

Взаимодействие двумерных электромагнитных бризеров в массиве углеродных нанотрубок

© Э.Г. Федоров¹, А.В. Пак², М.Б. Белоненко³

¹ Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет, Волгоград, Россия

² Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

³ Волгоградский институт бизнеса, Волгоград, Россия

E-mail: mbelonenko@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 14 апреля 2014 г.)

Исследовано распространение и взаимодействие двумерных биполярных электромагнитных импульсов в среде массива полупроводниковых углеродных нанотрубок. Электромагнитное поле в массиве нанотрубок описано посредством уравнений Максвелла, сведенных к неоднородному волновому уравнению. Начальное распределение поля задано в виде сближающихся бризеров, ограниченных гауссианой в плоскости, перпендикулярной направлению распространения импульсов. В результате численного решения волнового уравнения показана возможность устойчивого распространения бризеров в массиве нанотрубок. Установлено, что взаимодействие электромагнитных бризеров в среде массива полупроводниковых углеродных нанотрубок имеет характер квазиупругого столкновения.

1. Введение

В настоящее время в качестве объектов, перспективных для использования при создании элементной базы современной наноэлектроники, рассматриваются углеродные нанотрубки — квазиодномерные макромолекулы углерода [1]. Нелинейность закона дисперсии электронов нанотрубок обуславливает наличие у них широкого спектра свойств, которые могут наблюдаться в полях умеренных напряженностей $\sim 10^3 - 10^5$ V/cm (см., например, работы [2,3] и ссылки в них). Данное обстоятельство, а также успехи лазерной физики в области формирования мощного электромагнитного излучения с заданными параметрами (см., например, [4]) явились стимулом для всесторонних исследований электронных и оптических свойств нанотрубок в присутствии электромагнитных полей. В частности, серия работ [5–9] посвящена изучению распространения предельно коротких электромагнитных импульсов в массивах нанотрубок. В работах [5,6] установлена возможность распространения в массиве нанотрубок уединенных электромагнитных волн — солитонов, исследованы их характеристики в зависимости от диаметра нанотрубок. В [7,8] изучена динамика периодического цуга электромагнитных импульсов и индуцируемых ими доменов тока, а также рассмотрено затухание электромагнитных импульсов при их распространении в массиве нанотрубок. В работе [9] исследовано столкновение электромагнитных импульсов в среде массива нанотрубок в одномерной модели.

Однако остается ряд вопросов, касающихся распространения волн в нанотрубках, требующих дальнейшего изучения в связи с возможностью обнаружения качественно новых эффектов, которые могут представлять

интерес с прикладной точки зрения. В частности, это вопросы, связанные с выходом за рамки одномерной модели, а также с учетом поперечной дисперсии при изучении динамики электромагнитных волн. Например, в работе [10] установлена возможность распространения в массиве нанотрубок цилиндрически-симметричных электромагнитных волн, эволюция которых схожа с динамикой пульсонов, описанных в [11]. В работе [12] теоретически исследована возможность распространения „световых пульс“ — двумерных бегущих уединенных электромагнитных волн, а в [13] изучены особенности их взаимодействия с неоднородностями в массивах нанотрубок.

Необходимо отметить, что в работах [10–13] рассматривалось распространение однополярных двумерных электромагнитных импульсов в среде массива нанотрубок. Однако известно, что в некоторых нелинейных средах возможно существование и биполярных уединенных волн, распространение которых может обусловить возникновение ряда интересных физических эффектов.

В этой связи представляется целесообразным изучение возможности и особенностей распространения и взаимодействия двумерных биполярных лазерных импульсов в массиве полупроводниковых углеродных нанотрубок. Актуальность рассмотрения данного круга вопросов очевидна в свете решения ряда перспективных задач современной оптоэлектроники.

2. Основные соотношения и волновое уравнение

Рассмотрим распространение и взаимодействие электромагнитных волн (импульсов лазерного излучения)

в объемном массиве однослойных полупроводниковых углеродных нанотрубок типа „zigzag“ $(m, 0)$, где число m (не кратное трем) определяет радиус нанотрубки $R = \frac{bm}{2\pi}\sqrt{3}$, b — расстояние между соседними атомами углерода [2]. Будем считать, что нанотрубки помещены в однородный диэлектрик, оси нанотрубок параллельны общей оси Ox , а расстояния между соседними нанотрубками велики по сравнению с их диаметром, что позволяет пренебречь взаимодействием между нанотрубками [14].

