УДК 531.21

М.Б. БЕЛОНЕНКО, Н.Г. ЛЕБЕДЕВ**, Е.Н. ГАЛКИНА**, М.М. ШАКИРЗЯНОВ****

СТОЛКНОВЕНИЕ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИХ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Рассмотрено взаимодействие предельно коротких оптических импульсов в полупроводниковых углеродных нанотрубках (УНТ). Выведено уравнение для динамики электромагнитного поля в системе УНТ в случае низких температур, решения которого являются аналогами солитонов уравнения sin-Gordon. Проанализировано поведение предельно коротких оптических импульсов в полупроводниковых УНТ при столкновении.

Ключевые слова: *предельно короткие оптические импульсы, солитоны, столкновение импульсов.*

Введение

Углеродные нанотрубки обладают уникальными свойствами, такими, как: высокой прочностью, проводимостью (полупроводниковой или металлической), высокой нелинейной восприимчивостью, которые дают неограниченные возможности их применений, например в микроэлектронике [1–4]. Квазиодномерность и относительная простота их строения сделали данные вещества весьма популярными среди как теоретиков, так и экспериментаторов. В области исследования нелинейных свойств при помощи редукции к уравнению КдФ были исследованы свойства УНТ акустической природы, которые обусловлены существенной негармоничностью потенциала взаимодействия между соседними атомами углерода [5–7]. Не остались без внимания и вопросы, связанные с нелинейными свойствами углеродных нанотрубок в оптическом диапазоне. В работах [8, 9] изучались вопросы, связанные с вопросами нелинейного отклика УНТ на электромагнитное поле. Нелинейность, как следует из этих работ, возникает вследствие изменения классической функции распределения электронов и непараболического закона дисперсии электронов.

Возможность существования аналогов солитонов и зависимость их параметров от параметров УНТ была установлена в работах [10, 11], но вместе с тем остался ряд вопросов, требующих дальнейшего уточнения. Так, разработка последовательного квантово-механического описания, основанного на микроскопическом гамильтониане для системы электронов в УНТ, представляет собой и самостоятельный теоретический интерес. Особенно это становится актуальным для случая низких температур, когда необходимо учитывать вырождение статистики электронного газа. Кроме того, представляет самостоятельный интерес (что важно для практических приложений) вопрос о том, каким будет поведение двух оптических импульсов – будут ли они взаимодействовать друг с другом, и если будут, то от каких параметров данное взаимодействие зависит сильнее всего и при каких параметрах им можно пренебречь. Очевидно, что вопрос о взаимодействии двух предельно коротких импульсов важен, прежде всего, для устройств управления полем излучения, в которых возможно будет управлять светом при помощи света. Все вышеизложенные обстоятельства и послужили стимулом для написания настоящей работы.

Основные уравнения

Исследование электронной структуры УНТ приведено, например, в [12–15], и стандартным подходом является анализ динамики π-электронов в приближении сильной связи. Рассмотрим переменное электрическое поле, распространяющееся в системе УНТ, в геометрии, представленной на рис. 1.

Гамильтониан системы электронов в этом случае в присутствии внешнего переменного электрического поля, записанного в калибровке $\boldsymbol{E} = -\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$, имеет вид

$$H = \sum_{ps} \varepsilon_s \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) a_{ps}^{+} a_{ps} \,, \tag{1}$$

где a_{ps}^{+}, a_{ps} – операторы рождения, уничтожения электронов с квазиимпульсом (p, s); $A(t)$ – величина вектор-потенциала переменного электромагнитного поля, который имеет одну компоненту и направлен вдоль осей нанотрубок; $\varepsilon_s(p)$ – закон дисперсии электронов. Для полупроводниковых УНТ типа zig-zag, на свойствах которых и остановимся для определенности задачи, закон дисперсии есть

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

где квазиимпульс $\boldsymbol{p}$ задается как (p,s), $s = 1, 2, ..., m$, нанотрубка имеет тип $(m,0)$, и m не делится на 3. Заметим, что основное отличие электронных свойств углеродных нанотрубок, например, от сверхрешеток заключается в законе дисперсии (2), который имеет сложный периодический характер и не допускает разложения, в частности, в ряд по степеням импульса.

