

Терагерцевое излучение углеродных нанокольцев во внешних коллинеарных постоянном и переменном электрических полях

© Э.Г. Федоров,¹ Н.Н. Янюшкина,² М.Б. Белоненко^{3,4}

¹ Волгоградский кооперативный институт (филиал) Российского университета кооперации, 400002 Волгоград, Россия

² Волгоградский государственный университет, 400062 Волгоград, Россия

³ Волгоградский институт бизнеса, 400048 Волгоград, Россия

⁴ Entropique Inc., London, N6J 3S2, ON, Canada
e-mail: mbelonenko@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 28 февраля 2012 г. В окончательной редакции 21 мая 2012 г.)

Рассмотрен отклик квазиодномерного баллистического углеродного кольца на поле электромагнитной волны, распространяющейся вдоль нормали к плоскости кольца, в присутствии постоянного электрического поля, коллинеарного полю волны. Рассчитаны дипольный момент и интенсивность излучения кольца в условиях баллистического движения электрона проводимости. Показана возможность реализации регулярного периодического и хаотического режимов излучения кольца под действием внешних полей. Изучен частотный спектр излучения кольца. Рассчитана зависимость сечения рассеяния падающей на кольцо электромагнитной волны от ее частоты и амплитуды.

Успехи современных нанотехнологий стимулируют теоретические и экспериментальные исследования физических свойств низкоразмерных структур на основе углерода. В настоящее время большой интерес исследователей вызывают углеродные нанокольца или „нанообручи“ — циклопарафенилены, представляющие собой молекулы, состоящие из последовательно соединенных бензольных колец (см., например, [1–4]). В силу малых характерных размеров, как правило, сравнимых с де-бройлевской длиной волны электрона, исследования физических свойств наноструктур и, в частности, нанокольцев посвящены в основном квантовым явлениям. Однако в широком диапазоне значений параметров наноструктуры могут проявлять также интересные электродинамические свойства, которые могут быть описаны квазиклассически [5–7].

В настоящей работе исследуется отклик электрона в квазиодномерном углеродном нанокольце на внешнее постоянное электрическое поле $\mathbf{E}_0 = \{E_0, 0, 0\}$ и электрическое поле $\mathbf{E}_1 = \{E_{10} \cos(\omega_1 t), 0, 0\}$ электромагнитной волны (лазерного излучения) с циклической частотой ω_1 , распространяющейся вдоль нормали к плоскости кольца (векторы \mathbf{E}_0 и \mathbf{E}_1 параллельны друг другу и плоскости кольца).

Рассмотрим углеродное кольцо, содержащее один электрон проводимости, движение которого вдоль радиуса кольца ограничено двумя концентрическими потенциальными барьерами (квантовое ограничение). Полагая, что де-бройлевская длина волны электрона λ_e мала по сравнению с $2\pi R$ (R — радиус кольца), будем рассматривать движение электрона вдоль окружности кольца классически.

Положим, что длина свободного пробега электрона велика по сравнению с $2\pi R$ (баллистическое классическое движение), а длина волны падающего на кольцо лазерного излучения существенно превышает диаметр кольца. При этом в дипольном приближении [8] можно считать, что на электрон в кольце действует только электрическое поле

$$\mathbf{E} = \{E_0 + E_{10} \cos(\omega_1 t), 0, 0\}. \quad (1)$$

Уравнение движения электрона в кольце имеет вид

$$\frac{d^2\varphi}{d\tau^2} + [1 + 2\alpha \cos(\gamma\tau)] \sin \varphi = 0, \quad (2)$$

где $\varphi = \varphi(\tau)$ — угловая координата, отсчитываемая от оси Ox (поле \mathbf{E} параллельно оси Ox), $\tau = \omega_0 t$ — безразмерное время, $\alpha = E_{10}/(2E_0)$ ($\alpha > 0$), $\gamma = \omega_1/\omega_0$,

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{eE_0}{mR}}, \quad (3)$$

где e и m — заряд и эффективная масса электрона в кольце ($e < 0$, $eE_0 > 0$).

