

Воздействие на массив невзаимодействующих углеродных нанолент электромагнитного излучения при наличии импульсов наносекундной длительности

© Н.Р. Садыков[†], М.Б. Белоненко*, Д.А. Пешков[†]

[†] Снежинский физико-технический институт — филиал Национального исследовательского ядерного университета „МИФИ“, 456776 Снежинск, Россия

* Волгоградский институт бизнеса (лаборатория нанотехнологий), 400048 Волгоград, Россия

(Получена 20 февраля 2014 г. Принята к печати 30 сентября 2014 г.)

Для углеродных нанолент типа „зигзаг“ (m -ZGNR) при нечетных значениях m исследована зависимость нелинейного тока от величины терагерцового излучения с шириной наклонного переднего фронта $\Delta T = 10^{-10}$ с при наличии постоянного электрического поля. Теоретически и численно показано, что по сравнению с простыми углеродными нанотрубками величина нелинейного поверхностного тока может быть на 2 порядка больше. Установлена сильная зависимость величины тока от ширины ленты.

1. Введение

Существует большое многообразие кристаллических и молекулярных структур на основе углерода — например, фуллерены, нанотрубки, углеродные цепочки, наноленты и др. Это связано в первую очередь с особенностью строения электронных оболочек атома. Такие структуры проявляют самые разнообразные свойства, в том числе разнообразные электромагнитные. В этой работе нас будут интересовать зигзагообразные наноленты m -ZGNR (m -зигзаг) в которых при совместном воздействии постоянного и периодического полей нелинейный поверхностный ток оказывается на 2 порядка больше по сравнению с простыми металлическими нанотрубками.

Ленты m -ZGNR имеют отличную от кресельных лент (m -AGNR) зонную структуру [1]. В этом случае дно зоны проводимости и потолок валентной зоны двух ветвей собственных значений энергии всегда дважды вырождены на краю зоны Бриллюэна. С увеличением ширины ленты кривизна дисперсионной кривой и область вырождения увеличиваются в окрестности края зоны Бриллюэна. Электронные состояния этих ветвей на уровне Ферми характеризуются локализованными состояниями вблизи зигзагообразного края ленты [2,3]. Первое сообщение на основе квантовых расчетов об особенностях электронной структуры зигзагообразных лент было сделано в [4] после анализа плотности электронных состояний края графита, где графит моделировался стопкой графеновых нанолент типа „зигзаг“. Значительное влияние края наноленты на элек-

тронную структуру было экспериментально показано в [5]. Законы дисперсии электронов для зигзагообразных лент при нечетном m совпадают с законом дисперсии химически модифицированных нанотрубок типа „кресло“ [6].

В данной работе будет показано, что значительные изменения в графеновых нанолентах (GNR) закона дисперсии носителей заряда по отношению к обычным нанотрубкам с металлическим типом зонной структуры приводят к значительному увеличению нелинейного тока в системе на основе массива невзаимодействующих нанолент по сравнению с нанотрубками [7–9]. В дальнейшем предлагается вместо постоянного (стационарного) поля использовать нестационарное поле, параметры которого будут приведены далее.

2. Дисперсионное уравнение для электронов в нанолентах m -зигзаг при нечетных m

Сначала получим закон дисперсии на краю зоны Бриллюэна. Рассмотрим графеновые наноленты m -зигзаг при нечетных $m = 2f - 1$, где $f = 2, 3, 4, \dots$, элементарная ячейка которых содержит $N = 2m = 4f - 2$ атомов углерода [1], а индекс m будет характеризовать число пар атомов углерода в ячейке. В случае наноленты типа m -зигзаг (m -GNR) при нечетных $m = 2f - 1$ хюккелевская матрица размерности $N \times N$, определяющая законы дисперсии электронов с учетом трансляционной симметрии,