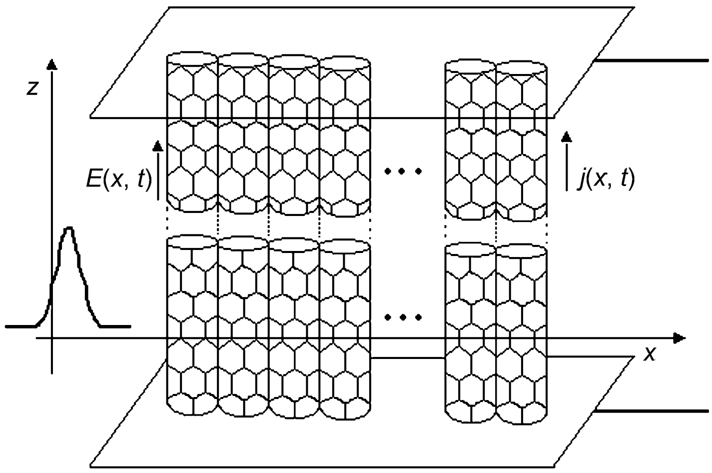


Рис. 1. Геометрия задачи. Постоянное поле параллельно переменному полю

С учетом диэлектрических и магнитных свойств УНТ [16] уравнения Максвелла можно записать как

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j} = 0\,. \qquad (3)$$

Здесь пренебрегается дифракционным расплыванием лазерного пучка в направлениях, перпендикулярных оси распространения. Вектор-потенциал $\boldsymbol{A}$ есть: $\boldsymbol{A} = (0, 0, A\,(x,t))$.

Выражение для плотности тока имеет вид

$$j = e\sum_{ps} v_s\left(p - \frac{e}{c}A(t)\right)\left\langle a_{ps}^{+} a_{ps}\right\rangle, \qquad (4)$$

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

Учитывая, что $\rho_0 = \exp(-H/kT)/\mathrm{Sp}(\exp(-H/kT))$, где k – постоянная Больцмана, T – температура, и суммируя все вышесказанное, получаем точное уравнение для вектор-потенциала электрического поля:

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} + \frac{8\pi e\gamma a}{c}\sin\left(\frac{eaA}{c}\right)\times$$

$$\times\sum_{s=1}^{m}\int_{-\pi/a}^{\pi/a}dp\frac{\cos(ap)\cos(\pi s/m)}{\sqrt{1+4\cos(ap-aeA/c)\cos(\pi s/m)+4\cos^2(\pi s/m)}}\frac{\exp(-\beta\varepsilon_s(p))}{1+\exp(-\beta\varepsilon_s(p))}=0,$$
$$\beta=1/kT. \tag{5}$$

Уравнение (5) после нормирования, разложения корня в ряд Фурье по $\cos(ap-aeA/c)$ и выполнения интегрирования может быть представлено в виде

$$\frac{\partial^2 B}{\partial x'^2}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 B}{\partial t'^2}+\sin(B)+\sum_{k=2}^{\infty}b_k\sin(kB)=0,$$
$$B=\frac{eaA}{c};\quad x'=\frac{ea}{c}\sqrt{8\pi\gamma\delta};\quad t'=t\frac{ea}{c}\sqrt{8\pi n_0\gamma\delta}, \tag{6}$$
$$\delta=\sum_{s=1}^{m}\int_{-\pi/a}^{\pi/a}dp\frac{\cos(ap)\cos(\pi s/m)}{\sqrt{1+4\cos^2(\pi s/m)}}\frac{\exp(-\beta\varepsilon_s(p))}{1+\exp(-\beta\varepsilon_s(p))}.$$

Здесь n_0 – концентрация равновесных электронов в углеродных нанотрубках.