Дипольный момент $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\tau)$ (относительно центра окружности кольца) и интенсивность излучения $I = I(\tau)$ кольца определяются формулами [8]

$$\mathbf{P}(\tau) = eR\{\cos \varphi(\tau), \sin \varphi(\tau), 0\}, \quad (4)$$

$$I(\tau) = \frac{2\omega_0^4}{3c^3} \left(\frac{d^2\mathbf{P}}{d\tau^2} \right)^2 = I_0 \left[\left(\frac{d\varphi}{d\tau} \right)^4 + \left(\frac{d^2\varphi}{d\tau^2} \right)^2 \right], \quad (5)$$

где $I_0 = (2/3)c^{-3}(eR)^2\omega_0^4$.

Величина I имеет смысл энергии, излучаемой кольцом в полный телесный угол за единицу времени при

падении на него электромагнитной волны с вектором Пойнтинга, по модулю равному $S = \frac{c}{4\pi} E_1^2$ [8].

Уравнение (2) по форме совпадает с уравнением, описывающим динамику математического маятника с вертикально колеблющимся подвесом [9]. Известно, что в системах, описываемых уравнениями подобного вида, возможны как регулярные, так и хаотические колебания [10].

Если параметры рассматриваемой системы удовлетворяют условию

$$\gamma > 2(1 + \sqrt{\alpha}), \quad (6)$$

то движение электрона в кольце носит регулярный характер [10]. В результате угловая координата φ электрона, дипольный момент \mathbf{P} и интенсивность излучения I кольца являются периодическими функциями времени.

В обратном случае, т.е. при выполнении условия

$$\gamma < 2(1 + \sqrt{\alpha}), \quad (7)$$

движение электрона в кольце становится хаотическим в обширной области значений начальных условий $\frac{d\varphi}{d\tau}(\tau=0)$, $\varphi(\tau=0)$ [10]. При этом дипольный момент \mathbf{P} и интенсивность излучения I изменяются во времени хаотически.

Динамика электрона в кольце изучалась авторами путем численного решения уравнения (2) посредством алгоритмов, описанных в [11,12]. Предполагалось, что в начальный момент времени ($t=0$) электрон обладал энергией W , совершая вращательное движение вдоль окружности кольца, что соответствует начальным условиям $\frac{d\varphi}{d\tau}(\tau=0) = (\omega_0 R)^{-1}(2W/m)^{1/2}$, $\varphi(\tau=0) \equiv \varphi(0)$ [5–7].

Характер движения электрона определялся с помощью спектрального анализа временной зависимости интенсивности излучения I , найденной по формуле (5) в результате численного решения уравнения (2).

Амплитуды гармонических компонент $F(\Omega)$ в спектре излучения кольца определены по формулам [13]

$$F(\Omega) = \sqrt{a^2(\Omega) + b^2(\Omega)}, \quad (8)$$

$$a(\Omega) = \frac{2}{T} \int_0^T \frac{I(\tau)}{I_0} \cos(\Omega\tau) d\tau, \quad (9)$$

$$b(\Omega) = \frac{2}{T} \int_0^T \frac{I(\tau)}{I_0} \sin(\Omega\tau) d\tau, \quad (10)$$

где $\Omega = \omega/\omega_0$ — безразмерная частота колебаний излучения кольца, $T \cong \omega_0/\nu$ — интервал безразмерного времени, на котором определено численное решение уравнения (2), ν — частота столкновений (обратная времени релаксации).

При падении на кольцо электромагнитной волны происходит ее рассеяние. Рассеяние падающей волны кольцом будем характеризовать величиной сечения рассеяния, которое равно отношению усредненной по времени

интенсивности излучения $\langle I \rangle$ кольца к усредненной по времени плотности потока энергии падающего на кольцо излучения $\langle S \rangle$ [8]

$$\sigma = 8\pi \frac{\langle I \rangle}{cE_{10}^2}, \quad (11)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по времени.

Величина σ может рассматриваться как характеристика, пропорциональная коэффициенту полезного действия преобразования энергии падающей волны в энергию излучения кольца. Коэффициент полезного действия может быть определен как отношение плотности потока энергии излучения кольца к плотности потока энергии падающей волны S . Плотность потока энергии излучения кольца в данной точке пространства зависит от расстояния до центра кольца, поскольку волновой фронт излучения кольца не плоский в отличие от падающей волны. В этой связи вычисление плотности потока энергии излучения кольца сопряжено с некоторой неопределенностью, влекущей за собой необходимость наложения дополнительных конкретизирующих условий. Более универсальной энергетической характеристикой излучения кольца, не требующей учета дополнительных условий, является интенсивность излучения I [8]. Таким образом, вычисляя отношение I/S , мы получаем величину σ , характеризующую преобразование энергии падающей волны в энергию излучения кольца.

