

09

Волноводы, построенные на чередующихся слоях графена и нитрида бора

© А.В. Пак, М.Б. Белоненко

Волгоградский государственный университет
Волгоградский институт бизнеса
E-mail: pak.anastasia@gmail.com

Поступило в Редакцию 9 июля 2013 г.

Рассмотрено распространение предельно короткого оптического импульса в структуре, образованной двойными слоями графена и нитрида бора, представляющими собой аналог волноводов. Электроны проводимости такой системы описываются в рамках длинноволнового эффективного гамильтониана в случае низких температур, а электромагнитное поле учитывается на основании классических уравнений Максвелла. Показано, что зависимости амплитуды предельно короткого импульса от характеристик системы практически не наблюдается.

Возросший в последнее время интерес многих исследователей к нелинейному распространению света в дискретных волноводных структурах связан прежде всего с возможностями практического использования нелинейно-оптических эффектов [1–5]. Уникальные свойства графена, выращенного на подложке из нитрида бора (h -BN) [6–16] обычно связывают со сходством кристаллической структуры графена и h -BN, а также с тем, что ионный характер межатомных связей в h -BN приводит к отсутствию на его поверхности „болтающихся“ ковалентных связей и зарядовых ловушек [17]. В работе [17] установлено, что шерховатость графена на h -BN гораздо меньше, чем у графена на SiO_2 , а зарядовые флуктуации слабее на два порядка величины. В целом же электронные характеристики графена на h -BN оказываются практически такими же, как и у свободного графена. Исследовать и использовать графен на подложке гораздо проще и удобнее [17]. В работе [18] показано существование устойчивых структур — аналогов дискретных солитонов, распространению предельно коротких оптических импульсов в углеродных наноструктурах, в частности в слоистых структурах

на основе графена и нитрида бора, посвящены работы [19–20]. Это позволяет сделать вывод о том, что проблема прохождения электромагнитных импульсов через систему, состоящую из нескольких чередующихся слоев графена и нитрида бора, является достаточно важной и актуальной. Результаты, полученные ранее, в том числе и для системы из графеновых волноводов, позволяют ожидать обнаружения новых перспективных явлений и в данных углеродных структурах.

В этой работе исследовалась динамика прохождения короткого оптического импульса сквозь систему чередующихся двойных слоев графена и нитрида бора.

Рассмотрение задачи проводим в системе единиц Хартри ($m = 1$, $\hbar = 1$).

В работе будем рассматривать волноводную структуру, состоящую из чередующихся слоев графена и нитрида бора, гамильтониан для которой можно получить, записав его предварительно для системы из двух слоев графена–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 [19–20]:

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

Здесь t — интеграл перескока электрона между слоями графена и нитрида бора; Δ — величина запрещенной щели для нитрида бора; $k = v_{fg}(k_x + ik_y)$, v_{fg} — скорость Ферми для графена; k_x, k_y — компоненты импульса электрона; $f = v_{fnb}(k_x + ik_y)$; v_{fnb} — скорость Ферми для нитрида бора.

Гамильтониан (1) можно переписать, используя структуру блочных матриц [21]:

$$H^1(k) = \begin{pmatrix} 0 & k^* & 0 & t \\ k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & f^* \\ t & 0 & f & -\Delta \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_{11}^1 & H_{12}^1 \\ H_{21}^1 & H_{22}^1 \end{pmatrix}.$$

Для случая, когда величина щели в нитриде бора велика в сравнении с энергией электронов, рассматриваемых в длинноволновом приближении, можно записать это по аналогии с биграфеном эффективный гамильтониан [21]:

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

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

Электронный спектр такой системы легко получить [19], он выражается следующим соотношением:

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \frac{1}{2} \Delta \left(\left(1 - \frac{v_{fg}^2 (k_x^2 + k_y^2)}{t^2} \right) + \sqrt{\left(1 + \frac{v_{fg}^2 (k_x^2 + k_y^2)}{t^2} \right)^2 + \frac{4v_{fg}^2 v_{fnb}^2 (k_x^2 + k_y^2)^2}{\Delta^2 t^2}} \right), \quad (3)$$

где v_{fg} , v_{fnb} — скорости Ферми электронов в графене и нитриде бора соответственно.

Рассмотрим распространение электромагнитного импульса в геометрии, когда волновой вектор электромагнитного поля направлен вдоль слоев графена–нитрида бора, а вектор поляризации параллелен этому направлению.