Вследствие убывания коэффициентов b_k с ростом *k*, в сумме в уравнении (6) можно ограничиться первыми двумя неисчезающими слагаемыми и получить широко применяемое в приложениях, но не интегрируемое методом обратной задачи рассеяния двойное уравнение sin-Gordon [17]. Важным следствием данного уравнения есть теорема площадей: устойчивы по отношению к изменению формы только импульсы, имеющие определенную «площадь» («площадь» импульса $\psi(t)$ определена как $\int_{-\infty}^{\infty}\psi(t)dt$). Импульсы, имеющие большую «площадь», стремятся уменьшить ее до фиксированной, а имеющие меньшую «площадь», наоборот, увеличивают ее. В случае быстро убывающих граничных условий [17] характер взаимодействия импульсов и, главное, характер распада одиночного импульса сильно зависят от их скорости. При увеличении скорости импульсы начинают взаимодействовать все более и более упруго, и меньшая часть их энергии уходит в колебательные моды. Специфика распространения электромагнитного поля в системе углеродных нанотрубок состоит в том, что, в отличие от ранее изучаемых систем, которые описываются одним (двумя) слагаемыми с sin в (6), для нанотрубок надо учитывать весь бесконечный ряд. Отметим, что коэффициенты этого ряда зависят от температуры и не могут быть выражены какой-либо простой формулой, даже для одного интервала температур. Таким образом, углеродные нанотрубки представляют собой уникальную систему, для описания которой надо использовать все слагаемые в (6), и результаты не могут быть представлены простыми формулами (как для уравнения sin-Gordon) даже для одиночной уединенной волны.

Все это и послужило стимулом для дальнейшего численного исследования уравнения (6), которое было получено без каких-либо ограничений на минимальную длительность импульса электрического поля.

Результаты компьютерного моделирования

Исследуемые уравнения решались численно при помощи прямой разностной схемы типа крест [18]. Постоянное поле на первом этапе полагалось равным нулю. Шаги по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости. Шаги разностной схемы уменьшались последовательно в два раза до тех пор, пока решение не изменялось в 8-м значащем знаке. Начальное условие выбиралось по аналогии в виде хорошо известного кинк-решения для уравнения sin-Gordon:

$$B(x,t)=4\,\mathrm{arctg}(\exp((x-vt)/\gamma)),$$
$$\gamma=(1-v^2)^{1/2}. \tag{7}$$

На рис. 2 приведено типичное решение уравнения (6).

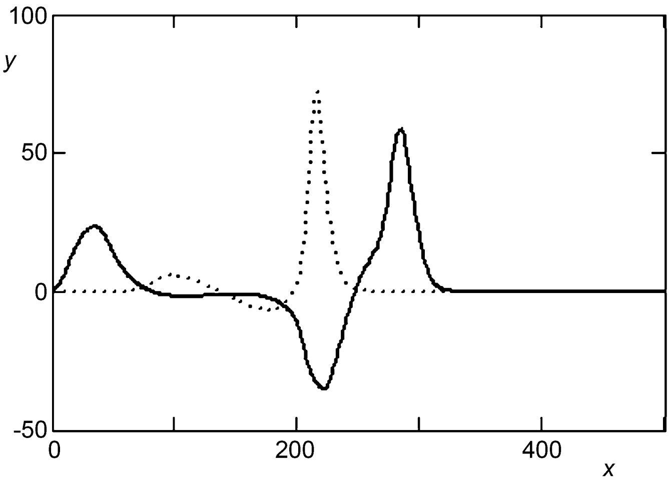


Рис. 2. Зависимость электрического поля, определяемого уравнением (6), от координаты в фиксированный момент времени. По оси x – безразмерная координата (единица соответствует $3\cdot10^{-6}$ м), по оси y – безразмерная величина электрического поля (единица соответствует 10^8 В/м). Для сплошной кривой время в два раза больше, чем для пунктирной, $v/c = 0{,}95$