Приведем типичные результаты произведенных нами расчетов. Отклик углеродного нанокольца на внешнее постоянное электрическое поле и поле лазерного излучения изучался в широком диапазоне значений параметров системы. В частности, авторы полагали $R \cong 5 \cdot 10^{-7}$ см, $m \cong m_e$ (m_e — масса свободного электрона), $W = 0.1$ эВ, $\varphi(0) = 0$, $E_0 = -6 \cdot 10^4$ В/см, $\omega_0 \approx 1.5 \cdot 10^{13}$ с $^{-1}$ (см. (3)). Указанное здесь значение величины начальной энергии движения электрона W существенно превышает энергию теплового движения при комнатной температуре. Выбор значения W обусловлен необходимостью рассмотрения динамических режимов системы, некоторые могут проявляться лишь в случае $W \cong 0.1$ эВ. Такие значения начальной энергии электрона, на наш взгляд, могут быть достигнуты на практике путем инжекции электрона в кольцо. При выбранных здесь значениях параметров условие применимости квазиклассического подхода к описанию динамики электрона выполняется ($\lambda_e \ll 2\pi R$). Критерием применимости использованного в настоящей работе бесстолкновительного приближения при описании динамики электрона в кольце является выполнение условий $|\frac{d\varphi}{d\tau}(\tau=0)| \gg 2\pi\nu/\omega_0$, $l \gg 2\pi R$, где $l = R \int_0^T |\frac{d\varphi}{d\tau}| d\tau$ — путь, пройденный электроном за время порядка времени релаксации ν^{-1} . При $\nu \cong 3.3 \cdot 10^{11}$ с $^{-1}$ [14] данные условия выполняются.

Варьируя значения амплитуды напряженности $|E_{10}|$ и/или циклической частоты ω_1 , можно эффективно изме-

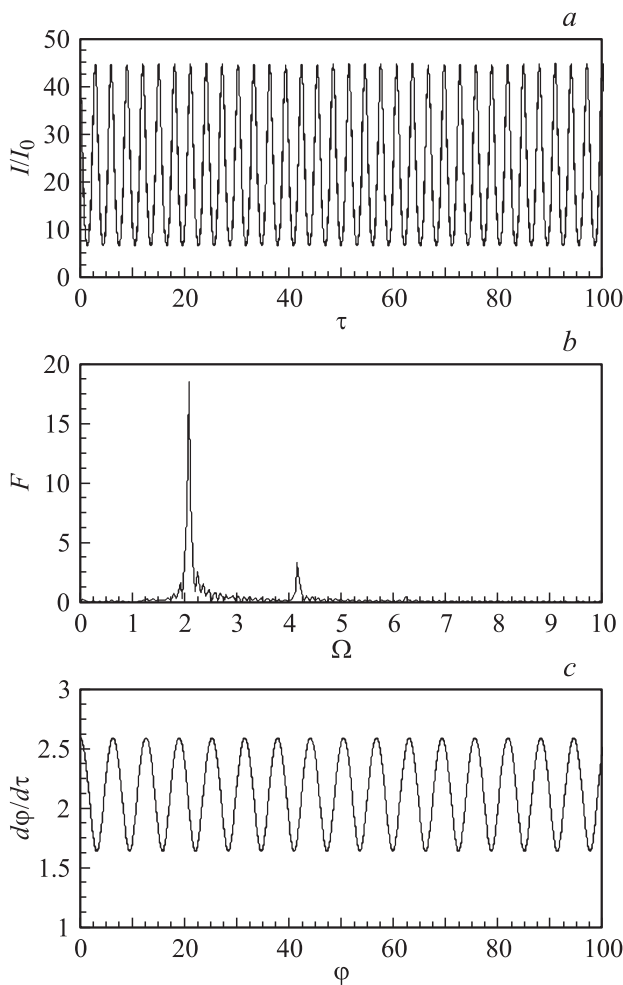


Рис. 1. Регулярный режим излучения углеродного нанокольца при частоте внешнего переменного электрического поля $\omega_1 = 10^{15} \text{ s}^{-1}$: *a* — зависимость отношения I/I_0 от безразмерного времени $\tau = \omega_0 t$ ($I_0 = \frac{2}{3c^3} (eR)^2 \omega_0^4$), *b* — спектр излучения кольца $F(\Omega)$ ($\Omega = \omega/\omega_0$ — безразмерная частота излучения кольца), *c* — фазовый портрет $\frac{d\varphi}{d\tau}(\varphi)$.

