

# Предельно короткие оптические импульсы в углеродных нанотрубках и графене с периодическими примесями

© М.Б. Белоненко<sup>1</sup>, Н.Г. Лебедев<sup>2</sup>, Н.Н. Янюшкина<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Волгоградский институт бизнеса,  
Волгоград, Россия

<sup>2</sup> Волгоградский государственный университет,  
Волгоград, Россия

E-mail: mbelonenko@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 7 декабря 2009 г.)

На основе периодической модели Андерсона, которая предлагается для описания электронной подсистемы в углеродных нанотрубках и графене с примесями, методом функций Грина получен закон дисперсии для электронов. В низкотемпературном пределе рассмотрена совместная динамика электронов и электромагнитного поля и получено эффективное уравнение, которое описывает распространение предельно коротких оптических импульсов. Приведены решения данного уравнения в зависимости от параметров задачи.

Работа проведена в рамках реализации ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 гг. (проект № НК-16(3)), а также поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 08-02-00663).

## 1. Введение

Возросший в последнее время интерес к нелинейным явлениям значительно стимулировал создание материалов, способных проявлять нелинейные свойства в легко достижимых экспериментально условиях. Такими материалами являются аллотропные углеродные материалы: нанотрубки [1], образованные свернутым в цилиндр монослоем атомов углерода, расположенных в узлах гексагональной решетки, и графен [2], представляющий собой планарную гексагональную структуру, которая состоит из одного слоя атомов углерода. Большая подвижность электронов в графене и его уникальные электрофизические характеристики привлекают к нему внимание как к одной из альтернатив кремниевой базы современной микроэлектроники [3,4]. Хотя обычно закон дисперсии электронов в углеродных нанотрубках (УНТ) выбирается из условия наложения периодических граничных условий на закон дисперсии в графене, а для графена выбирается в линейном виде вблизи поверхности Ферми, необходимо отметить, что и УНТ, и графен легко адсорбируют на своей поверхности различные примеси, и учет взаимодействия собственно электронной системы представляет сложную задачу [5,6]. В частности, учет взаимодействия электронов графена и электронов примеси может привести к качественному изменению энергетического спектра (например, образованию щели в спектре) и, следовательно, к возможности распространения оптических импульсов. Также отметим, что энергетический спектр электронов в описанной выше ситуации становится сильно непараболическим. Это в свою очередь приводит к тому, что существенная нелинейность электронных свойств углеродной наночастицы может быть заметна уже в полях умеренных напряженностей [7,8].

По-видимому, наиболее простым способом учитывать взаимодействие электронов собственно углеродной наночастицы и электронов примеси является метод, предложенный Андерсоном [9,10], в котором рассматривается только гибридизация электронных подсистем. Изменение закона дисперсии элементарных возбуждений в модели примесей Андерсона хорошо известно, и возникает задача о последовательном учете данного изменения в оптическом отклике вещества.

Суммируя изложенное выше, можно сделать вывод, что задача исследования динамики нелинейных электромагнитных волн в углеродных нанотрубках и графене с учетом перестройки электронного спектра, вызванной гибридизацией электронов наночастиц и электронов примеси, представляется достаточно важной и актуальной.

## 2. Модель и спектр возбуждений

Периодическая модель Андерсона изначально рассматривает две группы электронов: коллективизированные  $s$ -электроны и локализованные  $d$ -электроны. Коллективизированные частицы являются свободными, а локализованные — взаимодействуют между собой посредством кулоновского отталкивания на одном узле. Взаимодействие осуществляется между  $s$ - и  $d$ -электронами не за счет обменных сил, а посредством гибридизации. Традиционно модель применялась к описанию физических свойств  $d$ - и  $f$ -металлов [10]. Однако с открытием новых форм углерода она может успешно применяться и для исследования статистических свойств углеродных нанотрубок и графена. Атом углерода образует три химические связи  $\sigma$ -типа с ближайшими соседними атомами с помощью трех  $sp^2$ -гибридных атомных орбиталей. Четвертая орбиталь  $p$ -типа участвует в образовании