Ультракороткий импульс разделяется на несколько импульсов, и импульсы имеют существенно разную амплитуду. Отметим, что аналогичное поведение наблюдалось при исследовании аналога уравнения sin-Gordon в других нелинейных системах [19]. Обратим внимание на то, что ультракороткий импульс «сбрасывает» излишнюю «площадь» («хвост»), которая отделяется от импульса, что в общем согласуется с результатами по эволюции систем, описываемых уравнением, «близким» к уравнению sin-Gordon. Данное обстоятельство связано с тем фактом, что, как уже упоминалось выше, рассматриваемую систему можно хорошо описать в рамках двойного уравнения sin-Gordon, для которого существует аналог теоремы площадей [19].

Далее рассматривалась ситуация, когда сталкивались два предельно коротких импульса, каждый из которых имел вид

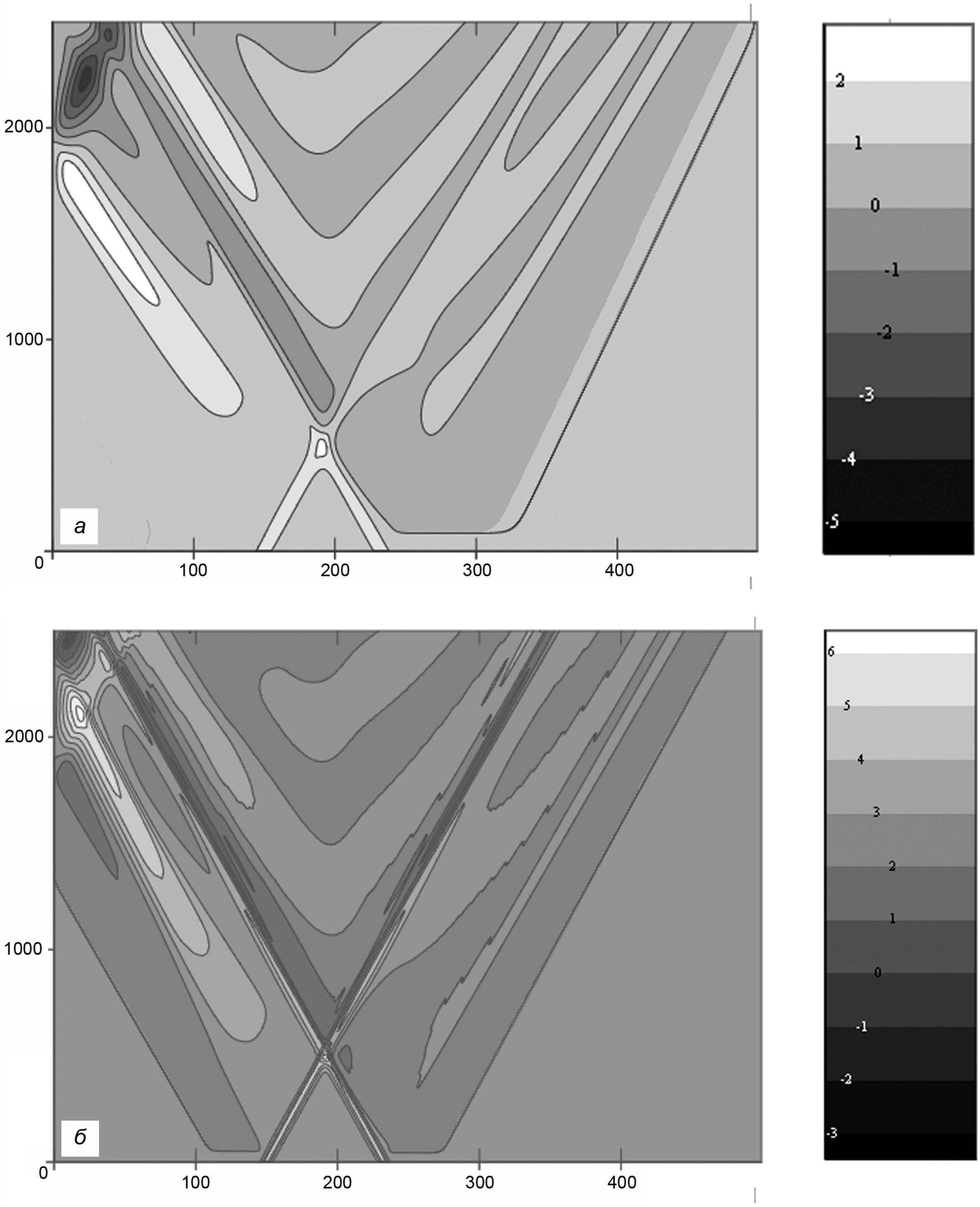
$$\begin{gathered} B_i(x,t) = A_i \operatorname{arctg}(\exp((x - x_{0i} - v_i t)/\gamma_i)), \\ \gamma_i = (1 - v_i^2)^{1/2}, \\ i = 1, 2. \end{gathered} \tag{8}$$