[†] E-mail: n.r.sadykov@rambler.ru

имеет вид

$$\begin{vmatrix} \alpha_\pi - \varepsilon & \gamma_0(1 + e^{-i2\bar{\xi}}) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_0(1 + e^{i2\bar{\xi}}) & \alpha_\pi - \varepsilon & \gamma_0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_0 & \alpha_\pi - \varepsilon & \gamma_0(1 + e^{i2\bar{\xi}}) & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \gamma_0 & \alpha_\pi - \varepsilon & \gamma_0(1 + e^{-i2\bar{\xi}}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \gamma_0(1 + e^{i2\bar{\xi}}) & \alpha_\pi - \varepsilon \end{vmatrix}, \quad (1)$$

где $\bar{\xi} = \bar{a}p_z$, $\bar{a} = \sqrt{3}b/2\hbar$, \hbar — постоянная Планка, α_π — энергия Ферми, ε — электронные уровни энергии. Из условия равенства нулю определителя матрицы (1) следуют законы дисперсии электронов для произвольных значений f .

Несложно показать, что для определителя матрицы (1) имеет место рекуррентное соотношение

$$\begin{aligned} |N \times N| &= \{(\alpha_\pi - \varepsilon)^2 - 4\gamma_0^2 \cos^2 \bar{\xi}\} |(N-2) \times (N-2)| \\ &\quad - (\alpha_\pi - \varepsilon)\gamma_0^2 |N-3, N-3|, \\ |(N-1) \times (N-1)| &= (\alpha_\pi - \varepsilon) |(N-2) \times (N-2)| \\ &\quad - \gamma_0^2 |(N-3) \times (N-3)|, \quad (2) \end{aligned}$$

где $|N \times N|$ означает определитель матрицы (1), величина $|N-k, N-k|$ означает минор матрицы (1), который получается вычеркиванием первых k строк и первых k столбцов матрицы (1). Используя метод математической индукции, докажем, что для матрицы $(N \times N)$ имеет место соотношение

$$Y^2 \approx \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^{4f-2} - 2\gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^{4f}, \quad (3)$$

где $f = 2, 3, 4, \dots, N = 4f - 2, Y = \varepsilon - \alpha_\pi$.

В соответствии с методом математической индукции сначала убедимся в выполнении равенства (3) при $f = 2$. В этом случае $N = 4f - 2 = 6$. Поэтому из условия $|6 \times 6| = 0$ из (П.2) убеждаемся в правильности соотношения (3). Аналогично для $f = 3$ получаем $N = 10$. Поэтому из условия $|10 \times 10| = 0$ из (П.3) убеждаемся в правильности соотношения (3). Теперь предположим, что соотношения (П.4) выполняются при любом f . Пусть при произвольном f имеет место соотношение (3). Тогда при $f_1 = f + 1$ должно иметь место равенство

$$Y^2 \approx \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^{4f+2} - 2\gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^{4f+4}. \quad (4)$$

Поскольку в этом случае $N_1 = 4f + 2$, то из условия $|(4f + 2) \times (4f + 2)| = 0$ из (П.4) получаем (4).

Таким образом, закон дисперсии для наноленты m -зигзаг при $m = 2f - 1$ определяется в соответствии с (3).

3. Постоянная составляющая плотности тока для массива невзаимодействующих нанолент m -зигзаг при нечетных m

Рассмотрим массив невзаимодействующих нанолент типа m -зигзаг. Пусть наноленты ориентированы вдоль оси z . В этом случае дисперсионные кривые валентной зоны и зоны проводимости пересекаются на краю зоны Бриллюэна [1], в результате чего такие наноленты обладают полуметаллическим типом зонной структуры. При этом по мере отклонения продольной компоненты импульса от максимального значения (от значения импульса на краю зоны Бриллюэна) дисперсионная кривая в зоне проводимости растет в соответствии с (3). Зная такую закономерность дисперсионной кривой, определим величину нелинейного тока с учетом только такой дисперсионной кривой. Плотность тока вдоль оси наноленты (ось z) вычислим по формуле

$$j_z = \frac{eN}{\pi\hbar} \int_{-p_0}^{p_0} v_z(p_z) f(p_z) dp_z, \quad (5)$$

где $\bar{\xi} = \bar{a}p_z$, $\bar{\xi}p_0 = \pi/2$, $-\pi/2 \leq \bar{\xi} \leq \pi/2$; одномерный интеграл в (5) следует из того факта, что в случае наноленты у нас реализуется одномерная структура.