химической связи  $\pi$ -типа. Последняя создает  $\pi$ -оболочку нанотрубки, описывающую состояние коллективизированных электронов, которые определяют основные свойства углеродных нанотрубок и графена. Это позволяет рассматривать состояния системы  $\pi$ -электронов в рамках модели Андерсона. В модели учитываются кинетическая энергия электронов и кулоновское взаимодействие их на одном узле и пренебрегается энергией электронов внутренних оболочек атомов и электронов, участвующих в образовании химических связей  $\sigma$ -типа, а также энергией колебаний атомов кристаллической решетки.

Элементарная ячейка гексагональной решетки графена, которая также лежит в основе описания структуры УНТ, содержит два атома углерода. Поэтому удобно считать, что графитовый слой состоит из двух гексагональных подрешеток  $A$  и  $B$ . Электроны совершают лишь прыжки между подрешетками. Гамильтониан периодической модели Андерсона в удобном виде для рассмотрения электронного спектра [10] следующий:

$$H = H_h + H_{im} + H_{hyb},$$

$$H_h = - \sum_{j\Delta\sigma} t_{\Delta} (a_{j\sigma}^+ b_{j+\Delta\sigma} + b_{j+\Delta\sigma}^+ a_{j\sigma}) + U \sum_j (a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j-\sigma}^+ a_{j-\sigma} + b_{j\sigma}^+ b_{j\sigma} b_{j-\sigma}^+ b_{j-\sigma}),$$

$$H_{im} = \sum_j (\varepsilon d_{j\sigma}^+ d_{j\sigma} + \varepsilon d_{j-\sigma}^+ d_{j-\sigma} + U_1 d_{j\sigma}^+ d_{j\sigma} d_{j-\sigma}^+ d_{j-\sigma}),$$

$$H_{hyb} = V \sum_{j\sigma} (a_{j\sigma}^+ d_{j\sigma} + d_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}), \quad (1)$$

где  $a_{j\sigma}^+, a_{j\sigma}, b_{j\sigma}^+, b_{j\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения электронов со спином  $\sigma$  на двух подрешетках углерода  $A$  и  $B$ ;  $t_{\Delta}$  — интеграл перескока между соседними узлами;  $U$  — константа кулоновского отталкивания электронов, оказавшихся на одном узле;  $d_{j\sigma}^+, d_{j\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения примесных электронов со спином  $\sigma$ ;  $\varepsilon$  — уровень энергии примесей;  $U_1$  — константа кулоновского отталкивания электронов примеси;  $V$  — интеграл перекрытия между волновыми функциями электронов примеси и  $\pi$ -электронов атома углерода.

Значения таких параметров, как  $t_{\Delta}, U, U_1, V$ , оценивались при помощи квантово-химического полуэмпирического метода MNDO [11] из расчетов электронного строения углеродных структур. Так, оценки показали, что типичные величины для этих параметров есть  $t_{\Delta} \approx 2 \text{ eV}$ ,  $U \approx 12 \text{ eV}$ ,  $U_1 \approx 12 \text{ eV}$ ,  $V \approx 2 \text{ eV}$ .

Для получения электронного спектра углеродных нанотрубок и графена с примесями применен метод двухвременных функций Грина [12,13], которые определяются как

$$\langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle = \theta(t - t') \langle A(t), B(t') \rangle, \quad (2)$$

где  $\theta(t)$  — функция Хевисайда, а угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают термодинамическое среднее. Тогда с учетом уравнений Гейзенберга для операторов

$$i \frac{dA}{dt} = [A, H]$$

легко записать уравнения движения для функций Грина (2) [12,13]

$$i \frac{d \langle \langle A(t), B(t') \rangle \rangle}{dt} = \delta(t - t') \langle A(t) B(t') \rangle + \langle \langle [A(t), H(t)], B(t') \rangle \rangle. \quad (3)$$