Закон дисперсии электронов проводимости углеродных нанотрубок в выбранной нами геометрии имеет вид

$$\Delta(p_x, s) = \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(p_x \frac{d_x}{\hbar}\right) \cos\left(\pi \frac{s}{m}\right) + 4 \cos^2\left(\pi \frac{s}{m}\right)}, \quad (1)$$

где квазиимпульс электрона задается как $\mathbf{p} = \{p_x, s\}$, s — число, характеризующее квантование импульса вдоль периметра нанотрубки ($s = 1, 2, \dots, m$), γ_0 — интеграл перекрытия, $d_x = 3b/2$ [2].

Положим, что лазерные импульсы распространяются в направлении, перпендикулярном осям нанотрубок (в выбранной геометрии — вдоль оси Oz), а электрическое поле импульсов $\mathbf{E} = \{E(y, z, t), 0, 0\}$ ориентировано вдоль оси Ox . Будем считать, что характерная длительность лазерных импульсов T_s удовлетворяет условию $T_s \ll t_{rel}$ (t_{rel} — время релаксации), что позволяет использовать бесстолкновительное приближение при описании эволюции поля электромагнитных волн в системе [5].

Электромагнитное поле в массиве нанотрубок будем описывать посредством уравнений Максвелла [15], из которых в выбранной нами геометрии следует уравнение

$$\frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} - \frac{4\pi}{c} j = 0, \quad (2)$$

где $A(y, z, t)$ и $j(y, z, t)$ — соответственно проекции векторного потенциала $\mathbf{A} = \{A, 0, 0\}$ и плотности тока проводимости $\mathbf{j} = \{j, 0, 0\}$ на ось Ox , ε — диэлектрическая проницаемость среды, c — скорость света в вакууме, электрическое поле лазерных импульсов определяется известным соотношением $\mathbf{E} = -c^{-1} \partial \mathbf{A} / \partial t$ [16].

Электрическое поле в системе вдоль оси Ox будем считать однородным. Отметим, что неоднородность поля вдоль оси Ox может привести к накоплению электрического заряда и соответственно к необходимости учета поля этого заряда, что представляет отдельную задачу, не рассматриваемую в данной работе.

Определим плотность тока проводимости в массиве углеродных нанотрубок, следуя подходу, развитому в работе [17]. Представив электронный энергетический спектр (1) в виде ряда Фурье, запишем выражение для проекции плотности тока на ось Ox в бесстолкновитель-

ном приближении

$$j = -en_0 \frac{d_x}{\hbar} \gamma_0 \sum_{s=1}^m \sum_{\alpha=1}^{\infty} G_{\alpha,s} \sin\left(\alpha \frac{ed_x}{c\hbar} A\right), \quad (3)$$

где e — модуль заряда электрона, n_0 — концентрация электронов проводимости в массиве нанотрубок,

$$G_{\alpha,s} = -\alpha \frac{\delta_{\alpha,s}}{\gamma_0} \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \cos(\alpha\xi) \exp\left[-\sum_{\alpha=1}^{\infty} \theta_{\alpha,s} \cos(\alpha\xi)\right] d\xi}{\int_{-\pi}^{\pi} \exp\left[-\sum_{\alpha=1}^{\infty} \theta_{\alpha,s} \cos(\alpha\xi)\right] d\xi}, \quad (4)$$

$\theta_{\alpha,s} = \delta_{\alpha,s} (k_B T)^{-1}$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, $\delta_{\alpha,s}$ — коэффициенты в разложении спектра (1) в ряд Фурье [18],

$$\delta_{\alpha,s} = \frac{d_x}{\pi\hbar} \int_{-\pi\hbar/d_x}^{\pi\hbar/d_x} \Delta(p_x, s) \cos\left(\alpha \frac{d_x}{\hbar} p_x\right) dp_x. \quad (5)$$

Заметим, что в формуле (3) плотность тока явным образом зависит от векторного потенциала \mathbf{A} . Следовательно, могло бы возникнуть предположение о том, что изменение векторного потенциала на постоянную величину (что не приводит ни к каким физическим последствиям) обуславливает изменение плотности тока. Однако в действительности подобного не происходит, поскольку при выводе формулы (3) считалось, что при нулевом токе в отсутствие электромагнитного поля также имеет нулевое значение и векторный потенциал \mathbf{A} , что фиксирует его выбор.