В случае нанолент m -зигзаг при нечетных $m = 2f - 1$ реализуется одномерная структура с элементарной фазовой ячейкой из $(4f - 2)$ атомов углерода. Поскольку в (5) осуществляется переход от двумерного интеграла к одномерному $\iint \dots d^2\mathbf{p} = (2\pi\hbar/L) \int \dots dp_z$, то по аналогии с выводом плотности тока для массива простых углеродных нанотрубок (УНТ) [6] типа кресло (f, f) формулу для постоянной составляющей плотности тока запишем в виде

$$j_0 = \frac{eN}{\pi\hbar} \sum_l a_l B(l, T) \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2 \left(\frac{\bar{a}eE_0 l}{\omega} \right) \sin \varphi_n \cos \varphi_n, \quad (6)$$

где $l = 1, 2, 3, \dots, k_B$ — постоянная Больцмана, T — температура, μ — химический потенциал, ω — циклическая частота падающего на массив нанолент терагер-

цового излучения. В (6) угол φ_n и величина $\sum_l a_l B(l, T)$ определяются равенствами

$$\sin \varphi_n = \frac{v}{\sqrt{v^2 + (l a e E_1 + n \omega)^2}},$$

$$B(l, T) = \frac{1}{\bar{a}} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos(l \bar{\xi}) \left\{ 1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_c - \alpha_\pi - \mu}{k_B T}\right) \right\}^{-1} d\bar{\xi}. \tag{7}$$

Дисперсионная кривая в зоне проводимости на краю зоны Бриллюэна определяется (3), поэтому скорость электрона будет иметь вид

$$v_z = \partial \varepsilon_c / \partial p_z \approx -2\gamma_0 \bar{a} \left\{ (2f - 1) - (2f + 1)(2 \cos \bar{\xi})^2 \right\} \times \sin(\bar{\xi}) [2 \cos(\bar{\xi})]^{2f-2},$$

$$Y \approx \gamma_0 \left\{ (2 \cos \bar{\xi})^{2f-1} - (2 \cos \bar{\xi})^{2f+1} \right\}. \tag{8}$$

Из (8) следует, что скорость можно разложить в гармонический ряд

$$v_z(\bar{\xi}) = \sum_l a_l \sin[l \bar{\xi}], \tag{9}$$

зависимости постоянных величин a_l от f приведены в таблице. Из таблицы видно, что при четных l имеет место $a_l = 0$.

Пусть терагерцовое излучение с частотой $\omega = 5\nu = 1.667 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ ($\tau = 1/\nu = 3 \cdot 10^{-13} \text{ с}$) и с шириной переднего фронта $\Delta T = 10^{-10} \text{ с}$ воздействует на массив нанолент типа m -зигзаг при $m = 2f - 1$, $f = 4$ при наличии постоянного электрического поля ($x_1 = \bar{a} e E_1 / \nu = 1$). Пусть поверхностная концентрация нанолент в поперечном направлении $N = 10^{11} \text{ м}^{-2}$. Пусть ширина переднего фронта излучения ΔT , а амплитуда равняется E_0 . Поле излучения за время ΔT сместится на расстояние $\Delta x = c \Delta T$. Поэтому постоянная составляющая плотности тока (6) при распространении излучения будет модулирована как $j_0(t, x) = f_0(x_{\max} \bar{t} / \Delta T)$, где максимальное значение x_0 равно $x_{\max} = 80$, $\bar{t} = t - x/c$, $0 \leq \bar{t} \leq \Delta T$. Из (6) следует, что модулированный сигнал будет периодической функцией. Это подтверждается результатами численных расчетов.

Значения величин a_l из (9) для нанолент m -зигзаг с $m = 2f - 1$

f	a_1	a_3	a_5	a_7	a_9	a_{11}
2	$14\gamma_0 \bar{a}$	$24\gamma_0 \bar{a}$	$10\gamma_0 \bar{a}$	—	—	—
3	$50\gamma_0 \bar{a}$	$96\gamma_0 \bar{a}$	$60\gamma_0 \bar{a}$	$14\gamma_0 \bar{a}$	—	—
4	$182\gamma_0 \bar{a}$	$378\gamma_0 \bar{a}$	$290\gamma_0 \bar{a}$	$112\gamma_0 \bar{a}$	$18\gamma_0 \bar{a}$	—

Примечание. При четных l имеет место $a_l = 0$.