Для дальнейшего исследования введем вектор-столбец функций Грина, определенный как

$$G_j(t - t') = \begin{pmatrix} \langle \langle a_{j\sigma}^+, a_{l\sigma} \rangle \rangle \\ \langle \langle b_{j\sigma}^+, a_{l\sigma} \rangle \rangle \\ \langle \langle d_{j\sigma}^+, a_{l\sigma} \rangle \rangle \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Вводя Фурье-компоненты функций Грина стандартным образом

$$G_k(t - t') = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_j G_j(t) \exp(ikj)$$

( $N$  — число атомов углерода в кристаллите), можно записать уравнения движения (3) в виде

$$i \frac{dG_k(t - t')}{dt} = \delta(t - t') M_k + W_k G_k(t - t') + X_k(t - t'),$$

$$W = \begin{pmatrix} 0 & t_k & V \\ t_k^* & 0 & V \\ V & V & \varepsilon \end{pmatrix},$$

$$t_k = \sum_{\Delta} t_{\Delta} \exp(ik\Delta),$$

где  $M$  — вектор-столбец, определяемый равновесными средними,  $X_k(t - t')$  — слагаемое, определяемое коммутацией последнего слагаемого в (3) с оператором  $H_4$ ,

$$H_4 = U \sum_j (a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j-\sigma}^+ a_{j-\sigma} + b_{j\sigma}^+ b_{j\sigma} b_{j-\sigma}^+ b_{j-\sigma}) + U_1 \sum_j d_{j\sigma}^+ d_{j\sigma} d_{j-\sigma}^+ d_{j-\sigma}.$$

Все величины в уравнении движения зависят только от разности пространственных и временных координат  $j-l$  и  $t-t'$  в силу временной и пространственной однородности. Последнее уравнение запишем как

$$i \frac{dG_k(t - t')}{dt} = \delta(t - t') M_k + (W_k + R_k(t - t')) G_k(t - t'),$$

$$\begin{aligned}
 R_k(t-t') &= \text{diag} \left( \sum_j \exp(ikj) \langle [a_{j\sigma}^+, H_4], a_{l\sigma} \rangle \right) / \\
 &/ \sum_j \exp(ikj) \langle [a_{j\sigma}^+, a_{l\sigma}] \rangle, \\
 &\sum_j \exp(ikj) \langle [b_{j\sigma}^+, H_4], a_{l\sigma} \rangle / \sum_j \exp(ikj) \langle [b_{j\sigma}^+, a_{l\sigma}] \rangle, \\
 &\sum_j \exp(ikj) \langle [b_{j\sigma}^+, H_4], a_{l\sigma} \rangle / \sum_j \exp(ikj) \langle [b_{j\sigma}^+, a_{l\sigma}] \rangle.
 \end{aligned} \quad (5)$$

Согласно [13], можно записать

$$R_k(t) = R_k(0) - \int_0^t dt' \frac{dR_k(t-t')}{dt'}. \quad (6)$$

Первое слагаемое при этом определяет поправки к частоте элементарных возбуждений, вызванные взаимодействием, а второе ответственно за затухание элементарных возбуждений [13]. Отметим, что, поскольку в работе ставится задача исследовать распространение предельно коротких оптических импульсов, затуханием элементарных возбуждений на временах порядка их длительности можно пренебречь [14]. И задача сводится к вычислению средних и коммутаторов, входящих в уравнение (5), т. е. к определению величины  $R_k(0)$ .