Соответствующие результаты для типичных картин столкновений импульсов приведены на рис. 3.

Отметим, что подобное поведение имеет достаточно простую физическую интерпретацию. С повышением скорости, как следует из (8), уменьшается как величина пространственной локализации уединенного импульса, так и время, за которое один импульс «проходит» через другой. Все это приводит к тому, что эффекты, связанные с нелинейным взаимодействием импульсов, не успевают развиться, и столкновение происходит «упругим» образом (т.е. без образования за импульсами хвостов). Отметим, что несимметричность рисунков, приведенных на рис. 3, связана с взаимодействием импульсов с границей области и отражением части импульса (для случая малых скоростей) от нее.

В случае столкновения импульсов разной амплитуды типичная картина столкновения выглядит так, как приведено на рис. 4.

Отметим, что в данном случае наблюдается рассеивание уединенного импульса с меньшей амплитудой на импульсе с большей амплитудой, вследствие чего импульс с меньшей амплитудой исчезает. Это можно связать с тем, что происходит нелинейное взаимодействие, в результате которого происходит перераспределение энергии импульсов, что, в свою очередь, приводит к появлению за импульсом с большей амплитудой более длинного «хвоста». Данное взаимодействие, несомненно, может оказаться полезным в устройствах управления светом при помощи света и может служить, например, базой для аналогового компаратора амплитуд импульсов.


а
2000
1000
0
100
200
300
400
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
б
2000
1000
0
100
200
300
400
6
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3