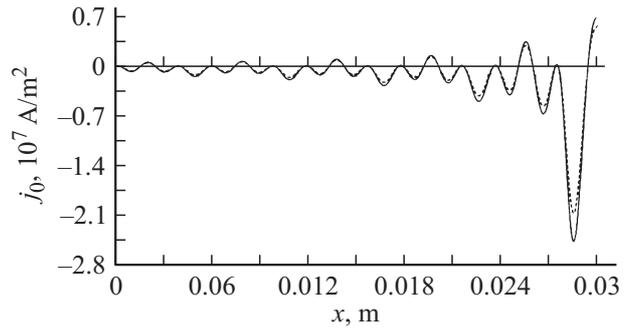


Рис. 1. Зависимость постоянной составляющей плотности тока j_0 от x для массива нанолент типа m -зигзаг при $f = 4$, $m = 2f - 1 = 7$ в момент времени $t = 10^{-10} \text{ с}$.

На рис. 1 для рассматриваемого массива нанолент приведена зависимость постоянной составляющей плотности тока j_0 от x . Сплошная кривая соответствует случаю, когда дисперсия определяется в соответствии с (3), пунктирная кривая соответствует случаю $Y^2 = \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^6$. Незначительное различие токов для сплошной и пунктирной кривых означает, что основным вклад в рассматриваемый эффект вносит первое слагаемое в (3). Из рисунка видно, что существует резко выраженный пик в начале фронта бегущего мощного электрического импульса. В этом случае можно говорить о предельно коротком импульсе плотности тока в один период с амплитудой в $\sim 2100 \text{ А/см}^2$ для нанолент с $f = 4$. Такой бегущий электрический импульс должен генерировать предельно короткий электрический импульс.

Для нанолент с $f = 3$ резко выраженный пик в начале фронта бегущего мощного электрического импульса составляет $\sim 300 \text{ А/см}^2$.

4. Возможность генерации СВЧ и терагерцового излучения в среде на основе массива не взаимодействующих нанолент m -зигзаг при нечетных m

Значительное увеличение нелинейного тока в системе на основе массива не взаимодействующих нанолент по сравнению с нанотрубками приводит к значительным (на 2 порядка) количественным изменениям в задаче по генерации СВЧ и терагерцового излучения в массиве простых не взаимодействующих нанотрубок при наличии постоянного и переменного полей [6]. Рассмотрим эту задачу.

Пусть терагерцовое излучение действует на массив нанолент при наличии постоянного поля (можно использовать наносекундные электрические импульсы [10–12]). Параметры полей соответствуют случаю рис. 1.

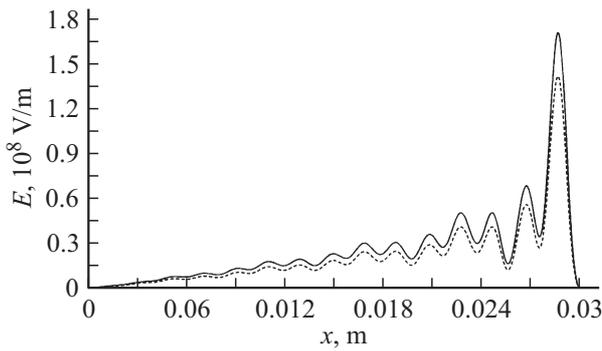


Рис. 2. Зависимость E от x для массива нанолент типа m -зигзаг при $f = 4$, $m = 2f - 1 = 7$ в момент времени $t = 10^{-10}$ с.

