

**BELARUS STATE UNIVERSITY
INSTITUTE FOR NUCLEAR PROBLEMS**

**BASIC AND APPLIED
PHYSICAL RESEARCH
2002–2009**

Collected Papers

Editor: Professor V. G. Baryshevsky

**MINSK
2009**

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ**

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**

Сборник научных трудов

Под редакцией
профессора В. Г. Барышевского

**МИНСК
2009**

УДК 53(082)
ББК 22.3я43
Ф94

Редакционная коллегия:
доктор физико-математических наук,
профессор *В. Г. Барышевский* (отв. редактор);
кандидат физико-математических наук
С. Н. Сытова (отв. секретарь);
доктор физико-математических наук *М. В. Коржик*;
доктор физико-математических наук *А. С. Лобко*;
доктор физико-математических наук *С. А. Максименко*;
доктор физико-математических наук *В. В. Тихомиров*

Ф94 **Фундаментальные** и прикладные физические исследования. 2002–2009 гг. :
сб. науч. тр. / редкол. : В. Г. Барышевский (отв. ред.) [и др.] ; под ред. проф. В. Г. Барышевского. – Минск : БГУ, 2009. – 415 с. : ил.
ISBN 978-985-518-147-8.

В сборнике представлены результаты научных исследований, выполненных сотрудниками НИИ ЯП БГУ за 2002–2009 гг. в области ядерной и теоретической физики, прикладной физики и приборостроения.

Предназначено для научных работников, а также студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

УДК 53(082)
ББК 22.3я43

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ВОЛНЫ В НАНОСТРУКТУРАХ

**С. А. Максименко, Г. Я. Слепян, К. Г. Батраков, П. П. Кужир,
А. В. Мадьяров, А. М. Немиленцев, А. А. Хрущинский, М. В. Шуба**

1. Введение

Последние два десятилетия развития науки и технологии ознаменовались быстрым прогрессом в синтезе различных типов искусственных сред и материалов, обладающих наноразмерной структурированностью и свойствами, существенно отличающимися от свойств природных сред. По сути дела, происходит фундаментальный перелом в физике и химии конденсированного состояния, значительно расширяющий наши представления о природе твердых тел и наши возможности управления их свойствами, сделан решительный шаг к созданию материалов, приборов и устройств с новыми уникальными свойствами. Слово-сочетания с приставкой нано-: наноэлектроника и нанооптика, наномеханика, наносенсорика, наноматериалы – определяют целые направления в современной физике, химии, материаловедении, приборостроении.

Развитие наноэлектроники – электроники на глубоком субмикронном уровне, т. е. с линейными размерами элементов цепей меньше 0.1 мкм, – создает предпосылки нового шага в решении проблемы миниатюризации устройств передачи, приема и обработки информации. Термин охватывает как традиционные микроэлектронные устройства и технологии с более высокой степенью миниатюризации, так и последние достижения молекулярной электроники, которая манипулирует одиночными атомами и молекулами. Идет разработка мономолекулярных логических схем, которые могут стать основой для новых поколений компьютеров, отличающихся сверхминиатюрными размерами при уникальной эффективности. Основу для этого создают новые нанотехнологические материалы, такие как фуллерены [1] и углеродные нанотрубки (УНТ) [1, 2] – квазиодномерные макромолекулы углерода, органические полимеры [3], структуры на основе квантовых ям, квантовых проводов и квантовых точек (КТ) – локализованных наноразмерных включений в полупроводник [4–6], обеспечивающих пространственное квантование движения носителей заряда в одном или нескольких направлениях и тем самым возможность использования таких структур в качестве активных сред полупроводниковых лазеров. Широкий обзор работ по лазерам на КТ представлен в монографии [6]. Недавние исследования продемонстрировали возникновение гибридных форм углерода – пиподов – на основе внедрения в УНТ различных фуллеренов [7], таких как C_{60} , C_{70} , C_{80} , C_{84} и металлофуллеренов [8], например $Gd@C_{82}$ и $Sc_2@C_{84}$. Оптические и электронные свойства КТ привлекают внимание также многообещающими возможностями для хранения, передачи и обработки квантовой информации [8–12]. В частности,

достигнут значительный прогресс в создании однофотонных источников света [12, 13].

Твердотельные наноструктуры представляют собой наноразмерные неоднородности различной природы и конфигурации внутри полупроводниковых и диэлектрических сред. Несмотря на различную физическую природу этих объектов, их объединяют весьма малые размеры в одном или нескольких направлениях, всего на 1–2 порядка превышающие характерное межатомное расстояние. При этих условиях длина волны де Бройля электрона оказывается сравнимой с размерами системы, и квантовая природа носителей заряда проявляется в полной мере. В частности, *пространственное ограничение движения зарядов* приводит к дискретизации энергетического спектра с энергетическими уровнями, определяемыми размером и формой нанообъекта. Именно этот эффект лежит в основе использования полупроводниковых структур пониженной размерности в качестве активной среды полупроводникового лазера, обеспечивает уникальное свойство одностенных УНТ менять свою проводимость на несколько порядков, от полупроводниковой до металлической, при изменении радиуса на несколько ангстрем.

Помимо эффекта пространственного ограничения движения носителей заряда, присущая наноструктурам пространственная неоднородность создает в них *наномасштабные неоднородности электромагнитных полей*. Во многих случаях они порождают значительную пространственную дисперсию, которая, как известно, играет фундаментальную роль и в классической кристаллооптике [14]. Если первый фактор лежит в фокусе современных физических исследований наноструктур, то роль второго из них часто недооценивается. Осознание этого факта явилось мотивацией для цикла исследований по электродинамике наноструктур, выполненных в лаборатории электродинамики неоднородных сред НИИ ядерных проблем БГУ.

Развитие электродинамики всегда тесно увязывалось с практическими проблемами, возникающими при решении задачи приема-передачи и обработки сигналов теми или иными системами в тех или иных средах. Так, например, проблема радиолокации привела к развитию методов решения задач рассеяния электромагнитных волн на телах произвольной формы [15], а потребность осуществления дальней радиосвязи привела к созданию теории рассеяния на статистически неоднородных поверхностях [16]. Становление квантовой электроники потребовало создания теории открытых квазиоптических резонаторов [17]. Синтез высококачественных оптических волокон сделал реальной волоконно-оптическую связь, что привело к развитию теории открытых диэлектрических волноводов [18, 19]. Развитие микроэлектроники стимулировало работы по электродинамике микрополосковых и других планарных структур [20]. Современный этап развития электродинамики связан с созданием высокоэффективных методов описания дифракции на телах с произвольной пространственной конфигурацией и диссипацией энергии [21]. Учитывая прогресс технологий синтеза все новых типов наноструктурированных объектов и материалов и потребности их применения в информационных и сенсорных системах, можно с уверенностью утверждать, что *моделирование наноструктур и наноразмер-*

ных элементов цепей и систем является одним из магистральных направлений развития современной электродинамики. В связи с этим возникают новые постановки задач, а хорошо известные приемы и методы наполняются новым содержанием.

Первый этап развития квантовой физики твердого тела был полностью посвящен однородным средам. Итогом моделирования среды было дисперсионное уравнение для связанных состояний электромагнитного поля и материальных частиц. Его решения соответствуют собственным волнам среды так называемым квазичастицам, которые отличаются от обычных (свободных) частиц сложным видом дисперсионной характеристики. Переход к наноразмерным неоднородностям создал условия для дифракции и рассеяния квазичастиц, их преобразования друг в друга, подобно тому, как это имеет место для электромагнитных волн в нерегулярных волноводах или в квантовых полупроводниковых сверхрешетках [22]. Существенную роль при этом играют резонансные взаимодействия различных мод. Процессы взаимодействия различных мод в наноструктурах оказываются более сложными ввиду большего разнообразия взаимодействующих мод и сложной трехмерной конфигурации неоднородностей. Соответственно электромагнитные свойства наноматериалов также оказываются более богатыми и разнообразными. В частности, квантование движения носителей заряда и неоднородность электромагнитного поля внутри и вблизи наноразмерных объектов часто приводит к пространственной нелокальности электромагнитного отклика, обеспечивает необычные механизмы неустойчивости и нелинейности, делает нанобъекты привлекательными для использования в квантовых информационных сетях для хранения и передачи квантовой информации.

Таким образом, особенностью электродинамики наноструктур является то, что, в отличие от классической электродинамики, она имеет дело с системами и средами со сложными и необычными законами дисперсии квазичастиц. По сути дела, электродинамическая задача на наноуровне должна формулироваться как самосогласованная задача о движении носителей заряда в создаваемом ими электромагнитном поле. Очевидно, что в этом случае традиционное для классической электродинамики введение материальных параметров среды становится невозможным или, по крайней мере, требует существенной модификации.

Во многих случаях при взаимодействии наноструктур со светом принципиальную роль играет квантование последнего. При этом мы приходим к необходимости развития *квантовой оптики наноструктур и наноструктурных композитов*. Здесь следует подчеркнуть, что применение к наноструктурам общих принципов квантования электромагнитного поля [23] не является тривиальным. Особо следует выделить проблему введения эффективных материальных уравнений экситонного композита. Здесь известны различные способы, причем не всегда они принципиально эквивалентны. Между тем проблема особенно существенна именно в квантовой оптике: нарушение некоторых общих условий для материальных уравнений сразу же приводит к физическим противоречиям при квантовании поля [23]. Наиболее оправданный и эффективный путь здесь, по нашему мнению, основан на введении показателя преломления через амплитуду

рассеяния одиночного рассеивателя на нулевой угол. Следует подчеркнуть, что этот путь применим не только для фотонов, но и для квантовых частиц иной физической природы (атомов, атомных ядер, нуклонов и т. д.), что позволило положить его в основу ядерной оптики поляризованных сред [24].

Начало работ в лаборатории в данном направлении можно отнести к 1997 г. К настоящему моменту заложены основы новой исследовательской дисциплины – наноэлектромагнетизма, синтезирующей макроскопическую электродинамику и микроскопическую теорию электронных свойств низкоразмерных структур. Исследования охватывают широкий класс эффектов переноса и линейной электродинамики УНТ и композитов на их основе [25–38], нелинейного переноса и нелинейной оптики УНТ [39–45], электродинамики КТ и их массивов с учетом влияния локальных полей [46–59], квантовой электродинамики низкоразмерных структур [60–65]. Начаты теоретические и экспериментальные исследования взаимодействия СВЧ излучения с нанокompозитами на основе луковичных форм углерода (ЛФУ) [66, 66]. Обосновывается единый подход к построению электродинамики наноструктур [64], который аккумулирует и использует хорошо известные методы и приемы макроскопической электродинамики [21]. В работе [64] впервые вводится понятие наноэлектромагнетизма как самостоятельного направления исследований.

Исследования выполнялись в рамках ряда проектов Государственных программ фундаментальных исследований: «Электроника», «Вещество» «Нанотех», «Фотоника», Межвузовских программ фундаментальных исследований «Наноэлектроника» и «Низкоразмерные системы» и при поддержке БРФФИ (проекты Ф97-174, Ф99-069, Ф01-047, Ф01-176, Ф02Р-047, Ф04М-078, Ф05-127, Ф06Р-091, Ф06Р-101). Существенная поддержка исследованиям оказана со стороны международных научных фондов, таких как ИНТАС (проекты 96-0467, 97-2018, 03-50-4409, 04-83-3607, 05-109-4595, 05-1000008-7801, 06-1000013-9225), программа Наука ради мира научного комитета НАТО (проекты SfP-972614, PST.CLG.980375 и SfP-981051) и в рамках Белорусско-Германского соглашения в области исследований (проекты WEI-001-98 и BEL-01-01).

2. Базовый формализм электродинамики УНТ

УНТ – углеродная макромолекула, получаемая сворачиванием плоского графитового слоя в цилиндр. Типичный радиус УНТ лежит в пределах 5–20 нм, тогда как ее длина может достигать нескольких микрон. Геометрическая конфигурация УНТ зависит от направления вектора сворачивания \mathbf{R}_c и классифицируется дуальным индексом (m, n) с $(m, 0)$ для zigzag УНТ и (m, m) для armchair УНТ (рис. 1).

Наш подход к описанию электромагнитного отклика УНТ основан на методе эффективных граничных условий (ЭГУ), первоначально развитом в теории антенн [17, 21] для периодических структур с периодом, значительно меньшим длины волны в свободном пространстве. В отношении УНТ метод ЭГУ применим в широком частотном диапазоне – от СВЧ до рентгеновского – там, где длина волны превышает длину C–C связи в графите $b = 0.142$ нм. Такой подход

определяет общий метод решения широкого круга задач электродинамики наноструктур.

Идея метода состоит в том, что периодическая структура заменяется гладкой однородной поверхностью, на которой определяются подходящие ЭГУ для электромагнитного поля. ЭГУ выбираются таким образом, что пространственная структура электромагнитного поля, индуцированного эффективным током, текущим по однородной гладкой поверхности, и пространственная структура поля реального тока в решетке оказываются идентичными на достаточно большом расстоянии от поверхности. Параметры решетки при этом включаются в коэффициенты ЭГУ. ЭГУ возникают в результате усреднения микроскопических полей по физически бесконечно малому элементу цилиндрической поверхности. Принимая непрерывность тангенциальной составляющей электрического и аксиальной компоненты магнитного полей на поверхности УНТ, и воспользовавшись уравнением для аксиальной проводимости УНТ [26, 28], получаем:

$$\begin{aligned} E_{\phi,z} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}+0}} - E_{\phi,z} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}-0}} &= 0, & H_z \Big|_{\rho=R_{\text{cn}+0}} - H_z \Big|_{\rho=R_{\text{cn}-0}} &= 0, \\ H_{\phi} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}+0}} - H_{\phi} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}-0}} &= \frac{4\pi}{c} \sigma_{zz}(\omega) E_z \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\sigma_{zz}(\omega)$ – аксиальная проводимость УНТ, R_{cn} – ее радиус. Пространственная дисперсия вводится в ЭГУ заменой $\sigma_{zz}(\omega) \rightarrow \sigma_{zz}(\omega) / [1 + \gamma(\omega) \partial^2 / \partial^2 z]$, где $\gamma(\omega) = l_0 / [k(1 + i/\omega\tau)]^2$, $k = \omega/c$, τ – среднее время свободного пробега электрона. Величина l_0 характеризует вклад пространственной неоднородности поля. В работах [26, 28] показано, что для металлических УНТ $l_0 \sim 10^{-5}$.

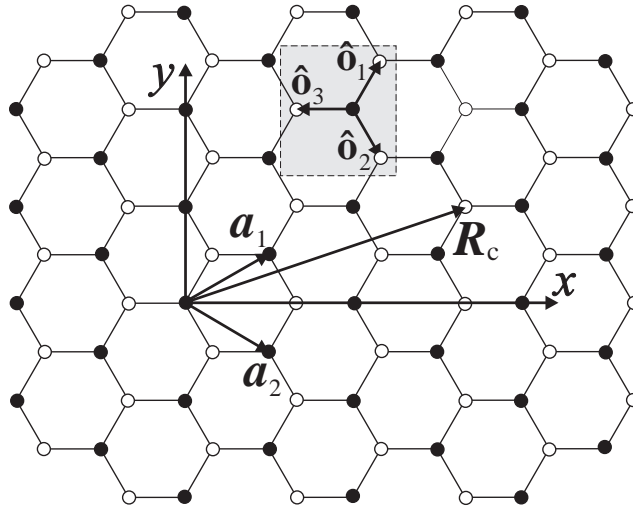


Рис. 1. Кристаллическая решетка графитового монослоя

$$\mathbf{R}_c = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2, \quad |\mathbf{a}_{1,2}| = b\sqrt{3}, \quad b = 0.142 \text{ нм} - \text{длина С-С связи в графите}$$

Равенства (1) образуют полную систему ЭГУ для электромагнитного поля на поверхности нанотрубки. Их вид аналогичен эквивалентным граничным условиям Вайнштейна – Сивова [15, 21] для сетчатых структур и частопериодических решеток в классической электродинамике СВЧ. Однако в отличие от электродинамики СВЧ, имеющей дело либо с проводниками, либо с диэлектриками, проводимость УНТ является сложной функцией внутренних параметров. Установление проводимости является критической проблемой электродинамики УНТ. Математически эта проблема формулируется системой нелинейных в общем случае уравнений для элементов матрицы плотности [64]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{cc}}{\partial t} + eE_z \frac{\partial \rho_{cc}}{\partial p_z} &= -\frac{i}{\hbar} eE_z (R_{cv}^* \rho_{cv} - R_{cv} \rho_{vc}), \\ \frac{\partial \rho_{cv}}{\partial t} + eE_z \frac{\partial \rho_{cv}}{\partial p_z} &= \frac{i}{\hbar} eE_z [R_{cv} (\rho_{vv} - \rho_{cc}) + (R_{cc} - R_{vv}) \rho_{cv}] - i\omega_{vc} \rho_{cv}, \end{aligned} \quad (2)$$

где индексы v и c относятся соответственно к π -электрону в валентной зоне и в зоне проводимости, ω_{vc} – частота перехода. Матричные элементы $R_{ll'}$ ($l, l' = c, v$) выражаются через амплитуды функций Блоха u_l следующим образом:

$$R_{ll'} = -\frac{i\hbar}{2} \int \left(u_l^* \frac{\partial u_{l'}}{\partial p_z} - u_{l'} \frac{\partial u_l^*}{\partial p_z} \right) d^3 \mathbf{r}. \quad (3)$$

Система (2) описывает динамику электронов в УНТ во внешнем электрическом поле и учитывает как внутри-, так и межзонные переходы. Релаксация может быть введена в рассмотрение феноменологически заменой $\omega_{vc} \rightarrow \omega_{vc} + i/\tau$. Вычисление матричных элементов $R_{ll'}$ (3) является стартовой процедурой анализа проводимости УНТ. Дальнейшее решение системы (2) устанавливает закон проводимости УНТ как в линейном (после линеаризации системы уравнений), так и в нелинейном режимах [64].

3. УНТ как нановолновод поверхностных волн

Проблема распространения поверхностных волн вдоль изолированной бесконечно длинной УНТ в свободном пространстве аналогична задаче о собственных волнах спиральных замедляющих систем СВЧ диапазона [15]. Используя условия излучения на бесконечности ($\rho \rightarrow \infty$) можно выразить скалярный потенциал Герца Π_e через модифицированные функции Бесселя первого и второго рода $I_\ell(x)$ и $K_\ell(x)$:

$$\Pi_e \cong e^{ihz} e^{i\ell\phi} \begin{cases} I_\ell(\kappa\rho) K_\ell(\kappa R_{cn}), & \rho < R_{cn}, \\ I_\ell(\kappa R_{cn}) K_\ell(\kappa\rho), & \rho > R_{cn}, \end{cases} \quad (4)$$

где $\kappa = \sqrt{h^2 - k^2}$. Данное представление непосредственно удовлетворяет первому условию ЭГУ (1). Тогда дисперсионное соотношение для поверхностных волн в УНТ записывается в виде

$$\left(\frac{\kappa}{k}\right)^2 I_1(\kappa R_{\text{сн}}) K_1(\kappa R_{\text{сн}}) = \frac{ic}{4\pi k R_{\text{сн}} \sigma_{zz}} \left[1 - \gamma(\omega)(k^2 + \kappa^2)\right]. \quad (5)$$

На рисунке 2 представлены результаты расчетов по формуле (5) комплексного коэффициента замедления $\beta = k/h$ азимутально-симметричной ($l=0$) поверхностной волны в металлической (9,0) УНТ. Обсуждение азимутально-несимметричных мод дано в [26]. В низкочастотном режиме, где $kb < 10^{-7}$, имеет место сильное затухание ($\text{Im}(\beta) \sim \text{Re}(\beta)$). Таким образом, в этом режиме УНТ как волноводы поверхностных волн не представляют интереса. Существенно, что при этом для типичных длин $l_{\text{сн}} \sim 1 \mu\text{м}$ выполняется условие $l_{\text{сн}} \text{Re}(h) \ll 1$. Это означает, что УНТ проводят низкочастотные электрические сигналы подобно электрическим цепям, без сопутствующих волновых эффектов. В инфракрасной области ($10^{-5} < kb < 10^{-3}$) ситуация кардинально изменяется – УНТ допускает распространение слабозатухающих волн с практически частотно-независимыми коэффициентом замедления и фазовой скоростью $v_{\text{ph}} = \text{Re}(\omega/h)$. Таким образом, анализ распространения поверхностных волн в УНТ приводит к заключениям, определяющим потенциал УНТ как элементов высокочастотных цепей: в ИК диапазоне УНТ (а) **является сильно замедляющей системой** с коэффициентом замедления $\beta \cong 0.02$ и (б) **может служить бездисперсионным волноводом поверхностных волн**.

Практическое применение УНТ в качестве волноведущих структур и элементов антенн требует создания в них различных типов нерегулярностей, подобных тем, что формируются в обычных макроскопических волноводах.

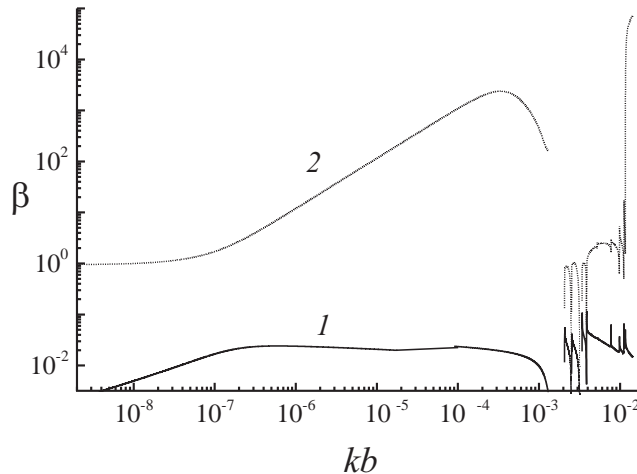


Рис. 2. Коэффициент замедления $\beta = k/h$ для азимутально-симметричной ($l=0$) поверхностной волны в металлической (9,0) УНТ: 1 – $\text{Re}(\beta)$; 2 – $\text{Re}(\beta)/\text{Im}(\beta)$; $\tau = 3 \times 10^{-12}$ с [26]

В УНТ экспериментально наблюдается целый ряд таких нерегулярностей – допирование кристаллической решетки примесными атомами, соединение УНТ различных радиусов, Т- и Y-образные ветвления, скрещивания УНТ. Введение нерегулярностей в макроскопические волноводы не изменяет их электронных свойств и проявляется в рассеянии электромагнитных волн и трансформации спектра собственных мод. В отличие от этого, нерегулярности в нановолноводе могут кардинальным образом изменить характер его проводимости.

4. УНТ как наноантенна в терагерцовом диапазоне

Прикладной интерес к электродинамике УНТ обусловлен, в частности, перспективой реализации наноразмерных антенн [29, 67–73]. Действительно, при реальных микронных длинах УНТ, для них выполняются условия $kR_{\text{cn}} \ll 1$, $kl_{\text{cn}} \sim 1$, которые являются типичными для проволочных антенн СВЧ диапазона [15] и которые определяют возможность реализации наноантенны на базе УНТ. При этом были отмечены широкие возможности управления с ее помощью различными характеристиками электромагнитного излучения (поляризация, диаграмма направленности, эффективность излучения) и потенциальная возможность создания эффективного электрического контакта между наноразмерными устройствами и макромиром. Другое применение – это беспроводное соединение с нанодатчиками. Реализация таких антенн на практике требует создания адекватной теории. При этом одним из ключевых аспектов является учет конечной длины нанотрубки. Эта проблема является ключевой и для построения корректной теории электромагнитного отклика композитов на основе УНТ.

Для УНТ характерна сильная геометрическая анизотропия (длина значительно превышает радиус), а радиус значительно меньше длины волны в рабочем диапазоне частот. В этом смысле макроскопическим аналогом УН является вибраторная антенна для радиоволн. Адекватная теория одиночных вибраторов [74] построена на основе метода интегральных уравнений. Можно ожидать, что этот метод окажется эффективным и для УНТ. Однако прямой перенос интегральных уравнений антенных вибраторов на случай УНТ не является возможным. Антенные вибраторы в диапазоне радиоволн с высокой степенью точности рассматриваются как идеальные проводники [74]. Граничные условия электромагнитного поля в УНТ имеют принципиально иной характер: они представляют собой двухсторонние граничные условия импедансного типа (1). Это приводит к тому, что интегральные уравнения вибраторов требуют кардинальной модификации при переходе к УНТ.

Не останавливаясь на математических деталях анализа [34], приведем базовый результат – интегро-дифференциальное уравнение для нахождения тока $j(z)$ в вибраторе любой проводимости σ_{zz}

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(k^2 - \frac{i\omega}{2\pi\sigma_{zz}R_{\text{cn}}X} \right) \right\} j(z) = -\frac{i\omega}{2\pi R_{\text{cn}}X} E_{0z}(z) + \frac{1}{X} \left[\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right] V(z, j(z)), \quad (6)$$

в котором

$$V(z, j(z)) = \int_{-L/2}^{L/2} \ln(2p|z-z'|) \left[\frac{z-z'}{|z-z'|} \frac{\partial j(z')}{\partial z'} - ikj(z') \right] e^{ik|z-z'|} dz'$$

и $X = -2K_0(\sqrt{\kappa^2 - k^2} R_{cn}) I_0(\sqrt{\kappa^2 - k^2} R_{cn})$. Уравнение получено путем решения краевой задачи электродинамики на основе граничных условий (1). Первый член в правой части (6) описывает действие сторонней ЭДС, а второй член – влияние распределения тока по трубке (собственная ЭДС) и включает в себя члены, определяемые запаздыванием взаимодействия. При $\sigma_{zz} \rightarrow \infty$ (6) сводится к уравнению Леонтовича – Левина для идеально проводящего вибратора [74].

На рисунке 3 показано, что изменение диаграммы направленности УНТ с изменением ее длины и угла падения. Как видно, учет конечной длины является принципиальным для определения излучающих свойств УНТ. Из анализа (6) также следует, что поляризуемость УНТ имеет резонансный характер в низкочастотном диапазоне (рис. 4). Природа резонансов связана с конечностью длины УНТ. В силу существенного, $\beta \cong 0.02$, замедления электромагнитных волн в УНТ, геометрические резонансы смещаются в ИК и даже СВЧ (для полупроводниковых УНТ) диапазоны. Например, поляризация полупроводниковой УНТ (23,0) длиной 1 мкм имеет резонансный отклик на частоте 180 ГГц. Поэтому полупроводниковые УНТ будут вносить заметный вклад в поляризуемость композита на их основе в области низких частот.

