

Динамика распространения предельно короткого импульса в многослойной системе графен–нитрид бора

© А.В. Пак¹, М.Б. Белоненко^{2,3}

¹ Волгоградский государственный университет,
Волгоград, Россия

² Entropique Inc.,
London, Canada

³ Волгоградский институт бизнеса,
Волгоград, Россия

E-mail: pak.anastasia@gmail.com

(Поступила в Редакцию 26 сентября 2012 г.
В окончательной редакции 6 октября 2012 г.)

Рассмотрено распространение предельно короткого оптического импульса в многослойной структуре, образованной чередующимися слоями графена и нитрида бора, причем электроны проводимости такой системы описываются в рамках длинноволнового эффективного гамильтониана в случае низких температур, а электромагнитное поле учитывается на основании классических уравнений Максвелла. Выявлена зависимость эволюции от скорости и от максимальной амплитуды предельнокороткого импульса.

Работа проведена в рамках реализации госконтракта Министерства образования и науки № 14.740.11.0374, а также поддержана РФФИ (гранты № 11-02-97054, 12-02-31654).

1. Введение

В последнее время наблюдается увеличение числа работ, посвященных исследованию графена, выращенного на подложке из гексагонального нитрида бора (*h*-BN) [1–10]. Это обусловлено прежде всего необычными свойствами, которыми в таком случае обладает графен [11]. Описанные эффекты обычно связываются со сходством кристаллической структуры графена и *h*-BN [12]. В работе [13] установлено, что шероховатость графена на подложке из нитрида бора гораздо меньше, чем у графена на кремниевой подложке. В целом же электронный гамильтониан графена на *h*-BN оказывается весьма похожим на гамильтониан свободного графена. Распространение ультракоротких импульсов длительностью 10^{-15} с в оптических средах без разрушения вещества дало возможность наблюдать и исследовать нелинейные явления, которые в поле импульсов больших длительностей достаточно редки [14]. К таким явлениям можно, например, отнести явление сверхширения временного спектра. Под предельно короткими импульсами мы будем понимать импульсы, состоящие из нескольких колебаний поля [14].

В настоящей работе исследовалась динамика прохождения короткого оптического импульса сквозь многослойную структуру графен–нитрида бора.

2. Основные уравнения

Будем рассматривать слоистую структуру, состоящую из чередующихся пластов графена и нитрида бора, гамильтониан для которой можно получить, записав

его предварительно для двух слоев графен–нитрида бора. В длинноволновом приближении в базисе $\phi_{g1}, \phi_{g2}, \phi_{nb1}, \phi_{nb2}$, где волновые функции соответствуют электрону, локализованному на одной подрешетке графена, на другой подрешетке графена, на одной подрешетке нитрида бора, на другой подрешетке нитрида бора соответственно, этот гамильтониан запишем в матричном виде

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & E_g^* & 0 & t \\ E_g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & E_{bn}^* \\ t & 0 & E_{bn} & -\Delta \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Здесь t — интеграл перескока электрона между слоями графена и нитрида бора, Δ — величина запрещенной щели для нитрида бора, $E_g = v_{fg}(k_x + ik_y)$, v_{fg} — скорость Ферми для графена, k_x, k_y — компоненты волнового вектора электрона, $E_{bn} = v_{fbn}(k_x + ik_y)$, v_{fbn} — скорость Ферми для нитрида бора, постоянная Планка в этих выражениях полагалась равной единице.

Гамильтониан (1) можно переписать, используя структуру блочных матриц [15]

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & E_g^* & 0 & t \\ E_g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & E_{bn}^* \\ t & 0 & E_{bn} & -\Delta \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}.$$

Для случая, когда величина щели в нитриде бора велика в сравнении с энергией электронов, рассматриваемых

в длинноволновом приближении, можно записать эффективный гамильтониан по аналогии с биграфеном [14]

$$H^{eff} \equiv H_{11} - H_{12}H_{22}^{-1}H_{21} = -\frac{1}{t} \begin{pmatrix} \Delta & -\frac{1}{t} E_g^* E_{bn}^* \\ -\frac{1}{t} E_g E_{bn} & -\frac{1}{t^2} |E_g|^2 \Delta \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Используемое приближение фактически является дополнительным ограничением на предельный импульс электронов, который мы можем рассматривать в рамках длинноволнового приближения, и согласуется с уже использованным длинноволновым приближением для электронной подсистемы графена.