Отметим, что в силу трансляционной инвариантности задачи величины  $R_k(0)$  должны слабо зависеть от волнового вектора возбуждений  $k$ . В пользу подобного обстоятельства свидетельствует недавно разработанный метод DMFT [15,16], в котором показывается, что данную зависимость можно вообще не учитывать. Отметим, что в методе DMFT лежит именно независимость собственно энергетической части функции Грина от волнового вектора, что выполняется точно в случае бесконечной размерности пространства. Эта зависимость, как покажут расчеты, является определяющей для динамики предельно коротких импульсов, и, исходя из сравнения с методом DMFT, будем считать далее, что  $R_k(0)$  не зависит от волнового вектора  $k$ . Наиболее простой способ вычислить  $R_k(0)$  — это применить для расчета средних метод среднего поля [12]. Отметим, что, поскольку здесь не ставится задача расчета термодинамических характеристик и величин, характеризующих фазовый переход, данное приближение вполне работоспособно.

Применяя преобразование Фурье к уравнению (5), легко получить, что спектр элементарных возбуждений  $E_k$  будет определяться корнями уравнения

$$\det \begin{vmatrix} Un - E_k & t_k & V \\ t_k^* & Un - E_k & V \\ V & V & \varepsilon - U_1 n_p - E_k \end{vmatrix} = 0, \quad (7)$$

где  $n, n_p$  — равновесное число электронов на узлах углеродной решетки и примесях; считается, что состояния с различной ориентацией спинов эквивалентны. Учитывая,

что импульс, распространяющийся в образце, будет достаточно коротким, можно пренебречь влиянием взаимодействий между элементарными возбуждениями и использовать гамильтониан в виде

$$H = \sum_{k\sigma} E_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma}, \quad (8)$$

где  $C_{k\sigma}^+, C_{k\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения элементарных возбуждений (квантовое число  $k$  включает в себя величину волнового вектора и номер решения кубического уравнения (7)).

### 3. Эффективное уравнение для электрического поля

Рассмотрим переменное электрическое поле, когда электромагнитная волна распространяется вдоль оси  $z$  в пучках углеродных нанотрубок, ориентированных вдоль оси  $x$ , и в системе монослоев графена, ориентированных в плоскостях, перпендикулярных оси  $z$  задачи (рис. 1). Вектор напряженности электрического поля направлен вдоль оси  $x$ .

Гамильтониан системы элементарных возбуждений в этом случае в присутствии внешнего переменного электрического поля имеет вид

$$H = \sum_{p\sigma} E \left( p_x - \frac{e}{c} A(t) \right) C_{p\sigma}^+ C_{p\sigma}, \quad (9)$$

где  $C_{p\sigma}^+, C_{p\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения возбуждений с квазиимпульсом  $p = (p_x, p_y)$ ;  $A(t)$  — величина вектор-потенциала электромагнитного поля, который имеет одну компоненту и направлен вдоль

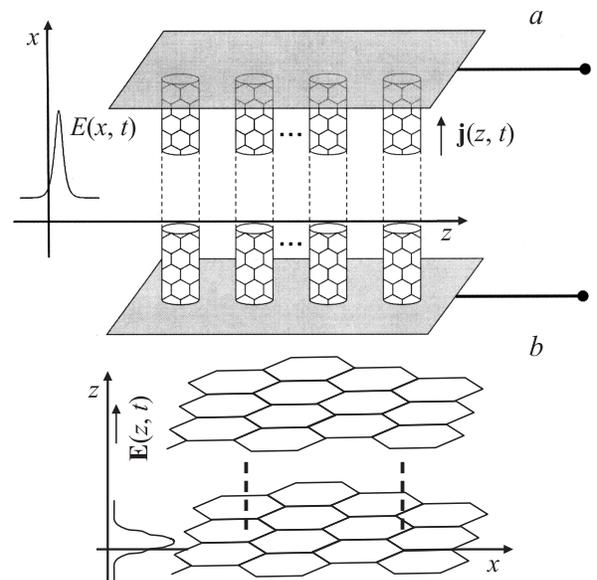


Рис. 1. Геометрия модели распространения оптического импульса в пучках УНТ (а) и многослойном графене (б).