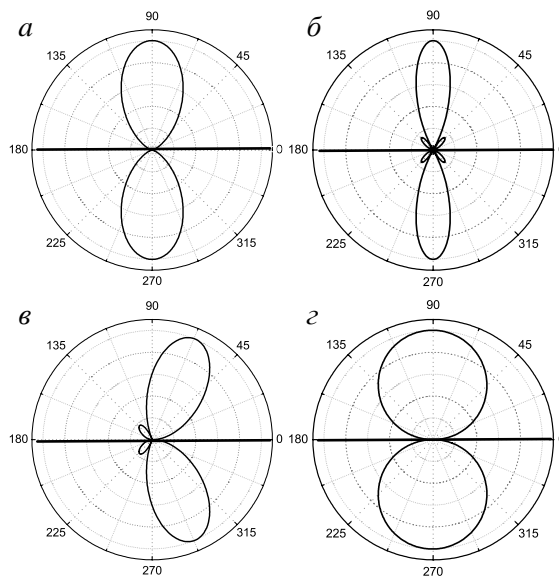


Рис. 3. Диаграмма направленности для УНТ (9,0) при разной длине трубки: $l_{cn} = \lambda$ (а, в), $l_{cn} = 2\lambda$ (б) и разных углах падения света: 90° (а, б, г), 60° (в) [34]. Диаграмма (д) соответствует длинноволновому пределу $L \ll \lambda$, $\lambda = 432.4$ нм. Горизонтальная линия указывает ориентацию УНТ

Таким образом, нами впервые описаны антенные свойства углеродной трубки в оптической и терагерцовой областях частот. Теория охватывает различные типы некиральных УНТ и различные диапазоны частот: низкие частоты, область квантовых переходов, окрестность плазменного резонанса. Теория основывается на квантовой микроскопической модели проводимости УНТ и строгом решении граничной задачи электродинамики для УН конечной длины. Кроме того, проведенные теоретические расчеты позволили дать удовлетворительное объяснение экспериментально зарегистрированному несоответствию поведения частотной дисперсии проводимости композитов из УНТ предсказаниям теории Друде для объемной среды [75]. Установлено, что экспериментально зарегистрированный резонанс поглощения в дальнем ИК диапазоне [76–77] может быть объяснен резонансом поверхностных волн на конечной длине нанотрубки.

При рассмотрении УНТ как передающей антенны возникает вопрос о физической реализации источника ЭДС (как указано в [73], в настоящее время этот вопрос не вполне ясен). Один из возможных путей аналогичен обычным радиочастотным антеннам, но вместо макроскопических металлических проводов могут быть использованы полупроводниковые нанопровода (см. также [67]). Другой подход: в качестве источника возбуждения используется фотолюминесценция квантового излучателя, размещенного внутри УНТ. В качестве последнего могут фигурировать макромолекулы, полупроводниковые квантовые точки, металлофуллерены (см. разд. 8).

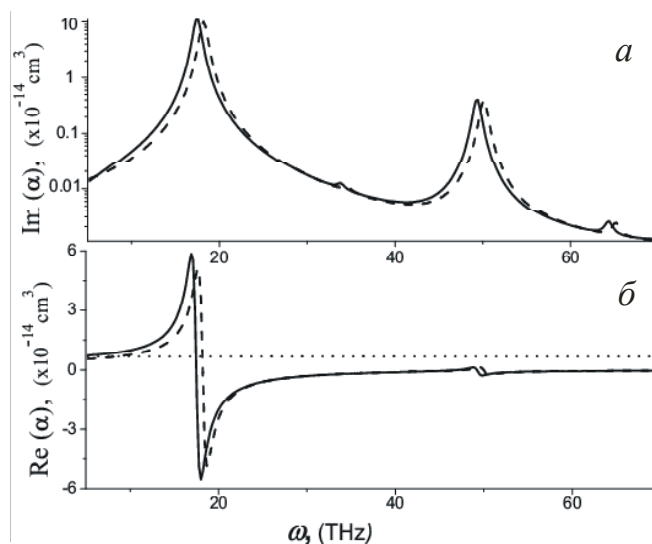


Рис. 4. Частотные зависимости мнимой (а) и действительной (б) части диэлектрической восприимчивости нанотрубки (9,0) [34]. Сплошная и пунктирная кривые представляют точное численное и приближенное решения соответственно. Кривая из точек рассчитана для идеально проводящей трубки

Одной из важнейших тенденций развития электроники является интеграция, приводящая к увеличению пространственной плотности электронных компонентов в системах передачи и обработки информации. Это порождает про-

блему электромагнитной совместимости, заключающейся в установлении паразитных связей электронных компонентов посредством их ближних и промежуточных электромагнитных полей. Современная наноэлектроника характеризуется максимально высокой степенью интеграции. Это дает основание предположить, что проблема электромагнитной совместимости будет проявляться в ней особенно остро. В этой связи становится актуальным исследование структуры электромагнитного поля в ближней и промежуточной зонах антенн на основе углеродной нанотрубки, что позволит в дальнейшем рассмотреть проблему их электромагнитной совместимости и проблему взаимодействия трубок в композитном материале.

Решение уравнения (6) позволило определить токи в УНТ и затем на частотах геометрических (антенных) резонансах выяснить характер распределения поля излучения вблизи нанотрубки [35]. При этом установлено, что дальняя зона УНТ формируется на расстоянии $r/L \geq 1/s\beta$ (s – номер антенного резонанса) (рис. 5). Данный результат имеет принципиальное физическое значение: размеры ближней и промежуточной зон, нормализованные к характерному размеру объекта (применительно к УНТ – длине L), возрастают с увеличением замедления рабочей волны. Наноструктурные элементы характеризуются сильным замедлением, что приводит к значительной величине эффекта. Так, используя оценку $\beta \approx 0.02$ для металлической УНТ на частоте первого геометрического резонанса, условия для границ ближней и дальней зоны будут соответственно $r/L \ll 15$ и $r/L \geq 50$, в то время как для границы дальней зоны макроскопического проводящего вибратора $r/L \geq 1$.

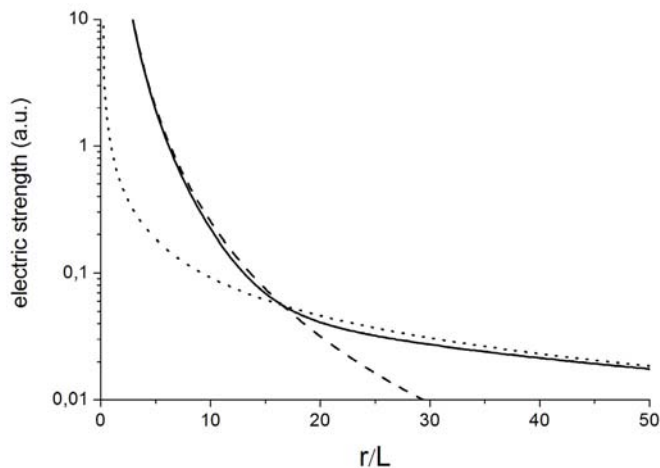


Рис. 5. Изменение напряженности поля вблизи УНТ при удалении от геометрического центра углеродной нанотрубки в перпендикулярном от нее направлении (сплошная кривая). Расстояние до нанотрубки по оси X нормировано на длину УНТ. Поле ближней зоны – пунктирная кривая, поле дальней зоны – кривая из точек

Помимо одиночных нанотрубок впервые теоретически исследованы электромагнитные свойства УНТ пучков из металлических углеродных нанотрубок конечных размеров. При этом установлено, что в УНТ пучке могут распростра-

няться симметричные и несимметричные моды с различным характером поперечного распределения поля внутри пучка. С ростом поперечных размеров УНТ пучков замедление поверхностных мод уменьшается и стремится к единице для пучков больших радиусов ($R > 25$ нм), что характерно для макроскопических металлических проводов. Данный результат качественно согласуется с результатами работы [70], где в видимой области экспериментально зарегистрированы антенные резонансы многослойных углеродных нанотрубок больших поперечных размеров и указано на малое замедление собственных мод исследуемых нанотрубок. Увеличение коэффициента замедления собственных мод УНТ пучка с ростом числа трубок в нем приводит к смещению геометрических резонансов поляризуемости УНТ пучков с терагерцовой области в ближний ИК диапазон (рис. 6). В отличие от одиночной нанотрубки (сравните рис. 4 и 6) в частотной зависимости диэлектрической восприимчивости УНТ пучков в длинноволновом режиме имеют место несколько геометрических резонансов, соответствующих различным собственным модам УНТ пучка. В связи с малым замедлением собственных мод УНТ пучков их антенная эффективность близка к единице и на несколько порядков превышает таковую для одиночных УНТ. Таким образом, вариация числа трубок в пучке является еще одной степенью свободы при создании антенн и композитных материалов на основе углеродных нанотрубок с новыми функциональными возможностями в широком интервале частот от терагерцового до ближнего инфракрасного диапазонов.

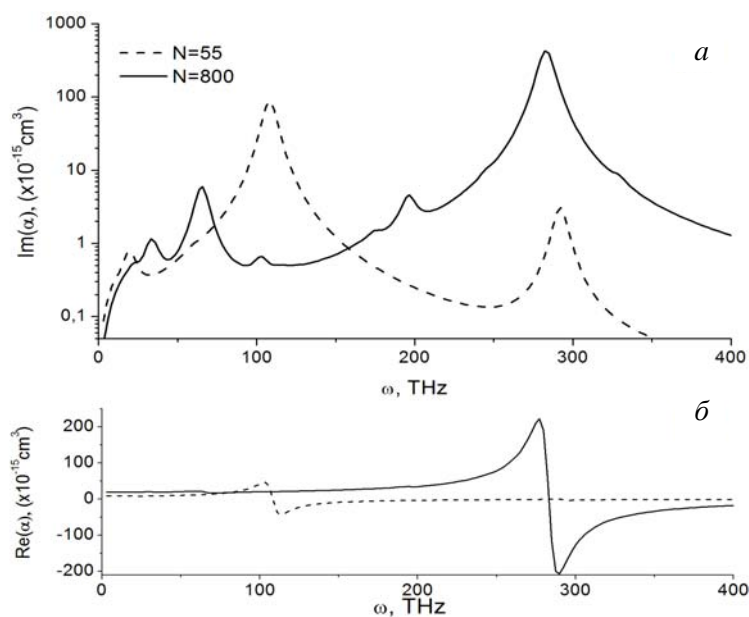


Рис. 6. Частотные зависимости мнимой (а) и действительной (б) части диэлектрической восприимчивости пучка из 55 (пунктирная кривая) и 800 (сплошная кривая) нанотрубок (21,0)

5. Тепловое излучение из углеродных нанотрубок

В данном разделе исследуется тепловое излучение из однослойных металлических некиральных УНТ. При анализе использовалась флуктуационно-диссипативная теорема. Уравнение Дайсона для запаздывающего фотонного пропагатора было модифицировано для случая однослойных углеродных нанотрубок, для того чтобы учесть эффект конечной длины углеродной нанотрубки, а также реальную динамику π -электронов в ней. Был разработан численный метод для решения модифицированного уравнения Дайсона. Этот метод основывается на квадратурной аппроксимации интегрального оператора с последующим переходом к системе матричных уравнений конечного порядка.

Частотный спектр теплового излучения в ближней, промежуточной и дальней зонах был исследован. Было показано, что спектр теплового излучения углеродных нанотрубок существенным образом отличается от спектра излучения абсолютно черного тела. В частности, спектр теплового излучения проводящих углеродных нанотрубок типа «zigzag» представляет собой ряд дискретных линий на фоне непрерывного шума. Два различных подсемейства спектральных линий можно выделить в данном спектре: одно из этих подсемейств исчезает в дальней зоне, в то время как второе остается (рис. 7).

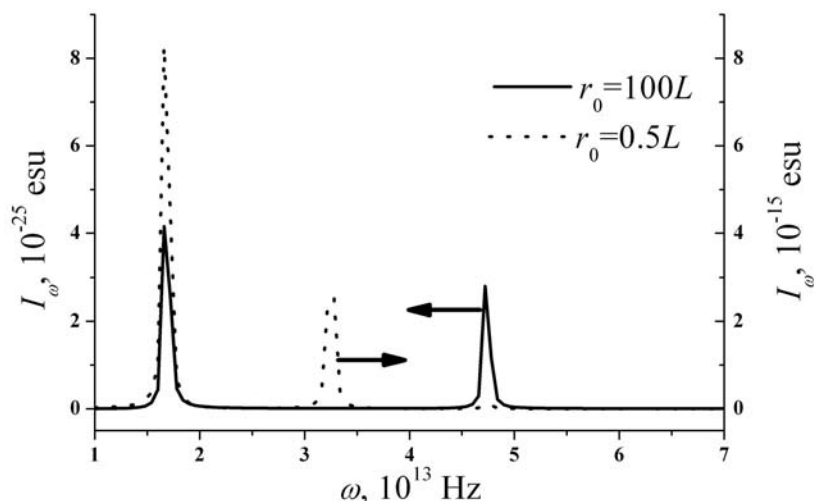


Рис. 7. Спектральные характеристики интенсивности теплового излучения I_ω однослойной (15,0) «zigzag» углеродной нанотрубки. В данном случае r_0 – расстояние между геометрическим центром углеродной нанотрубки и точкой наблюдения, $L = 10^{-4}$ см – длина углеродной нанотрубки. Предполагается, что угол между осью углеродной нанотрубки и направлением из геометрического центра углеродной нанотрубки в точку наблюдения равен $\pi/2$

С физической точки зрения данные результаты могут быть проинтерпретированы как радикальная трансформация локальной вакуумной плотности состояний под влиянием углеродной нанотрубки. Данный факт, в частности,

обусловлен способностью металлических углеродных нанотрубок к поддержанию распространения сильно замедленных слабо затухающих поверхностных плазмонов в ТГц и ИК спектральных диапазонах. Дискретная спектральная структура обусловлена наличием геометрических резонансов поверхностных плазмонов. Спектральные линии, остающиеся в дальней зоне соответствуют дипольным резонансам в то время как исчезающие – квадрупольным.

Полученные результаты позволяют рассматривать УНТ как перспективный элемент для создания когерентных источников направленного теплового излучения (тепловые антенны на основе фотонных кристаллов были предложены ранее [78]).

6. Композиты на основе различных форм нанougлерода

Развитые подходы к описанию электромагнитного отклика композитных материалов на основе УНТ могут быть распространены на нанокompозиты с другими формами наночастиц углерода. В частности, в рамках широкого научного сотрудничества с учеными СО РАН, США и Бельгии начаты экспериментальные и теоретические исследования композитов с луковичными формами углерода [79] в качестве наполнителя. Эти исследования позволили нам предложить ЛФУ в качестве базовой компоненты для создания широкополосных радиопоглощающих материалов [66]. ЛФУ обладают разнообразными электрическими и оптическими свойствами, которые управляются изменением размеров агрегатов и условиями их синтезирования [80]. Мы предполагаем, что такие материалы позволят существенным образом снизить толщину покрытий при сохранении их высокой эффективности.

Таблица 1

Характеристики материалов и экранирующие электромагнитные свойства различных типов ЛФУ (OLC –1,2,3,4) в сравнении с образцами многослойных УНТ (MWNT), волокнистого углерода (CFC–1,2), наноалмазов и сажи [66].

Образцы	Отжиг ДНА, температура/время	Содержание магнитных металлических примесей, % от веса	Плотность порошка г/см ³	Максимальные потери на пропускание		
				26–37 ГГц	8–12 ГГц	2–5 ГГц
OLC-1	1800K/3ч	0.1/Fe	0.45	-50.0	-11	-27.4
OLC -2	2140K/3ч	0.1/Fe	0.36	-46.0	-8.8	Смесь ЛФУ (15% от веса) и ДНА
OLC -3	1900K/3ч	0.15/Fe, 0.015/Cr	0.20	-21.0	-8.0	
OLC -4	1800K/3ч	0.15/Fe, 0.15/Cr	0.25	-30.0	-6.0	
MWNT	–	0.9/Fe, 0.4/Co	0.10	-42.0	–	
CFC-1	–	0.9/Ni	0.82	-42.0	-9.0	-23.0
CFC-2	–	0.3/Ni	0.55	54.0	-5.9	-24.0
ДНА	–	0.3/Cr, 0.1 Fe	0.37	–	–	-5.6
Сажа	–	1.3/Fe	0.42	–	–	-10.1

Экспериментальные исследования были выполнены для двух наборов образцов: а) ЛФУ порошки, полученные из детонационных наноалмазов (ДНА) различного происхождения; б) полимерные пленки (ПММА) с ЛФУ в качестве наполнителя. Образцы были изготовлены в Институте катализа СО РАН и в Международном технологическом центре (Рэлей, США). Наноалмазы синтезируются при высоких температурах и давлениях, вызванных детонацией углерода от взрывной ударной волны в отсутствие кислорода. Средние размеры частиц 4 – 5 нм. Частицы сажи, не подвергшиеся детонации, изолируются посредством окислительного удаления горячей смесью концентрированных кислот H_2SO_4 и HCl [79–80] или обработкой озоном. Отжиг ДНА порошка в вакууме при высокой температуре приводит к возникновению углеродных наночастиц со структурой ЛФУ [79–80]. Характеристики исследованных порошков приведены в табл. 1. Более подробная информация может быть найдена в [66].

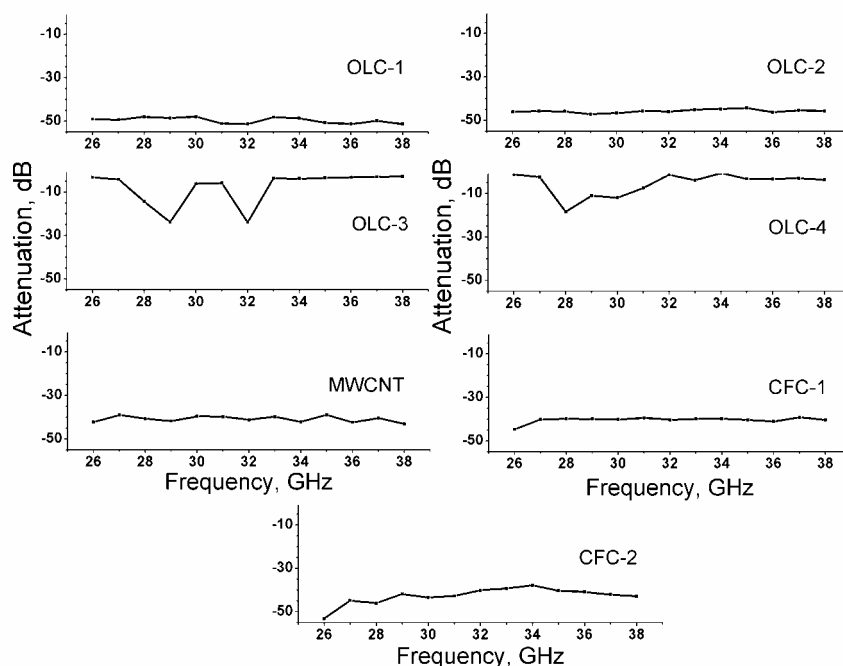


Рис. 8. Ослабление в порошках ЛФУ (образцы OLC), многостенных углеродных нанотрубок (MWCNT) МУНТ и каталитических волокон углерода (образцы CFC) в Ка-диапазоне [66]

Измерение поглощения электромагнитного излучения порошками ЛФУ и композитными пленками выполнялись в диапазоне 2–37 ГГц. Далее мы проведем обсуждения результатов для Ка-диапазона (26–37 ГГц) и дадим только краткие комментарии относительно S- (2–5 ГГц) и X- (8–12 ГГц) диапазонов. Для образцов с аббревиатурами OLC–1, OLC–2, MWNT, CFC–1 и CFC–2 (см. табл. 1), рис. 8 демонстрирует однородное поглощение на протяжении всего диапазона, тогда как поглощение в образцах OLC–3 и OLC–4 существенно слабее и неоднородно. Образцы OLC–1 и OLC–2 имеют практически идентичные хими-

ческие составы и отличаются лишь технологическими особенностями получения. Порошки OLC-3 и OLC-4 отличаются присутствием Cr и меньшей плотностью. Уместно предположить, что примесь Cr может влиять на поглощение. Образцы CFC-1 и CFC-2 содержат в различных пропорциях (см. табл. 1) вместо Fe и Cr. Несмотря на это, они демонстрируют поглощение, очень схожее с таковым для образцов OLC-1 и OLC-2. В целом рис. 8 и табл. 1 показывают сильное влияние металлических примесей на поглощение. Влияние технологических особенностей получения образцов требует дополнительных исследований. Из рис. 8 можно заключить, что наилучшее ослабление (40–50 дБ) в Ка-диапазоне демонстрируют порошки ЛФУ с примесями Fe. Такие порошки можно использовать при создании экранирующих покрытий. Отметим, что в настоящее время ослабление электромагнитного излучения поглощающими материалами, такими как сажа и карбонильное железо, смешанные в различных пропорциях в эпоксидной смоле, не превышает 15–20 дБ в Ка-диапазоне и быстро падает с ростом частоты. Таким образом, *поглощающие свойства порошков УЛФ*, исследованные в работе [66], *значительно превышают поглощение в традиционных материалах.*

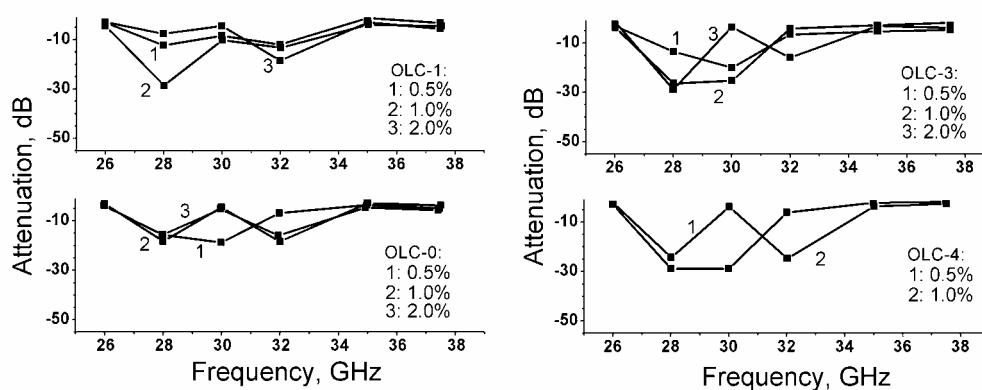


Рис. 9. Ослабление электромагнитного излучения в Ка-диапазоне в полимерных пленках с различным содержанием ЛФУ в качестве наполнителя [66]

На рисунке 9 представлены измерения электромагнитного ослабления в полимерных пленках с различным процентным содержанием УЛФ. В отличие от порошков ослабление не превышает 30 дБ и является сильно неоднородным. Указанная неоднородность является предметом текущих исследований. Все измеренные образцы демонстрируют значительное ослабление в диапазоне 28–32 ГГц, с быстрым уменьшением до 3–4 дБ при удалении от него. Изменение содержания металлических примесей не оказывает отчетливого воздействия на ослабление. Очевидно, что создание поглощающих электромагнитное излучение материалов на основе PMMA пленок с УЛФ в качестве наполнителя требует больших затрат, связанных с решением вопросов с содержанием, примесями и технологией синтеза.

7. Возможность создания источника света на основе УНТ

В макроскопической электронике известны генераторы электромагнитного излучения, работающие на основе излучательной неустойчивости направленных электронных потоков, такие как лампа бегущей волны (ЛБВ), лампа обратной волны (ЛОВ), лазер на свободных электронах (ЛСЭ). Для функционирования таких приборов необходимо поддержание высокого вакуума для проводки электронных пучков. В противном случае рассеяние электронов нарушает когерентность излучения и приводит к деградации элементов системы. Для создания электронного пучка в таких приборах используются, например, вакуумные диоды. Плотность тока диодов ограничена влиянием пространственного заряда и относительно невысока ($<10\text{--}100\text{ А/см}^2$). Поэтому для генерации стимулированного излучения требуется довольно протяженная область взаимодействия (от 10 см до нескольких метров в зависимости от параметров электронного пучка и генерируемой частоты). Одним из фундаментальных свойств УНТ является установленная экспериментально [81] баллистическая электронная проводимость со свободным пробегом, составляющим несколько десятков микрон. Большой пробег электронов в нанотрубке наряду с высокой плотностью тока (согласно некоторым экспериментальным работам, большей 10^{10} А/см^2) позволяет реализовать источник стимулированного излучения, основанный на модуляции электронного потока в поле генерируемой им волны. Генерация при таких плотностях может развиваться при длинах в несколько микрон, соответствующих длинам производимых в настоящий момент нанотрубок.

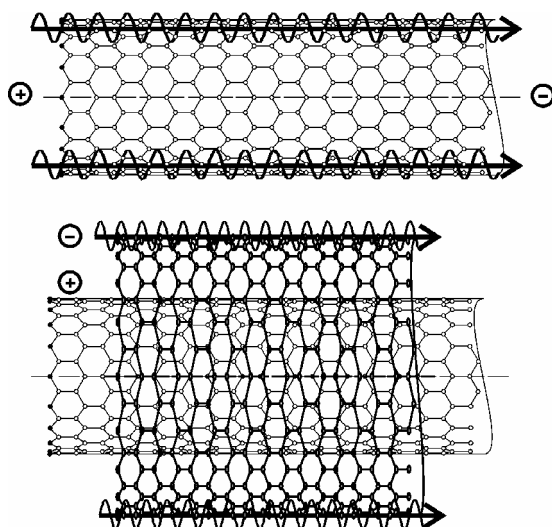


Рис. 10. Направленный электронный поток в УНТ [38]

Еще одним базовым принципом работы таких приборов является синхронизация электронного пучка и электромагнитной волны для эффективной передачи кинетической энергии пучка волне. В приборах типа ЛОВ и ЛБВ это достигается, например, путем замедления волны в гофрированной электродинамической структуре. Существенное уменьшение фазовой скорости поверхностной волны в

УНТ (см. разд. 3 и работы [26, 31, 64]) по сравнению со скоростью света обеспечивает синхронное движение нерелятивистского пучка электронов и индуцированной электромагнитной волны.

Направленный поток электронов может быть получен путем приложения напряжения к определенной части одностенной или к разным стенкам двустенной УНТ (рис. 10). Если созданы определенные резонансные условия, связанные с одним из механизмов излучения (черенковский механизм, механизм излучения осциллятора и др.), – пучок электронов может излучать фотоны. Генерируемое излучение оказывает обратное влияние на электроны и приводит к модуляции электронного потока и усилению излучения. Если при длине, меньшей длины свободного пробега электрона, наработка излучения превышает его потери, то развивается лазерная генерация [82]. На линейной стадии развития генерации излучательная неустойчивость электронного потока описывается дисперсионным уравнением:

$$k^2 - k_m^2 = -\frac{\omega_L^2}{4m_e c^2} \sum |B_{nl}^{(m)}|^2 \left\{ \frac{1}{-\hbar\omega + \varepsilon_n(p_n) - \varepsilon_l(p_n - k)} + \frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_n(p_n) - \varepsilon_l(p_n + k)} \right\}. \quad (7)$$

Мы использовали следующие определения для матричных элементов:

$$B_{nl} = \sum_{\tau\tau'} b_{l\tau} b_{n\tau'}^* \langle u_{n\tau} | (\hat{p}_n + \tau) A(k, \omega) + A(k, \omega) (\hat{p}_n + \tau) | u_{l\tau'} \rangle,$$

где $\varepsilon(p_n)$ – закон дисперсии, k – электромагнитный волновой вектор, k_m – собственные значения, соответствующие физической системе без электронного потока, ω – частота индуцированной электромагнитной волны, \hat{p}_n – оператор квазиимпульса, $b_{l\tau}$ и $u_{l\tau}(r_\perp)$ постоянные коэффициенты и функции поперечной координаты разложения волновой функции электрона по собственным блоховским функциям, A – потенциал электромагнитного поля, τ – постоянная обратной решетки, ω_L – частота Лангмюра. Первый член дисперсионного уравнения (7) соответствует излучению, второй – поглощению фотона. В случае малости знаменателей этих членов взаимодействие электронного потока с электромагнитной волной очень интенсивное.