Для многослойной структуры „графен-нитрид бора“ в общем случае n слоев эффективный гамильтониан (2) можно по аналогии записать в виде [13]

$$H_{2n}^{eff} = \begin{pmatrix} \Delta & -\frac{(k^* f^*)^{n/2}}{t^{2n-1}} \\ -\frac{(k f)^{n/2}}{t^{2n-1}} & -\frac{\Delta |k|^2}{t^2} \end{pmatrix},$$

$$H_{2n+1}^{eff} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta |k|^2}{t^2} & -\frac{(k^*)^{n+1} (f^*)^n}{t^{n+1}} \\ -\frac{(k)^{n+1} f^n}{t^{n+1}} & -\frac{\Delta |k|^2}{t^2} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Гамильтонианы (3) легко диагонализуются и задают спектр электронов исследуемой структуры для случаев четного и нечетного количества слоев

$$\varepsilon^{2n}(k_x, k_y) = \frac{1}{2} \left(\left(\Delta - \frac{\Delta |k|^2}{t^2} \right) \pm \sqrt{\left(\Delta - \frac{\Delta |k|^2}{t^2} \right)^2 + 4 \left(\frac{\Delta^2 |k|^2}{t^2} + \frac{|k|^{n/2} |f|^{n/2}}{t^{2(2n-1)}} \right)} \right), \quad (4)$$

где все параметры имеют тот же смысл, что и в (1).

В предельном случае при $n \rightarrow \infty$ слагаемые $\sim \frac{1}{t^n}$ становятся бесконечно малыми и оба уравнения в (4) преобразуются в одно:

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \pm \frac{\Delta |k|^2}{t^2}. \quad (5)$$

Таким образом, в предельном переходе мы получили закон дисперсии для двумерного электронного газа.

Из правил квантовой механики известно, что в присутствии внешнего электрического поля \mathbf{E} , которое для определенности направлено вдоль оси x , и будет далее рассматриваться в калибровке

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

необходимо заменить импульс на обобщенный импульс: $p \rightarrow p - \frac{e}{c} A$ (e — заряд электрона). В этом случае

эффективный гамильтониан (3) можно переписать как

$$H = \sum_{p\sigma} \varepsilon \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma},$$

где $a_{p\sigma}^+$, $a_{p\sigma}$ — операторы рождения, уничтожения электронов с квазиимпульсом p и спином σ .

Уравнения Максвелла с учетом диэлектрических и магнитных свойств рассматриваемой системы, а также с учетом калибровки в квазиодномерном приближении можно записать в следующем виде [16]:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = 0, \quad (6)$$

причем здесь пренебрегаем дифракционным расплыванием лазерного пучка в направлениях, перпендикулярных оси распространения. Вектор-потенциал \mathbf{A} считается имеющим вид $\mathbf{A} = (0, A(x, t), 0)$, а ток \mathbf{j} есть $\mathbf{j} = (0, j, 0)$. Отметим, что поскольку у нас импульс предельно короткий (т.е. содержит несколько колебаний электрического поля), в уравнении (6) не отражены релаксационные процессы. Далее это будет использоваться и при рассмотрении электронной подсистемы, что приведет к пренебрежению процессами, связанными с релаксацией электронов.

Запишем стандартное выражение для плотности тока

$$j = e \sum_p v_y \left(p - \frac{e}{c} A(x, t) \right) \langle a_p^+ a_p \rangle, \quad (7)$$

где

$$v_p = \frac{\partial \varepsilon(p_x, p_y)}{\partial p_y},$$

а скобки означают усреднение с неравновесной матрицей плотности $p(t)$: $\langle B \rangle = \text{Sp}(B(0)\rho(t))$. Учитывая, что $[a_p^+ a_p, H] = 0$, из уравнений движения для матрицы плотности получается $\langle a_p^+ a_p \rangle = \langle a_p^+ a_p \rangle_0$, где $\langle B \rangle_0 = \text{Sp}(B(0)\rho(0))$. Таким образом, в выражении для плотности тока можно использовать число частиц, которое следует из распределения Ферми-Дирака. Далее мы будем рассматривать случай низких температур, когда в сумму (интеграл) (7) дает вклад лишь небольшая область в импульсном пространстве вблизи уровня Ферми. Соответственно этому запишем формулу (7) в виде

$$j = e \int_{-\Delta}^{\Delta} \int_{-\Delta}^{\Delta} v_y \left(p - \frac{e}{c} A(x, t) \right) dp_x dp_y. \quad (8)$$