Уравнения Максвелла с учетом диэлектрических и магнитных свойств рассматриваемой системы [22] и с учетом калибровки

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

можно записать как:

$$\frac{\partial^2 \vec{A}_k}{dx^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}_k}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_k = 0. \quad (4)$$

Здесь вектор-потенциал \vec{A}_k , который соответствует электромагнитному полю в k -м бислое графена–нитрида бора, считается имеющим вид $\vec{A}_k = (0, 0, A_k(x, t))$. j_k -ток, текущий в k -м бислое. Запишем далее стандартное выражение для плотности тока:

$$j_k = e \sum_p v \left(p - \frac{e}{c} A_k(t) \right) \langle a_p^+ a_p \rangle, \quad (5)$$

где a_p^+ , a_p — операторы рождения уничтожения электронов с квазиимпульсом p , $v(p) = \partial E_{ps,k} / \partial p$, а скобки означают усреднение с неравновесной матрицей плотности $\rho(t)$: $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(t))$.

Проводя вычисления, аналогичные сделанным в работе [19], запишем выражение для плотности тока в системе волноводов, состоящих из листов графена и нитрида бора:

$$j = e \int_{-\Delta}^{\Delta} \int_{-\Delta}^{\Delta} v_y \left(p - \frac{e}{c} A(x, t) \right) dp_x dp_y. \quad (6)$$

При этом уравнение на распространение предельно короткого импульса можно записать как:

$$\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \Phi(A) = 0, \quad (7)$$

а $\Phi(A)$ определяется интегрированием в (6).

Исследуемое уравнение (7) решалось численно при помощи прямой разностной схемы типа крест [23]. 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 изменялось в восьмом значащем знаке. Начальный профиль импульса на входе в систему волноводов графена — нитрида бора выбирался в виде:

$$R(t, N) = A \cdot e^{-(t-t_0)^2} \cdot e^{-\beta(N-N_c)^2},$$

где A — амплитуда импульса, N_c — номер центрального волновода ($N_c = 5$), β — параметр, определяющий ширину импульса, N — номер волновода, t_0 — начальный момент времени.

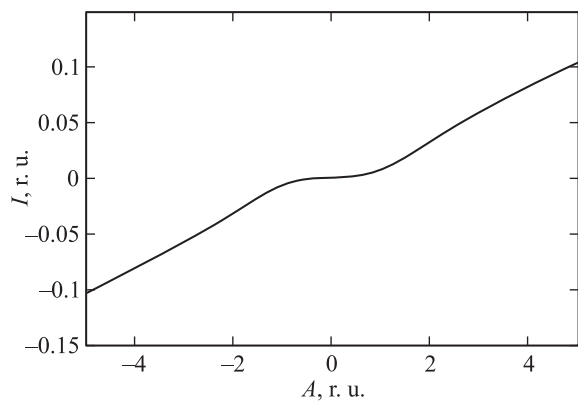


Рис. 1. Зависимость силы тока от вектор-потенциала. Все величины в безразмерных единицах.

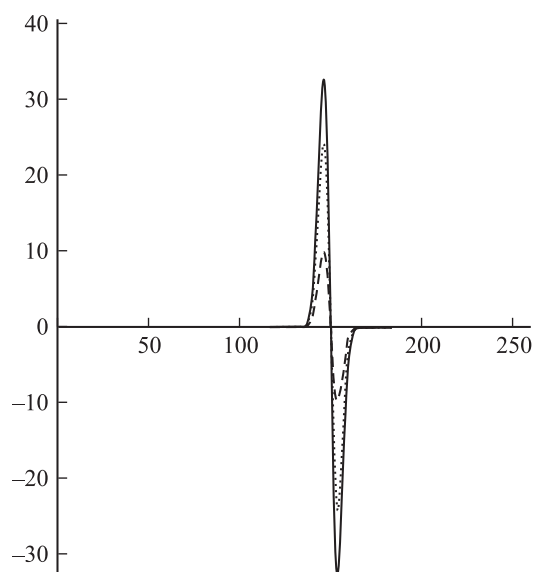


Рис. 2. Эволюция электромагнитного поля, определяемого потенциалом в уравнении (7). По оси x время t (единица соответствует 10^{-16} s), по оси y безразмерная величина электрического поля (единица соответствует 10^8 V/m). Для сплошной кривой — номер волновода $N = 5$, для точечной кривой $N = 6$, для пунктирной $N = 7$, $\beta = 0.3$.

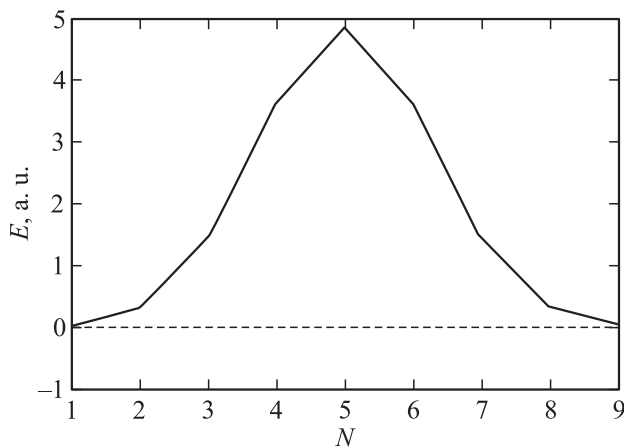


Рис. 3. Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (7) от номера волновода. По оси x номер волноводов N , по оси y обезразмеренная величина электрического поля (единица соответствует 10^8 V/m). Для сплошной кривой — $t = 140$ (единица соответствует $3 \cdot 10^{-16}$ s), для точечной кривой $t = 210$, для пунктирной $t = 270$, $\beta = 0.5$.