нять характер отклика электрона в кольце на действие падающего лазерного излучения.

При падении на кольцо электромагнитной волны с параметрами $E_{10} = -6 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$ и $\omega_1 = 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (инфракрасное излучение) выполняется условие (6), и динамика электрона носит регулярный характер. При этом угловая координата φ электрона, дипольный момент \mathbf{P} и интенсивность излучения I кольца являются периодическими функциями времени. В данном случае частотный спектр $F(\Omega)$ величины $I(\tau)$ имеет линейчатую структуру, а фазовая траектория (зависимость $\frac{d\varphi}{d\tau}$ от φ) представляет собой осциллирующую с постоянными амплитудой и частотой кривую, что характерно для регулярного движения. На рис. 1 представлены зависимость $I(\tau)$, а также спектр $F(\Omega)$ и фазовый портрет $\frac{d\varphi}{d\tau}(\varphi)$: в спектре излучения кольца присутствует главный максимум, который находится в терагерцевой области инфракрасного диапазона и соот-

ветствует частоте $\omega/(2\pi) \approx 5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Это позволяет предложить углеродные нанокольца в качестве объектов для генерации терагерцевого излучения, что важно для практических приложений [15–17].

При падении на кольцо электромагнитной волны с циклической частотой $\omega_1 = 10^{13} \text{ s}^{-1}$ и выбранным выше значением амплитуды E_{10} выполняется условие (7), и происходит хаотизация динамики электрона. Зависимость интенсивности излучения от времени $I(\tau)$, спектр $F(\Omega)$ и фазовый портрет $\frac{d\varphi}{d\tau}(\varphi)$ в данном режиме представлены на рис. 2: частотный спектр $F(\Omega)$ излучения кольца — сплошной, а зависимость $I(\tau)$ и фазовая траектория $\frac{d\varphi}{d\tau}(\varphi)$ представляют собой нерегулярные сложные кривые, что характерно для хаотического движения. Из рис. 2 видно, что и в хаотическом режиме излучение приходится в основном на терагерцевую область спектра, что представляется перспективным с точки зрения применения рассматриваемых колец при создании терагерцевых излучателей.

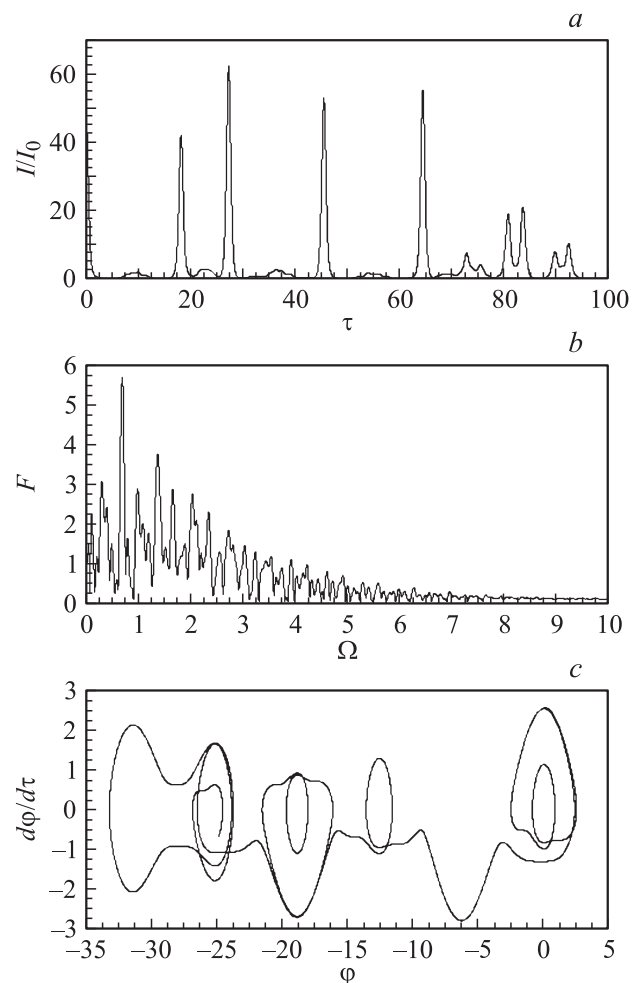


Рис. 2. Хаотический режим излучения углеродного нанокольца при частоте внешнего переменного электрического поля $\omega_1 = 10^{13} \text{ s}^{-1}$: *a* — зависимость отношения I/I_0 от безразмерного времени τ , *b* — спектр излучения кольца $F(\Omega)$, *c* — фазовый портрет $\frac{d\varphi}{d\tau}(\varphi)$.