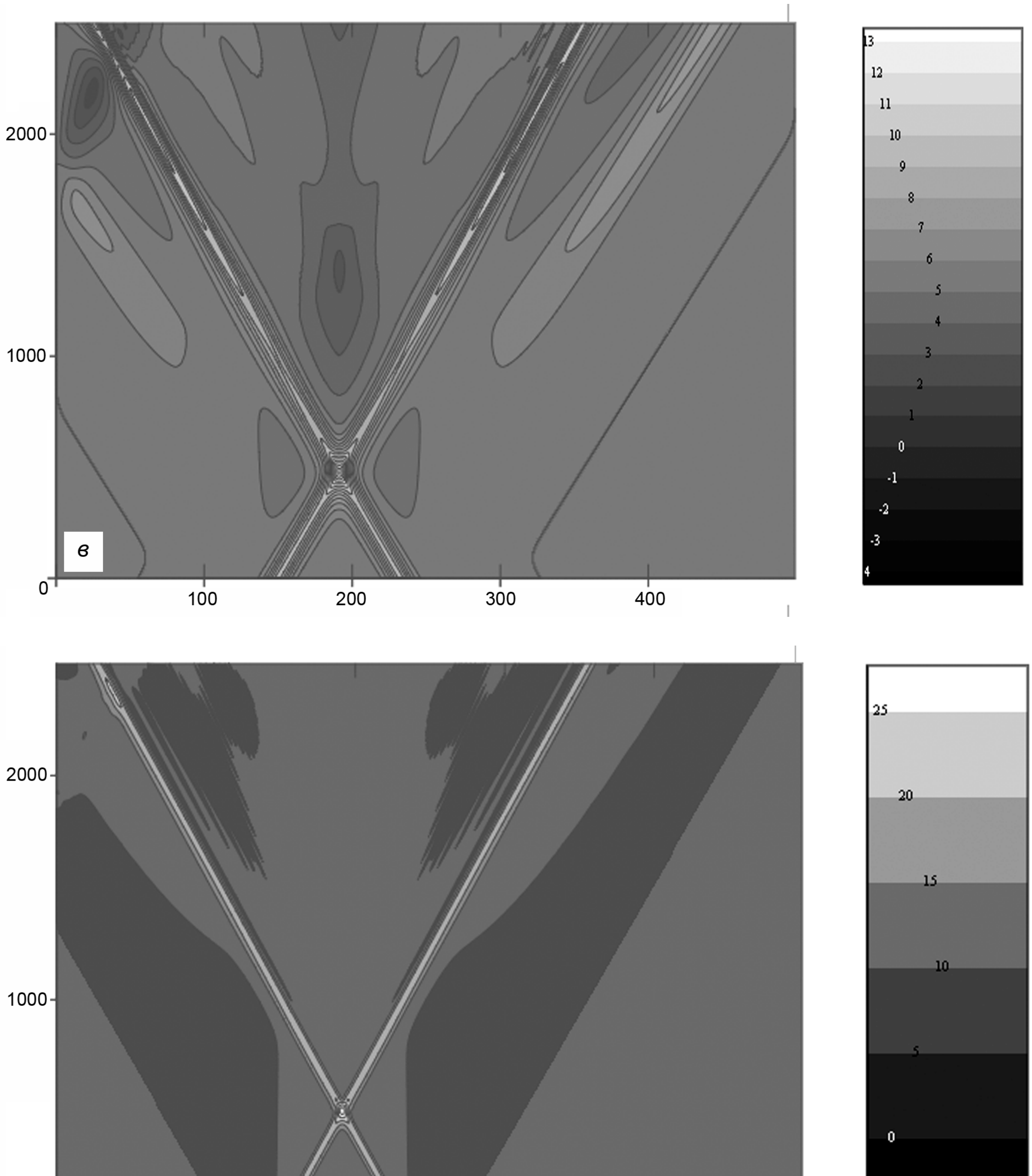


Рис. 3. Картина столкновения двух импульсов в системе углеродных нанотрубок, яркость соответствует величине электрического поля импульса в отн. ед., время – по вертикальной оси, по горизонтальной оси – координата: *а* – $A_1 = A_2 = 1$; $v_1 = -v_2 = 0{,}95$ c ; *б* – $A_1 = A_2 = 1$; $v_1 = -v_2 = 0{,}99$ c ; *в* – $A_1 = A_2 = 4$; $v_1 = -v_2 = 0{,}95$ c ; *г* – $A_1 = A_2 = 4$; $v_1 = -v_2 = 0{,}99$ c