Отметим, что при этом предполагалось, что валентные зоны у графена и нитрида бора первоначально заполнены и уровень Ферми выбран проходящим через дираковскую точку графена. Введение взаимодействия между слоями графена и нитрида бора можно рассматривать как возмущение по параметру малости t/Δ . В этом случае очевидно, что зонная структура изменится незначительно; выведенный эффективный гамильтониан просто

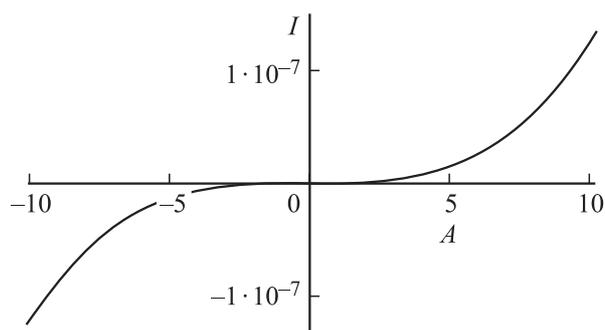


Рис. 1. Зависимость силы тока от вектор-потенциала. Все величины в безразмерных единицах.

представляет собой один из способов учета возмущения. Отметим, что полученный эффективный гамильтониан наследует щель в спектре нитрида бора в случае четного числа слоев. Аналогичное рассмотрение было проведено также в [15,12].

Область интегрирования по импульсам в (8) определим из условия равенства числа частиц

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \int_{-\Delta}^{\Delta} dp_x dp_y = \int_{-\Delta}^{\Delta} \int_{-\Delta}^{\Delta} dp_x dp_y \langle a_{p_x, p_y}^+ a_{p_x, p_y} \rangle.$$

При этом уравнение на распространение предельно короткого импульса можно записать как

$$\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \Phi(A) = 0, \tag{9}$$

а $\Phi(A)$ определяется интегрированием в (8).

Типичная зависимость нелинейности, присутствующей в уравнении (9), от величины поля A представлена на рис. 1.

3. Результаты численного моделирования

Исследуемое уравнение (9) решались численно при помощи прямой разностной схемы типа крест [17]. Шаги по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости, при этом шаги разностной схемы уменьшались последовательно в 2 раза до тех пор, пока решение не переставало изменяться в восьмом знаке. Начальное условие выбиралось в виде предельно короткого импульса, состоящего из одного колебания поля нулевой ширины, что соответственно можно обеспечить, задав потенциал A как

$$A(x, t) = Q \exp(-(x - vt)^2/\gamma), \tag{10}$$

$$\gamma = (1 - v^2)^{1/2},$$

Q — амплитуда, а v — начальная скорость предельно короткого импульса на входе в образец. Значения энергетических параметров выражались в единицах Δ .

Возникающая эволюция электромагнитного поля при его распространении по образцу представлена на рис. 2. Такое поведение импульса связано с дисперсией, возникающей при рассмотрении линеаризованного уравнения (9), которая приводит к уширению оптического импульса, а также с нелинейностью в том же уравнении, которая приводит к „сужению“ импульса. Конкуренция этих двух слагаемых приводит как к деформации первоначальной форму импульса, так и к появлению его устойчивой формы. Наиболее ярко влияние нелинейности представлено на рис. 3, показывающем зависимость формы импульса от начальной амплитуды.

Особенно ярко эффекты, связанные с нелинейностью, проявляются на фронте импульса и приводят, в частности, к уширению импульса, что можно объяснять нарушением баланса между дисперсией и нелинейностью в рассматриваемой системе (рис. 3).