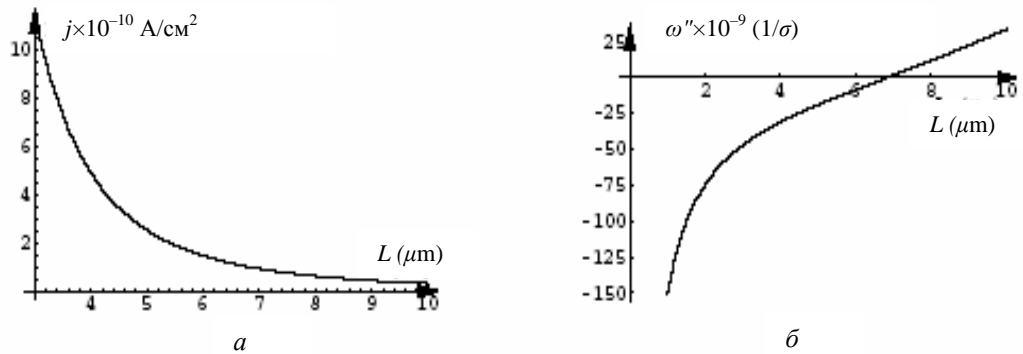


Рис. 11. Зависимость порогового тока (а) и инкремента неустойчивости (б) от длины УНТ [36]

Исследование дисперсионного уравнения позволяет определить области устойчивости и неустойчивости системы, вычислить время развития излучательной неустойчивости. Для работы в режиме генератора необходима положительная обратная связь, которая обеспечивает возврат части усиленной мощности. Один из естественных механизмов обратной связи – отражение излучения на границах. На рис. 11 приведена зависимость плотности стартового тока и инкремента неустойчивости от длины нанотрубки:

$$\frac{b_{nn}^{(m)}}{v_n^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial p_n^2} kL^3 f(x) = 1 - |\alpha| + L \operatorname{Im}(k_m), \quad \omega_m'' = \left(\frac{\partial k_m}{\partial \omega} \right)^{-1} \left(\frac{b_{nn}^{(m)}}{v_n^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial p_n^2} L^2 f(x) - \frac{1 - |\alpha|}{L} - \operatorname{Im}(k_m) \right). \quad (8)$$

Здесь v_n – групповая скорость

$$x = (\omega - k_m v_n) L / (2v_n) \quad \text{и} \quad f(x) = (x \cos x - \sin x) / x^3$$

Расчет проведен для длины волны излучения 1 мкм. Коэффициент α выбран ~ 0.99 . Из графиков видно, что при данных параметрах генерация начинает развиваться при длине больше 6 мкм, что вполне соответствует современному технологическому уровню. Характерное время развития генерации при длине нанотрубки 10 мкм составляет 0.4 нс.

Таким образом, нами *впервые предложен* [33, 36, 38] *новый тип мономолекулярного источника когерентного излучения в ИК и терагерцовом диапазоне длин волн на основе черенковского механизма развития неустойчивости в УНТ*. Подчеркнем, что предложенная нами идея является альтернативной по отношению к существующим схемам создания источников света на основе УНТ [83–85].

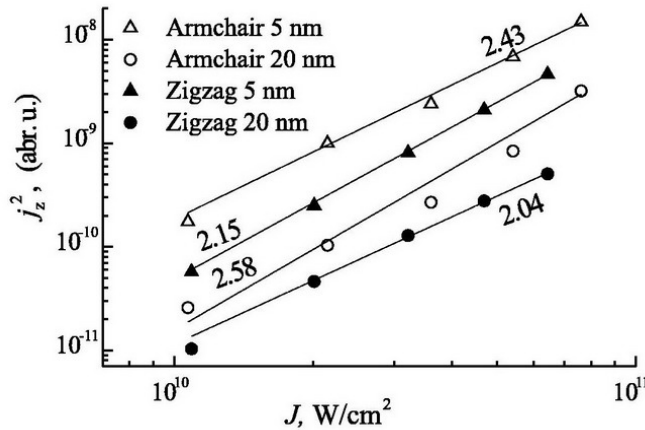


Рис. 12. Аппроксимация для параметра p в уравнении (9) [43]

8. Оптическая нелинейность УНТ

Ряд недавних теоретических и экспериментальных исследований [41–45, 86, 87] показал, что УНТ являются сильно нелинейными оптическими средами со значительным потенциалом прикладного использования в наноразмерных устройствах контроля и управления оптическим излучением. Для иллюстрации

этого утверждения рассмотрим процесс генерации третьей гармоники в УНТ, облучаемой интенсивным электромагнитным импульсом, линейно поляризованным вдоль оси УНТ и имеющим гауссову форму. Для определения плотности аксиального тока, индуцированного в УНТ, выполнено численное решение квантовых кинетических уравнений (2) [45].

Генерация третьей гармоники при нерезонансном возбуждении в кристаллах или газах в общем случае может быть описана с помощью поляризуемости третьего порядка, даже для достаточно больших интенсивностей, при которых еще не происходит разрушения вещества под действием облучающего поля. Для малых интенсивностей амплитуда тока N -й гармоники пропорциональна N -й степени амплитуды облучающего поля. Естественно было бы ожидать подобного поведения третьей гармоники в УНТ. Однако даже для интенсивностей импульса накачки меньших, чем 10^{10} Вт/см², ожидаемый степенной закон нарушается:

$$|j(N\omega)| \sim E_0^p, \quad (9)$$

причем в общем случае $p \neq N$. Этот факт указывает на то, что происходит насыщение взаимодействия УНТ с интенсивными лазерными импульсами и, следовательно, степенное разложение перестает быть справедливым. Для более детального исследования данного эффекта и его сравнения с экспериментальными данными [43] была вычислена $|j_z|^2$ как функция интенсивности падающего ультракороткого импульса. Было обнаружено, что в узкой низкоинтенсивной зоне параметр p в уравнении (9) может быть аппроксимирован числом, лежащим в диапазоне от 2.04 до 2.58, для различных типов УНТ (рис. 12). Экспериментальные результаты для третьей гармоники [43] подтверждают данное заключение. При более высоких интенсивностях облучающего поля численное моделирование предсказывает еще более значительное отклонение от степенного закона $p = N$. Рис. 13 демонстрирует насыщение третьей гармоники индуцированного тока при увеличении амплитуды импульса накачки в широком диапазоне амплитудных параметров.

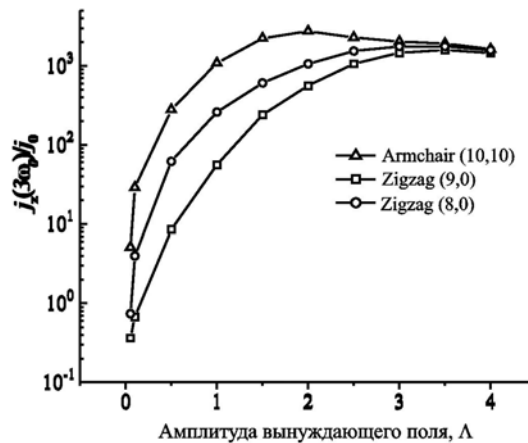


Рис. 13. Амплитуда тока третьей гармоники как функция интенсивности облучающего поля для различных типов УНТ [43]; $j_0 = e\gamma_0 / 2\pi^2 \hbar R_c$

В случае электромагнитных полей достаточно слабой интенсивности нелинейный отклик УНТ может быть описан кубической восприимчивостью. С этой целью квантовые кинетические уравнения (2) решаются аналитически методом последовательных приближений, что позволяет определить компоненту тензора кубической восприимчивости $\chi_{zzzz}^{(3)}(-3\omega; \omega, \omega, \omega)$. Результаты наших вычислений находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [87–88]. Сравнение представлено в табл. 2.

Таблица 2

Сравнение экспериментально измеренных значений кубической восприимчивости [87–88] с вычисленными теоретически [45].

$\hbar\omega$ (eV)	$\text{Im}[\chi^{(3)}], \text{esu}$ Эксперимент [87–88]	$\text{Im}[\chi^{(3)}], \text{esu}$ Теория
0.8	-1.9×10^{-8}	-3.7×10^{-8}
1.47	-10^{-9}	-6.5×10^{-9}

9. Излучение атома вблизи УНТ – механизм возбуждения нановолновода и наноантенны

Спонтанное излучение есть процесс взаимодействия возбужденного атома и вакуумных состояний электромагнитного поля. Эти состояния дифрагируют на диэлектрических телах подобно тому, как дифрагирует обычно классическое электромагнитное поле. Как результат, вероятность спонтанного распада оказывается зависящей от расположенных вблизи атома тел (эффект Парселла). Уникальной особенностью УНТ является существенное, на несколько порядков величины, увеличение скорости спонтанного распада атома вблизи УНТ по сравнению со скоростью распада в вакууме [60, 64], см. рис. 14. При расположении атома снаружи УНТ скорость спонтанного распада определяется формулой

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \xi(\omega_A) = 1 + \frac{3R_{\text{cn}}}{2\pi k_A^3} \text{Im} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \int \frac{\beta_A \kappa_A^4 I_p^2(\kappa_A R_{\text{cn}}) K_p^2(\kappa_A r_A)}{1 + \beta_A \kappa_A^2 R_{\text{cn}} I_p(\kappa_A R_{\text{cn}}) K_p(\kappa_A R_{\text{cn}})} dh, \quad (10)$$

где $\kappa_A = \sqrt{\hbar^2 - k_A^2}$, индекс A указывает, что помеченные величины вычисляются на частоте атомного перехода ω_A , $\Gamma_0 = 4k_A^3 |\mu_z|^2 / 3\hbar$ – скорость спонтанного распада в свободном пространстве. При расположении атома внутри УНТ ($r_A < R_{\text{cn}}$) приведенная формула модифицируется простой заменой $r_A \leftrightarrow R_{\text{cn}}$ в числителе подынтегрального выражения.

Атом, взаимодействующий со средой, может распадаться как посредством излучения реального фотона (радиационный распад), так и путем излучения виртуального фотона с последующим возбуждением в среде квази-частиц, включая поверхностные волны (нерадиационный распад). Оба канала распада представлены в зависимостях, изображенных на рис. 8. Однако нерадиационный канал дает доминирующий вклад в рост скорости распада. Радиационный канал оказывается существенным только вблизи частот межзонных переходов

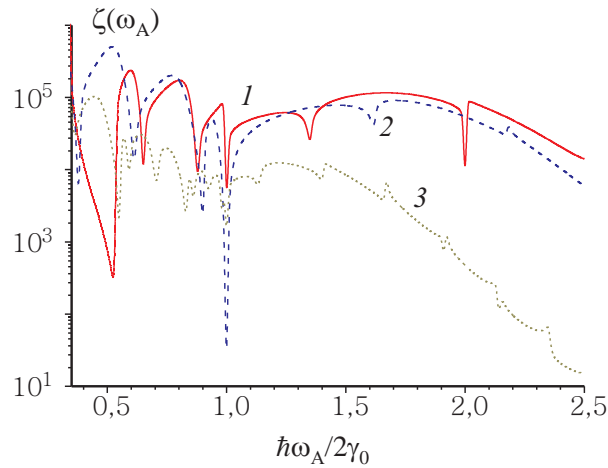


Рис. 14. Аномальное ускорение спонтанного распада атома, расположенного в центре различных УНТ типа zigzag: 1 – (9, 0), 2 – (10, 0), 3 – (23, 0), $\tau = 3 \times 10^{-12}$ с, $\gamma_0 = 2.7$ эВ [60]

(резонансные минимумы на рис. 14). Таким образом, *нерадиационный канал атомного распада вблизи УНТ может служить средством возбуждения поверхностных волн в УНТ, т. е. – средством возбуждения нановолновода и наноантенны*. Особенно интригующей данная идея выглядит применительно к упомянутым выше пиподам типа [(Gd@C₈₂)_n@SWNT] – одностенным УНТ, заполненным металлофулеренами. В таких системах атомы Gd находятся внутри УНТ на заданном одинаковом расстоянии от ее стенок и обеспечивают условия для возникновения эффекта Парсела.

10. Роль локальных полей в электродинамике КТ

Как уже указывалось ранее, эффект пространственного ограничения движения носителей заряда в квантовых точках приводит к дискретизации энергетического спектра локализованного в КТ экситона, что обеспечивает возможность создания инверсной населенности в КТ и, как следствие, их использование для разработки нового поколения полупроводниковых светоизлучающих приборов. Однако при этом остается в тени класс эффектов, связанных с дифракцией электромагнитных волн на КТ и приводящих к существенной модификации электромагнитного отклика КТ и их массивов. Действительно, резонансная природа экситона в КТ, феноменологически моделируемая в однорезонансном приближении лоренцевской диэлектрической проницаемостью

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_h + \frac{g_0}{\omega - \omega_0 + i\Gamma_{\text{hom}}} , \quad (11)$$

приводит к весьма заметному скачку диэлектрической функции на границах КТ при частотах, близких к частоте экситона ω_0 (рис. 15) и, следовательно, к дифракции электромагнитного поля на КТ. В формуле (11) Γ_{hom} – однородная ши-

рина линии экситона, $g_0 = 4\pi w |\mu_0|^2 / 3\hbar V_{QD}$, где μ_0 – дипольный момент объемного образца, V_{QD} – объем КТ, $w = \pm 1$ – населенность экситонного уровня. Знак + соответствует возбужденной КТ. Параметр ε_h предполагается действительным, частотно-независимым и равным диэлектрической проницаемости окружающей среды.

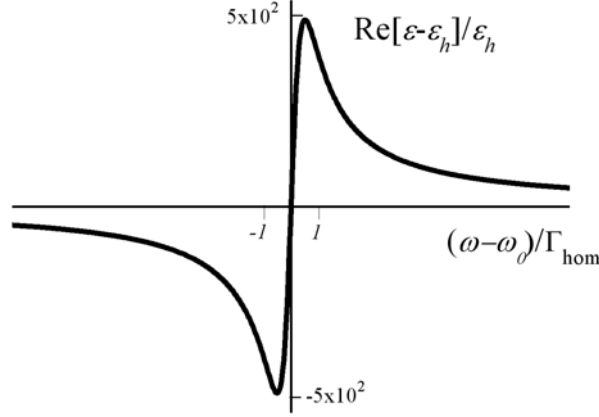


Рис. 15. Поведение действительной части диэлектрической проницаемости КТ, $\text{Re}[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_h] / \varepsilon_h$, для типичных значений параметров $\Gamma_{\text{hom}} = 6.7 \times 10^9 \text{ c}^{-1}$ и $g_0 = 8 \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$

Дифракция изменяет структуру поля как внутри, так и снаружи КТ и делает поле неоднородным на характерных размерах КТ (5–10 нм), значительно меньших, чем длина волны в окружающей среде. Электромагнитный отклик среды определяется ее поляризацией под действием внешнего поля. В объемных средах эта поляризация задается хорошо известным соотношением $\mathbf{P} = (\varepsilon(\omega) / \varepsilon_h - 1)\mathbf{E} / 4\pi$. Поскольку линейный размер КТ много меньше длины волны, можно ограничиться дипольным приближением $\mathbf{P} = \alpha(\omega)\mathbf{E} / 4\pi$, в котором $\alpha(\omega)$ – поляризуемость КТ. Для сферической КТ радиуса R_{QD} в первом приближении

$$\alpha(\omega) = \alpha_0(\omega) = R_{QD}^3 \frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_h}{\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_h}. \quad (12)$$

Более строгий анализ [49] дает

$$\alpha(\omega) \approx \frac{\alpha_0(\omega)}{1 - \frac{2}{3} i(k\sqrt{\varepsilon_h})^3 \alpha_0(\omega)} = \frac{R_{QD}^3}{3\varepsilon_h} \frac{g_0}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\tilde{\Gamma}}, \quad (13)$$

где $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 - g_0 / 3\varepsilon_h$, $\tilde{\Gamma} = \Gamma_{\text{hom}} - w\Gamma_0 / 3$ и $\Gamma_0 = 2(kR_{QD}\sqrt{\varepsilon_h})^3 g_0 / 3\varepsilon_h$ – скорость спонтанного распада КТ. Таким образом, **учет эффектов локального поля в КТ**

приводит к сдвигу экситонного резонанса и изменению скорости его релаксации. Для GaAs сферических КТ с радиусом $R_{QD} = 3$ нм и диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_h = 12$, при длине волны 1.3 мкм и ширине линии спонтанного распада $\Gamma_0 = 10^9 \text{ с}^{-1}$, получаем оценку частотного сдвига экситонного резонанса $\hbar\Delta\omega \sim 1$ мэВ. Важно отметить, что смещение экситонного резонанса зависит от состояния КТ: оно является голубым для невозбужденной КТ и красным в противоположном случае.

На первый взгляд, сдвиг экситонного резонанса в КТ является скорее перенормировкой энергетического уровня, чем наблюдаемым эффектом. Действительно, наблюдение такого сдвига невозможно в сферически симметричных КТ, находящихся в заданном состоянии. Ситуация меняется в случае точек более сложной формы, когда сдвиг резонансной частоты становится зависящим от поляризации падающей электромагнитной волны. В результате мы приходим к поляризационно-зависимому расщеплению линии усиления в КТ [45, 47].

Строгая квантово-электродинамическая теория взаимодействия КТ с электромагнитным полем с учетом локальных полей представлена в [61], где получена обусловленная локальным полем поправка к гамильтониану взаимодействия света с КТ:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{IL} + \frac{4\pi}{3} P(-\mu\hat{b}^+ + \mu^*\hat{b}). \quad (14)$$

В этом выражении первый член описывает движение носителей заряда в КТ, второй член является стандартным гамильтонианом Джейнса – Куммингса – описывающим взаимодействие системы с полем [23], а последний член является указанной поправкой; P – макроскопическая поляризация КТ, \hat{b}^+, \hat{b} – операторы рождения и уничтожения экситона в КТ. Анализ взаимодействия КТ с квантовым светом, описываемого гамильтонианом (14), приводит к следующим заключениям.

Резонансное взаимодействие неклассического света с КТ реализуется через два различных механизма. Первый из них, квазиклассический, связан с макроскопической поляризацией среды во внешнем электромагнитном поле. Этот механизм обеспечивает деполяризационный сдвиг резонансной частоты, голубой для КТ в основном состоянии и красный для возбужденной КТ. Сдвиг экситонного резонанса наблюдается для состояний света, порождающих макроскопическую поляризацию среды, т. е. для классического света и любых других состояний с неопределенным числом фотонов. Величина сдвига зависит только от геометрии КТ и ее электронных свойств. Второй механизм взаимодействия света с КТ имеет квантово-электродинамическое происхождение и не может быть проинтерпретирован в рамках классической электродинамики. Этот механизм оставляет резонансную частоту несмещенной и реализуется в полях с заданным числом фотонов, таких как спонтанное излучение и поглощение одиночного фотона. Таким образом, мы предсказываем тонкую структуру линии экситона в КТ, взаимодействующей с квантовым светом (рис. 16). Интенсивности компонент тонкой структуры определяются статистикой квантового света.

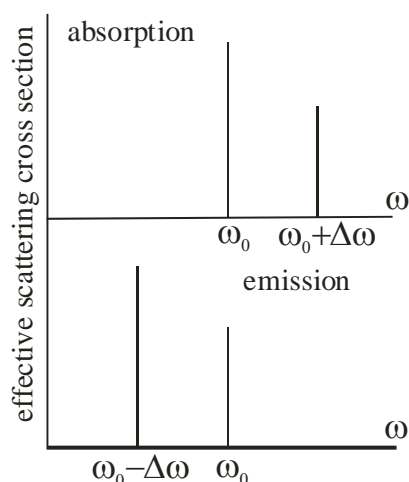


Рис. 16. Тонкая структура электромагнитного отклика КТ в квантовом свете [61]. Верхний рисунок соответствует случаю поглощения, а нижний – излучения света

В физике полупроводников сложилась устойчивая концепция экситонного газа как системы свободно движущихся в безграничной полупроводниковой среде квази-частиц – экситонов. В квантовой точке движение экситона ограничено ее размерами. В этих условиях представляется полезным введение концепции экситонного композита [52] – среды из КТ. В отличие от обычных композитов экситонный композит образован резонансными активными включениями (их свойства описываются соотношением (11)), что и определяет особенности его электромагнитного отклика. При этом большая часть стандартных процедур пространственного усреднения, принятых в теории эффективной среды, остаются применимыми к экситонным композитам. Такой подход позволяет развить электродинамику слоистых гетероструктур с квантовыми точками на основе хорошо известных методов описания квантовых ям [50, 55].

11. Дисперсия фотонных состояний в экситонных композитах – новый тип оптической дисперсии

Дисперсия света является одним из важнейших эффектов взаимодействия света с веществом. Классический пример – частотная дисперсия: показатель преломления света зависит от частоты. В процессе распространения изменяется частотный спектр света. Диэлектрическая проницаемость среды представляет собой интегральный оператор во времени. Другой пример – пространственная дисперсия [14]: показатель преломления среды зависит от направления распространения света. В процессе распространения трансформируется пространственная структура волнового пучка. Диэлектрическая проницаемость среды представляет собой интегральный оператор в пространстве. Как один из типов дисперсии может рассматриваться анизотропия: показатель преломления зависит от поляризации света. В процессе распространения трансформируется поля-

ризациянная структура света; диэлектрическая проницаемость представляет собой тензор.

В работе [65] предсказан новый тип оптической дисперсии, имеющий место в наноструктурных композитных средах (экситонных композитах) для квантового света. Показатель преломления такого света зависит от квантовой статистики света. При распространении света в данной среде квантовая статистика света трансформируется. Диэлектрическая проницаемость среды представляет собой оператор в пространстве фотонных состояний.

Экситонный композит [52] представляет собой упорядоченную систему квантовых точек с пространственно локализованными экситонами. Показатель преломления n произвольного поля в произвольной среде определяется через амплитуду рассеяния на нулевой угол $f(0)$ для одиночного рассеивателя как

$$n^2 = 1 + \frac{4\pi\rho}{k^2} f(0), \quad (15)$$

где $k = \omega/c$ – волновое число, ρ – пространственная плотность рассеивателей (в нашем случае КТ). Таким образом, ключевой проблемой в определении показателя преломления является анализ взаимодействия поля с одиночным рассеивателем (применительно к экситонному композиту с КТ). При этом определяющую роль играет эффект локального поля. Данная задача детально рассмотрена в ряде работ [61, 65]. Краткие комментарии по этому поводу даны в разд. 9.

Согласно [65], амплитуда рассеяния на нулевой угол является оператором в пространстве квантовых состояний света и имеет в одномоновом случае вид

$$\hat{f}(0) = 2\langle \hat{a} \rangle [f_1(0) - f_2(0)] \hat{\xi} + f_2(0), \quad (16)$$

где $f_{1,2}(0) = -k^2 |\mu_0|^2 / \hbar V_{\text{QD}} (\omega - \omega_{1,2} + i0)$ – парциальные амплитуды рассеяния, $\omega_1 = \omega_0 + \Delta\omega$ и $\omega_2 = \omega_0$ – частоты, соответствующие смещенной и несмещенной линии резонансного дуплета (см. рис. 16), $\langle a \rangle$ – среднее значение оператора уничтожения фотона, $\hat{\xi}$ – оператор, имеющий вид

$$\xi = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|2m+1\rangle \langle 2m|}{\sqrt{2m+1}}. \quad (17)$$

Показатель преломления определяется равенством (15), но с учетом (16), показатель преломления становится фотонным оператором.

Материальное уравнение экситонного композита для операторов электромагнитного поля имеет вид

$$\hat{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} (\hat{\varepsilon} \hat{\mathbf{E}} + \hat{\mathbf{E}} \hat{\varepsilon}), \quad (18)$$

где $\hat{\varepsilon} = \hat{n}^2$ – диэлектрическая проницаемость. Материальное уравнение (18) кардинально отличается от обычных случаев квантовой оптики сплошных сред [23]: оно не совпадает по виду с соответствующим уравнением для средних значений. Оператор $\hat{\varepsilon}$ не коммутирует с оператором напряженности и неэрмитов

даже при отсутствии диссипации (сказанное не является физическим противоречием, т. к. диэлектрическая проницаемость не является наблюдаемой величиной). Легко видеть, что все отмеченные свойства операторной диэлектрической проницаемости обусловлены тонкой структурой электродинамического отклика КТ: при $\Delta\omega \rightarrow 0$ $\hat{\epsilon}$ переходит в S -число, совпадающее с диэлектрической проницаемостью среды из независимых двухуровневых осцилляторов.

Простейшей задачей квантовой оптики экситонного композита является распространение плоских волн. Анализ их основывается на решении уравнений Максвелла для безграничной однородной среды с материальным уравнением (18) [65]. Одномодовое поле имеет вид обобщенной плоской волны

$$\hat{\mathbf{E}} = i\sqrt{\frac{\hbar k}{A}} \mathbf{e} \left[\frac{e^{ikn_1 z}}{\sqrt{n_1}} \langle \hat{a} \rangle + \frac{e^{ikn_2 z}}{\sqrt{n_2}} (\hat{a} - \langle \hat{a} \rangle) \right], \quad (19)$$

где \mathbf{e} – единичный вектор поляризации, $n_{1,2}^2 = 1 + 4\pi\rho f_{1,2}(0)/2$ (и аналогичное выражение для \mathbf{H}). Первое слагаемое соответствует когерентной части поля, второе – некогерентной. Их показатели преломления $n_{1,2}$ различны, что и определяет трансформацию квантовой статистики поля.

Представленный эффект может наблюдаться в различных физических условиях. Так, при наклонном падении света на границу экситонного композита с вакуумом в последнем возникает двулучепреломление новой физической природы (пространственное расщепление света на когерентную и некогерентную части). При заполнении экситонным композитом микрорезонатора каждая его мода будет характеризоваться двумя резонансными частотами (для когерентной и некогерентной части соответственно). В фотонных кристаллах на основе экситонных композитов полосы непрозрачности для когерентного и некогерентного света будут сдвинуты друг относительно друга. Описанный эффект может иметь существенные приложения в квантовой метрологии, оптической информатике, квантовом компьютеринге.

12. КТ в гармоническом электромагнитном поле.