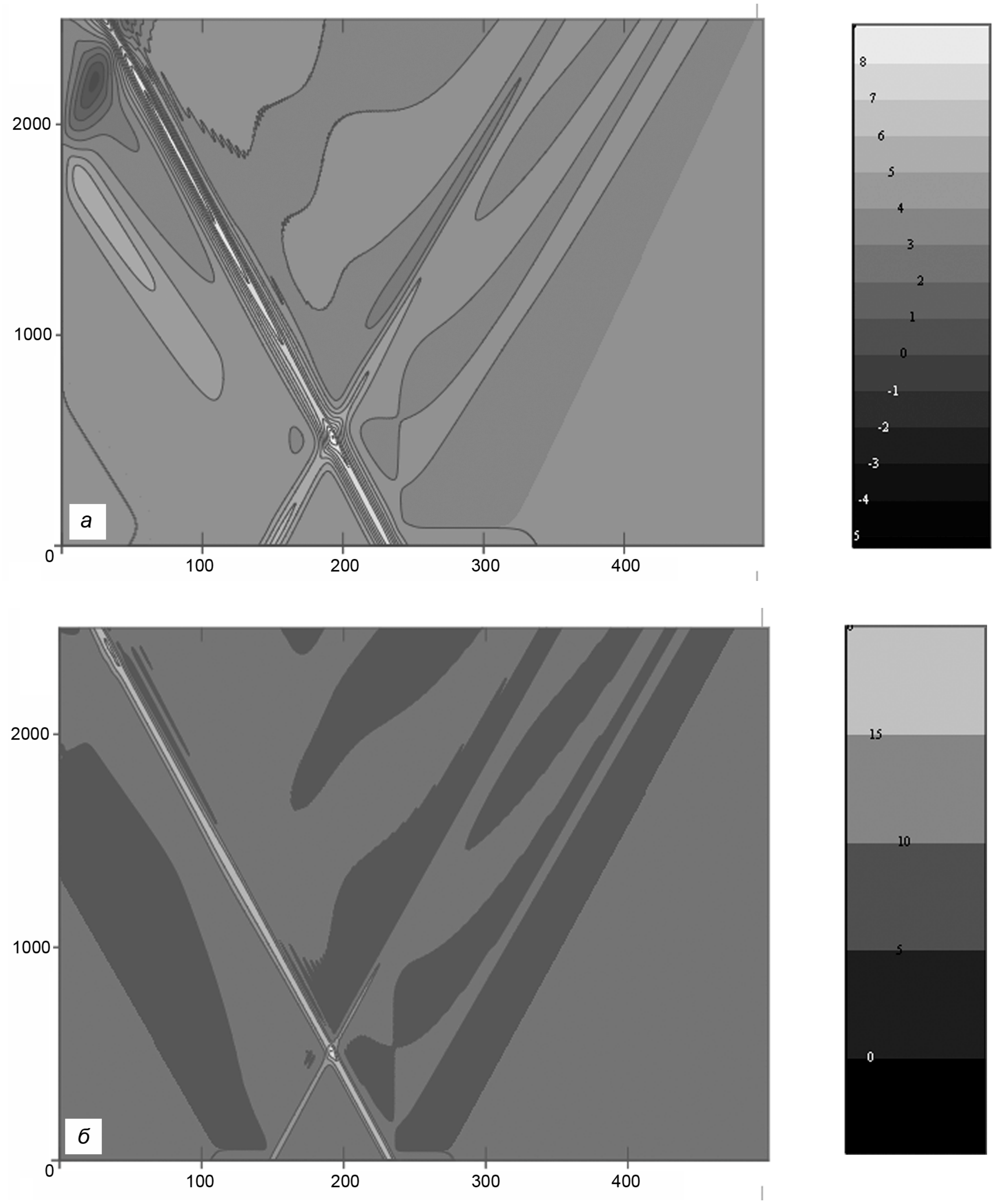


Рис. 4. Картина столкновения двух импульсов в системе углеродных нанотрубок, яркость соответствует величине электрического поля импульса в отн. ед., время – по вертикальной оси, по горизонтальной оси – координата: *а* – $A_1 = 2$; $A_2 = 4$; $v_1 = -v_2 = 0,95$ с; *б* – $A_1 = 2$; $A_2 = 4$; $v_1 = -v_2 = 0,99$ с

В заключение сформулируем основные выводы из данной работы:

1. Выведено уравнение для динамики электромагнитного поля в системе углеродных нанотрубок в случае низких температур, решения которого являются аналогами солитонов уравнения sin-Gordon.

2. Уединенные импульсы сталкиваются тем более «упруго», чем выше их скорость и амплитуда.