Подставив выражение для тока проводимости (3) в уравнение (2), получаем волновое уравнение, описывающее эволюцию поля в массиве нанотрубок

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \tau^2} - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial v^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi^2} \right) + \sum_{s=1}^m \sum_{\alpha=1}^{\infty} G_{\alpha,s} \sin(\alpha\Phi) = 0, \quad (6)$$

где $\Phi = A \frac{ed_x}{c\hbar}$ — проекция безразмерного векторного потенциала на ось Ox , $\tau = \omega_0 t / \sqrt{\varepsilon}$ — безразмерное время, $v = y\omega_0/c$ и $\xi = z\omega_0/c$ — безразмерные координаты, ω_0 — величина с размерностью частоты, определяемая как

$$\omega_0 = 2 \frac{ed_x}{\hbar} \sqrt{\pi n_0 \gamma_0}. \quad (7)$$

Электрическое поле волны в массиве нанотрубок имеет вид $\mathbf{E} = \{E, 0, 0\}$,

$$E = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} = E_0 \frac{\partial \Phi}{\partial \tau}, \quad (8)$$

где величина E_0 определяется по формуле

$$E_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{ed_x\sqrt{\varepsilon}}. \quad (9)$$

Как известно, измеряемой приборами физической величиной является интенсивность электромагнитного излучения, которая пропорциональна квадрату модуля вектора электрического поля [19]. Величина, пропорциональная интенсивности поля, $I = |\mathbf{E}|^2$, с учетом формулы (8), определяется как

$$I = I_0 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} \right)^2, \quad (10)$$

где $I_0 = E_0^2$ (см. (9)).

3. Численное моделирование и обсуждение результатов

Волновое уравнение (6) не имеет точного аналитического решения в общем случае, поэтому исследование процесса взаимодействия лазерных импульсов в массиве углеродных нанотрубок мы провели путем численного моделирования. Выбор начальных условий для расчета распределения электромагнитного поля в рассматриваемой системе обусловлен следующими соображениями. Уравнение (6) можно рассматривать как обобщение неоднородного уравнения sine-Gordon в случае, когда обобщенный потенциал разложен в ряд Фурье. Как показали результаты численных расчетов, коэффициенты $G_{\alpha,s}$ (см. формулу (4)) быстро убывают с ростом индекса α ($|G_{1,s}| \gg |G_{2,s}|$ и т.д.) (также см., например, [5,6]). Оставляя единственное (первое) слагаемое в сумме по α и ограничиваясь одномерным приближением, из уравнения (6) можно получить известное уравнение sine-Gordon, которое имеет решение в виде бризера [20]. Отметим, что возможность распространения бризеров в твердых телах, в частности в полупроводниковых сверхрешетках (в одномерной модели, описываемой уравнением sine-Gordon), была теоретически установлена в работе [21]. Исходя из этого мы предположили, что и в рассматриваемой нами системе, описываемой уравнением (6), возможно распространение уединенных волн, по форме близких к бризерам уравнения sine-Gordon.

Будем полагать, что в момент $\tau = 0$ в массиве углеродных нанотрубок сформированы два электромагнитных импульса в виде бризеров, распространяющихся с различными в общем случае скоростями. Пусть безразмерный векторный потенциал поля пары таких электромагнитных импульсов имеет вид

$$\Phi(\nu, \xi, \tau) = 4 \sum_{i=1}^2 \left\{ \arctg \left[\left(\frac{1}{\Omega_i^2 - 1} \right)^{1/2} \frac{\sin \chi_i}{\cosh \mu_i} \right] \times \exp \left[- \left(\frac{\nu - \nu_{0i}}{\lambda_i} \right)^2 \right] \right\}, \quad (11)$$