Режим сильной связи

При взаимодействии двухуровневой системы с сильным резонансным электромагнитным полем $E(t)$, то есть при условии $\Omega_R = \mu E(t)/\hbar > \Gamma_0$, возникает эффект Раби осцилляций [23] – населенность ее уровней осциллирует с частотой Ω_R , называемой частотой Раби; Γ_0 – ширина линии спонтанного распада рассматриваемой системы. В стандартной модели [23] осцилляции Раби являются гармоническими. Учет локальных полей меняет гамильтониан взаимодействия КТ со светом (см. формулу (14)), что приводит к изменению эффекта Раби. Анализ системы уравнений Блоха, соответствующей гамильтониану (14), для режима сильной связи выполнен в [56]. Расчеты демонстрируют существенный ангармонизм Раби-осцилляций и возникновение двух режимов проявления эффекта при $\xi = \Omega_R/\Delta\omega < 1/2$ и при $\xi > 1/2$ с абсолютно различными колебатель-

ными характеристиками (сравните рис. 17, б и в). Здесь $\Delta\omega$ – деполаризационный сдвиг. При $\xi = \xi^{cr} = 0.5$ в динамике осцилляций возникает *бифуркация*, которая разделяет два колебательных режима. Для наблюдения режима бифуркации $\xi^{cr} = 0.5$ приведенная выше оценка деполаризационного сдвига $\hbar\Delta\omega \approx 1$ мэВ диктует условие $\hbar\Omega_R \approx 0.5$ мэВ. Данная величина является достижимой в 2-импульсных экспериментах для КТ. На рис. 17 отображены результаты расчета инверсности (т. е. разности населенностей верхнего и нижнего уровней в КТ) для различных значений параметра ξ .

Отметим, что период осцилляций для идеальной 2-уровневой системы не зависит от напряженности внешнего поля. Однако при наличии локальных полей период осцилляций Раби в КТ (в единицах T) определяется следующим выражением [56]:

$$T_0 = \frac{2}{\pi} \begin{cases} \xi K(2\xi); & \xi < 0.5 \\ K(1/2\xi); & \xi > 0.5 \end{cases}, \quad (20)$$

где $K(\dots)$ – эллиптический интеграл первого рода. Данный результат экспериментально подтвержден в работе [88]. Эффект Раби осцилляций, модифицированный влиянием локальных полей, может служить физической основой создания логических элементов квантовой информатики.

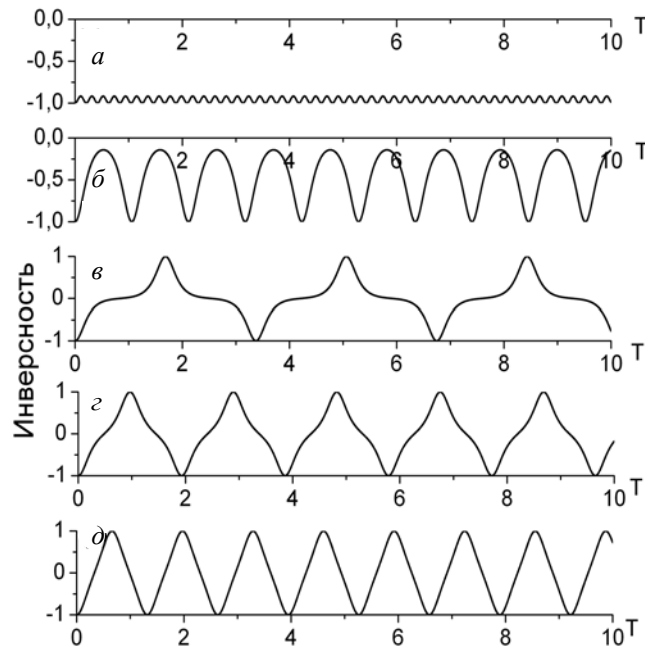


Рис. 17. Осцилляции инверсности в КТ с учетом влияния локальных полей [56]:
 а – $\xi = 0.2$; б – $\xi = 0.495$; в – $\xi = 0.5001$; г – $\xi = 0.51$; д – $\xi = 0.6$.

$T = \Omega_R t / 2\pi$. При $\xi > 1$ поведение инверсности удовлетворяет приближению $w(t) = \cos(2\pi T)$, которое описывает стандартную картину осцилляций Раби [23]

Выше нами рассмотрена полуклассическая теория осцилляций Раби, в которой поле описывалось уравнениями классической электродинамики, а КТ рассматривалась как квантовая система. Таким образом, поле представляло обычную монохроматическую волну и в нем не учитывалось фотонная природа света. Для описания ряда экспериментов применение данной теории вполне допустимо. Однако в последнее время прогресс в экспериментальной квантовой оптике позволил создавать квантовые состояния электромагнитного поля, имеющие определенное распределение фотонов, таких как фокковские состояния, кубиты, когерентные поля и др., и использовать их в спектроскопии одиночных КТ. Далее в этом разделе мы рассмотрим нелинейную динамику взаимодействия КТ с подобными полями. В качестве примера рассмотрим когерентное состояние поля.

Пусть экситон в КТ, находящийся в момент $t = 0$ в основном состоянии, взаимодействует с когерентным полем, функция распределения фотонов которого имеет вид: $\exp[-\langle n \rangle / 2] \langle n \rangle^{n/2} / \sqrt{n!}$ – где $\langle n \rangle$ – среднее число фотонов. Полная система уравнений, описывающая процесс взаимодействия системы с данным излучением, приведена в [61]. Как и ранее, введем безразмерный параметр $\xi = \Omega_{\langle n \rangle} / \Delta \omega$, в котором $\Omega_{\langle n \rangle} = 2g\sqrt{\langle n \rangle}$ – квантовая частота Раби, g – постоянная взаимодействия с внешним полем. На рис. 18 отображены результаты вычислений инверсности как функции безразмерного времени $\tau = gt$ для $\langle n(0) \rangle = 9.0$ и различных значений ξ .

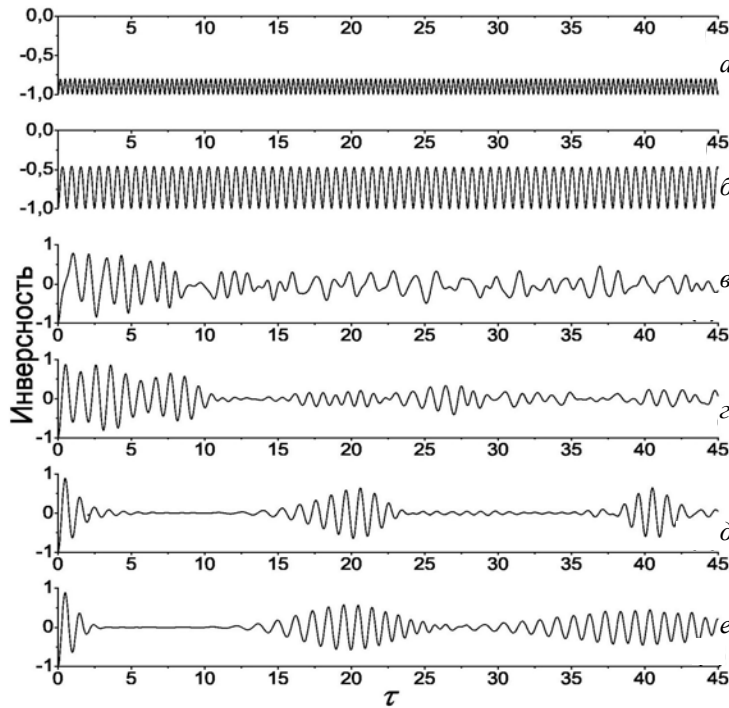


Рис. 18. Временная зависимость инверсности КТ, взаимодействующей с когерентным полем: $a - \xi = 0.2$; $b - 0.49$; $c - 0.53$; $d - 1.2$; $e - \xi = 18.0$

Известно, что картина ОР в идеальной атомной системе (при отсутствии локального поля и релаксационных процессов), взаимодействующей с одноименным когерентным полем, не зависит от параметра g [23]. При этом во временной эволюции инверсности возникают области коллапса и спонтанных возрождений населенностей [23]. Численное решение (3) показывает, что при $\xi \geq 18$ поведение ОР аналогично случаю отсутствия локального поля ($\xi \rightarrow \infty$ при $\Delta\omega \rightarrow 0$), как показано на рис. 18, *e*. В зависимости от ξ , в ОР возникают два различных режима колебаний. Первый из них проявляется при $\xi < 0.5$. При этом инверсность системы – отрицательна (рис.18, *a, б*). Во втором режиме, возникающем при $\xi > 0.5$, инверсность колеблется в диапазоне $-1 \leq w(t) \leq 1$ (рис. 18, *в-е*). Данные два режима разделены точкой бифуркации, возникающей, как и в предыдущем разделе, при $\xi_b = 0.5$ (сравните рис.18, *б* и *в*). В окрестности точки бифуркации поведение Раби осцилляций является хаотическим (рис. 18, *в, г*) и значительно отличается от явления коллапса – возрождений представленного на рис. 18, *e*. Как нами показано, данный результат указывает на изменение состояния квантового поля и является следствием нового типа дисперсии – дисперсии фотонной статистики света [65].

13. Заключение

Мы сделали краткий обзор недавних результатов, полученных в лаборатории электродинамики НИИ ЯП БГУ, по исследованию и теоретическому моделированию электромагнитных эффектов в наноструктурах. Не останавливаясь на деталях анализа, мы постарались представить основные физические эффекты, возникающие при взаимодействии света с теми или иными наноразмерными объектами и определяемые именно масштабом этих объектов. Но, пожалуй, главная цель данной работы – продемонстрировать, как теоретические модели приводят к идеям, базовым для разработки элементного состава будущей нанооптики, квантовой информатики и т. п. Следует подчеркнуть, что методология исследования, развитая в наших работах и представленная в настоящей статье, не ограничивается в своей применимости углеродными нанотрубками и квантовыми точками. Напротив, эта методология, адаптирующая методы классической электродинамики к наноразмерным системам, с самого начала разрабатывалась как общая идеологическая платформа решения широкого класса задач. К настоящему моменту сделаны только первые шаги. Мы уверены, что развиваемая методология приведет в будущем к новым важным научным результатам.

Авторы выражают благодарность сотрудникам НИИ ЯП В. Н. Родионовой и В. А. Карповичу за проведение экспериментов по изучению электромагнитного отклика композитов на основе УЛФ. За предоставление образцов и многочисленные дискуссии авторы признательны нашим партнерам из Института катализа и Института неорганической химии СО РАН В. Кузнецову и А. Окотрубу, из Международного технологического центра (Рэлей, США) О. Шендеровой, из университета г. Намюра (Бельгия) профессору Ф. Ламбину и доктору Р. Лангет. Авторы благодарят своих постоянных соавторов профессора А. Лахтакия (Пен-

ильванский университет, США) и доктора А. Хоффмана (Технический университет Берлина) за многолетнее плодотворное сотрудничество, без которого представленные результаты были бы невозможны. Авторы выражают также признательность всем своим соавторам не упомянутым выше. Работа выполнена при поддержке БРФФИ (проекты Ф05-127, Ф05К-003, Ф06Р-091, Ф06Р-101), Государственного комитета по науке и технологиям РБ и ИНТАС (проект 03-50-4409), ИНТАС (проекты 05-1000008-7801 и 06-1000013-9225) и программы Наука ради мира научного комитета НАТО (проект SfP-981051).

Литература

1. *Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C.* Science of fullerenes and carbon nanotubes. 1996.
2. *Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Avouris Ph.* Carbon nanotubes. 2001.
3. *Gamota D. R., Brazis P.* et al. (Eds.) Printed organic and molecular electronics. 2004.
4. *Kelly M. J.* Low-dimensional semiconductors: materials, physics, technology, devices. 1995.
5. *Gaponenko S. V.* Optical Properties of semiconductor nanocrystals. 1998.
6. *Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N. N.* Quantum dot heterostructures. 1999.
7. *Smith B. W., Monthieux M., Luzzi D. E.* // Nature. 1998. Vol. 396, № 6709. P. 323.
8. *Hirahara K., Suenaga K.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85, № 25. P. 5384.
9. *Кулин С. Я.* // УФН. 1999. Т. 169, № 5. С. 507.
10. *Yamamoto Y., Tassone F., Cao H.* Semiconductor cavity quantum electrodynamics. 2000.
11. *Michler P.* (Ed.) Single quantum dots, Topics of applied physics. 2003.
12. *Zwiler V., Aichele T., Benson O.* // New J. Phys. 2004. Vol. 6. P. 96(23).
13. *Lounis B., Orrit M.* // Rep. Prog. Phys. 2005. Vol. 68, № 5. P. 1129.
14. *Агранович В. М., Гинзбург В. Л.,* Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. 1979.
15. *Вайнштейн Л. А.* Электромагнитные волны. 1988.
16. *Басс Ф. Г., Фукс И. М.,* Рассеяние волн на статистически неровной поверхности. 1972
17. *Вайнштейн Л. А.* Открытые резонаторы и открытые волноводы. 1966.
18. *Адамс М.* Введение в теорию оптических волноводов. 1984.
19. *Шевченко В. В.* Плавные переходы в открытых волноводах. 1969.
20. *Нефедов Е. И., Фиалковский А. Т.* Полосковые линии передачи. 1980.
21. *Ilyinsky A. S., Slepuyan G. Ya., Slepuyan A. Ya.* Propagation, scattering and dissipation of electromagnetic waves. 1993.
22. *Басс Ф. Г., Булгаков А. А., Тетервов А. П.* Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. 1989.
23. *Scully M. O., Zubairy M. S.* Quantum optics. 2001.
24. *Барышевский В. Г.* Ядерная оптика поляризованных сред. М., 1995.
25. *Slepuyan G. Ya., Maksimenko S. A.* et al. // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57. P. 9485.
26. *Lakhtakia A., Slepuyan G. Ya.* et al. // Carbon. 1998. Vol. 36. P. 1833.
27. *Slepuyan G. Ya., Maksimenko S. A.* et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136.
28. *Maksimenko S. A., Slepuyan G. Ya.* // Electromagnetic fields in unconventional structures and materials. 2000. P. 217.
29. *Slepuyan G. Ya., Krapivin N. A.* et al. // AEÜ Int. J. Electron. & Commun. 2001. Vol. 55. P. 273.
30. *Slepuyan G. Ya., Maksimenko S. A.* et al. // Synth. Metals. 2001. Vol. 124. P. 121.
31. *Максименко С. А., Слепян Г. Я.* // Радиотехника и электроника. 2002. Т. 47. С. 261.
32. *Maksimenko S. A., Slepuyan G. Ya.* // Introduction to complex mediums for optics and electromagnetics. 2003. Vol. PM 123. P. 507.

33. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // Proc. joint 9th Intern. Conf. on Electromagnetics in Advanced Applications ICEAA '05 and 11th European Electromagnetic Structures Conf. EESC '05. 2005. P. 949.
34. Slepyan G. Ya., Shuba M. V. et al. // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73, № 19. P. 195416 (11).
35. Maksimenko S.A., Slepyan G. Ya. et al. // Proc. SPIE 2006. Vol. 6328. P. 632807 (8).
36. Batrakov K. G., Kuzhir P. P., Maksimenko S. A. // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6328 "Nanomodeling II". P. 63280Z (8).
37. Maksimenko S. A., Khrushchinsky A. A. et al. // J. Nanophotonics. 2007. Vol. 1. P. 013505(14).
38. Kuzhir P. P., Batrakov K. G., Maksimenko S. A. // Synthesis and Reactivity in Inorganic and Metal-Organic Chemistry. 2007. Vol. 37. P.341
39. Yevtushenko O. M., Slepyan G. Ya. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 79. P. 1102.
40. Maksimenko A. S., Slepyan G. Ya. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. P. 362.
41. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 61. P. R777.
42. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 63. P. 053808(10).
43. Stanciu C., Ehlich R., Petrov V. et al. // Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 81. P. 4064.
44. Slepyan G. Ya., Khrutchinski A. A. et al. // Int. J. of Nanoscience. 2004. Vol. 3. P. 343.
45. Nemilentsau A. M., Slepyan G. Ya. et al. // Carbon. 2006. Vol. 44, № 9. P. 2246.
46. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 1275.
47. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. et al. // J. Electronic Materials. 2000. Vol. 29. P. 494.
48. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. et al. // Semiconductor Sci. and Techn. 2000. Vol. 15. P. 491.
49. Maksimenko S.A., Slepyan G. Ya. et al. // Mater. Sci. & Eng. B. 2001. Vol. 82. P. 215.
50. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 64. P. 125326 (8).
51. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. et al. // Phys. Stat. Sol. (a). 2002. Vol. 190. P. 555.
52. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Advances in Electromagnetics of Complex Media and Metamaterials, NATO Sci. Ser.: II: Mathematics, Physics and Chemistry: Vol. 89. 2003. P. 385.
53. Bondarev I. V., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. P. 073310(4).
54. Bondarev I.V., Maksimenko S. A. et al. // Material Sci. Eng. C. 2003. Vol. 23. P. 1107.
55. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology. 2004. P. 3097.
56. Slepyan G. Ya., Magyarov A. et al. // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 045320(5).
57. Slepyan G. Ya., Magyarov A. et al. // Superlattices and Microstructures. 2004. Vol. 36. P. 773.
58. Slepyan G. Ya., Magyarov A. et al. // Phys. Stat. Sol. (c). 2005. Vol. 2. P. 850.
59. Sreenivasan D., Haverkort J. E. M. et al. // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6328 "Nanomodeling II". P. 63280T (9).
60. Bondarev I. V., Slepyan G. Ya., Maksimenko S.A. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 115504(4).
61. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 063804(17).
62. Бондарев И. В., Слепян Г. Я., Максименко С. А. // Опт. и Спектроск., 2003. Т. 94. С. 885.
63. Bondarev I. V., Slepyan G. Ya. et al. // Carbon. 2004. Vol. 42. P. 997.
64. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // The Handbook of Nanotechnology: Nanometer Structure Theory, Modeling, and Simulation. 2004. P. 145.
65. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // arXiv.org:quant-ph/0605189. 2006.
66. Maksimenko S. A., Rodionova V. N. et al. // Diamond and Related Materials. 2007. Vol. 16. P. 1231.
67. Langlet R., Geuquet N. et al. // Diamond and Related Materials. 2007. ol. 16. P. 2145.
68. Kazunori A., Chikara M. et al. // US Patent WO03083993 (10 September 2003).
69. Burke P.J., Li S., Yu Z. // IEEE Trans. Nanotechn. 2006. Vol. 5. 314; arXiv.org:cond-mat/0408418. 2004).
70. Wang Y., Kempa K. et al. // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 85. P. 2607.
71. Dresselhaus M. S. // Nature. 2004. Vol. 432. P. 959.
72. Murakami Y., Einarsson E. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 087402(4).
73. Hanson G. W. // IEEE Trans. Antenn. Propagat. 2005. Vol. 53. P. 3426.
74. Леонтович М. А., Левин М. Л. // ЖТФ. 1944. Т. 14. С. 481.

75. Jeon T.-I., Kim K. J. et al. // APL. 2002. Vol. 80. P. 3403.
76. Bommeli F., Degiorgi L. et al. // Synth. Metals. 1997. Vol. 86. P. 2307.
77. Ugawa A., Rinzler A.G., Tanner D. B. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. R11305.
78. Laroche M., Carminati R., Greffet J.-J. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. P.123903.
79. Kuznetsov V. L., Chuvilin A. L. et al. // Chem. Phys. Lett. 1994. Vol. 222. P. 343.
80. Kuznetsov V.L., Butenko Yu.V. // Synthesis and applications of ultrananocrystalline diamond. 2005. P. 199.
81. Berger C. J., Yi Y., Wang Z. L., de Heer W. A. // Appl. Phys. A. 2002. Vol. 74. P. 363.
82. Zvelto O. Principles of lasers. 2004.
83. Collins Ph., Avouris, P. // Scientific American. 2000. P. 68.
84. Chen J., Perebeinos V. et al. // Science. 2006. Vol. 310. P. 1171.
85. Кубиц О. В., Портной М. Е. // Письма в ЖТФ. 2005, Т. 31, вып.15. С. 85.
86. Margulis V. A., Sizikova T. A. // Physica B. 1998. Vol. 245. P. 173.
87. Lauret J. S., Voisin C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. P. 057404(4).
88. Lauret J. S., Voisin C. et al. // Physica E. 2003. Vol. 17. P. 380.
89. Mitsumori Y., Hasegawa A. et al. // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71. P. 233305(6).

ELECTROMAGNETIC WAVES IN NANOSTRUCTURES

**S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan, K. G. Batrakov, P. P. Kuzhir,
A. V. Magyarov, A. M. Nemilentsau, A. A. Khrutchinski, M. V. Shuba**

A research discipline – nanoelectromagnetics – is introduced as a synthesis of macroscopic electrodynamics and microscopic theory of electronic properties of different nanostructures exemplified by carbon nanotubes (CNTs) and quantum dots (QDs). The method of effective boundary conditions is shown to be a universal tool for the study of electrodynamic problems of nanotubes. A set of physical effects, which emerge from the interaction of light with different nanocarbon structures and QDs and which are due to characteristic sizes of objects, are presented. Linear electrodynamics of nanotubes, nonlinear optical effects in nanotubes and foundations of quantum electrodynamics in nanotubes are discussed. A strong slowing down of surface waves in nanotubes is demonstrated and the concept of nanotube as a surface wave nanowaveguide in the infrared and terahertz range is presented. Antenna properties of CNTs and CNT bundles are described and the thermal radiation of isolated CNT is demonstrated to be strongly different from the black-body radiation. The idea of the CNT as monomolecular analog of free electron laser is proposed and discussed. The high-efficient generation of high-order harmonics in nanotubes exposed to strong pumping field is predicted. Experimental results on third-order harmonic generation in nanotube ensemble is compared with theoretical predictions. The formalism of electrodynamics of lossy dispersive media is applied to the problem of spontaneous radiation of an excited atom in the carbon nanotube. A theory is presented of the local field impact on the QD electromagnetic response in the weak and strong light-matter coupling regimes. Potentiality of logic elements development for the quantum information processing on the basis of quantum dots in the strong light-matter coupling regime is discussed. First results on measurements of the attenuation of electromagnetic waves in onion-like carbon (OLC) – based polymer films on a substrate are reported in the frequency range 27–38 GHz. The measurements demonstrate potentiality of OLC-based composites as basic components for wideband electromagnetic wave absorbing materials.

КВАНТОВО-ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В АТОМНО-ДОПИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

И. В. Бондарев*

Углеродная нанотрубка (УН) представляет собой графеновый лист, свернутый в цилиндр диаметром порядка 1 нм и длиной до нескольких сантиметров, таким образом образуя практически идеально-одномерную полую углеродную нить. Обширные исследования, выполненные за последние годы в различных лабораториях по всему миру, выявили исключительную уникальность физических свойств УН, обусловленную прежде всего эффектом поперечного confinement и соответственно поперечного размерного квантования электронного движения в этих системах [1, 2]. Уникальность физических свойств УН открывает пути для их потенциального использования в многочисленных приложениях, например, при создании миниатюрных, микроскопически малого размера, электронных, оптических, механических, электромеханических, сенсорных устройств, а также в качестве соответствующих компонент для макроскопических композитных материалов с новыми свойствами [3].

Физические свойства УН могут быть контролируемым образом модифицированы путем их допирования примесными атомами, молекулами, молекулярными соединениями [4]. Экспериментально продемонстрирована, в частности, возможность инкапсуляции единичных атомов (ионов) внутрь одностенных нанотрубок [5] и их интеркалирования в межнанотрубочное пространство [4, 6]. Несомненно, что и свойства атомов-допантов меняются при их внедрении в УН. Это, а также прогресс в технологиях выращивания сверхдлинных (до нескольких сантиметров [7, 8]) нанотрубок малых диаметров (~1 нм), стимулирует исследования квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных нанотрубках, таких, например, как динамика спонтанного распада, перепутывание возбужденных атомных состояний в присутствии УН, оптическое поглощение атомно-допированными УН, ван-дер-ваальсовы взаимодействия атомов с нанотрубкой и др. Такие исследования важны как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения, поскольку проливают свет на особенности электромагнитных взаимодействий в низкоразмерных диспергирующих и поглощающих средах и тем самым ведут к выработке новых решений по применению атомно-допированных УН в нанопотонике и квантовых информационных технологиях.

Отметим, что несмотря на впечатляющие эксперименты по наблюдению фундаментальных высококогерентных квантовых эффектов в разнообразных твердотельных мезоскопических системах, таких, например, как квантовые точки в полупроводниковых микрорезонаторах и фотонных кристаллах, ядерные спины в решетке, джозефсоновские переходы и др., экспериментальные исследования по созданию твердотельных наноструктурированных материалов с высокой степенью когерентности квантовых квазичастичных состояний (для их последующего применения в нанопотонике и квантовых информационных технологиях) по-прежнему находятся на стадии проверки правильности и тестиро-

* North Carolina Central University, USA.

вания теоретических гипотез (см., например, обзор [9]). Разработка наноструктурированных твердотельных материалов с высокой степенью когерентности квантовых квазичастичных состояний – критически важная научная проблема на ближайшие десятилетия. Необходимо создать материалы с характерными временами когерентности парных квазичастичных корреляций, по крайней мере, на 3–4 порядка величины превышающими время одного акта парного взаимодействия [10, 11]. Тогда парная корреляция будет хорошо определенным перепутанным двухчастичным состоянием соответственно, обеспечивая возможность распространения квантовой информации на расстояние, определяемое числом одновременно скоррелированных пар.

Учитывая важность проблемы для квантовых информационных технологий, необходимо развивать различные альтернативные подходы к созданию наноструктурированных материалов с высокой степенью когерентности квантовых квазичастичных состояний. В данной работе дается краткий обзор теоретических результатов, полученных недавно для одного из таких подходов, основанного на применении углеродных нанотрубок, допированных единичными атомами (ионами). О перспективности применения атомно-допированных УН в нанофотонике и квантовых информационных технологиях впервые было указано в работах [12, 13]. Дальнейшие исследования ван-дер-ваальсовых взаимодействий атомов с УН [14–16], оптического поглощения атомно-допированными УН вблизи частот атомных переходов [17, 18], и, наконец, перепутывания атомных состояний вблизи УН 19, 20, только подтвердили обоснованность первоначальной идеи. Здесь дается лишь краткий теоретический обзор упомянутых выше основных квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных углеродных нанотрубках. Более детальный анализ можно найти в оригинальных работах [12–23].