Процесс распространения излучения описывается волновым уравнением

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 E}{c^2 \partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial j_0(\bar{t})}{\partial \bar{t}}. \quad (10)$$

Из уравнения (10) можно получить приближенное аналитическое решение. Пусть $\bar{t} = t - x/c$, $\bar{x} = x$. Предполагая, что $|E| \ll |P/\epsilon_0|$, $|E| \ll |E_0|$, получаем [7]

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \bar{t} \partial \bar{x}} = -\frac{\mu_0 c}{2} \frac{\partial j_0(\bar{t})}{\partial \bar{t}}, \quad (11)$$

где при выводе (11) учтено, что $|\partial E/\partial \bar{x}| \ll |\partial E/c \partial \bar{t}|$. Из (11) получаем

$$\frac{\partial E}{\partial \bar{x}} = -\frac{\mu_0 c}{2} [j_0(\bar{t}) - j_0(0)] \quad (12)$$

или, с учетом граничного условия $E(\bar{x} = 0, \bar{t}) = 0$,

$$E(t, x) = -\frac{\mu_0 c x}{2} [j_0(\bar{t}) - j_0(0)]. \quad (13)$$

На рис. 2 для наноленты типа m -зигзаг при $f = 4$, $m = 2f - 1 = 7$, $N = 10^{11} \text{ м}^{-2}$ приведены зависимости $E(t, x)$, которые вычислялись в соответствии (13), от продольной координаты x в момент времени $t = 10^{-10}$ с (плотности токов j_0 приведены на рис. 1). Поле излучения $E = \tilde{E}_1 + \tilde{E}_0$ состоит из медленно меняющейся по линейному закону составляющей \tilde{E}_0 и быстро осциллирующей части \tilde{E}_1 . Сплошная кривая соответствует случаю, когда дисперсия определяется в соответствии с (3), пунктирная кривая соответствует случаю $Y^2 = \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^6$. Из рисунка видно, что на переднем фронте быстро осциллирующей части содержится предельно короткий импульс с амплитудой $\sim 1.4 \cdot 10^8$ В/м для 7-ZGNR на расстоянии $\Delta x \approx 3$ см.

Если рассмотреть по аналогии с [7] задачу генерации терагерцового излучения с помощью двухчастотного CO_2 -лазера, то величина генерируемого поля излучения также увеличится на 2 порядка.

5. Заключение

В работе для массива нанолент типа „зигзаг“ (m -ZGNR) при $m = 7$ показана возможность генерации коротких импульсов СВЧ излучения с длиной волны $\lambda \approx 2$ мм. Амплитуда СВЧ излучения (поля излучения) при $z \approx 0.09m$ составляет $\sim 1.7 \cdot 10^8$ В/м. Из результатов расчетов следует, что величина поверхностного тока зависит от ширины наноленты (от величины m), в то время как в случае простых нанотрубок величина тока не зависит от радиуса УНТ. Частота колебаний переменного электрического поля E_0 $\omega = 5\nu = 1.667 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, что соответствует терагерцовому излучению с $\lambda \approx 0.11$ мм.

Приложение

Из (1), (2) для $n = 2$ ($N = 6$) следует

$$|3 \times 3| = Y|2 \times 2| - Y\gamma_0^2 \approx -Y\gamma_0^2 [1 + (2 \cos \bar{\xi})^2]. \quad (\text{П.1})$$

При выводе (П.1) учтено, что при $\bar{\xi} \rightarrow \pi/2$ имеем место $\cos \bar{\xi} \rightarrow 0$; в соответствии с (3) при $Y = \Xi_2 \gamma_0 (\cos \bar{\xi})^3$ имеет место $Y^2 \ll \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^2$.

Аналогично получаем

$$|4 \times 4| \approx \gamma_0^2 \{ \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^4 - Y^2 [1 + 2(2 \cos \bar{\xi})^2] \},$$

$$|5 \times 5| \approx Y\gamma_0^2 \{ \gamma_0^2 [1 + (2 \cos \bar{\xi})^2] \},$$

$$|6 \times 6| \approx \gamma_0^4 \{ Y^2 [1 + 2(2 \cos \bar{\xi})^2] - \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^6 \}. \quad (\text{П.2})$$

Из (3) и (П.2) с учетом условия $|6, 6| = 0$ следует (3) при $n = 2$.