где использованы следующие обозначения:

$$\chi_i = \Omega_i (1 - \beta_i^2)^{-1/2} [\tau - \beta_i (\xi - \xi_{0i})], \quad (12)$$

$$\mu_i = (1 - \Omega_i^2)^{1/2} (1 - \beta_i^2)^{-1/2} [\beta_i \tau - (\xi - \xi_{0i})], \quad (13)$$

$\Omega_i = \omega_{Bi}/\omega_0$ — параметр, определяемый собственной частотой колебаний бризера ω_{Bi} ($\Omega_i < 1$), $\beta_i = u_i/v$ — отношение скорости импульса u_i к скорости света в среде $v = c/\sqrt{\varepsilon}$, ξ_{0i} и ν_{0i} — безразмерные координаты импульса вдоль осей соответственно Oz и Oy в момент $\tau = 0$, λ_i — безразмерная полуширина импульса вдоль оси Oy . Здесь i нумеруют сталкивающиеся бризеры: первый и второй соответственно.

Электрическое поле в массиве нанотрубок в соответствии с (8) и (11) определяется как $E = E_0 \Psi(\nu, \xi, \tau)$, где функция $\Psi(\nu, \xi, \tau)$ имеет вид

$$\Psi(\nu, \xi, \tau) = 4 \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{\sqrt{1 - \Omega_i^2}}{\sqrt{1 - \beta_i^2}} \times \left[\frac{\cos \chi_i \cosh \mu_i + \beta_i (\Omega_i^{-2} - 1)^{1/2} \sin \chi_i \sinh \mu_i}{\cosh^2 \mu_i + (\Omega_i^{-2} - 1) \sin^2 \chi_i} \right] \times \exp \left[- \left(\frac{\nu - \nu_{0i}}{\lambda_i} \right)^2 \right] \right\}, \quad (14)$$

а величина E_0 вычисляется по формуле (9).

В выражении (11) первым множителем является пара бризеров, распространяющихся со скоростями u_1 и u_2 . Наличие второго множителя в виде гауссианы в начальных условиях (11) и (14) связано с тем, что гауссово распределение интенсивности, как известно, представляет большой интерес с прикладной точки зрения в различных областях физики и техники. Это объясняется минимальной дифракционной расходимостью гауссовых пучков, причем такие пучки весьма близки к реальности, являясь приближением, просто и полно описывающим свойства лазерного излучения [19,22].

Для численного решения уравнения (6) с начальными условиями (11), (14) была реализована явная разностная схема „крест“ для уравнений гиперболического типа, описанная в [23]. Найденные таким образом значения $\Phi(\nu, \xi, \tau)$ использовались для вычисления электрического поля по формуле (8), а также для нахождения распределения интенсивности поля по формуле (10).

Исследование распространения и взаимодействия лазерных импульсов в массиве углеродных нанотрубок типа „zigzag“ ($m, 0$) проведено нами при следующих значениях параметров рассматриваемой системы: $m = 7$, $\gamma_0 = 2.7$ eV, $b = 1.42 \cdot 10^{-8}$ cm, $d_x \approx 2.13 \cdot 10^{-8}$ cm, $n_0 = 2 \cdot 10^{18}$ cm $^{-3}$ [14], $T = 77$ K, $\varepsilon = 4$, $\omega_0 \approx 10^{14}$ s $^{-1}$ (см. формулу (7)). Отметим, что применение использованного в данной работе бесстолкновительного прибли-