1. Общий формализм

Для корректного рассмотрения квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных углеродных нанотрубках необходимо разработать процедуру квантования электромагнитного поля в присутствии квазиодномерной диспергирующей и поглощающей среды, каковой является сама УН. Проблема состоит в том, что при наличии поглощения операторные уравнения Максвелла становятся неэрмитовыми, и соответственно разложение их решений по ортогональным модам, обычно применяемое в стандартной квантовой электродинамике (см., например, [24]), становится, строго говоря, плохо определенным в математическом смысле. В связи с этим в работах [25, 26] был предложен другой подход к решению задачи о квантовании электромагнитного поля в диспергирующих и поглощающих средах, и этот подход был позднее применен к квазиодномерным поглощающим средам, в частности, к атомно-допированным УН [13, 16, 20]. Идея метода состоит в том, что Фурье-образы электрического и магнитного полей рассматриваются в качестве физических наблюдаемых соответ-

ствующих квантово-механических операторов в представлении Шредингера. Последние удовлетворяют уравнениям Максвелла в Фурье-пространстве с дополнительным операторным источником (т. н. шумовой ток [25]), ответственным за выполнение стандартных квантово-электродинамических коммутационных соотношений для операторов электрического и магнитного полей в присутствии поглощающей и диспергирующей среды. Операторный источник представляется в виде надлежащим образом подобранных вторично квантованных Бозе-операторов, имеющих смысл операторов рождения и уничтожения одно-квантовых возбуждений фотонного типа в среде. В итоге Фурье-образы операторов электрического и магнитного полей представляются в виде интегралов-сверток вторично квантованных Бозе-операторов с тензором Грина электромагнитного поля. Последний определяется геометрией системы и находится решением уравнения Грина при наложенных на поверхностях раздела сред граничных условиях и условии затухания на бесконечности.

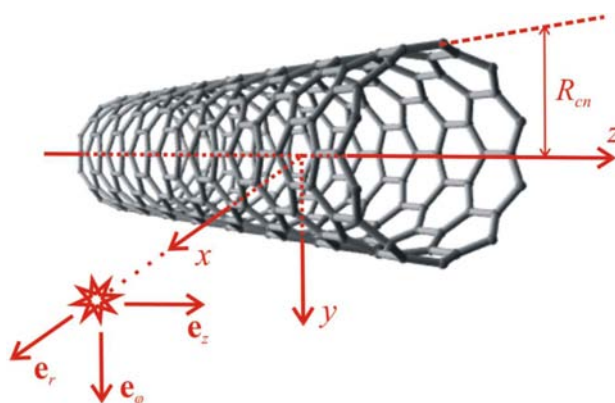


Рис. 1. Геометрия задачи при рассмотрении квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных УН (атом может находиться как снаружи, так и внутри нанотрубки)

Ниже дается краткое описание общего формализма при рассмотрении квантово-электродинамических задач для атомно-допированных УН с учетом эффектов поглощения и дисперсии электромагнитного поля. Изначально рассматривается бесконечно длинная одностенная УН и нейтральная атомная система (атом или молекула) с радиус-вектором центра масс \mathbf{r}_A вблизи УН (рис.1). С учетом цилиндрической симметрии задачи выбирается ортонормированный цилиндрический базис $\{\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z\}$ с вектором \mathbf{e}_z , направленным вдоль оси УН, так что $\mathbf{r}_A = r_A \mathbf{e}_r = \{r_A, 0, 0\}$. Наличие сильной поперечной деполяризации позволяет пренебречь возможной модификацией радиальной ε_{zz} и азимутальной $\varepsilon_{\varphi\varphi}$ составляющих тензора диэлектрической проницаемости среды в присутствии УН [27]. При этом единственная отличная от единицы компонента ε_{zz} определяется продольной поляризуемостью нанотрубки и отвечает за продольный поверхно-

стный ток параллельно вектору \mathbf{e}_z . Тогда соответствующий (шумовой) операторный токовый источник имеет вид

$$\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}, \omega) = \sqrt{\hbar \omega \operatorname{Re} \sigma_{zz}(\mathbf{R}, \omega) / \pi} \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) \mathbf{e}_z,$$

где $\mathbf{R} = \{R_{cm}, \phi, Z\}$ – радиус-вектор произвольной точки поверхности УН, $\hat{f}(\mathbf{R}, \omega)$ – вторично квантованный скалярный Бозе-оператор, уничтожающий одноквантовое возбуждение фотонного типа частоты ω на поверхности УН (оператор $\hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega)$ рождает аналогичное возбуждение на поверхности УН), $\sigma_{zz}(\mathbf{R}, \omega)$ – аксиальная поверхностная проводимость на единицу длины УН (получается из $\varepsilon_{zz}(\mathbf{R}, \omega)$ посредством формулы Друде). Операторы $\hat{f}(\mathbf{R}, \omega)$ и $\hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega)$ удовлетворяют стандартным бозонным коммутационным соотношениям на поверхности УН.

Полный (нерелятивистский) гамильтониан атомной подсистемы, взаимодействующей с модифицированным присутствием УН электромагнитным полем, имеет стандартный вид (используется гауссова система единиц):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int_0^\infty d\omega \hbar \omega \int d\mathbf{R} \hat{f}^\dagger(\mathbf{R}, \omega) \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) + \sum_i \frac{1}{2m_i} \left[\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{q_i}{c} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{r}}_A + \hat{\mathbf{r}}_i) \right]^2 \\ & + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\rho}_A(\mathbf{r}) \hat{\phi}_A(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \hat{\rho}_A(\mathbf{r}) \hat{\phi}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Здесь m_i , q_i , $\hat{\mathbf{r}}_i$ и $\hat{\mathbf{p}}_i$ – соответственно, массы, заряды, операторы координат (относительно \mathbf{r}_A) и импульсов частиц в атомной подсистеме. Первый член есть вторично квантованный оператор свободного электромагнитного поля, модифицированного присутствием УН. Второй и третий члены определяют кинетическую и потенциальную (кулоновскую) энергии атомной подсистемы. Здесь $\hat{\phi}_A(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \hat{\rho}_A(\mathbf{r}') / |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ – скалярный потенциал заряженных частиц, распределенных в атомной подсистеме с плотностью $\hat{\rho}_A(\mathbf{r}) = \sum_i q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A - \hat{\mathbf{r}}_i)$. Последний член гамильтониана учитывает кулоновское взаимодействие частиц с УН. Шредингеровские операторы векторного и скалярного потенциалов определяются для произвольного $\mathbf{r} = \{r, \varphi, z\}$ в виде

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) &= \int_0^\infty d\omega (c / i\omega) \hat{\mathbf{E}}^\perp(\mathbf{r}, \omega) + \text{h.c.}, \\ -\nabla \hat{\phi}(\mathbf{r}) &= \int_0^\infty d\omega \hat{\mathbf{E}}^\parallel(\mathbf{r}, \omega) + \text{h.c.}, \end{aligned}$$

соответственно

$$\hat{\mathbf{E}}^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{r}' \delta^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$$

есть оператор поперечного (продольного) электрического поля, $\delta_{\alpha\beta}^\perp(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}) - \delta_{\alpha\beta}^\parallel(\mathbf{r})$ и $\delta_{\alpha\beta}^\parallel(\mathbf{r}) = -\nabla_\alpha \nabla_\beta (1/4\pi r)$ – поперечная и продольная дельта-функции.

Фурье-образы $\hat{\mathbf{E}}$ и $\hat{\mathbf{H}} = (i\omega/c)^{-1} \nabla \times \hat{\mathbf{E}}$ удовлетворяют уравнениям Максвелла:

$$\nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i(\omega / c) \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = -i(\omega / c) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + (4\pi / c) \hat{\mathbf{I}}(\mathbf{r}, \omega),$$

где $\hat{\mathbf{I}}(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{R} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}, \omega) = 2\hat{\mathbf{J}}(R_{cn}, \varphi, z, \omega) \delta(r - R_{cn})$ – оператор плотности шумового тока на поверхности УН. Из уравнений Максвелла имеем электрический Фурье-образ в виде

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i(4\pi\omega / c^2) \int d\mathbf{R} \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \omega) \cdot \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}, \omega),$$

где \mathbf{G} – тензор Грина электромагнитного поля в окрестности УН, удовлетворяющий уравнению

$$\sum_{\alpha=r,\varphi,z} [\nabla \times \nabla \times - (\omega / c)^2]_{z\alpha} G_{\alpha z}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

при наложенных на поверхности УН граничных условиях (они вытекают из условий непрерывности и наличия скачка для соответствующих компонент электромагнитного поля – см., например, [28]) и условия затухания на бесконечности. Последнее уравнение фактически замыкает формализм квантования электромагнитного поля в присутствии квазиодномерной поглощающей и диспергирующей среды. В нашем случае роль среды играет УН, но это не ограничивает общности изложенного подхода, который, возможно с небольшими модификациями, остается верным в применении к любым квазиодномерным поглощающим и диспергирующим средам. При этом операторы электрического и магнитного полей удовлетворяют всем необходимым требованиям стандартной квантовой электродинамики [25, 26]. Таким образом, задача о квантовании электромагнитного поля вблизи УН фактически сводится к определению тензора Грина электромагнитного поля для связанной системы «Атом – УН». В нем (а точнее, в налагаемых на него граничных условиях, куда входит поверхностная проводимость нанотрубки $\sigma_{zz}(\mathbf{R}, \omega)$) содержится вся информация об УН. Проводимость же определяется заранее, исходя из реалистичной зонной структуры нанотрубок конкретных типов.

Предполагая далее, что атомная подсистема хорошо локализована в пространстве, так что применимо длинноволновое приближение по электромагнитному полю, можно разложить операторы векторного и скалярного потенциалов $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ и $\hat{\varphi}(\mathbf{r})$ в изначальном полном гамильтониане в окрестности координаты \mathbf{r}_A центра масс атома и удержать в этих разложениях первые не исчезающие члены. Тогда при условии кулоновской калибровки $[\mathbf{p}_i, \hat{\mathbf{A}}] = 0$ приходим к полному гамильтониану вида (электрическое дипольное приближение):

$$\hat{H} = \hat{H}_F + \hat{H}_A + \hat{H}_{AF}^{(1)} + \hat{H}_{AF}^{(2)},$$

$$\text{где } \hat{H}_F = \int_0^\infty d\omega \hbar \omega \int d\mathbf{R} \hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega) \hat{f}(\mathbf{R}, \omega), \quad \hat{H}_A = \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_i} + \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|},$$

$$\hat{H}_{AF}^{(1)} = -\sum_i \frac{q_i}{m_i c} \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_A) + \hat{\mathbf{d}} \cdot \nabla \hat{\varphi}(\mathbf{r}_A), \quad \hat{H}_{AF}^{(2)} = \sum_i \frac{q_i^2}{2m_i c^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}_A) \text{ – соответственно}$$

гамильтонианы не взаимодействующих электромагнитного поля (модифицированного присутствием УН) и атомной подсистемы и два вклада в гамильтониан их взаимодействия, происходящие соответственно от линейного и квадратичного по электромагнитным потенциалам членов, $\mathbf{d} = \sum_i q_i \hat{\mathbf{r}}_i$ – оператор электрического дипольного момента атомной подсистемы. Этот гамильтониан, в свою очередь, может быть переписан в стандартном вторично квантованном виде по операторам рождения/уничтожения одноквантовых фотонных возбуждений и в двухуровневом приближении по атомным переменным:

$$\hat{H} = \int_0^\infty d\omega \hbar \omega \int d\mathbf{R} \hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega) \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) + \frac{\hbar \tilde{\omega}_A}{2} \hat{\sigma}_z + \\ + \int_0^\infty d\omega \int d\mathbf{R} [g^{(+)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega) \hat{\sigma}^\dagger - g^{(-)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega) \hat{\sigma}] \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) + h.c.$$

Операторы Паули $\hat{\sigma}_z = |u\rangle\langle u| - |l\rangle\langle l|$, $\hat{\sigma} = |l\rangle\langle u|$ и $\hat{\sigma}^\dagger = |u\rangle\langle l|$ описывают электрические дипольные переходы между двумя атомными состояниями, верхним $|u\rangle$ и нижним $|l\rangle$, разделенными частотой атомного перехода ω_A . Эта («голая», непоренормированная) частота модифицируется взаимодействием $\hat{H}_{AF}^{(2)}$, которое, будучи не зависящим от оператора атомного дипольного момента, не дает вклада в смешивание состояний $|u\rangle$ и $|l\rangle$, но зато перенормирует частоту атомного перехода к виду

$$\tilde{\omega}_A = \omega_A [1 - 2/(\hbar \omega_A)^2 \int_0^\infty d\omega \int d\mathbf{R} |g^\perp(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega)|^2].$$

С другой стороны, взаимодействие $\hat{H}_{AF}^{(1)}$ зависит от оператора атомного дипольного момента и потому смешивает состояния $|u\rangle$ и $|l\rangle$, приводя в итоге к стандартному вторично квантованному взаимодействию с матричными элементами вида $g^{(\pm)} = g^\perp \pm (\omega/\omega_A) g^\parallel$, где

$$g^{\perp(\parallel)} = -i(4\omega_A/c^2) \sqrt{\pi \hbar \omega \operatorname{Re} \sigma_{zz}(\omega)} \sum_\alpha d_\alpha G_{\alpha z}^{\perp(\parallel)}, \quad d_\alpha = \langle l | \hat{d}_\alpha | u \rangle$$

– дипольный момент перехода, а $G_{\alpha z}^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega)$ – поперечная (продольная) части тензора Грина электромагнитного поля (определяются полностью аналогично приведенным выше определениям операторов поперечного и продольного электрического поля). При этом для функций $g^{\perp(\parallel)}$ имеет место следующее важное свойство:

$$\int d\mathbf{R} |g^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega)|^2 = (\hbar^2/2\pi)(\omega_A/\omega)^2 \Gamma_0(\omega) \xi^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \omega).$$

Здесь интегрирование выполняется по поверхности УН, $\xi^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \omega)$ – поперечная (продольная) локальная (зависящая от местоположения атома) плотность фотонных состояний вблизи УН (иногда называемая Парсел-фактором [29]), а $\Gamma_0(\omega)$ – хорошо известная функция частотной зависимости скорости спонтанного распада возбужденного атомного состояния в вакууме (см., например, [30, 31]).

Таким образом, полный гамильтониан связанной системы «Атом-УН» (записанный в дипольном приближении по электромагнитному полю и двухуровневом приближении по атомным переменным – стандартные, широко используемые в атомной и лазерной физике приближения) в итоге выражается только через внутренние параметры взаимодействия электромагнитной и атомной подсистем – поперечную и продольную локальные функции фотонных состояний вблизи УН. Последние отвечают за интенсивность процесса обмена фотоном между атомом и УН и должны быть вычислены заранее, исходя из функции Грина электромагнитной подсистемы. Дальнейшее обобщение изложенного формализма на случай любого конечного числа атомов вблизи УН не вызывает затруднений. При этом в теории возникает еще одна пара внутренних параметров взаимодействия – двухчастичные поперечная и продольная локальные функции фотонных состояний [19, 20], задающие интенсивность обмена фотоном между парой атомов вблизи УН. Различные квантово-электродинамические эффекты в атомно-допированных УН могут быть теперь рассмотрены путем решения временного уравнения Шредингера с полученным вторично квантованным гамильтонианом. Ниже рассматриваются конкретные примеры применения изложенной теории.

2. Спонтанный распад возбужденного атома вблизи УН

Хорошо известно, что спонтанный распад возбужденного атома может происходить по-разному в зависимости от силы связи возбужденного атомного состояния с вакуумными электромагнитными модами его локального окружения (см., например, [29, 31, 33]). Последняя определяется величиной (дипольного) матричного элемента перехода и плотностью конечных фотонных состояний, доступных для поглощения окружением испущенного атомом фотона. Принято различать режимы слабой и сильной связи атома с вакуумным электромагнитным полем. Первый характеризуется монотонной экспоненциальной динамикой распада возбужденного атомного уровня, где скорость экспоненциального затухания может варьироваться по сравнению с вакуумной. Второй, напротив, характеризуется сильно неэкспоненциальной осциллирующей динамикой распада (Раби-осцилляции), когда изначально возбужденный атомный уровень периодически обменивается энергией с вакуумным полем.

На основе изложенного выше формализма в работах [12, 13, 20, 22] были получены и решены интегральные уравнения эволюции возбужденного состояния двухуровневого атома вблизи акиральных УН различных диаметров. Уравнения решались численно и аналитически с использованием Марковского приближения для ядра интегрального уравнения. Типичные основные результаты приведены на рис. 2 для различных расстояний атома от поверхности УН (9,0) и различных частот атомных переходов. Видно, что с приближением атома к поверхности УН экспоненциальная динамика распада сменяется Раби-осцилляциями. Это свидетельствует о том, что на достаточно близких расстояниях (или внутри УН достаточно малого радиуса) концентрация вакуумного поля настолько высока, что реализуется режим сильной связи атома с вакуумными

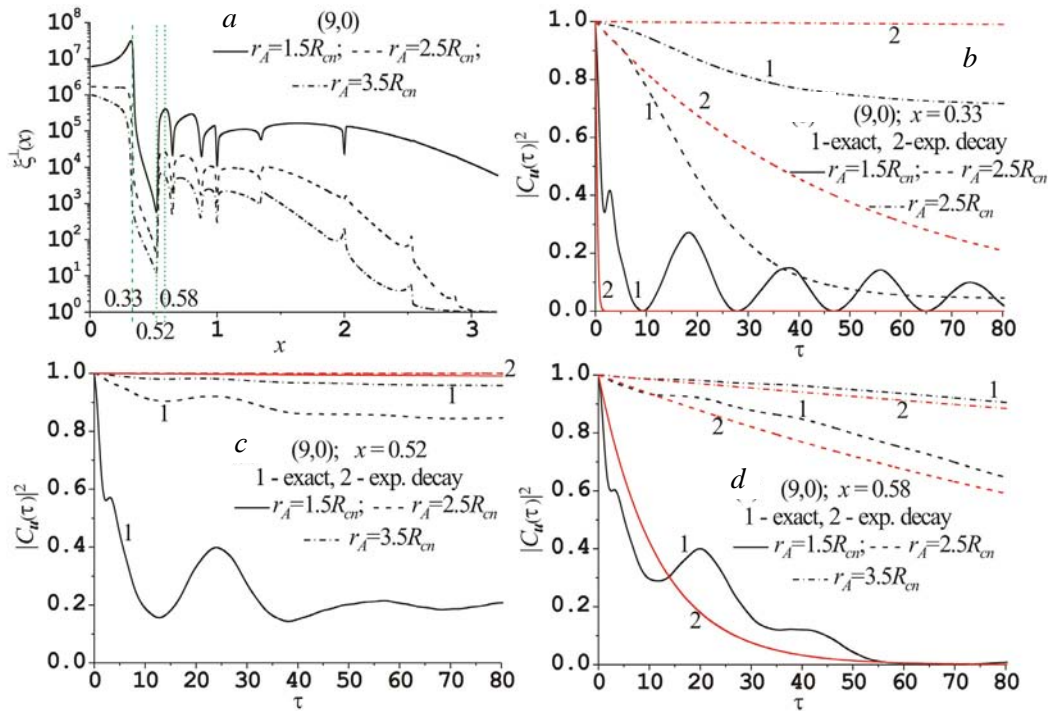


Рис. 2. (a) Частотные зависимости поперечной плотности фотонных состояний для двухуровневого атома снаружи нанотрубки (9,0) на различных расстояниях от ее стенки. (b), (c), (d) Динамика спонтанного распада заселенности возбужденного атомного состояния, полученная прямым численным решением интегрального уравнения эволюции, на соответствующих расстояниях от стенки УН (9,0) в сравнении с экспоненциальным затуханием, которое получается при использовании в интегральном уравнении Марковского приближения. Расчеты выполнены для трех частот атомных переходов [штриховые линии на рис. 2, a]; x и τ – соответственно безразмерные частота и время

фотонными модами УН. Любопытно, что этот результат не может быть получен в рамках Марковского приближения, как видно из сравнения результатов прямых численных расчетов с аналитическими на рис. 2, b–d.

3. Особенности ван-дер-ваальсовой связи в системе «Атом–УН»

Исходя из изложенных выше особенностей динамики спонтанного распада, можно сделать вывод о сильно нелинейном характере связи атома с вакуумным полем вблизи УН. Из-за резкого увеличения плотности вакуумных фотонных мод константа связи атома с полем является функцией расстояния между атомом и УН, сильно возрастающая с приближением атома к стенке нанотрубки. При этом взаимодействие может переходить в режим сильной связи, когда уровни всей системы не просто смещены относительно невозмущенных, а смещены настолько сильно, что в системе наступает квазивыврождение, сопровождающееся перемешиванием уровней (см. рис. 3). Это соответствует Раби-осцилляциям в

динамике спонтанного распада на рис. 2, *b*, *c*, *d*. С другой стороны, совершенно очевидно, что при этом стандартные, базирующиеся на теории возмущений при отсутствии вырождения модели ван-дер-ваальсовых взаимодействий, перестают быть применимыми.

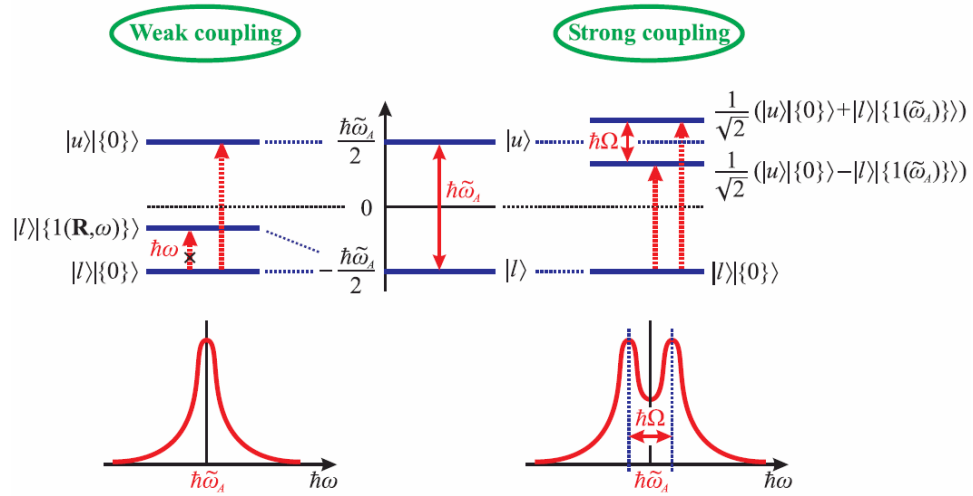


Рис. 3. Схема уровней двухуровневого атома (в центре), взаимодействующего с вакуумным полем УН, в режимах слабой (слева) и сильной (справа) связи. Вертикальными восходящими стрелками слева и справа показаны разрешенные и запрещенные (перечеркнуты) переходы при возбуждении системы «Атом–УН» внешним оптическим полем. Слева и справа внизу показаны соответствующие профили оптического поглощения УН в окрестности частоты атомного перехода. В режиме сильной связи (справа) линия оптического поглощения расщеплена. Частота расщепления совпадает с частотой Раби-осцилляций в динамике спонтанного распада, показанной на рис. 2, *b*, *c*, *d*

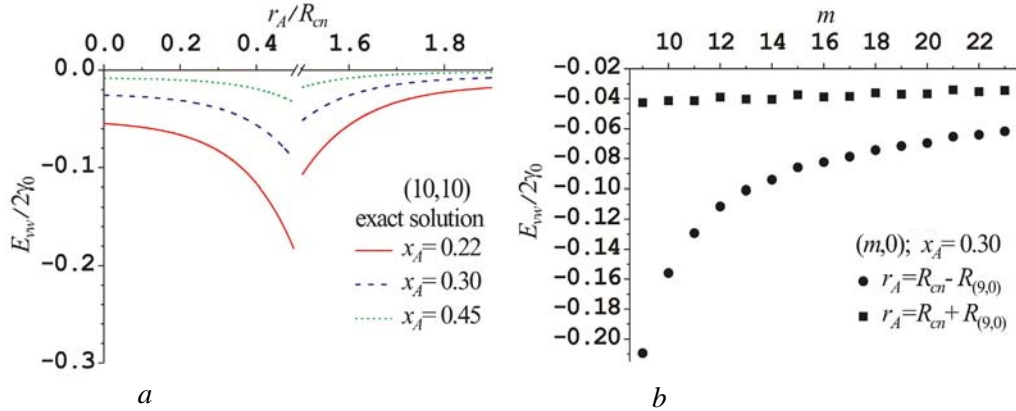


Рис. 4. (а) Энергии Ван-дер-Ваальса двухуровневого атома в основном состоянии около УН (10,10) как функции местоположения атома для трех типичных (безразмерных) частот атомного перехода x_A . (б) Энергии Ван-дер-Ваальса для атома на фиксированном расстоянии от поверхностей УН типа $(m,0)$ возрастающего радиуса (атом зафиксирован снаружи и внутри нанотрубок на расстояниях, равных радиусу УН (9,0))

Наличие эффекта квазивыврождения было учтено в работах 14–16 при выводе энергии ван-дер-ваальсова взаимодействия для атома в основном состоянии вблизи УН. Основные результаты теории представлены на рис. 4, откуда, в частности, следует (см. рис. 4, *a*) практически важный вывод о том, что атомам(ионам)-допантам энергетически выгоднее находиться внутри нежели снаружи УН. Отметим, что пренебрежение эффектом квазивыврождения на малых расстояниях атома от поверхности УН привело бы к нефизической расходимости энергии Ван-дер-Ваальса вблизи поверхности нанотрубки. Любопытно также (см. рис. 4, *b*), что ван-дер-ваальсово взаимодействие атома с металлическими УН (индекс m кратен трем) слегка слабее, чем с полупроводниковыми, что объясняется особенностями процесса обмена виртуальными фотонами между атомом и УН, ответственного за ван-дер-ваальсово взаимодействие.

4. Оптические поглощения атомно-допированными УН

В настоящее время значительный прогресс достигнут в изучении квантовых оптических процессов в полупроводниковых наноструктурах. Сложилось определенное понимание того, что двухуровневые экситонные и спиновые возбуждения в полупроводниковых квантовых точках могут быть применены для реализации принципов квантовой логики в квантовых информационных технологиях [34–36]. При этом значительная доля предлагаемых теоретических концепций базируется на принципах квантовой электродинамики полупроводниковых микрорезонаторов [37–39], где экситонные или межзонные электронные переходы сильно связаны с высокодобротными вакуумными фотонными модами полупроводникового микрорезонатора, образуя таким образом новые квазичастичные состояния среды – экситон-поляритоны, регистрируемые экспериментально по Раби-расщеплению линии экситонного поглощения [40–43]. Недавние эксперименты на квантовых точках в полупроводниковых микрополостях [41, 42] и фотонных кристаллах [43] показали наличие такого расщепления в спектрах оптического поглощения соответствующих наноструктур.