оси  $x$ ;  $E(p)$  — закон дисперсии возбуждений, определяемый из решения уравнения (7) с учетом того, что для углеродных нанотрубок  $(m, 0)$  типа zig-zag дисперсионное соотношение имеет известный вид [2]

$$t_s(p) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(ap) \cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)},$$

где  $s = 1, 2, \dots, m$ , а для графена [2]

$$t_s(p) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(ap_x) \cos\left(\frac{ap_y}{\sqrt{3}}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ap_y}{\sqrt{3}}\right)}.$$

Здесь  $\gamma \approx 2.7 \text{ eV}$ ,  $a = 3b/2\hbar$ ,  $b = 0.142 \text{ nm}$  — расстояние между соседними атомами углерода в графене.

Уравнения Максвелла с учетом диэлектрических и магнитных свойств описанной системы и калибровки

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

можно записать как [15]

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = 0, \quad (10)$$

причем здесь пренебрегается дифракционным расщеплением короткого импульса в направлениях, перпендикулярных оси распространения. Вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  считается имеющим вид  $\mathbf{A} = (A(z, t), 0, 0)$ .

Запишем стандартное выражение для плотности тока

$$\mathbf{j} = e \sum_{p\sigma} v \left( p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle C_{p\sigma}^+ C_{p\sigma} \rangle, \quad (11)$$

где  $v(p) = \frac{\partial E_s(p)}{\partial p_x}$  — скорость элементарных возбуждений, а скобки означают усреднение с неравновесной матрицей плотности  $\rho(t)$ :  $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(t))$ . Учитывая, что оператор числа частиц коммутирует с оператором энергии  $[C_{p\sigma}^+ C_{p\sigma}, H] = 0$ , из уравнений движения для матрицы плотности сразу получаем

$$\langle C_{p\sigma}^+ C_{p\sigma} \rangle = \langle C_{p\sigma}^+ C_{p\sigma} \rangle_0,$$

где  $\langle B \rangle_0 = Sp(B(0)\rho(0))$ ,  $\rho_0 = \exp(-H/kT)/Sp(\exp(-H/kT))$ ,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура. Закон дисперсии  $E_s(p)$  можно представить в виде ряда Фурье

$$E(p) = \frac{1}{2\pi} \sum_{q p_y} a_{q p_y} \cos(a p_x q),$$

$$a_{q p_y} = \int dp_x \cos(a p_x q) E(p), \quad (12)$$

где интегрирование проводится по первой зоне Бриллюэна, а  $q$  — натуральное число. В этом случае из

формул (10)–(11) следует эффективное уравнение на вектор-потенциал  $\mathbf{A}$ :

$$\frac{\partial^2 A}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4en_0}{c} \sum_{q=1}^{\infty} q b_q \sin\left(\frac{aeA}{c} q\right) = 0,$$

$$b_q = \sum_{p_y} a_{p_y} q \int dp_x \cos(a p_x q) \frac{\exp(-E_s(p)/kT)}{1 + \exp(-E_s(p)/kT)}, \quad (13)$$

и интегрирование ведется в пределах первой зоны Бриллюэна.

Отметим, что вследствие убывания коэффициентов  $b_q$  с ростом квантового числа  $q$  в сумме в уравнении (13) можно ограничиться первыми двумя не исчезающими слагаемыми и получить широко применяемое в приложениях, но не интегрируемое методом обратной задачи рассеяния двойное уравнение sine-Gordon [16]. Важным достоинством данного уравнения является то, что из него следует теорема площадей, а именно: устойчивы по отношению к изменению формы только импульсы, имеющие определенную „площадь“. Импульсы, имеющие большую „площадь“, стремятся уменьшить ее до фиксированной, а те, которые имеют меньшую „площадь“, наоборот, увеличивают ее. Кроме того, характер взаимодействия импульса и, главное, характер распада одиночного импульса сильно зависят от его скорости. При увеличении скорости импульсы начинают взаимодействовать все более и более упруго, и меньшая часть их энергии уходит в колебательные моды. Все это и послужило стимулом для дальнейшего численного исследования уравнения (13).