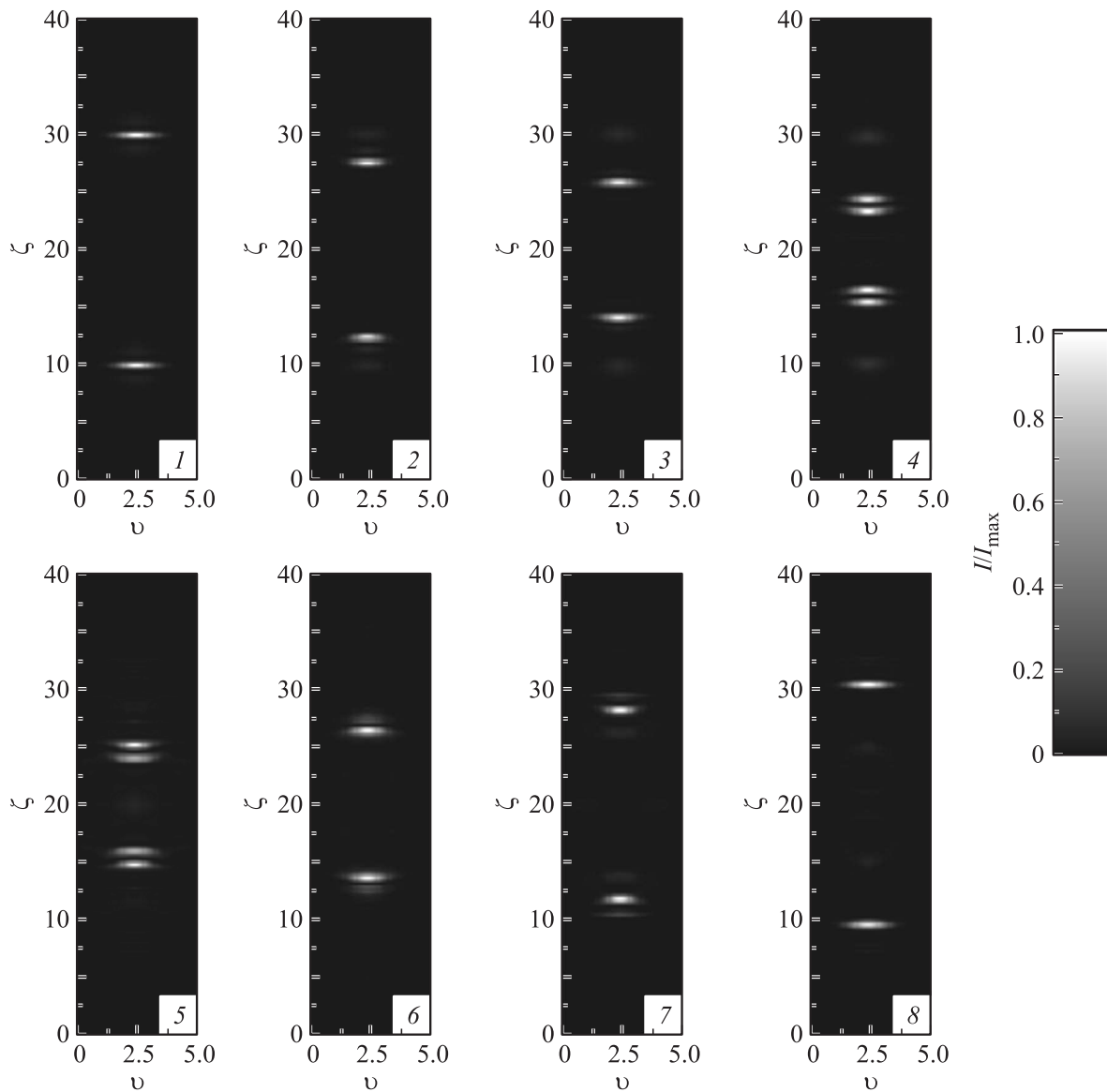


Рис. 1. Распределение интенсивности поля в массиве нанотрубок в различные моменты безразмерного времени $\tau = \omega_0 t / \sqrt{\epsilon}$ при взаимодействии лазерных импульсов. τ : 1 — 0, 2 — 3.5, 3 — 7.0, 4 — 10.5, 5 — 25.5, 6 — 29.0, 7 — 32.5, 8 — 36.0. По горизонтальной и вертикальной осям отложены безразмерные координаты $v = y\omega_0/c$ и $\xi = z\omega_0/c$. Значениям отношения I/I_{\max} сопоставлена шкала оттенков серого цвета — максимальным значениям интенсивности соответствуют наиболее светлые участки, минимальным — наиболее темные. I_{\max} — максимальное значение I в момент τ .

жения оправдано при рассмотрении процессов на временах t , не превышающих время релаксации $t_{\text{rel}} \cong 10^{-12}$ s.