Отметим, что изменение величины напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0 также может привести к изменению характера динамики электрона в кольце (условия (6), (7)).

Зависимость сечения рассеяния σ падающей на кольцо электромагнитной волны от ее частоты ω_1 при фиксированной амплитуде E_{10} показана на рис. 3. Для удобства расчетов по оси ординат отложено отношение σ/σ_T , где $\sigma_T = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{m_e c^2}\right)^2$ — томсоновское сечение рассеяния [8]. Зависимость $\sigma(\omega_1)$ нелинейная и в целом немонотонная: при $\omega_1 < \omega_{\text{crit}} \cong 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ имеют место ярко выраженные осцилляции, при $\omega_1 > \omega_{\text{crit}}$ с возрастанием ω_1 осцилляции сглаживаются и исчезают, а при $\omega_1 \gg \omega_{\text{crit}}$ сечение рассеяния σ становится слабо зависящим от частоты падающей волны. Такую немонотонность зависимости $\sigma(\omega_1)$ можно объяснить изменением характера динамики электрона в кольце, которое происходит при условии $\omega_1 \cong \omega_{\text{crit}} = 2\omega_0(1 + \sqrt{\alpha})$ (см. (6), (7)). Таким образом, осцилляции зависимости $\sigma(\omega_1)$ имеют место при условии $\omega_1 \leq \omega_{\text{crit}}$, что соответствует хаотическому режиму движения электрона в кольце, а монотонное убывание σ при возрастании ω_1 наблюдается в регулярном режиме.

Зависимость сечения рассеяния σ падающего на кольцо излучения от его амплитуды E_{10} при фиксированной частоте ω_1 приведена на рис. 4. Вид кривой $\sigma(\omega_1)$ зависит от выполнения условий (6), (7). При $\omega_1 > \omega_{\text{crit}} \cong 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ величина σ монотонно и нелинейно убывает с ростом частоты ω_1 , а при $\omega_1 < \omega_{\text{crit}}$ имеют место осцилляции величины σ относительно некоторой убывающей линии тренда $\langle \sigma \rangle(\omega_1)$, где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по осцилляциям. Таким образом, учитывая условия (6), (7), можно сделать вывод, что осциллирующая зависимость $\sigma(\omega_1)$ соответствует хаотическому режиму, а монотонная — регулярному режиму движения электрона в кольце.

Сделаем основные выводы из данной работы.

1. Под действием электромагнитной волны с частотой, лежащей в широком спектральном диапазоне, углерод-

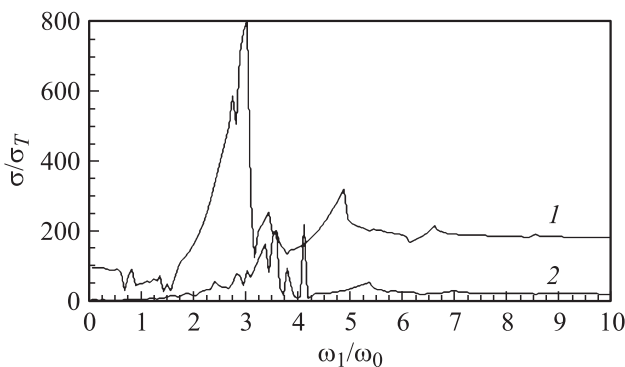


Рис. 3. Зависимость отношения σ/σ_T от частоты ω_1 падающей волны при фиксированной амплитуде E_{10} (σ_T — томсоновское сечение рассеяния): 1 — $E_{10} = -3 \cdot 10^4$, 2 — $E_{10} = -9 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$.