#### 4. Обсуждение результатов численного моделирования

В безразмерном виде уравнения (13) приводятся к виду

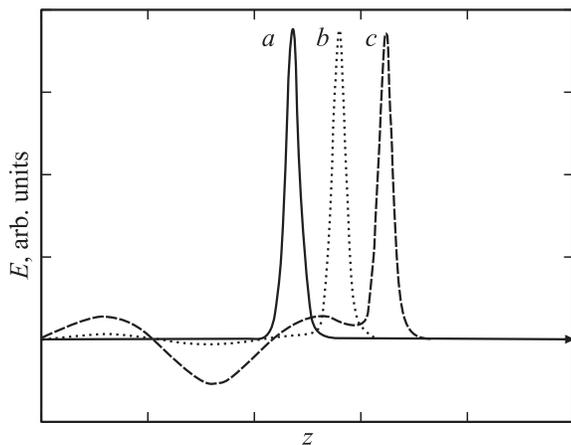
$$\frac{\partial^2 B}{\partial z'^2} - \frac{\partial^2 B}{\partial t'^2} + \sin B + \sum_{q=2}^{\infty} b'_q \sin(Bq) = 0.$$

В работе проведено численное исследование динамики предельно коротких оптических импульсов, распространяющихся в рассматриваемых объектах.

Исследуемые уравнения решались численно при помощи прямой разностной схемы типа крест [17]. Шаги по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости схемы. Шаги разностной схемы уменьшались последовательно в 2 раза до тех пор, пока решение не изменялось в восьмом значащем знаке. Начальное условие выбиралось в виде хорошо известного кинг-решения для уравнения sin-Gordon:

$$B(z', t) = 4 \arctg[\exp((z' - vt')/\gamma)],$$

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



**Рис. 2.** Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (13), от координаты в системе УНТ и графеновых плоскостей. По оси абсцисс отложена координата (единица соответствует  $3 \cdot 10^{-5}$  м), по оси ординат — величина электрического поля. Для кривой *b* время в 1.5 раза больше, чем для кривой *a*; для кривой *c* — в 2 раза больше, чем для кривой *a*. Скорость импульса  $v/c = 0.95$ . Параметры задачи  $Un = 0.5\gamma$ ,  $U_{1n_p} = 0.6\gamma$ ,  $V = 0.1\gamma$ .

Данное начальное условие соответствует тому, что на образец подается предельно короткий импульс, состоящий из одного „полуколебания“ электрического поля.

Возникающая эволюция электромагнитного поля в углеродных наноструктурах с течением времени представлена на рис. 2. Ввиду того что уравнение (13) достаточно близко к интегрируемому уравнению sine-Gordon, импульс распространяется, сохраняя свою форму на первоначальном этапе, а далее начинают играть роль неинтегрируемые слагаемые в (13) и за импульсом появляется хвост, который имеет приблизительно нулевую площадь. Такое поведение, на наш взгляд, связано с тем, что в системе приближенно выполняется теорема площадей, поэтому возмущения, вносимые неинтегрируемой частью уравнения (13), не изменяют суммарную площадь под импульсом. Как показали результаты численных расчетов, на динамику импульса слабо влияет тип углеродной нанотрубки, и такое поведение наблюдалось для всех типов полупроводниковых нанотрубок. Как видно из рисунка, эволюция оптического импульса в пучках УНТ и графене качественно одинакова.