В работах [18, 19] было показано, что аналогичный эффект расщепления линии оптического поглощения должен иметь место и для атомно-допированных УН достаточно малого диаметра в окрестности частоты атомного перехода. Это несложно понять из следующих качественных соображений. Константа связи атома (моделируемого двухуровневой системой с дипольным моментом перехода d_A и частотой перехода ω_A) с вакуумным полем есть $\hbar g = (2\pi d_A^2 \hbar \omega_A / \tilde{V})^{1/2}$, где \tilde{V} – эффективный объем полевой моды, с которой взаимодействует атом (см., например, [31]). Для атома (иона) в нанотрубке радиуса R_{cn} эффективный объем полевой моды есть $\tilde{V} \sim \pi R_{cn}^2 (\lambda_A / 2)$, что порядка $\sim 10^2$ нм³ для УН диаметром ~ 1 нм в оптической области длин волн $\lambda_A \sim 600$ нм. Используя приближение $d_A \sim er \sim e(e^2 / \hbar \omega_A) 30$], получаем $\hbar g \sim 0.3$ эВ. С другой стороны, ширина моды микрорезонатора на частоте ω_A оценивается выражением $\hbar \gamma_c = 6\pi \hbar c^3 / \omega_A^2 \xi(\omega_A) \tilde{V}$ 31, где $\xi(\omega_A)$ – фактор усиления атомной

спонтанной эмиссии (Парсел-фактор [29]). Учитывая громадные значения $\sim 10^7$ Парсел-фактора в окрестности УН [23], получаем $\hbar\gamma_c \sim 0.03$ эВ для нанотрубок диаметром ~ 1 нм в оптическом спектральном диапазоне. Таким образом, для атомов (ионов) в атомно-допированных УН малого диаметра условие сильной связи $g/\gamma_c > 1$ выполнено, и образование квазиодномерных атомных поляритонных состояний, являющихся суперпозицией атомного и фотонного состояний (см. рис. 3, справа), становится возможным. Именно это обстоятельство и приводит к осциллирующей динамике атомного спонтанного распада и особенностям ван-дер-ваальсовых взаимодействий атома с УН, обсуждавшимся выше.

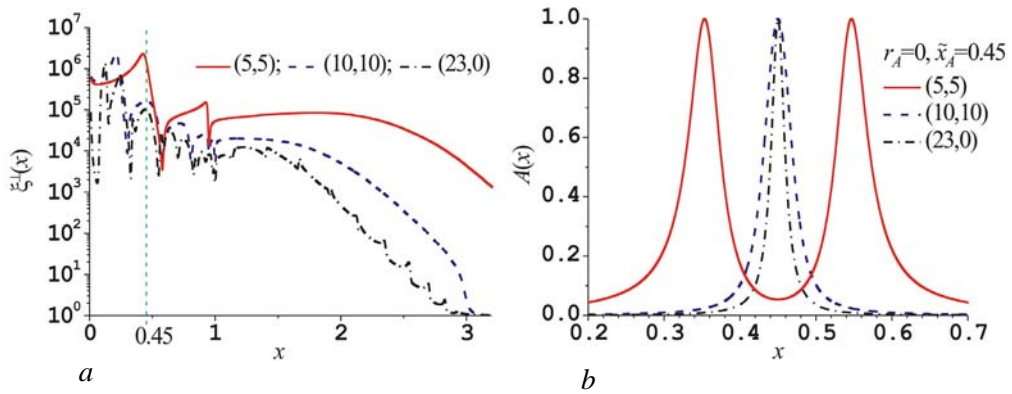


Рис. 5. (а) Частотные зависимости поперечной плотности фотонных состояний для двухуровневого атома, расположенного в центре трех нанотрубок возрастающего радиуса. (б) Соответствующие профили оптического поглощения в окрестности частоты атомного перехода (показана вертикальной штриховой линией на рис.5, а).

См. работы [17, 18]

На рисунке 5 представлены результаты численных расчетов формы линии оптического поглощения для двухуровневого атома в центре трех нанотрубок возрастающего радиуса. Детали расчетов приведены в работах [18, 19]. Раби-расщепление квазиодномерного атомного поляритонного состояния в УН (5,5) составляет ~ 1 эВ, что как минимум на порядок величины превышает типичные значения Раби-расщеплений квазиульмерных экситон-поляритонов в квантовых точках в полупроводниковых микрополостях и фотонных кристаллах (см., например, [41–43]). Такой большой эффект происходит от большей энергии связи оптического электрона в атоме по сравнению с типичной экситонной энергией связи. Предсказываемый эффект открывает новые возможности по использованию атомно-допированных УН в современной нанофотонике при создании различных высококогерентных светоизлучающих устройств по аналогии с теми, которые в настоящее время производятся на основе полупроводниковых наноструктурированных материалов [44–47].

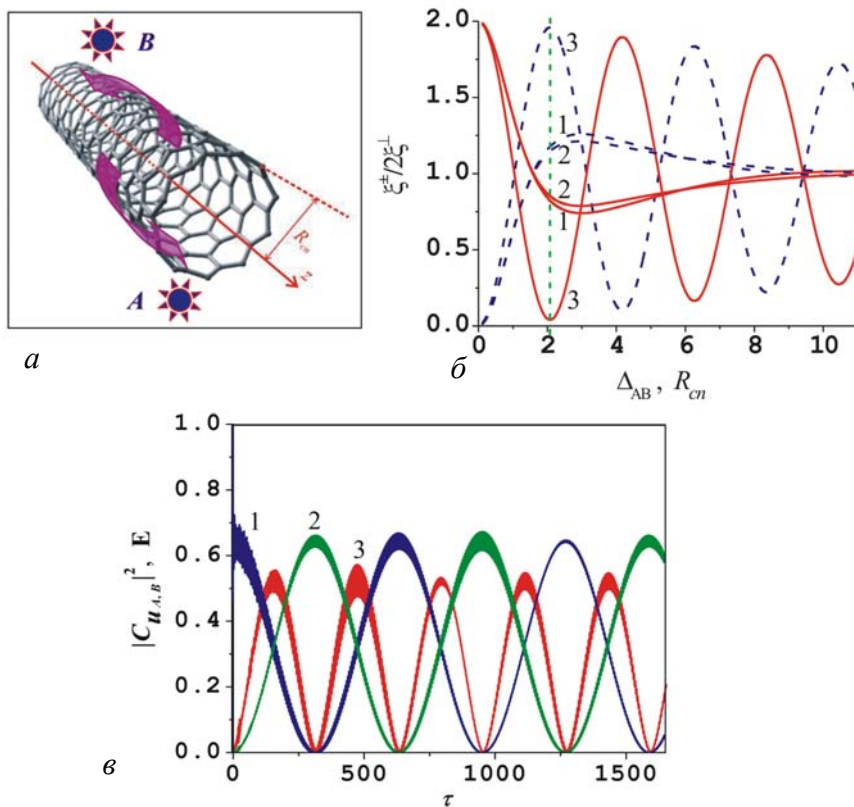


Рис. 6. (а) Иллюстрация взаимодействия и перепутывания двух пространственно-разнесенных атомов посредством обмена поверхностными фотонными возбуждениями нанотрубки. (б) Нормированные двухчастичные функции локальной плотности фотонных состояний ξ^+ (сплошные линии) и ξ^- (штриховые линии) на частотах пиков одночастичных функций поперечных плотностей фотонных состояний $\xi^\pm(x)$ (см. рис. 2, а, 5, а) как функции расстояния Δ_{AB} между атомом А и атомом В в центре УН (10,0) (линии 1; $x = 0.29$), (11,0) (линии 2; $x = 0.25$) и (9,0) (линии 3; $x = 0.32$). (с) Временная зависимость заселенностей $|C_{u,A,B}|^2$ верхних уровней атомов А и В (линии 1 и 2) и функции $E(\tau)$ перепутывания атомных состояний (энтанглмент) для пары атомов, расположенных в центре металлической УН (9,0) на расстоянии $\Delta_{AB} = 2.1R_{cn} \approx 7.4 \text{ \AA}$ друг от друга (показано вертикальной штрихпунктирной линией на рис. б), при условии начального возбуждения только атома А, [19, 20]

5. Перепутывание пространственно разнесенных атомов близи УН

Совсем недавно [48] была теоретически продемонстрирована возможность стабильной перепутанной конфигурации (энтанглмент) волновых функций двух пространственно-разнесенных двухуровневых экситонных состояний (кубитов), локализованных на двух полупроводниковых квантовых точках в планарном

фотонном нанорезонаторе. Аналогичный эффект для пары квазиодномерных атомных поляритонных состояний в УН изучался в [19, 20]. Основные результаты этих работ представлены на рис. 6. Перепутывание пространственно разнесенных атомных состояний происходит за счет обмена виртуальными поверхностными фотонами нанотрубки. Иллюстрация такого (межатомного) взаимодействия дается на рис. 6, *a*. Взаимодействие тем сильнее, чем сильнее каждый из атомов связан с виртуальными фотонными модами УН. В отличие от полупроводниковых УН в металлических нанотрубках малого диаметра (~ 1 нм) в режиме сильной связи парные локальные плотности фотонных состояний ξ^\pm (отвечают за смешивание коэффициентов заселенности $C_{A,B}$ верхних уровней атомов *A* и *B* с образованием перемешанных комбинаций $C_\pm(0) = [C_A(0) \pm C_B(0)]/\sqrt{2}$) очень слабо затухают при удалении атомов друг от друга (см. рис.6, *b*); для металлических УН ($m,0$) типа индекс m кратен трем, так что величина перепутывания (энтанглмента) двух пространственно разделенных атомных состояний оказывается достаточно значительной и слабо затухает со временем. Эффект перепутывания показан на рис. 6, *c* для атомов *A* и *B*, находящихся на расстоянии ≈ 7.4 Å друг от друга (соответствующие значения функций ξ^\pm показаны вертикальной штриховой линией на рис. 6, *b*) в центре металлической нанотрубки (9,0). Изначально возбужден только атом *A*. Видно периодическое увеличение и уменьшение заселенностей верхних уровней атомов *A* и *B*, происходящее в противофазе, что и означает факт того, что атомы периодически обмениваются виртуальными поверхностными фотонами нанотрубки. При этом энтанглмент $E(\tau)$ пространственно разнесенных атомных состояний достигает значительной величины ~ 0.6 , которая не может быть достигнута в режиме слабой связи атомов с УН (в работах [49, 50] было показано, что в режиме слабой связи с локальным окружением максимальное значение энтанглмента двух пространственно разнесенных атомов не может превышать 0.35). Таким образом, металлическая нанотрубка служит тем промежуточным звеном, благодаря которому атомные состояния могут быть контролируемым образом перепутаны. Учитывая, что в настоящее время существуют технологии выращивания сверхдлинных (до нескольких сантиметров [7, 8]) одностенных УН малого диаметра и технологии их допирования единичными атомами (ионами) [5], предсказываемый эффект приобретает важное значение для квантовых информационных технологий, поскольку по сути представляет собой новый метод передачи квантовой информации нанообъектами на макроскопические расстояния.

6. Заключение

В данной работе был выполнен краткий обзор недавних теоретических исследований квантово-электродинамических процессов в атомно-допированных углеродных нанотрубках. Было показано, что так же, как полупроводниковые наноструктурированные материалы и фотонные кристаллы, УН могут менять характер и силу связи примесного атома с вакуумным фотонным полем, обеспечивая при определенных условиях режим сильной связи атома с полем с образо-

ванием квазиодномерных атомных поляритонных состояний. Такие состояния проявляются в виде Раби-осцилляций в динамике спонтанного распада возбужденного атома вблизи УН и могут быть экспериментально зарегистрированы по Раби-расщеплению линии оптического поглощения атомно-допированных УН в области частот вблизи частоты атомного перехода. Исследован процесс взаимодействия пары атомов (ионов), сильно связанных с вакуумными поверхностными фотонными модами УН, и показано, что металлические нанотрубки малого радиуса обеспечивают значительную степень перепутывания пространственно разнесенных атомных состояний на длительных временах. Предсказываемые эффекты открывают новые возможности по применению атомно-допированных УН в нанопотонике и квантовых информационных технологиях.

Литература

1. *Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S.* Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes 1998.
2. *Dai H.* // Surf. Sci. 2002. Vol. 500. P. 218.
3. *Baughman R. H., Zakhidov A. A., de Heer W. A.* // Science. 2002. Vol. 297. P. 787.
4. *Duclaux L.* // Carbon. 2002. Vol. 40. P. 1751.
5. *Jeong G.-H., Farajian A. A. et al.* // Phys. Rev. 2003. Vol. B 68. P. 075410.
6. *Shimoda H., Gao B. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88. P. 015502.
7. *Zheng L. X., O'Connell M. J. et al.* // Nature Materials. 2004. Vol. 3. P.673.
8. *Huang S. M., Maynor B. et al.* // Advanced Materials. 2003. Vol. 15. P. 1651.
9. *Brandes T.* // Phys. Rep. 2005. Vol. 408. P. 315.
10. *Sørensen A. S., van der Wal C. H. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 063601.
11. *Benjamin S. C., Ardavan A. et al.* // J.Phys.: Condens. Matter. 2006. Vol. 18. P. S867.
12. *Bondarev I. V., Lambin Ph.* // Phys. Lett. A 2004. Vol. 328. P. 235.
13. *Bondarev I. V., Lambin Ph.* // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 035407.
14. *Bondarev I. V., Lambin Ph.* // Solid State Commun. 2004. Vol. 132. P. 203.
15. *Bondarev I. V., Lambin Ph.* // Opt. Spectrosc. 2005. Vol. 99. P. 475.
16. *Bondarev I. V., Lambin Ph.* // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 035451.
17. *Bondarev I. V., Vlahovic B.* // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 74. P. 073401.
18. *Bondarev I. V., Vlahovic B.* // Physica E. 2007. Vol. 37. P. 105.
19. *Bondarev I. V., Vlahovic B.* // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. P. 033402.
20. *Bondarev I. V., Vlahovic B.* // Materials Science and Engineering C. 2007. Vol. 27. P.1117.
21. *Bondarev I. V., Lambin Ph.* // Trends in Nanotubes Research . 2006. P.139.
22. *Bondarev I. V., Lambin Ph.* // Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures. 2005. Vol. 13. P. 21.
23. *Bondarev I. V., Slepuyan G. Ya., Maksimenko S. A.* // Phys. Rev. Let. 2002. Vol. 89. P. 115504.
24. *Ахузезер А. И., Берестецкий В. Б.* Квантовая электродинамика. 1981.
25. *Vogel W., Welsch D.-G.* Quantum Optics. 2006.
26. *Knöll L., Scheel S., Welsch D.-G.* Coherence and Statistics of Photons and Atoms. 2001.
27. *Jorio A., Souza Filho A. G. et al.* // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 121402R.
28. *Jackson J. D.* Classical Electrodynamics. 1962.
29. *Purcell E. M.* // Phys. Rev. 1946. Vol. 69. P. 681.
30. *Давыдов А. С.* Квантовая механика. 1973.
31. *Гайтлер В.* Квантовая теория излучения. 1956.
32. *Andreani L. C., Panzarini G., Gerard J.-M.* // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 13276.
33. *Allen L, Eberly J. H.* Optical Resonance and Two-Level Atoms. 1975.

34. *Li X., Wu Y. et al. // Science. 2003. Vol. 301. P. 809.*
35. *Chen G., Bonadeo N. H. et al. // Science. 2000. Vol. 289. P. 1906.*
36. *Biolatti E., Iotti R. C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 5647.*
37. *Cirac J. I., Zoller P. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 3221.*
38. *Duan L.-M., Kimble H. J. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 127902.*
39. *Zubairy M. S., Kim M., Scully M. O. // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 68. P. 033820.*
40. *Weisbuch C., Nishioka M. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 69. P. 3314.*
41. *Reithmaier J. P., Sęk G. et al. // Nature. 2004. Vol. 432. P. 197.*
42. *Peter E., Senellart P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. P. 067401.*
43. *Yoshie T., Scherer A. et al. // Nature. 2004. Vol. 432. P. 200.*
44. *Henini M. // Materials Today. 2002. Vol. 5(Issue 6). P. 48.*
45. *Michler P., Kiraz A. et al. // Science. 2000. Vol. 290. P. 2282.*
46. *Pelton M., Santori C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 233602.*
47. *Vičković J., Fattal D. et al. // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 82. P. 3596.*
48. *Hughes S. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 227402.*
49. *Dung H. T., Scheel S. et al. // J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. 2002. Vol. 4. P. S169.*
50. *Dung H. T., Knöll L., Welsch D.-G. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 063810.*

QUANTUM ELECTRODYNAMIC PHENOMENA IN ATOMICALLY DOPED CARBON NANOTUBES

I. V. Bondarev*

Latest theoretical studies are being reviewed of the near-field electrodynamic properties of atomically doped carbon nanotubes. It has been shown that, similar to semiconductor microcavities and photonic band-gap materials, carbon nanotubes may qualitatively change the character of the atom-electromagnetic-field interactions, yielding strong atom-field coupling with the subsequent formation of the quasi-one-dimensional (quasi-1D) atomic polariton states representing the eigen states of the full atom-vacuum-field Hamiltonian close to the nanotube. For small-diameter (~1 nm) atomically doped carbon nanotubes, the calculations performed exhibit both the vacuum-field Rabi oscillations in the atomic spontaneous decay dynamics and the corresponding Rabi splitting of the optical absorption line in the frequency range close to the atomic transition frequency – clear signatures of the strong atom-vacuum-field coupling. The stability of the quasi-1D atomic polaritons is mainly determined by the atom-nanotube van der Waals interaction. The calculations of the ground-state atom van der Waals energy performed within a newly developed quantum mechanical approach valid for both weak and strong atom-field coupling demonstrate the inapplicability of conventional (weak-coupling-based) van der Waals interaction models in a close proximity to the nanotube surface. A simple scheme for entangling the quasi-1D atomic polaritons has been studied, and the small-diameter metallic nanotubes are shown to result in sizable amounts of the two-qubit atomic entanglement with no damping for sufficiently long times. This challenges novel applications of atomically doped carbon nanotubes in nanophotonics and quantum information science.

* North Carolina Central University, USA.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УЕДИНЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А. А. Хрущинский, А. Л. Пушкарчук, С. А. Кутень,
С. Я. Килин*, А. П. Низовцев*

1. Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) со времени их открытия Иджимой в 1991 г. [1] сразу привлекли широкое внимание в силу их уникальных физико-химических свойств. Эти свойства позволяют надеяться на широкое их применение в разнообразных областях науки и техники. Мы не будем перечислять возможные применения, поскольку, как правило, любая статья на тему нанотрубок содержит это перечисление.

В данной работе исследуются механические свойства одностенных углеродных нанотрубок. Из механических свойств выбраны важные для разработки новых материалов упругие константы (модуль Юнга, модуль изгиба, модуль кручения).

Следует заметить, что несмотря на значительное количество работ, посвященных экспериментальному определению упругих констант УНТ и материалов на их основе, количество надежных экспериментальных данных на эту тему весьма ограничено, что связано со сложностью манипулирования наноразмерными объектами. Практически полностью отсутствуют экспериментальные данные по модулю кручения нанотрубок, а те, которые есть, скорее вызывают сомнение, чем доверие. Из-за малого диаметра нанотрубки осуществить корректно чисто торсионную нагрузку на уединенную нанотрубку очень сложно. Для эксперимента используют обычно связку УНТ и вычисляют потом модули кручения уединенной нанотрубки [2]. Такая процедура дает завышенную оценку модуля (~1 ТПа). Однако уже в работе [3] эксперименты были проведены на единичных нанотрубках и дали в результате (хотя и с большой ошибкой) оценку модуля кручения 0.41 ± 0.36 ТПа. Оценки же методом молекулярной динамики дают величину порядка нескольких сотен ГПа, т. е. близки к оценке в работе [3].

Вместе с тем на практике торсионные деформации являются довольно частым явлением. Поэтому расчеты на основе молекулярной динамики и квантовой химии упругих констант для нанотрубок представляют непосредственный интерес для практики. Модуль Юнга для свободных от примесей нанотрубок был получен в ряде работ на основе различных экспериментальных методик. В работе [4] это было сделано на основе исследования амплитуды тепловых колебаний концов нанотрубки, в [5] с помощью атомного силового микроскопа, исследуя деформацию изгиба. Экспериментальный результат для модуля Юнга лежит в пределах одного ТПа. Это близко к значениям модуля Юнга для графита, однако экспериментальные ошибки достаточно велики. Большой разброс имеет место и в теоретических оценках [6], см. также [8] и ссылки в ней.

* Институт физики НАН Беларуси, Минск.

Определение упругих констант важно во многих прикладных аспектах, в частности при производстве композитов на основе УНТ, разработке и производстве наномеханизмов.

Уединенная нанотрубка характеризуется двумя целыми числами (индексы киральности). Эти числа определяют все свойства нанотрубок. Данная работа посвящена исследованию зависимости механических свойств (упругие константы при деформации растяжения, изгиба и кручения) УНТ от индексов киральности.

2. Расчет на основе методов молекулярной динамики упругих постоянных углеродных нанотрубок различной киральности

Для расчета упругих постоянных УНТ были использованы методы молекулярной динамики (МД). Хотя они базируются на классических уравнениях Ньютона, МД достаточно успешно описывает динамику атомов в сложных молекулах в широком диапазоне условий, исключая область очень низких температур.

Итак, основные уравнения МД есть уравнения Ньютона:

$$\frac{d^2 r^i}{dt^2} = F^i(r^1, \dots, r^i, \dots) = -\frac{\partial V(r^1, \dots, r^i, \dots)}{\partial r^i} \quad (1)$$

или уравнения Гамильтона, определяемые гамильтонианом:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(r^1, \dots, r^j, \dots), \quad (2)$$

где $V(r^1, \dots, r^j, \dots)$ – потенциал взаимодействия атомов в молекуле и моделирующий химические связи. Различные варианты метода МД отличаются в основном формой этого потенциала. Для описания C–C, C–H и других углеродных связей используют обычно Терсов – Бренер (Tersoff – Brenner) потенциал [12–16]:

$$V(r_{ij}) = f_c(r_{ij})(f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})), \quad (3)$$

где $f_R(r) = Ae^{-\lambda_1 r}$; $f_A(r) = -Be^{-\lambda_2 r}$, а функция обрезания $f_c(r)$ определяется уравнением

$$f_c(r) = \begin{cases} 1 & r < (R - D) \\ 0.5 - 0.5 \sin(0.5\pi(R - D) / D) & (R - D) < r < (R + D) \\ 0 & r > (R + D) \end{cases} \quad (4)$$

Функция b_{ij} определяется характером связи (одиночная, двойная, тройная), а также углами между соседними связями для учета стереохимических эффектов. Параметры этого потенциала выбираются из соображений наилучшей подгонки длины связи и ее энергии в основном состоянии молекулы. Явный вид b_{ij} можно найти в работах [12–16]. R – длина связи, D – длина переходной об-

ласти функции обрезания. Один из возможных наборов параметров приведен в табл. 1 [12].

В МД межмолекулярное взаимодействие (Ван-дер-Ваальса) описывается обычно с помощью потенциала Ленарда – Джонсона (Lennard – Jones) [17]:

$$V^{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (5)$$

Для исследования равновесных конфигураций основного уровня необходимо найти безусловный минимум суммарной энергии. При решении динамических проблем задача моделирования в МД сводится к решению большого числа связанных обыкновенных дифференциальных уравнений с указанными выше потенциалами.

Таблица 1

Основные параметры потенциала Tersoff – Benner

A (эВ)	B (эВ)	λ_1 (Å ⁻¹)	λ_2 (Å ⁻¹)	R (Å)	D (Å)
13036	346.7	3.4879	2.2119	1.95	0.2

В большинстве программ молекулярного моделирования на этих решениях строятся функционалы полной энергии, полной кинетической энергии, полной потенциальной энергии. Ясно, что эти функционалы зависят от начальных условий. Если начальные условия выбрать так, чтобы они соответствовали чистой деформации определенного вида, то эти функционалы будут зависеть от величины этой деформации. Тогда, используя приемы континуальной теории упругости, будем иметь:

1. Продольное сжатие и модуль Юнга

$$Y = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 W_{axial}}{\partial \varepsilon^2}, \quad (6)$$

где W_{axial} – энергия упругой деформации, ε – относительная деформация (сжатие или растяжение), V_0 – объем оболочки, моделирующей нанотрубку ($V_0 = 2\pi L R \delta R$), L – длина нанотрубки, R – радиус УНТ, δR – толщина оболочки. Однако в отношении последней нет единого подхода. Чаще всего значение этой величины принимают равным расстоянию между графитовыми плоскостями, т. е. 0.34 нм. Мы также в данной работе принимаем это соглашение. Хотя в работе [7] использовалась толщина оболочки 0.06 нм, и именно в ней была получена наиболее завышенная величина оценки модуля Юнга, существенно выше экспериментальной.

2. Деформация изгиба

Жесткость на изгиб определяется уравнением [22]

$$K = \frac{1}{L} \frac{\partial^2 W_b}{\partial C^2}, \quad (7)$$

где W_b – энергия деформации изгиба, L – длина нанотрубки, C – кривизна изгиба

УНТ, которая соотносится с углом изгиба θ формулой $C = \theta/L$. Из общей теории цилиндрических оболочек [23] следует связь жесткости K с модулем Юнга Y :

$$K = Y_b \delta R (\pi R^3). \quad (8)$$

3. Деформация кручения

Формула для расчета модуля кручения в данном случае есть [22]

$$G_\theta = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 W_{tw}}{\partial \gamma^2}, \quad (9)$$

где W_{tw} – упругая энергия деформации кручения, V_0 – равновесный объем, определяемый в данном случае выражением

$$V_0 = 2\pi L R \delta R. \quad (10)$$

Величина γ равна длине дуги закручивания, отнесенной к длине нанотрубки:

$$\gamma = \frac{R \varphi}{L}. \quad (11)$$

L – длина; R – радиус УНТ в равновесном состоянии; δR – толщина стенок нанотрубки.

2.1. Подготовка исходного напряженного состояния нанотрубки различных киральностей

Исходная геометрия деформированного состояния нанотрубки приготавливалась с помощью программы NanotubeModeler. Для исследования эффектов киральности на механические свойства нанотрубок были взяты нанотрубки примерно одного радиуса и шести киральностей. Основные свойства выбранных нанотрубок приведены в табл. 2.

Таблица 2

Киральность использованных нанотрубок (n, m), их радиус, длина и объем оболочки в предположении, что ее толщина равна 0.34 нм. Длина УНТ относится к трубкам, подвергавшимся деформации изгиба и кручения, для сжатия это было 80 Å

(n, m)	8,0	6,2	5,3	6,3	5,4	5,5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
L (Å)	45.0	45.0	45.0	45.0	45.0	45.0
V_0 (Å ³)	2789.52	2514.96	2441.39	2767.98	2724.02	3020.11

Для каждой нанотрубки с заданной киральностью и длиной приготавливались деформированные состояния. Исследуемые деформации: аксиальное растяжение/сжатие, изгиб, кручение. На рис. 1 приведены изображения нанотрубок до и после деформации для деформации изгиба.

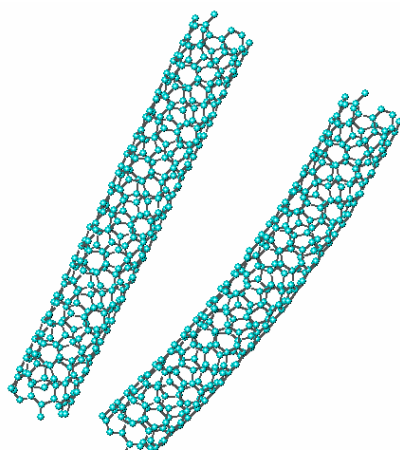


Рис. 1. Деформация изгиба (слева исходная трубка (8,0), справа – деформированная)

2.2. Расчет и результаты для упругой энергии и оценки упругих модулей в случае незаполненных нанотрубок

Используя приготовленные начальные состояния для разных видов и значений деформаций с помощью программы «HyperChem», были рассчитаны функционалы полной энергии для всех упомянутых выше нанотрубок. В качестве примера величины полной энергии нанотрубки в зависимости от величины деформаций приведены на рис. 2. для нанотрубки с киральными индексами (8,0).