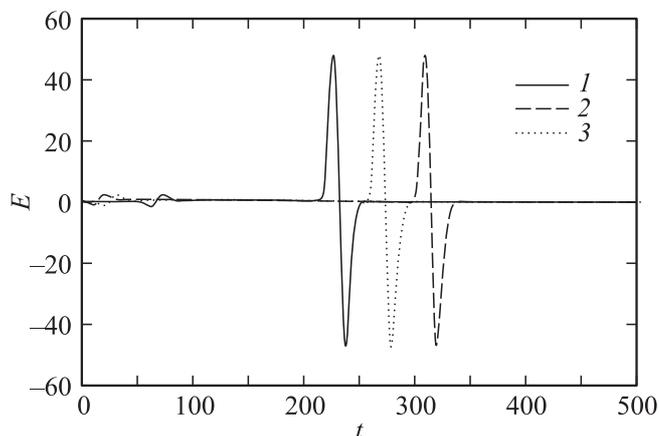


Рис. 2. Зависимость вектор потенциала от времени для разных точек пространства: 1 — $x = 10^{-5}$ м, 2 — $x = 1.5 \cdot 10^{-5}$ м, 3 — $x = 2 \cdot 10^{-5}$ м.

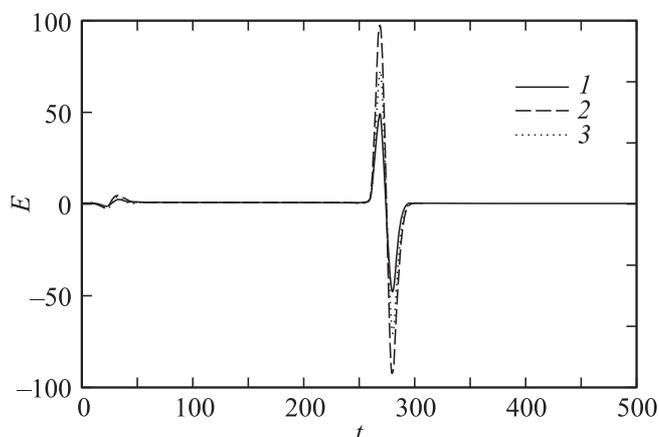


Рис. 3. Зависимость формы импульса от времени в случае различных значений первоначальной амплитуды импульса: 1 — $Q = 2$, 2 — $Q = 3$, 3 — $Q = 4$. Все величины в безразмерных единицах.

4. Заключение

Из результатов, полученных в настоящей работе, следует, что возможно устойчивое распространение предельно коротких оптических импульсов в графене, выращенном на подложке гексагонального нитрида бора. При увеличении амплитуды первоначального импульса происходит уширение фронта волны, а также возникает второй импульс меньшей интенсивности. Данный эффект может оказаться полезным при разработке гибридных устройств, основанных на эффекте взаимодействия света с электронами графена.

Список литературы

- [1] G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P.J. Kelly, J. van den Brink. *Phys. Rev. B* **76**, 073 103 (2007).
- [2] T. Greber. In: *Handbook of Nanophysics, Graphene and Boron Nitride Single Layers* (2010).
- [3] B. Partoens, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B* **74**, 075 404 (2006).
- [4] A.A. Avetisyan, B. Partoens, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B* **79**, 035 421 (2009).
- [5] A.A. Avetisyan, B. Partoens, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B* **80**, 195 401 (2009).
- [6] K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Sigrist. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 036 601 (2007).
- [7] X. Blase, A. Rubio, S.G. Louie, M.L. Cohen. *Europhys. Lett.* **28**, 355 (1994).
- [8] E. Hern'andez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4502 (1998).
- [9] Y. Chen, J. Zou, S.J. Campbell, G. Le Caer. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2430 (2004).
- [10] A.P. Suryavanshi, M. Yu, J. Wen, C. Tang, Y. Bando. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2527 (2004).
- [11] M.S. Breshenan, M.J. Hollander, M. Wetherington, M. LaBella, K.A. Trumbull, R. Cavalero, D.W. Snyder, J.A. Robinson. *ACS Nano* **6**, 5234 (2012).
- [12] R.M. Ribeiro, N.M.R. Peres. arXiv: 1101.3950v1 (2011).
- [13] J. Xue, J. Sanchez-Yamagishi, D. Bulmash, Ph. Jacquod, A. Deshpande, K. Watanabe, P. Jarillo-Herrero, B.J. LeRoy. *Nature Mater.* **10**, 282 (2011).
- [14] D. von der Linde, H. Schuler. *J. Opt. Soc. Am. B* **13**, 1, 216 (1999).
- [15] A. Cortijo, F. Guinea, M.A.H. Vozmediano. arXiv: 1112.2054v1 (2011).
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Т. II. Теория поля.* Наука, М. (1988). 512 с.
- [17] Н.С. Бахвалов. *Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения).* Наука, М. (1975). 632 с.