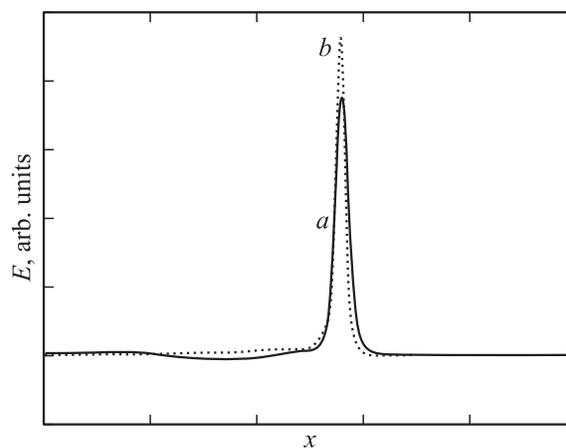
Наиболее сильно эволюция ультракороткого оптического импульса зависит от величины  $V$  — интеграла перекрытия между волновыми функциями электронов примеси и  $\pi$ -электронов атомов углерода, образующих зоны вблизи уровня Ферми. Пример такой зависимости приведен на рис. 3.

Такое поведение можно объяснить тем, что величина  $V$  определяет смешивание, гибридизацию ветвей спектра „чистой“ наночастицы с уровнем энергии примеси. Это в свою очередь приводит к изменению коэффициентов разложения по гармоникам в уравнении (12). Следо-

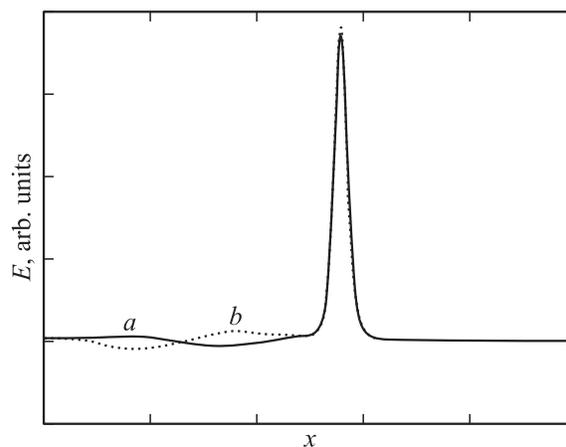
вательно, рассматриваемая система с ростом высших гармоник становится менее интегрируемой (т.е. сильно отличается от классического уравнения sine-Gordon). Отметим, что в системах с большей величиной  $V$  импульс несколько замедляется и вместе с тем увеличивает свою амплитуду. Данное обстоятельство может оказаться полезным для проектирования устройств обработки предельно коротких оптических импульсов.

Кроме того, как показали численные расчеты, динамика предельно короткого оптического импульса зависит и от величины  $Un$ , т.е. фактически от среднего кулоновского поля, которое действует на электрон в данном узле решетке. Типичная зависимость приведена на рис. 4.

Как и ранее, можно связать образование „хвоста“ за предельно коротким импульсом с гибридизацией ветвей спектра „чистой“ углеродной нанотрубки и графена с



**Рис. 3.** Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (13), от координаты. По оси абсцисс отложена координата (единица соответствует  $3 \cdot 10^{-5}$  м), по оси ординат — величина электрического поля.  $V = 0.1\gamma$  (*a*) и  $0.3\gamma$  (*b*).  $Un = 0.5\gamma$ ,  $U_{1n_p} = 0.6\gamma$ .



**Рис. 4.** Зависимость электрического поля, определяемого потенциалом в уравнении (13), от координаты. По оси абсцисс отложена координата (единица соответствует  $3 \cdot 10^{-5}$  м), по оси ординат — величина электрического поля.  $Un = 0.5\gamma$  (*a*) и  $0.15\gamma$  (*b*).  $U_{1n_p} = 0.6\gamma$ ,  $V = 0.1\gamma$ .

уровнем энергии примеси. Также возникший „хвост“ имеет относительно малую площадь, что указывает на выполнение теоремы площадей и на то, что система близка к интегрируемой. Отметим, что незначительные изменения (в пределах 10%) величины  $Un$  практически не влияют на динамику предельно короткого импульса, т. е. импульс устойчив по отношению к малым флуктуациям концентрации носителей заряда.