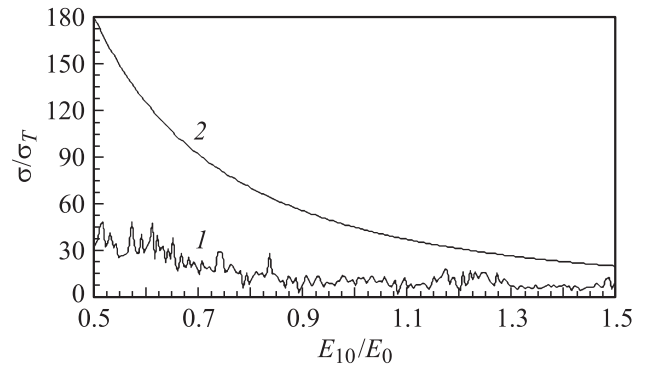


Рис. 4. Зависимость отношения σ/σ_T от амплитуды E_{10} падающей волны при фиксированной частоте ω_1 (σ_T — томсоновское сечение рассеяния): 1 — $\omega_1 = 10^{13} \text{ s}^{-1}$, 2 — $\omega_1 = 10^{15} \text{ s}^{-1}$.

ное нанокольцо может являться источником терагерцевого излучения.

2. В зависимости от значений параметров внешних электрических полей реализуется регулярный или хаотический режим излучения кольца. Изменяя параметры падающего на кольцо излучения, можно эффективно управлять характером динамики электрона в кольце.

3. Зависимость сечения рассеяния падающей на кольцо электромагнитной волны от ее частоты и амплитуды нелинейная, при этом являющаяся осциллирующей в хаотическом режиме и монотонной — в регулярном.

Результаты настоящей работы, на наш взгляд, могут представлять практический интерес с точки зрения разработки элементной базы наноэлектроники. Квазиодномерное углеродное нанокольцо может служить в качестве генератора как регулярного, так и хаотического электромагнитного излучения (шума) в терагерцевом диапазоне. Также полученные результаты могут быть полезны, на наш взгляд, при разработке методов стабилизации функционирования приборов на основе углеродных нанокольцев в случаях, когда хаотические режимы нежелательны.

Авторы благодарят Г.М. Шмелева за полезные дискуссии, стимулировавшие выполнение настоящей работы, а также за предоставленные ссылки на статьи по динамическому хаосу в нелинейных системах.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 11-02-97054).

Список литературы

- [1] Jasti R., Bhattacharjee J., Neaton J. B., Bertozzi C.R. // J. Am. Chem. Soc. 2008. Vol. 130. N 52. P. 17 646–17 647.
- [2] Wong B.M. // J. Phys. Chem. C. 2009. Vol. 113. N 52. P. 21 921–21 927.
- [3] Taubert S., Sundholm D., Pichierrri F. // J. Org. Chem. 2010. Vol. 75. N 17. P. 5867–5874.
- [4] Omachi H., Segawa Y., Itami K. // Org. Lett. 2011. Vol. 13. N 9. P. 2480–2483.

- [5] *Epshtein E.M., Shmelev G.M.* // Phys. Scripta. 2000. Vol. 62. N 2. P. 216–218.
- [6] *Epshtein E.M., Shmelev G.M., Maglevanny I.I.* // Phys. Low-Dim. Struct. 2001. Vol. 1/2. P. 137.
- [7] *Федоров Э.Г., Эпштейн Э.М., Шмелев Г.М.* // ЖТФ. 2005. Т. 75. Вып. 2. С. 137–139.
- [8] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. М.: Наука, 1973. 504 с.
- [9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Наука, 1988. 216 с.
- [10] *Балакирев В.А., Буц В.А., Толстолужский А.П., Туркин Ю.А.* // Укр. физ. журн. 1987. Т. 32. № 8. С. 1270.
- [11] *Кунин С.* Вычислительная физика. М.: Мир, 1992. 518 с.
- [12] *Вержбицкий В.М.* Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Высшая школа, 2001. 382 с.
- [13] *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров). М.: Наука, 1978. 832 с.
- [14] *Максименко С.А., Слепян Г.Я.* // РЭ. 2002. Т. 47. № 3. С. 261–280.
- [15] *Кибис О.В., Портной М.Е.* // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. Вып. 15. С. 85–89.
- [16] *Кибис О.В., Портной М.Е.* // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. Вып. 17. С. 69–77.
- [17] *Садыков Н.Р., Скоркин Н.А.* // ФТП. 2012. Т. 46. Вып. 2. С. 168–173.