективные инновации в науке, образовании, производстве и транспорте" **8**, 56 (2011).
- [5] К.В. Городнов. Тр. VII Всерос. науч. конф. молодых ученых и студентов "Современное состояние и приоритеты развития фундаментальных наук в регионах" 2, 24 (2010).
- [6] А.С. Давыдов. Теория твердого тела. Наука, М. (1976). 640 с.
- [7] А.С. Давыдов, Э.Н. Мясников. ДАН СССР 173, 1040 (1967).
- [8] А.Г. Свешников, А.Н. Тихонов. Теория функции комплексной переменной. Наука, М. (1979). 320 с.
- [9] Г. Бэйтмен, А. Эрдейн. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. Наука, М. (1969). 344 с.
- [10] Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. Наука, М. (1979). 832 с.