На рис. 1, 2 представлены типичные результаты моделирования распространения и взаимодействия двумерных биполярных лазерных импульсов (бризеров) в массиве углеродных нанотрубок. Для определенности взяты следующие начальные параметры: $\beta_1 = -\beta_2 = 0.9$ (соответствует скорости $|u_{1,2}| = |\beta_{1,2}|c/\sqrt{\epsilon} = 1.35 \cdot 10^{10}$ cm/s), $\Omega_{1,2} = 0.5$ (соответствует частоте собственных колебаний бризера $\omega_{B,1,2} = \Omega_{1,2}\omega_0 \approx 5.05 \cdot 10^{13}$ s $^{-1}$), $\lambda_{1,2} = 1$ (полуширина импульса вдоль оси Oy равна $L_{1,2} = \lambda_{1,2}c/\omega_0 \approx 3 \cdot 10^{-4}$ cm).

На рис. 1 показано распределение интенсивности $I(v, \xi, \tau)$ поля в массиве нанотрубок до столкновения импульсов (части 1–4) и после их столкновения (части 5–8). Интенсивность поля представлена отношением I/I_{\max} , различным значениям которого сопоставлены в линейной зависимости оттенки шкалы серого цвета (I_{\max} — максимальное значение интенсивности в конкретный момент безразмерного времени $\tau = \omega_0 t / \sqrt{\epsilon}$). Наиболее светлые участки соответствуют максимальной интенсивности, а наиболее темные — минимальной. По горизонтали и по вертикали на рис. 1 отложены безразмерные координаты $v = y\omega_0/c$ и $\xi = z\omega_0/c$.

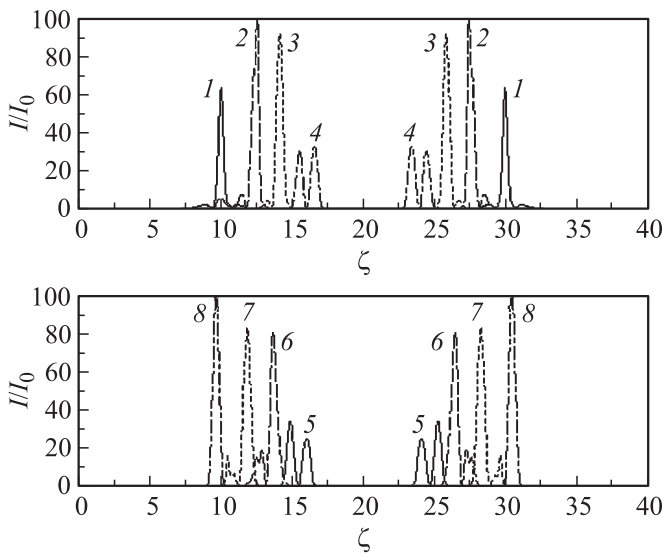


Рис. 2. Распределение интенсивности поля импульсов в различные моменты τ в плоскости xOz , проходящей через центры импульсов. τ : 1 — 0, 2 — 3.5, 3 — 7.0, 4 — 10.5, 5 — 25.5, 6 — 29.0, 7 — 32.5, 8 — 36.0. По горизонтальной оси отложена безразмерная координата $\xi = z\omega_0/c$, по вертикальной оси — величина I/I_0 .

При выбранных выше значениях параметров системы единица по осям Ov и $O\xi$ соответствует расстояниям $\Delta y = \Delta z \cong 3 \cdot 10^{-4}$ см.

На рис. 2 представлено распределение интенсивности $I(v, \xi, \tau)$ поля в массиве нанотрубок в плоскости xOz , проходящей через центры импульсов, имеющие координату $v = v_{0,2} = 2.5$, в те же моменты времени τ , что на рис. 1.

Из рис. 1, 2 видно, что двумерные электромагнитные импульсы распространяются в среде массива нанотрубок устойчиво, не подвергаясь существенному расплыванию.

По мере движения импульсов происходит регулярное изменение их формы — конфигурация с одним максимумом периодически сменяется конфигурацией с двумя максимумами. В частности, в течение интервала времени $\tau \in [0, 10.5]$ (см. рис. 1, части 1–4; рис. 2, кривые 1–4) произошло несколько циклов такого периодического изменения. Периодическое изменение формы двумерных биполярных электромагнитных импульсов оправдывает аналогию с бризерами уравнения sine-Gordon.