Таким образом, исходя из результатов численных расчетов, можно сделать вывод, что происходит устойчивое распространение предельно коротких оптических импульсов в пучках углеродных нанотрубок и графене с примесями, электроны которых гибридизуются с электронами атомов углерода.

## 5. Заключение

Сформулируем основные выводы настоящей работы.

1) Методом функций Грина получен электронный энергетический спектр углеродных нанотрубок и графена с примесями, описываемых в рамках периодической модели Андерсона.

2) Получено эффективное уравнение для динамики предельно коротких оптических импульсов в углеродных нанотрубках и графене с примесями. Показано путем численного моделирования, что предельно короткие оптические импульсы устойчиво распространяются в углеродных наночастицах, содержащих примеси.

3) Наиболее сильно на форму предельно коротких оптических импульсов влияет величина интеграла перекрытия между волновыми функциями электронов примеси и  $\pi$ -электронов атомов углерода, образующих зоны вблизи уровня Ферми.

4) При распространении предельно коротких оптических импульсов в углеродных нанотрубках и графене за ними образуется вторичный импульс — „хвост“, имеющий площадь, близкую к нулевой.

5) Динамика предельно коротких оптических импульсов в углеродных нанотрубках и графене оказывается качественно одинаковой. Это связано с тем, что существует предельный переход между нанотрубками и графеном при увеличении диаметра трубок. Кроме того, пространственный размер импульса существенно превышает размер самих наночастиц, что делает его нечувствительным к геометрическим особенностям материала на нанометровом масштабе. Импульс взаимодействует с электронной подсистемой, которая в выбранном направлении напряженности электрического поля имеет одинаковые кинетические свойства и в нанотрубках, и в графене.

## Список литературы

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).

- [2] П. Харрис. Углеродные нанотрубки и родственные структуры. Новые материалы XXI века. Техносфера, М. (2003). 336 с.
- [3] Y. Zhang, J.W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim. *Nature* **438**, 201 (2005).
- [4] S. Stankovich, D.A. Dikin, G.H.B. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.J. Zimney, E.A. Stach, R.D. Piner, S.B.T. Nguyen, R.S. Ruoff. *Nature* **442**, 282 (2006).
- [5] B. Partoens, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B* **74**, 075 404 (2006).
- [6] S.V. Morozov, K.S. Novoselov, F. Schedin, D. Jiang, A.A. Firsov, A.K. Geim. *Phys. Rev. B* **72**, 201 401 (2005).
- [7] M.B. Belonenko, E.V. Demushkina, N.G. Lebedev. *J. Rus. Laser Res.* **27**, 457 (2006).
- [8] М.Б. Белоненко, Е.В. Демушкина, Н.Г. Лебедев. *ФТТ* **50**, 367 (2008).
- [9] P.W. Anderson. *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [10] Ю.А. Изюмов, И.И. Чашин, Д.С. Алексеев. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, Институт компьютерных исследований, М.–Ижевск (2006). 384 с.
- [11] Н.Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. Мир, М. (2001). 519 с.
- [12] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975). 527 с.
- [13] Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Боголюбов (мл.). Введение в квантовую статистическую механику. Наука, М. (1984). 384 с.
- [14] S.A. Maksimenko, G.Ya. Slepyan. In: *Handbook of nanotechnology. Nanometer structure: theory, modeling, and simulation.* SPIE press Bellingham. (2004). P. 145.
- [15] Ю.А. Ильинский, Л.В. Келдыш. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом. Изд-во МГУ, М. (1989). 304 с.
- [16] Солитоны / Под ред. Р. Буллаф, Ф. Кодри. Мир, М. (1983). 408 с.
- [17] Н.С. Бахвалов. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). Наука, М. (1975). 632 с.