3. В случае, если амплитуда одного импульса превосходит амплитуду другого более чем в два раза, и в случае высоких скоростей, близких к скорости света в среде, возможно поглощение импульса с меньшей амплитудой так, что далее распространяется только импульс с большей амплитудой.

4. В общем случае за импульсами распространяются «хвосты», причем в случае более высокой начальной скорости импульса величина «хвостов» меньше.

Авторы выражают глубокую признательность проф. А.М. Камчатнову, беседы с которым и послужили основным стимулом для написания данной работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., and Eklund P.C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. – Academic Press, Inc., 1996. – 965 p.
2. Ивановский А.Л. Квантовая химия в материаловедении. Нанотубулярные формы вещества. – Екатеринбург: УрОРАН, 1999. – 176 с.
3. Лозовик Ю.Е., Попов А.М. // УФН. – 1997. – Т. 165. – С. 752.
4. Елецкий А.В. // УФН. – 2000. – Т. 170. – С. 113.
5. Vinogradov G.A., Astakhova T.Yu., Gurin O.D., and Ovchinnikov A.A. // Abstracts of invited lectures and contributed papers «Fullerenes and Atomic Clusters», St. Peterburg, Russia, 4–8 October 1999. – P. 189.
6. Astakhova T.Yu., Gurin O.D., and Vinogradov G.A. // Abstracts of invited lectures and contributed papers «Fullerenes and Atomic Clusters», St. Peterburg, Russia, 2–6 July 2001. – P. 319.
7. Astakhova T.Yu., Gurin O.D., Menon M., and Vinogradov G.A. // Phys. Rev. B. – 2001. – V. 64. – P. 035418.
8. Maksimenko S.A. and Slepyan G.Ya.// Handbook of nanotechnology. Nanometer structure: theory, modeling, and simulation. – Bellingham: SPIE Press, 2004. – P. 145–206.
9. Slepyan G.Ya., Maksimenko S.A., Kalosha V.P., et al. // Phys. Rev. A. – 1999. – V. 60. – No. 2. – P. R777.
10. Belonenko M.B., Demushkina E.V., and Lebedev N.G. // J. Rus. Laser Res. – 2006. – V. 27. – No. 5. – P. 457–465.
11. Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Демушкина Е.В. // ФТТ. – 2008. – Т. 50. – № 2. – С. 367–373.
12. Lin M.F. and Shung K.W.-K. // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – No. 23. – P. 17744.
13. Saito R., Fujita M., Dresselhaus G., and Dresselhaus M.S. // Phys. Rev. B. – 1992. – V. 46. – No. 3. – P. 1804.
14. Wallace P.R. // Phys. Rev. – 1947. – V. 71. – No. 9. – P. 622.
15. Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Нелидина Е.Н. // Изв. вузов. Физика. – 2010. – № 11. – С. 14–19.
16. Эпштейн Э.М. // ФТТ. – 1977. – Т. 19. – Вып. 11. – С. 3456–3458.
17. Солитоны / под ред. Р. Буллаф, Ф. Кодри. – М.: Мир, 1983. – 408 с.
18. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). – М.: Наука, 1975.
19. Kitchenside P.W., Caudrey P.J., and Bullough R.K. // Phys. Scr. – 1979. – V. 20. – P. 673.

*Волгоградский институт бизнеса, г. Волгоград, Россия
**Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия
***Волгоградский государственный медицинский университет, г. Волгоград, Россия
****Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН, г. Казань, Россия
E-mail: mbelonenko@yandex.ru; nikolay.lebedev@volsu.ru; neli_80@mail.ru

Поступила в редакцию 22.03.10,
после доработки – 22.06.10.

Белоненко Михаил Борисович, д.ф.-м.н., профессор, профессор каф. математических и естественных наук;
Лебедев Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н., доцент, профессор каф. теоретической физики и волновых процессов;
Галкина Елена Николаевна, аспирантка, ст. преподаватель;
Шакирзянов Масгут Мазитович, д.ф.-м.н., профессор.