Используя уравнения (7–9), были определены соответствующие упругие постоянные.

1. Модуль Юнга

Таблица 3

Величины модуля Юнга (Y) для УНТ разной киральности

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
Y (ТПа)	1.32	1.38	1.24	1.25	1.23	1.24

Из таблицы 3 видно, что величина модуля Юнга в пределах ошибок ($\sim 30\%$) расчетов не зависит от киральности. Более того, она в пределах тех же ошибок [8] не зависит и от радиуса.

Имеющиеся в наличии к настоящему времени экспериментальные значения приведены в табл. 4.

Они были определены двумя методами: исследованием спектра тепловых колебаний нанотрубки и методом измерения возвращающей силы с помощью атомного силового микроскопа.

Таблица 4

Известные экспериментальные значения модуля Юнга

Метод	Тепловые колебания [18] МСУНТ	Возвращающая сила при изгибе [19] МСУНТ	Тепловые колебания [20] УНТ	Возвращающая сила при изгибе [21] УНТ
Y (ТПа)	1.8 ± 1.4	1.28 ± 0.59	1.7 ± 1.4	1.0

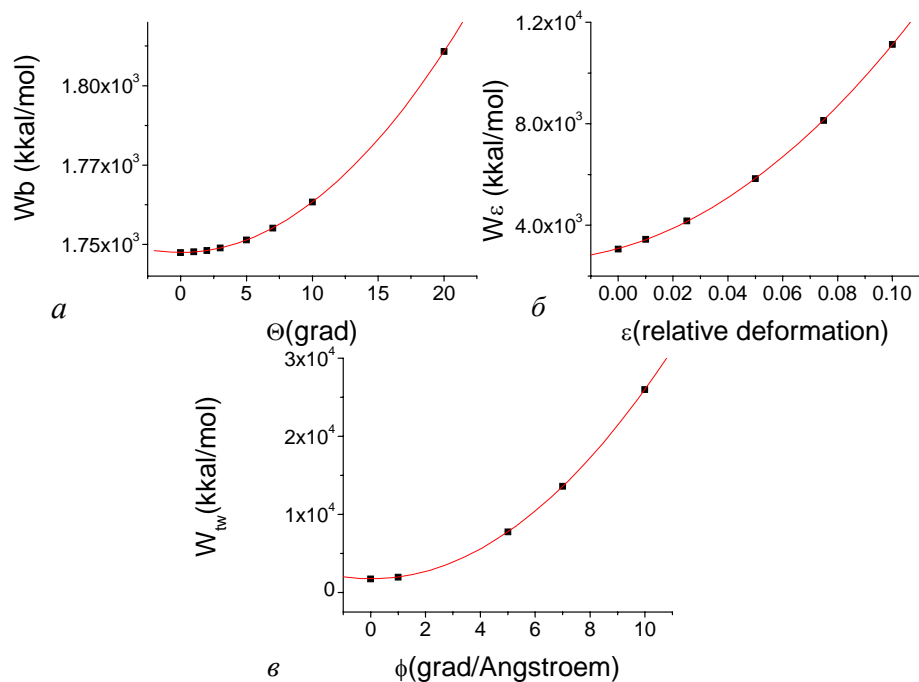


Рис. 2. Рассчитанные значения функционалов полной энергии как функции соответствующих деформаций для: *a* – деформация изгиба; *б* – деформация растяжения; *в* – деформация кручения

Видно, что полученные нами значения модуля Юнга в пределах экспериментальных и расчетных ошибок совпадают с экспериментальными. Они также совпадают с большинством оценок других авторов, см. в работе [8].

2. Деформация изгиба

Таблица 5

Значение жесткости K и модуля Юнга Y_b на изгиб для нанотрубок разной киральности

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
K (эВ·мкм)	0.203	0.149	0.135	0.199	0.186	0.264
Y_b (ТПа)	1.013	1.015	1.006	1.020	0.997	1.039

Как видно из табл. 5, здесь так же, как и в предыдущем пункте, модуль Юнга не зависит от киральности в пределах ошибок моделирования. Что касается жесткости, то, как известно [22], она зависит от радиуса по кубическому закону. Поскольку мы исследовали зависимость упругих постоянных от киральности, то были выбраны нанотрубки примерно одинакового радиуса и упомянутый выше закон не мог проявиться достаточно отчетливо.

3. Деформация кручения

Таблица 6

Значение модуля Юнга кручения G_θ для нанотрубок различной киральности

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
G_θ (ТПа)	0.383	0.386	0.304	0.344	0.286	0.271

Как уже говорилось во введении, надежные экспериментальные данные по модулю кручения в настоящее время отсутствуют по понятным причинам. Наш результат соответствует результатам расчетов других авторов, в частности [24] и экспериментальным результатам в [3], хотя в три раза меньше, чем в [2]. Анализ табл. 6 показывает наличие, хотя и слабой, зависимости модуля кручения от киральности нанотрубок. Нанотрубка (8, 0) имеет больший модуль кручения, нежели нанотрубки (5, 4) и (5, 5), имеющие примерно тот же радиус, что и нанотрубка (8, 0).

2.3. Расчет и результаты для упругой энергии и упругих постоянных в случае нанотрубок, содержащих одну молекулу водорода

Исходная структура деформированного состояния была такая же, как и в п. 2, но в деформированную нанотрубку в центр помещалась одна молекула водорода. По уравнениям (7–9) были рассчитаны жесткость и модуль Юнга на изгиб для нанотрубок, содержащих молекулу водорода. Их значения приведены в табл. 7.

Таблица 7

Значение жесткости K и модуля Юнга Y_b на изгиб для нанотрубок разной киральности при наличии двух атомов водорода в нанотрубке

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
K (эВ·мкм)	0.2025	0.148	0.135	0.199	0.185	0.263
Y_b (ТПа)	1.0108	1.011	1.006	1.018	0.995	1.036
G_θ (ТПа)	0.384	0.382	0.307	0.356	0.287	0.271

Сравнение величин жесткости и модуля Юнга из табл. 5 и 7 показывает, что существенной разницы между ними нет. Это и следовало ожидать, поскольку ван-дер-ваальсово взаимодействие атомов водорода с нанотрубкой достаточно слабо, чтобы изменить ощутимо упругие константы УНТ.

Таблица 8

Значение модуля изгиба для нанотрубок различной киральности, содержащих 10 молекул водорода

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
K (эВ·мкм)	0.2024	0.161	0.135	0.199	0.186	0.263
Y_b (ТПа)	1.010	1.097	1.008	1.018	0.997	1.035

3. Частоты собственных мод колебаний в МД описании

Расчет частот собственных мод колебаний в МД подходе сводится к тому, что нанотрубку подвергают сначала определенной деформации, готовится состояние, когда атомы углерода сдвинуты из положения равновесия. После этого прослеживается динамика всех атомов УНТ, решая связанную систему обыкновенных дифференциальных уравнений (см. выше), рассматривая приготовленное состояние как начальное. На решениях этих уравнений строятся функционалы полной кинетической и потенциальной энергии.

Ясно, что собственные моды низкочастотных колебаний УНТ присутствуют в этих функционалах. Большинство программ МД рассчитывают эти функционалы. Исследовав Фурье спектр этих функционалов, определяют собственные моды. Такой подход был реализован нами для всех отобранных нанотрубок, но результат приводится ниже только для УНТ (8,0) для двух случаев начальной деформации: сжатие и изгиб. На рис. 3 представлены амплитудные спектры потенциальной энергии для этих двух случаев. Для случаев сжатия и сдвига присутствуют частоты:

- деформация сжатия: $f \sim 0.1$ ТГц; 0.57 ТГц; 1.15 ТГц; 6.26 ТГц;
- деформация сдвига: $f \sim 0.141$ ТГц; 0.413 ТГц; 6.26 ТГц.

Эти величины достаточно хорошо совпадают с величинами, приведенными в табл. 9 для нанотрубки (8,0)

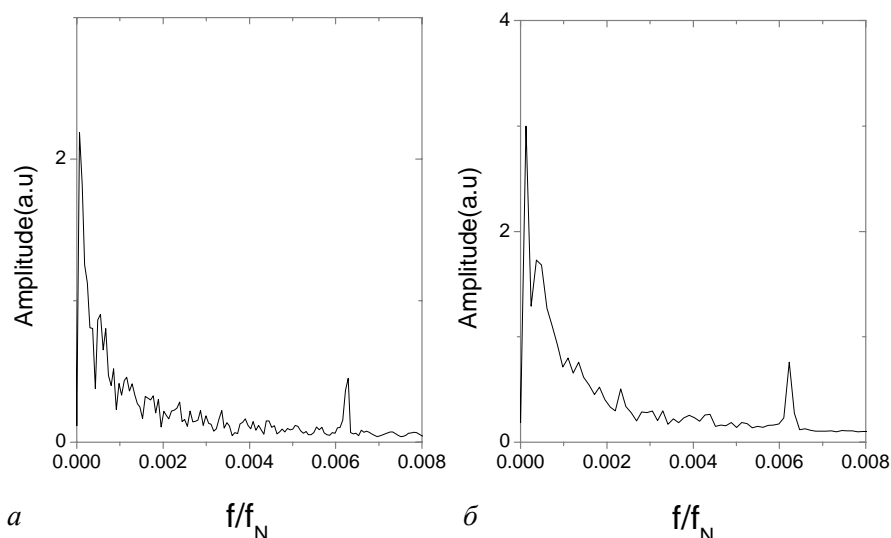


Рис. 3. Амплитудный спектр колебаний потенциальной энергии. По оси абсцисс – частота в долях частоты Нейквиста = 10^{15} ГГц, по вертикальной оси – амплитудный спектр: *a* – при возбуждении нанотрубки за счет продольного сжатия; *b* – при возбуждении нанотрубки за счет изгиба

Полученные частоты могут быть сравнимы с оценками по теории оболочек, поскольку модули Юнга были уже оценены выше. Так, для колебаний вдоль оси нанотрубки, имеем [25]

$$\omega = \frac{1}{4L} \sqrt{\frac{Y}{\rho}}, \quad (12)$$

где Y – модуль Юнга, L – длина нанотрубки (в нашем рассмотрении – 45 Å), ρ – плотность вещества оболочки в оболочечной модели нанотрубки, которая при условии, что толщина оболочки принята равной 3.4 Å, составляет величину порядка $9.5 \cdot 10^3 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$.

Для поперечных (изгибных) мод имеем более сложную формулу [25]:

$$f_i = \frac{k_i^2}{2\pi L^2} \sqrt{\frac{Y_b I}{\rho A}}, \quad (13)$$

где Y_b – модуль Юнга на изгиб, I – момент инерции = $\pi R t (4R^2 + t^2)$, A – площадь сечения оболочки, моделирующей нанотрубку = $2\pi R t$, k_i – константы, рассчитываемые из модели оболочек и для трех нижних мод, принимающие значения 1.875, 4.694, 7.855 соответственно, t – толщина оболочки.

В соответствии с ранее рассчитанными значениями модуля Юнга для выбранных нами УНТ имеем следующие значения частот (табл. 9).

Таблица 9

Значения частот продольных колебаний нанотрубок (f) и частот трех первых мод поперечных колебаний (f_1, f_2, f_3) нанотрубок различной киральности из теории оболочек

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
Y (ТПа)	1.32	1.38	1.24	1.25	1.23	1.24
F (ТГц)	0.104	0.106	0.101	0.101	0.101	0.101
Y_b (ТПа)	1.013	1.015	1.006	1.020	0.997	1.039
f_1 (ТГц)	0.143	0.132	0.129	0.142	0.196	0.154
f_2 (ТГц)	0.895	0.829	0.808	0.893	0.872	0.965
f_3 (ТГц)	2.507	2.322	2.262	2.501	2.44	2.702

Эти результаты следует сравнить для трубки (8, 0) с теми, что получены методом МД. Согласие довольно хорошее.

Как видно из табл. 9, частоты продольных колебаний довольно отчетливо зависят как от радиуса, так и от индексов киральности. Это означает, что исследуя спектр поперечных низкочастотных колебаний нанотрубок, можно попытаться определить одновременно киральность и радиус УНТ.

На обоих графиках можно видеть максимум на частоте: $f = 0.0063 f_N = 6.3 \cdot 10^{12} \text{ Гц} = 200 \text{ см}^{-1}$, эта частота соответствует нижней частоте комбинационного рассеяния для нанотрубки [26] и лежит в терагерцовой области.

4. Заключение

В работе приведены результаты модельных расчетов упругих постоянных углеродных нанотрубок различной киральности и примерно одинакового радиуса. Рассматривались свободные недопированные нанотрубки, нанотрубки, допированные одной молекулой водорода, допированные многими молекулами водорода. Используя методы и программы для молекулярной динамики, показано следующее.

Модуль Юнга для недопированных нанотрубок различной киральности лежит в диапазоне 1.23–1.38 ТПа и слабо зависит от киральности и радиуса [8] нанотрубок. Эти утверждения хорошо совпадают с утверждениями других авторов, производивших расчеты упругих постоянных, и немногочисленными экспериментальными данными (1.28 ± 0.59 [19] – 1.8 ± 1.4 [18]).

Жесткость на изгиб и модуль изгиба для исследованного набора нанотрубок лежат в диапазонах 0.135–0.264 эВ·мкм и 0.997–1.036 ТПа соответственно. Большой разброс жесткости определяется кубической зависимостью жесткости от радиуса и разбросом, хотя и слабым по радиусу исследуемого набора нанотрубок. Что же касается модуля изгиба, то он не зависит в пределах ошибок моделирования от киральности и радиуса.

Модуль кручения для рассмотренных нанотрубок лежит в диапазоне 0.271–0.383 ТПа. Имеет место слабая зависимость от индексов киральности нанотрубки. Для практических целей ею можно, как правило, пренебречь. У большинства авторов, проводивших моделирование упругих свойств нанотрубок с помощью методов молекулярной динамики или квантовой химии, значения модуля кручения с точностью до 30 % совпадают с полученными в настоящей работе.

Экспериментальное значение [2], полученное на жгуте нанотрубок, составляет величину ~ 1 ТПа и вряд ли может рассматриваться как надежный результат. Экспериментальное значение модуля кручения (0.41 ± 0.36 ТПа), полученное в работе [3], достаточно близко к полученным в нашей работе.

Исследование тех же модулей для нанотрубок, содержащих в центре одну или несколько молекул водорода, показало, что эти модули совпадают в пределах точности с таковыми для недопированных нанотрубок.

Тот факт, что значения упругих модулей не меняется от наличия молекулярного водорода в нанотрубке, позволяет утверждать, что можно использовать анализ колебаний нанотрубок для оценки содержания водорода в нанотрубке, что очень важно, если нанотрубки найдут применение в водородной энергетике.

В работе проведено исследование низкочастотных колебаний отобранных нанотрубок. Было установлено, что частоты продольных (вдоль оси нанотрубки) колебаний не зависят от индексов киральности, в то время как для поперечных (иницированных изгибом нанотрубки) колебаний имеет место явная зависимость частоты от индексов киральности. Этот факт может послужить отправным пунктом для развития методов экспериментального определения индексов киральности нанотрубок.

То, что на спектрах потенциальной энергии присутствует частота комбинационных колебаний 200 см^{-1} , говорит о том, что методы молекулярной динамики позволяют проводить расчеты спектров комбинационного (рамановского) рассеяния на нанотрубках, по крайней мере, для низкочастотного участка.

Литература

1. Iijima S. // Nature. 1991. Vol. 354. P. 56
2. Salvetat J. P., Andrew G. et al. // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 82. P. 944.
3. Hall A. R., An L. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. P. 256102.
4. Treacy M. M. J., Ebbesen T.W., Gibson J. M. // Nature. 1996. Vol. 381. P. 678.
5. Wong E. W., Seedan P. E., Lieber C. M. // Science. 1997. Vol. 277. P. 1971.
6. Iijima S., Brabec C. et al. // J.Chem.Phys. 1996. Vol. 104. P. 2089.
7. Yakobson B. I., Brabec C., Bernholc J. // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 2511.
8. Елецкий А. В. // УФН. 2007. Vol. 177. P. 233.
9. Brenner D. W. // Phys. Stat. Sol. B. 2000. Vol. 217. P. 23.
10. Brenner D. W., Shenderova O. A. et al. // J. Phys. Condens. Matter. 2002. Vol. 14. P. 783.
11. Tersoff J. // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61. P. 2872.
12. Brenner D. W. // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 9458.
13. Tadmor E. B., Smith, G. S. et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 235.
14. Lennard-Jones J. E. // Proc. Physical Society. 1931. Vol. 43. P. 461.
15. Poncharal P. et al. // Science. 1999. Vol. 283. P. 1513.
16. Iijima S. et al. // J.Chem.Phys. 2000. Vol. 104. P. 2089.
17. Treacy M. M. J. et al. // Nature. 1996. Vol. 381. P. 678.
18. Wong W. E. et al. // Science. 1997. Vol. 277. P. 1991.
19. Srivastava D., Wei C., Cho K. // ASME. 2003. Vol. 56. P. 215.
20. Li C., Chou T-W. // Int. J. Solids Structures. 2003. Vol. 40. P. 2487.
21. Ming-Jun C., Ying-Chun L. et al. // Chinese Phys. 2006. Vol. 15. P. 2676.
22. Chen X., Cao G. // Nanotechnology. 2006. Vol. 17. P. 1004.
23. Ястебов Н. Г., Иванов-Омский В. И., Кособужин В. А. // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 30. С. 47.

RESEARCH OF MECHANICAL PARAMETERS OF INDIVIDUAL CARBON NANOTUBES BY METHODS OF THE MOLECULAR DYNAMIC

**A. A. Khrutchinsky, A. L. Pushkarchuk, S. A. Kuten, S. Ja. Kilin*,
A. P. Nizovtsev***

Elastic modules of nanotubes have been investigated by methods of the molecular dynamics. It has been shown, that the Young's modulus for undoped nanotubes of a different chirality lays in the range 1.23–1.38 TPa and slightly depends on their chirality and radius.

Bending stiffness and modulus for the investigated set of nanotubes lay in the ranges 0.135–0.264 eV um and 0.997–1.036 TPa, respectively. The torsion modulus for nanotubes of interest lays in the range 0.271–0.383 TPa showing a weak dependence on chirality indexes.

Low frequency oscillations of nanotubes under consideration has been carried out. It has been shown, that frequencies of longitudinal (along the nanotube axis) oscillations do not depend on chirality indexes, while for transversal (initiated by curving of a nanotube) oscillations a certain relation between the frequency and chirality indexes takes place. This fact can be a start point for development of experimental methods for the determination of the nanotube chirality indexes.

* Institute of Physics, Minsk, Belarus.

ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ

А. В. Мадьяров

Оптические и электронные свойства квантовых точек (КТ) в настоящее время являются объектом интенсивных исследований благодаря потенциальным возможностям их применения в различных областях науки и техники: в физике полупроводниковых устройств, для создания принципиально новых светодиодов и лазеров [1], элементов хранения и передачи квантовой информации [2].

В последнее десятилетие выполнен ряд исследований соответствий и принципиальных отличий между атомными двухуровневыми системами и экситонами в КТ. В частности, в КТ были обнаружены явления, аналогичные наблюдаемым в атомах: экситонный оптический эффект Штарка, фотонное эхо и осцилляции Раби (ОР).

ОР – фундаментальное явление в физике двухуровневых систем. При взаимодействии такой системы (например, атома, экситона в полупроводниковой квантовой яме или в квантовой точке) с электромагнитным полем высокой интенсивности возникает периодическое изменение ее квантового состояния (см., например, [3, 4, 5]). В результате путем изменения интенсивности оптического возбуждения возможно осуществлять управление процессами перехода системы между уровнями, т. е. осуществлять элементарные логические операции (логическое НЕ, И, ИЛИ и др.). Экситонные ОР в КТ наблюдались экспериментально в ряде работ (см. например, [3]). Показано, что данное явление может быть использовано для выполнения различных логических операций, что дает возможность создания элементов на основе КТ для выполнения квантовых вычислений [3].

В настоящее время большую актуальность приобретают исследования, направленные на изучение физических свойств системы «КТ + электромагнитное поле» и определение условий, при которых они могут оказывать влияние на характеристики осцилляций Раби и, как следствие, на логические вычисления. Особенность квантовой точки заключается в том, что ее внутреннее поле, действующее на носители заряда (локальное поле), отлично от воздействующего [6]. В рамках макроскопической электродинамики локальное поле \mathbf{E}_L определяется выражением [6] $\mathbf{E}_L = \mathbf{E}_0 - 4\pi\mathbf{N}\langle\hat{\mathbf{P}}\rangle$, где \mathbf{N} – тензор деполяризации, определяемый формой КТ, $\langle\hat{\mathbf{P}}\rangle$ – макроскопическая поляризация. Второй член является деполяризующим полем, возникающим вследствие экранирования внешнего поля зарядами, индуцированными на поверхности КТ. Учет локального поля в КТ, взаимодействующей с классическими полями, приводит к возникновению точки бифуркации и ангармонизма в ОР, а также нелинейной зависимости периода колебаний от напряженности внешнего поля [7]. Подобное поведение периода экспериментально наблюдалось в системе из изолированных квантовых островков, локализованных в одиночной квантовой яме [8]. В настоящей работе теоретически исследуется влияние локального поля на характеристики осцилляций Раби экситона в

КТ, взаимодействующей с различными классическими и квантовыми полями.

Пусть одиночная сферическая КТ взаимодействует с одномодовым электромагнитным полем, линейно поляризованным вдоль оси x КТ, которое возбуждает в ней одиночную электрон-дырочную пару (экситон). В дальнейшем экситон в КТ рассматривается как пространственно ограниченный, квантовый двухуровневый осциллятор. При этом считается, что кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой считается пренебрежимо малым. При взаимодействии с классическим полем, имеющим частоту ω : $E(t) = E_{0x}(t) \equiv E_0 = \tilde{E}(t) \cos \omega t$, рассматриваемая система описывается гамильтонианом:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V\hat{P}E_0 + \Delta\hat{H}. \quad (1)$$

В данном соотношении, H_0 – гамильтониан электрон-дырочной пары, V – объем КТ, $\hat{P} = V^{-1}(\mu\hat{b}^+ + \text{Э.с.})$ – оператор поляризации, в выражении которого μ – компонента дипольного момента перехода экситона между уровнями, \hat{b}^+ (\hat{b}) – операторы рождения (уничтожения) экситона. Последний член в (1), учитывает эффект локального поля в системе:

$$\Delta H = (4\pi/3V)|\mu|^2 (\hat{b}\langle\hat{b}^+\rangle + \hat{b}^+\langle\hat{b}\rangle).$$

Пусть зависящая от времени волновая функция системы «КТ + электромагнитное поле» определяется выражением [4, 6]: $|\psi\rangle = A(t)|e\rangle + B(t)|g\rangle$, в котором A , B являются амплитудами вероятности нахождения экситона в возбужденном $|e\rangle$ и основном $|g\rangle$ состояниях соответственно. После подстановки данной волновой функции и гамильтониана (1) во временное уравнение Шредингера и использования приближения медленно меняющихся амплитуд, можно получить следующую систему уравнений:

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = \hbar\Delta\omega A|B|^2 - \frac{1}{2}\Omega_R B e^{i\delta}, \quad i\hbar \frac{dB}{dt} = \hbar\Delta\omega B|A|^2 - \frac{1}{2}\Omega_R A e^{-i\delta}. \quad (2)$$

В данных уравнениях $\Omega_R = |\mu|\tilde{E}(t)/\hbar$ – частота Раби, $\delta = \omega - \omega_0$ – частотная расстройка, ω_0 – частота перехода экситона. Величина

$$\Delta\omega = \frac{4\pi}{3\varepsilon_h\hbar V}|\mu|^2 \quad (3)$$

является постоянной локального поля (деполяризационным сдвигом), ε_h – диэлектрическая проницаемость материала КТ вдали от экситонного резонанса.

При взаимодействии КТ с одномодовым квантовым электромагнитным полем: $\hat{E}_0 = g\hat{c} + \text{Э.с.}$ (\hat{c}/\hat{c}^+ – операторы рождения/уничтожения фотонов, g – константа взаимодействия экситона с электромагнитным полем). Тогда гамильтониан системы может быть представлен в виде

$$H = H_0 + H_{\text{ph}} + V\hat{P}\hat{E}_0 + \Delta H, \quad (4)$$

где H_{ph} – гамильтониан фотонов поля. В данном случае, зависящая от времени волновая функция системы «КТ + квантовое электромагнитное поле» определяется следующим образом [4, 6]: $|\psi\rangle = \sum_{n \geq 0} [A_n(t)|e\rangle + B_n(t)|g\rangle]|n\rangle$, где A_n , B_n

являются амплитудами вероятности нахождения экситона в возбужденном $|e\rangle$ и основном $|g\rangle$ состояниях соответственно; $|n\rangle$ обозначает состояние поля с n фотонами.

$$i \frac{dA_n}{dt} = \Omega_n B_{n+1} e^{i\delta t} + \Delta \omega B_n \sum_{m=0}^{\infty} A_m B_m^*, \quad i \frac{dB_{n+1}}{dt} = \Omega_n^* A_n e^{-i\delta t} + \Delta \omega A_{n+1} \sum_{m=0}^{\infty} A_m^* B_m. \quad (5)$$

В данных уравнениях $\Omega_n = g\sqrt{n+1}$. Таким образом, в отличие от классического случая атомной системы [4, 5] взаимодействие КТ с электромагнитным полем определяется двумя частотными параметрами взаимодействий, частотой Раби и $\Delta\omega$, в зависимости от соотношения между которыми, как будет показано ниже, могут возникать два типа ОР.

Из системы (3) можно найти инверсную населенность (далее просто инверсность), определяемую как разность населенностей возбужденного и основного состояний экситона: $w(t) = \sum_n (|A_n(t)|^2 - |B_n(t)|^2)$. Данная величина будет использована для анализа временной эволюции ОР.