Из (2) для $n = 3$ ($N = 10$) следует

$$|7 \times 7| \approx -Y\gamma_0^6 [1 + (2 \cos \bar{\xi})^2],$$

$$|8 \times 8| \approx \gamma_0^8 (2 \cos \bar{\xi})^8 - Y^2 \gamma_0^6 [1 + 2(2 \cos \bar{\xi})^2],$$

$$|9 \times 9| \approx Y\gamma_0^8 [1 + (2 \cos \bar{\xi})^2],$$

$$|10 \times 10| \approx \gamma_0^8 \{ Y^2 [1 + 2(2 \cos \bar{\xi})^2] - \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^{10} \}. \quad (\text{П.3})$$

С помощью метода математической индукции нетрудно показать, что с учетом сделанных предположений из (П.1), (П.2) и (П.3) можно получить следующие рекуррентные соотношения:

$$|N \times N| \approx \gamma_0^{4f-4} \{ Y^2 [1 + 2(2 \cos \bar{\xi})^2] - \gamma_0^2 (2 \cos \bar{\xi})^{4f-2} \}.$$

$$|(N-1) \times (N-1)| \approx Y\gamma_0^{4f-4} [1 + (2 \cos \bar{\xi})^2],$$

$$|(N-2) \times (N-2)| \approx \gamma_0^{4f-4} (2 \cos \bar{\xi})^{4f-4}$$

$$- Y^2 \gamma_0^{4f-6} [1 + 2(2 \cos \bar{\xi})^2],$$

$$|(N-3) \times (N-3)| \approx -Y\gamma_0^{4f-6} [1 + (2 \cos \bar{\xi})^2]. \quad (\text{П.4})$$

Список литературы

- [1] П.Б. Сорокин, Л.А. Чернозатонский. УФН, **183** (2), 113 (2013).
- [2] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Kusakabe. J. Phys. Soc. Jpn., **65**, 1920 (1996).
- [3] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. Phys. Rev. B, **54**, 17954 (1996).
- [4] K. Kobayashi. Phys. Rev. B, **48**, 1757 (1993).
- [5] K. Suenaga, M. Koshino. Nature, **468**, 1088 (2010).
- [6] Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин, Е.А. Ахлюстина. ФТП, **47** (9), 1258 (2013) [Semiconductors, **47** (9), 1246 (2013)].
- [7] Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин. ФТП, **46** (2), 168 (2012).
- [8] Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин. ФТП, **46** (6), 809 (2012).
- [9] М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, А.С. Попов. Письма ЖЭТФ, **91** (9), 506 (2010).
- [10] Г.А. Месяц, М.И. Яландин. УФН, **175**, 225 (2005) [Phys. Usp., **48**, 211 (2005)].
- [11] Г.А. Месяц. УФН, **176**, 1069 (2006) [Phys. Usp., **49**, 1045 (2006)].
- [12] М.И. Яландин, А.Г. Реутов, М.Р. Ульмаскулов, К.А. Шарыпов, С.А. Шунайлов, Н.С. Гинзбург, И.В. Зотова, Е.Р. Кочаровская, А.С. Сергеев. Письма ЖЭТФ, **91** (11), 620 (2011).

Редактор Л.В. Шаронова

Influence of electromagnetic radiation on the array of noninteracting carbon nanoribbons in the presence of nanosecond electric pulses

N.R. Sadykov⁺, M.B. Belonenko^{*}, D.A. Peshkov⁺

⁺ Snezhinsk Physics and Technology Institute of the National Research Nuclear University „MEPhI“, 456070 Snezhinsk, Chelyabinsk, Russia

^{*} Volgograd Institute of Business (Laboratory of Nanotechnologies), 400048 Volgograd, Russia

Abstract For carbon zigzag-type nanoribbons (*m*-ZGNR) the dependence of nonlinear current on the value of terahertz radiation with width of inclined forward front $\Delta T = 10^{-10}$ s is investigated at odd values of *m* in the presence of constant electric field. It is shown theoretically and numerically that the value of nonlinear surficial current can be up two orders in comparison with simple carbon nanotubes. Strong dependence of current value on the ribbon width is established.