В результате численного анализа установлено, что после столкновения форма бризеров восстанавливается и дальнейшее их распространение происходит аналогично распространению до столкновения (см. рис. 1, части 5–8; рис. 2, кривые 5–8). Данное поведение импульсов можно объяснить тем, что при высоких скоростях движения и малых временах взаимодействия эффекты, связанные с нелинейным взаимодействием импульсов, не успевают развиться, вследствие чего столкновение импульсов происходит квазиупруго.

Особенности распространения и взаимодействия электромагнитных импульсов, описанные выше, могут быть учтены при разработке оптоэлектронных устройств, в основе которых лежит управление светом с помощью света; при создании элементной базы систем оптической обработки информации.

4. Заключение

Сформулируем основные результаты данной работы.

1. Получено уравнение, описывающее эволюцию поля при распространении и взаимодействии двумерных электромагнитных импульсов в среде массива углеродных полупроводниковых нанотрубок (см. (6)).

2. В результате численного моделирования установлено, что в массиве углеродных нанотрубок возможно распространение двумерных биполярных электромагнитных уединенных волн — бризеров.

3. Электромагнитные бризеры в массиве нанотрубок взаимодействуют квазиупруго — после столкновения форма и характер распространения бризеров восстанавливаются.

4. Бризеры, распространяющиеся в среде массива нанотрубок, устойчивы к расплыванию и могут перемещаться на расстояние $\sim 10^{-2}$ см.

Список литературы

- [1] И. Харрис. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. Техносфера, М. (2003). 336 с.
- [2] С.А. Максименко, Г.Я. Слепян. Радиотехника и электроника **47**, 3, 261 (2002).
- [3] S.A. Maksimenko, G.Ya. Slepian. Handbook of nanotechnology. Nanometer structure: theory, modeling, and simulation. SPIE Press, Bellingham (2004). P. 145.
- [4] С.А. Ахманов, В.А. Выслоух, А.С. Чиркин. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. Наука, М. (1988). 309 с.
- [5] М.В. Белоненко, Е.В. Демушкина, Н.Г. Лебедев. J. Rus. Laser Res. **27**, 5, 457 (2006).
- [6] М.Б. Белоненко, Е.В. Демушкина, Н.Г. Лебедев. ФТТ **50**, 2, 367 (2008).
- [7] М.Б. Белоненко, Е.В. Демушкина, Н.Г. Лебедев. ЖТФ **78**, 7, 1 (2008).
- [8] М.Б. Белоненко, Е.В. Демушкина, Н.Г. Лебедев. Хим. физика **27**, 7, 97 (2008).
- [9] М.В. Белоненко, N.G. Lebedev, E.N. Nelidina. Phys. Wave Phenom. **19**, 1, 39 (2011).
- [10] М.Б. Белоненко, С.Ю. Глазов, Н.Г. Лебедев, Н.Е. Мещерякова. ФТТ **51**, 8, 1657 (2009).
- [11] И.Л. Боголюбовский, В.Г. Маханьков. Письма в ЖЭТФ **25**, 2, 120 (1977).
- [12] М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, А.С. Попов. Письма в ЖЭТФ **91**, 9, 506 (2010).
- [13] М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, А.С. Попов. Письма в ЖТФ **37**, 3, 51 (2011).
- [14] М.Б. Белоненко, С.Ю. Глазов, Н.Е. Мещерякова. ФТП **44**, 9, 1248 (2010).

- [15] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Наука, М. (1982). 621 с.
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория поля. Наука, М. (1973). 504 с.
- [17] Э.М. Эпштейн. ФТТ **19**, *11*, 3456 (1977).
- [18] Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике. Наука, М. (1978). 832 с.
- [19] А.Н. Пихтин. Оптическая и квантовая электроника. Высш. шк., М. (2001). 573 с.
- [20] Yu.S. Kivshar, B.A. Malomed. Rev. Mod. Phys. **61**, *4*, 763 (1989).
- [21] С.В. Крючков, Г.А. Сыродоев. ФТП **24**, *5*, 913 (1990).
- [22] А.М. Гончаренко. Гауссовы пучки света. КомКнига, М. (2005). 144 с.
- [23] Н.Н. Калиткин. Численные методы. Наука, М. (1978). 512 с.