Изучение динамики импульса проводилось в системе 9 параллельных плоскостей графена и нитрида бора.

Возникающая зависимость электромагнитного поля от номера волновода представлена на рис. 2.

Как наглядно видно из рис. 1, амплитуда импульса уменьшается с удалением от центрального волновода, что логично при пространственном распространении импульса.

Форма светового импульса сохраняется с удалением от центрального, только немного изменяется его полуширина.

Многочисленные расчеты показали, что зависимость эволюции светового импульса во времени от первоначальной ширины импульса, параметра β , его скорости, характеристик графена и нитрида бора практически отсутствует. В момент времени $t = 140$ условных единиц (сплошная линия на рис. 3) максимум энергии приходится на центральный бислой графена–нитрида бора ($N = 5$), а потом резко спадает до нуля. То есть имеет место очень слабое перераспределение элек-

ромагнитного поля между волноводами. Это может быть связано со сложной энергетической структурой графена–нитрида бора, и импульс, рассеиваясь на центральном волноводе, практически его не покидает.

Таким образом, из результатов, полученных в данной работе, следует, что устойчивое распространение предельно короткого оптического импульса в волноводной структуре, образованной двойными слоями графена и нитрида бора, возможно и зависимости формы импульса от характеристик системы практически не наблюдается.

Работа поддержана РФФИ (грант № 12-02-31654).

Список литературы

- [1] Lederer F, Stegeman G.I., Christodoulides D.N., Assanto G., Segev M, Sillberg Y // *Phys. Rep.* 2008. V. 463. P. 1–126.
- [2] Musslimani Z.H. // *Phys. Rev. Lett.* 2008. V. 100. P. 030 402.
- [3] Renninger W.H., Wise F.W. // *Nature Communications.* 2012. V. 4. doi:10.1038/ncomms2739.
- [4] Yulin A.V., Driben R., Malomed B.A., Skryabin D.V. // *Optics Express.* 2013. V. 21(12). P 14 481–14 486.
- [5] Giri P., Choudhary K., Dey A., Biswas A., Ghosal A., Bandyopadhyay A.K. // *Phys. Rev. B.* 2012. V. 86. P. 184 101.
- [6] Blase X., Rubio A., Louie S.G., Cohen M.L. // *Europhys. Lett.* 1994. V. 28. P. 355.
- [7] Giovannetti G., Khomyakov P.A., Brocks G., Kelly P.J., van den Brink J. // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. P. 073 103.
- [8] Greber T. // *Handbook of Nanophysics, Graphene and Boron Nitride Single Layers*, 2010.
- [9] Partoens B., Peeters F.M. // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 74. P. 075 404.
- [10] Avetisyan A.A., Partoens B., Peeters F.M. // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 79. P. 035 421.
- [11] Avetisyan A.A., Partoens B., Peeters F.M. // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 80. P. 195 401.
- [12] Wakabayashi K., Takane Y., Sigrist M. // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 99. P. 036 601.
- [13] Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A. // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 80. P. 4502.
- [14] Chen Y., Zou J., Campbell S.J., Le Caer G. // *Appl. Phys. Lett.* 2004. V. 84. P. 2430.
- [15] Suryavanshi A.P., Yu M., Wen J., Tang C., Bando Y. // *Appl. Phys. Lett.* 2004. V. 84. P. 2527.
- [16] Breshenan M.S., Hollander M.J. et al. // *ACS Nano.* DOI: 10.1021/nn3000996t.

- [17] Xue J., Sanchez-Yamagishi J., Bulmash D., Jacquod Ph., Deshpande A., Watanabe K., Taniguchi T., Jarillo-Herrero P., LeRoy B.J. // *Nature Mater.* 2011. V. 10. P. 282.
- [18] Пак А.В., Янюшкина Н.Н., Белonenко М.Б., Лебедев Н.Г. // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2011. Т. 75. В. 12. С. 1765–1767.
- [19] Zhukov A.V., Roland Bouffanais, Pak A.V., Belonenko M.B. // *Phys. Lett. A.* 2013. V. 377. P. 564–566.
- [20] Пак А.В., Белonenко М.Б. // *ФТТ.* 2013. Т. 55. В. 6. С. 1157–1160.
- [21] Cortijo A., Guinea F., Vozmediano M.A.H. // 2011. arXiv:1112.2054v1.
- [22] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика. Т. II. Теория поля.* М.: Наука, 1988. 512 с.
- [23] Бахвалов Н.С. *Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения).* М.: Наука, 1975. 632 с.