Пусть экситон в КТ, находящийся в момент $t = 0$ в основном состоянии, взаимодействует с электромагнитным полем в когерентном состоянии: $|s\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} F_n(0)|n\rangle$, где $F_n(0) = \exp[-\langle n(0)\rangle/2] \langle n(0)\rangle^{n/2} / \sqrt{n!}$ – функция распределения фотонов и $\langle n(0)\rangle$ среднее число фотонов в поле. Тогда начальные условия для (3) имеют следующий вид: $A_n(0) = 0$, $B_n(0) = F_n(0)$. Для изучения ОР удобно ввести безразмерный параметр $\xi = \Omega_{\langle n \rangle} / \Delta\omega$, в котором $\Omega_{\langle n \rangle} = 2g\sqrt{\langle n(0)\rangle}$ является усредненной частотой Раби, характеризующей напряженность светового поля [4]. Ограничимся рассмотрением процесса взаимодействия системы при отсутствии релаксации и в режиме точного резонанса: $\delta = 0$. На рис. 1 отображены результаты расчетов инверсности для $\langle n(0)\rangle = 9.0$ и различных значений ξ . Известно, что картина ОР в идеальной атомной системе (при отсутствии локального поля и релаксационных процессов), взаимодействующей с одномодовым когерентным полем, не зависит от параметра g [4, 5]. При этом во временной эволюции инверсности возникают области коллапса и спонтанных возрождений населенностей [4, 5]. Численное решение уравнений (3) показывает, что при больших ξ ($\xi \geq 40$) поведение ОР аналогично случаю отсутствия локального поля ($\xi \rightarrow \infty$ при $\Delta\omega \rightarrow 0$), как показано на рис. 1, e.

В зависимости от ξ в ОР возникают два различных режима колебаний. Первый из них проявляется при $\xi < 0.5$ и характеризуется периодическими осцилля-

циями инверсности в диапазоне $-1 \leq w(t) \leq -0,5$ (рис. 1 *a, б*). Во втором режиме, возникающем при $\xi > 0,5$, инверсность колеблется в диапазоне $-1 \leq w(t) \leq 1$ (рис. 1, *в-е*). Данные два режима разделены точкой бифуркации, возникающей при $\xi_b = 0,5$ (сравните рис. 1, *б* и *в*). В окрестности точки бифуркации поведение Раби осцилляций является хаотическим (рис. 1, *в, з*) и значительно отличается от явления коллапса – возрождений (сравните с рис. 1, *е*).

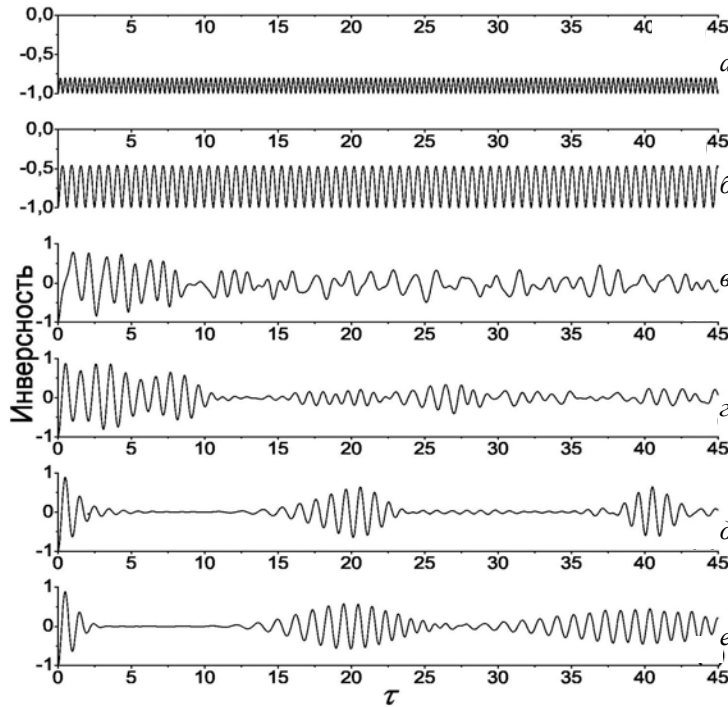


Рис. 1. Временная зависимость инверсности КТ, взаимодействующей с когерентным полем: *a* – $\xi = 0,2$; *б* – $\xi = 0,49$; *в* – $\xi = 0,53$; *з* – $\xi = 1,2$; *д* – $\xi = 3,5$; *е* – $\xi = 40,0$

Появление двух колебательных режимов в ОР, разделенных точкой бифуркации при $\xi = 0,5$ предсказано в работах [7] для КТ, взаимодействующей с классическим электромагнитным полем постоянной интенсивности.

На рисунке 2 отображены результаты расчетов временной эволюции инверсности и среднего числа фотонов в поле, взаимодействующем с КТ: $\langle n(t) \rangle = \sum_n n (|A_n(t)|^2 + |B_n(t)|^2)$. Полагаем $\xi = 0,2$. Из рисунка видно, что мак-

симальным (минимальным) значениям инверсности соответствуют минимальные (максимальные) значения функции $\langle n(t) \rangle$, т. е. ОР соответствуют периодическому обмену фотонами внешнего поля между уровнями экситона в КТ. Следует отметить, что подобное поведение осцилляций полностью обусловлено наличием ло-

кального поля и не следует из стандартной модели Джейнса – Каммингса, в рамках которой в ОР возникают области инверсности с $w(t) = 0$, разделяющие области коллапса и возрождений (см. рис. 1, e) и которым соответствует $\langle n(t) \rangle = 0$.

Качественно зависимость на рис. 2 соответствует случаю взаимодействия идеальной двухуровневой атомной системы с классическим полем при наличии расстройки [4].

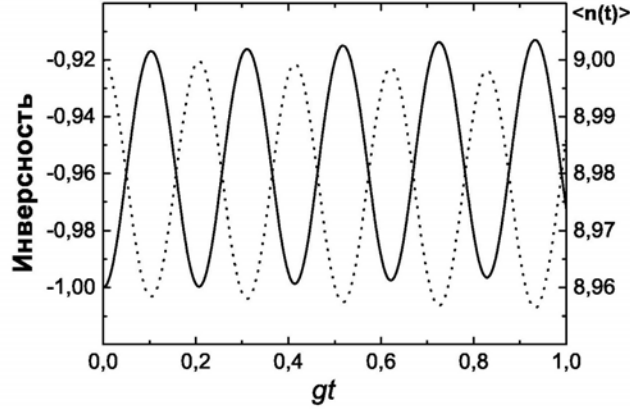


Рис. 2. Временные зависимости инверсности (сплошная линия) и среднего числа фотонов (пунктирная линия) в когерентном поле, взаимодействующем с КТ, при $\xi = 0.2$

Для сферической CdSe КТ радиуса $R \approx 3$ нм и дипольным моментом 15 Дебай оценка для параметра локального поля составляет $\hbar\Delta\omega \approx 8$ мэВ, которое соответствует значению $\hbar\Omega_{\langle n \rangle} \approx 4$ мэВ для случая $\xi_b = 0.5$. Подобное расщепление Раби наблюдаемо в экспериментах по спектроскопии одиночных КТ [10].

Колебательный режим при значениях $\xi > 40$ возникает вследствие «одевания» уровней системы фотонами внешнего поля [4]. Для объяснения возникновения колебаний при $\xi < 0.5$ рассмотрим макроскопическую поляризацию после окончания взаимодействия КТ с полем излучения ($g = 0$). Волновая функция системы в данном случае факторизуется, что позволяет найти аналитическое решение уравнений (5) в виде $A_n(t) = C_n A(t)$ и $B_n(t) = C_n B(t)$, где C_n – произвольные постоянные, удовлетворяющие условию нормировки $|A_n(t)|^2 + |B_n(t)|^2 = 1$. Тогда система (5) преобразуется к виду

$$i \frac{dA}{dt} = \Delta\omega A |B|^2, \quad i \frac{dB}{dt} = \Delta\omega B |A|^2, \quad (6)$$

позволяющему найти аналитическое решение:

$$A(t) = a_0 \exp[-i\Delta\omega |b_0|^2 t], \quad B(t) = b_0 \exp[-i\Delta\omega |a_0|^2 t]. \quad (7)$$

В данных выражениях $a_0 = A(0)$, $b_0 = B(0)$ – произвольные коэффициенты, удовлетворяющие условию $|a_0|^2 + |b_0|^2 = 1$. Данные величины определяют со-

стояние экситона в КТ после окончания взаимодействия. Решения (6) описывают в КТ квазичастицу с волновой функцией $|\tilde{\psi}(t)\rangle = A(t)|e\rangle + B(t)|g\rangle$, движение которой, как следует из (7), является коррелированным. Инверсность $w = |A|^2 - |B|^2$ в общем случае сохраняется во времени. Отметим, что в [6] для скорости Γ распада экситона, в КТ получена оценка: $\Delta\omega \gg \Gamma$. Таким образом, $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ является стабильным состоянием в диапазоне $1/\Delta\omega \ll t \ll 1/\Gamma$.

Для выяснения физического смысла решений (6), рассмотрим макроскопическую поляризацию КТ, определяемую выражением

$$\langle \hat{P} \rangle = \frac{1}{V} \mu \langle b^+ \rangle + \text{к.с.} = \frac{1}{V} \mu a_0 b_0^* e^{-i(\omega_0 - \delta')t} + \text{к.с.}, \quad (8)$$

в котором параметр $\delta' = \Delta\omega$ является самоиндуцированной расстройкой, зависящей от инверсности, т. е. от состояния экситона в КТ и от деполяризационного сдвига. Большие значения δ' приводят к появлению осцилляций Раби малых амплитуд, что подтверждается экспериментально [8]. Качественно это позволяет объяснить зависимости, представленные на рис. 1, а, б и рис. 2. Следует отметить, что подобное поведение ОР возникает и при нерезонансном взаимодействии ($\delta \neq 0$) атомной системы с классическими полями.

Из выражения (8) следует также, что коррелированное движение электрона и дырки, образующих экситон, приводит к возникновению неизохронизма ОР, т. е. зависимости частоты осцилляций от амплитуды, что также наблюдалось в [8].

Рассмотрим теперь взаимодействие одиночной КТ с материальными параметрами, указанными выше, с гауссовым импульсом $E(t) = E_p \exp[-(t/\tau_p)^2]$, где E_p – пиковая напряженность импульса и τ_p его длительность. На рис. 3 отображены результаты расчета зависимости конечного состояния населенности возбужденного состояния экситона в КТ $f_c(t_0) = |A(t_0)|^2$ (получаемого из решения системы (2)) после прохождения импульса, при $t_0 = 0.5\tau_p$, от площади импульса

$$\Theta = \int_{-\infty}^{\infty} \Omega_R(t') dt' \text{ для различных значений } \tau_p. \text{ Данная величина измеряема в спек-$$

троскопии одиночных квантовых точек (см., например, [3]).

Известно, что зависимость финального состояния инверсности идеальной двухуровневой системы от площади импульса в режиме точного синхронизма описывается выражением $f_c(t_0) = \cos \Theta$, что отображено на рис. 3, а пунктирной линией. Расчеты показывают, что при $\tau_p = 0.5$ пкс локальные поля приводят к небольшой перенормировке площади импульса, при которой возникают максимумы и минимумы осцилляций Раби (рис. 3, а (сплошная кривая)). Данное поведение значительно изменяется с увеличением длительности импульса. При $\tau_p = 3.0$ пкс (рис. 3, б) учет локального поля приводит к сдвигу первого максимума осцилляций Раби в область более высоких интенсивностей падающего поля,

а именно к $\Theta = 3.4\pi$. При этом осцилляции Раби обнаруживают ступенчатую зависимость от площади импульса, а также проявляются области, в которых $f_c(t_0) = 0$. Эффект ступенчатой зависимости становится более ярко выраженным при дальнейшем увеличении длительности импульса: при $\tau_p = 5$ пкс, первый максимум возникает при $\Theta = 6.2\pi$ (рис.3, в).

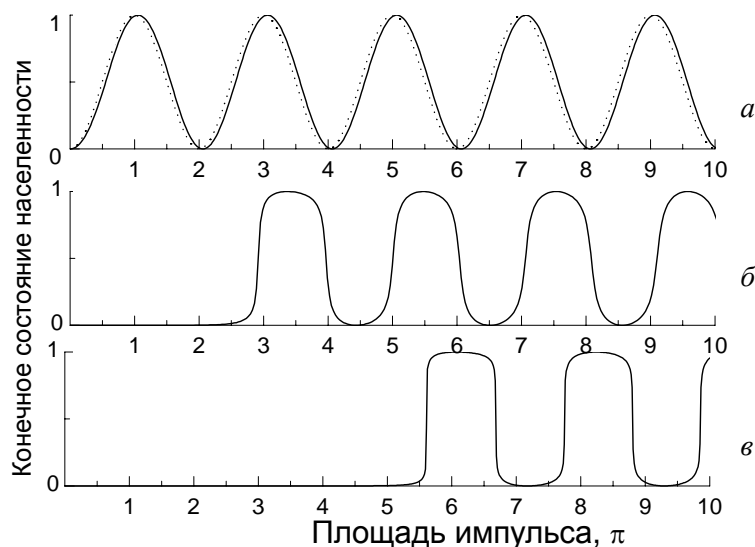


Рис. 3. Зависимость конечного состояния инверсности от площади импульсов различной длительности: а – 0.5 пкс; б – 3.0 пкс; в – 5.0 пкс

Эффект ступенчатых переходов можно использовать для выполнения логических операций. Вследствие того, что система имеет два устойчивых состояния – «0» и «1», путем воздействия оптического возбуждения можно осуществлять управление ее переходами между данными состояниями, что открывает возможность использования квантовой точки в качестве оптического переключателя. Существенное преимущество использования данного эффекта для логических операций заключается в следующем. В традиционном явлении Раби, в котором инверсность системы изменяется по гармоническому закону, для переключения системы из одного состояния в другое необходимо использование импульсов, площадь которых точно кратна π . Это видно также из рис. 3, а. Создание подобных полей является довольно трудной задачей. Эффект локального поля значительно уменьшает точность площади импульса, необходимую для переключения системы между состояниями.

Таким образом, в настоящей работе показано, что в осцилляциях инверсности КТ, взаимодействующей с когерентным полем, возникают два принципиально различных колебательных режима, разделенных точкой бифуркации. В первом колебательном режиме инверсность является периодической функцией времени. При этом явление коллапса – возродений отсутствует. Во втором режиме происходит возникновение коллапса и областей возрождения инверсности, однако они

значительно отличаются от предсказываемых классической моделью Джейнса – Каммингса для атомных систем. Для экситона КТ, взаимодействующей с гауссовым импульсом, зависимость населенности уровней от площади импульса обнаруживает ступенчатую зависимость.

Литература

1. *Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N. N.* Quantum Dot Heterostructures. 1999.
2. Single Quantum Dots, Topics of Applied Physics. 2003.
3. *Kamada H., Gotoh H.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 246401.
4. *Stievater T.H., Xiaoqin L. I.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 133602.
5. *Scully M. O., Zubairy M. S.* Quantum Optics. 2001.
6. *Meunier T.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 010401
7. *Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A.* et al. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 063804.
8. *Slepyan G. Ya., Magyarov A.* et al. // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 045320; *Slepyan G. Ya., Magyarov A.* et al. // Phys. Stat. Sol. C. 2005. Vol. 2. № 2. P.850.
9. *Mitsumori Y., Hasegawa A.* et al. // Phys. Rev. B. 2005. Vol.71. P. 233305.
10. *Jaynes E. T., Cummings F. W.* // Proc. IEEE, 1963, Vol. 51. P.89.
11. *Khitrova G., Gibbs H. M.* et al. // Rev. of Modern Phys. 1999. Vol. 7. P.1591.

THE LOCAL FIELD INFLUENCE ON SIGNATURES OF EXCITONIC RABI OSCILLATIONS IN AN ISOLATED QUANTUM DOT DRIVEN BY THE COHERENT LIGHT FIELD

A. V. Magyarov

The local field influence on the excitonic Rabi oscillations in single the quantum dot driven by classical and quantum fields has been theoretically investigated. In particularly it has been shown that for the case of the coherent state excitation, in dependence on the strength of the incident field, two completely different oscillatory regimes separated by the bifurcation are inherent to the Rabi effect. In the first regime Rabi oscillations are periodic and do not reveal collapse-revivals phenomenon, while in the second one collapse and revivals appear.

ПЛОТНОСТЬ ФОТОННЫХ СОСТОЯНИЙ ВБЛИЗИ ОДНОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

А. М. Немиленцев

Плотность фотонных состояний – фундаментальная физическая величина, которая определяет такие физические эффекты, как силы Казимира [1], эффект Парселла [2], тепловое излучение [3, 4] и др. Структура плотности состояний определяется геометрией и свойствами материала рассматриваемой системы. В настоящее время наиболее эффективными средами для управления плотностью состояний являются микрополости, фотонные кристаллы и системы, поддерживающие распространение поверхностных волн [2, 3]. Однослойная углеродная нанотрубка (УНТ) является очень перспективной системой для этих целей, так как она поддерживает распространение сильно замедленных поверхностных плазмонов [5]. Более того, сильное увеличение скорости спонтанного распада возбужденного атома, помещенного в окрестности бесконечно длинной УНТ, по сравнению со скоростью спонтанного распада атома в свободном пространстве, предсказанное в [2], позволяют сделать вывод о сильном влиянии УНТ на структуру плотности состояний в ее окрестности. Однако модель бесконечно длинной УНТ не позволяет исследовать влияние краев УНТ на распределение плотности состояний. Целью данной статьи является построение модели тензора Грина УНТ конечной длины и исследование влияния краев УНТ на распределение плотности фотонных состояний.

Рассмотрим УНТ конечной длины L и радиуса R_{cn} , геометрический центр УНТ расположен в начале декартовой системы координат, а ее ось ориентирована вдоль оси z . При рассмотрении мы будем учитывать только осевую компоненту тензора проводимости УНТ σ_{zz} , предполагая, что все остальные компоненты тензора проводимости пренебрежимо малы [5].

Согласно флуктуационно-диссипативной теореме, плотность фотонных состояний $\rho(\mathbf{r}, \omega)$ вблизи немагнитной УНТ может быть выражена через электрический тензор Грина $\underline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)$ следующим образом [3, 6]:

$$\rho(\mathbf{r}_1, \omega) = \frac{\omega}{4\pi^2 c^2} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[\underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + \frac{c^2}{\omega^2} \nabla_{\mathbf{r}_1} \times \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \cdot \nabla_{\mathbf{r}_2} \times \right]_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2} \right\}. \quad (1)$$

Тензор Грина является решением волнового уравнения с дельта-источником тока в правой части:

$$\left(\nabla_{\mathbf{r}_1} \times \nabla_{\mathbf{r}_1} \times - k^2 \right) \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = 4\pi \underline{I} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (2)$$

где \underline{I} – единичный тензор. Его решение в общем случае может быть представлено в виде суммы двух компонент:

$$\underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \underline{G}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + \underline{G}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega), \quad (3)$$

где $\underline{G}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = (\underline{I} + k^{-2} \nabla_{\mathbf{r}_1} \otimes \nabla_{\mathbf{r}_1}) G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ – тензор Грина свободного пространства, $G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \exp(ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, $\underline{G}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ – модификация тензора Грина свободного пространства вследствие его рассеяния на УНТ. Модифицированный тензор Грина удовлетворяет однородному волновому уравнению

$$(\nabla_{\mathbf{r}_1} \times \nabla_{\mathbf{r}_1} \times - k^2) \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = 0 \quad (4)$$

и эффективным граничным условиями на поверхности УНТ [5].

В декартовой системе координат уравнение (2) может быть разделено на три независимых уравнения, каждое из которых описывают эволюцию одного из столбцов тензора Грина. Следовательно, любой столбец β тензора Грина можно формально рассматривать как векторное поле, индуцированное в точке \mathbf{r}_1 дельта-источником тока, расположенным в точке \mathbf{r}_2 и поляризованным вдоль базисного вектора \mathbf{e}_β декартовой системы координат. Таким образом, задача о нахождении тензора Грина $G_{\alpha\beta}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ сводится к задаче рассеяния векторного поля $G_{z\beta}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ на УНТ для трех различных поляризаций дельта-источника тока \mathbf{e}_β , $\beta = x, y, z$. Для решения уравнения (4) мы сводим его к интегральному уравнению для плотности тока, индуцированной на поверхности УНТ падающим полем $G_{z\beta}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$, используя теорему Грина и граничные условия на поверхности УНТ [5]. Интегральное уравнение имеет следующий вид:

$$\int_{-L/2}^{L/2} j_z^{(\alpha)}(z', \mathbf{r}_2) \mathbf{K}(z - z') dz' + C_1 e^{-ikz} + C_2 e^{ikz} = \frac{1}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{ik|z-z'|}}{2ik} \int_0^{2\pi} G_{z\alpha}^{(0)}(\mathbf{R}', \mathbf{r}_2, \omega) dz' d\varphi', \quad (5)$$

где константы C_1, C_2 определяются из краевых условий $j_z^{(m)}(\pm L/2; \mathbf{r}_2) = 0$,

$$\mathbf{K}(z) = \frac{e^{ik|z|}}{2ik\sigma_{zz}(\omega)} - \frac{2iR_{cn}}{\omega} \int_0^\pi \frac{e^{ikr}}{r} d\varphi, \quad (6)$$

$r = \sqrt{z^2 + 4R_{cn}^2 \sin^2(\varphi/2)}$. Зная индуцированную плотность тока, можно легко вычислить рассеянную часть тензора Грина:

$$G_{\alpha\beta}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \frac{i\omega R_{cn}}{c^2} \int_{-L/2}^{L/2} j_z^{(\alpha)}(z; \mathbf{r}_2) \int_0^{2\pi} G_{\beta z}^{(0)}(\mathbf{r}_1, R, \omega) dz d\varphi. \quad (7)$$

Уравнения (5) – (7) играют роль уравнения Дайсона для тензора Грина однослойной углеродной нанотрубки конечной длины. Следует отметить, что в данном случае рассеяние не сводится к незначительным поправкам к тензору Грина свободного пространства и поэтому уравнение Дайсона нельзя решить в борновском приближении. Для преодоления этих трудностей численный метод решения данного уравнения был развит. Он основывается на аппроксимации интегралов квадратурными формулами с последующим сведением интегрального уравнения к системе матричных уравнений.

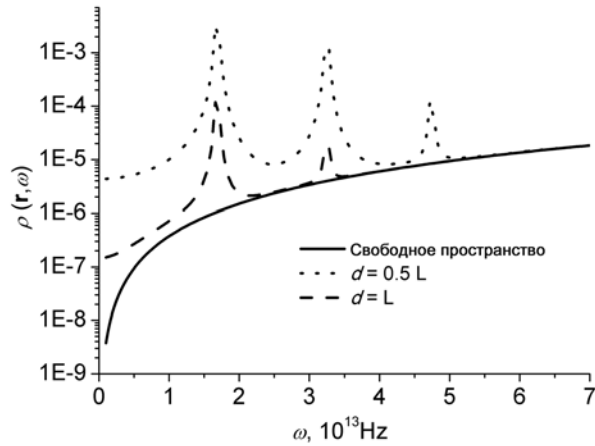


Рис. 1. Плотность фотонных состояний в свободном пространстве и в окрестности однослойной металлической (15, 0) УНТ длины $L = 1$ мкм. Вычисления проводились для точек, расположенных в плоскости $z = 0$ на расстоянии d от оси нанотрубки

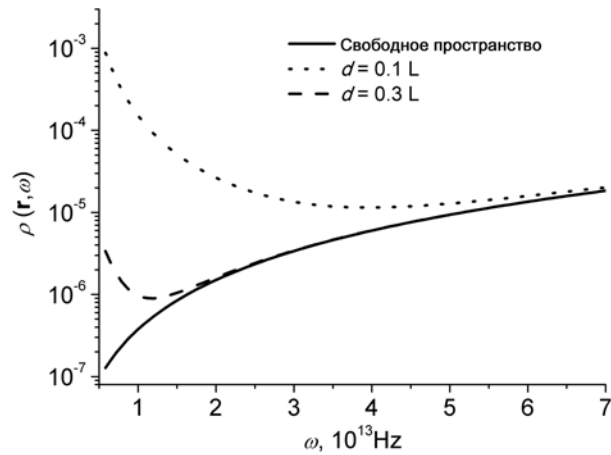


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для полупроводниковой (23,0) УНТ

На рисунках 1, 2 представлены результаты вычислений плотности фотонных состояний для металлической (15, 0) и полупроводниковой (23, 0) УНТ. Из рисунков видно, что спектральная структура плотности фотонных состояний вблизи УНТ сильно меняется по сравнению со случаем свободного пространства. Причины данных изменений состоят в том, что наряду со свободными фотонами появляются фотонные состояния, связанные с сильно замедленными плазмонами на поверхности УНТ. Наиболее существенные изменения наблюдаются в спектре металлической УНТ: спектр плотности состояний имеет резонансный характер. Эти резонансы возникают вследствие геометрических резонансов поверхностных плазмонов на краях УНТ. Следует отметить, что эти резонансы

сильно сдвинуты в терагерцовую область по сравнению с резонансами, которые можно было бы ожидать для случая идеально проводящего цилиндра. Причина данного сдвига – сильное замедление поверхностных плазмонов в УНТ (коэффициент замедления ~ 200). Вблизи полупроводниковых УНТ поведение плотности фотонных состояний также качественно отличается от случая свободного пространства: в то время как плотность фотонных состояний свободного пространства уменьшается с уменьшением частоты, плотность фотонных состояний вблизи УНТ возрастает.

Отсутствие ярко выраженных резонансов в спектрах фотонной плотности состояний вблизи полупроводниковых УНТ можно объяснить более сильным затуханием поверхностных плазмонов в полупроводниковых УНТ по сравнению с металлическими УНТ. Следует отметить, что влияние нанотрубки на плотность фотонных состояний быстро уменьшается с удалением от поверхности УНТ, что подтверждает тезис о существенном влиянии поверхностных возмущений на перераспределение плотности фотонных состояний.

Таким образом, в данной работе было исследовано влияние УНТ на плотность фотонных состояний. Для этого была разработана методика вычисления тензора Грина однослойной УНТ конечной длины. Результаты вычислений показали, что плотность фотонных состояний вблизи УНТ существенно отличается от плотности фотонных состояний в свободном пространстве. В частности, резонансы в спектре плотности фотонных состояний вблизи металлической УНТ были обнаружены. Природа данных резонансов – резонансы поверхностных плазмонов на краях УНТ, что отражает существенную роль краевых эффектов в данном случае. Результаты, представленные в данной работе, позволяют сделать вывод о том, что эффекты, связанные с плотностью фотонных состояний (эффект Казимира, эффект Парселла и др.), вблизи УНТ будут иметь нетривиальный характер.

Литература

1. *Bordag M., Mohideen U., Mostepanenko V. M.* // Phys. Rep. 2001. Vol. 353. P. 1.
2. *Bondarev I. V., Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A.* // Phys. Rev. Let. 2002. Vol. 89. P. 115504
3. *Joulain K., Mulet J.-P. et al.* // Surf. Sci. Rep. 2005. Vol. 57. P. 59.
4. *Nemilentsau A. M., Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A.* // Phys. Rev. Let. 2007. Vol. 99. P. 147403
5. *Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al.* // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136.
6. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Статистическая физика: теория конденсированного состояния. 1978.

PHOTONIC DENSITY OF STATES IN THE VICINITY OF THE SINGLE-WALL FINITE-LENGTH CNT

A. M. Nemilentsau

In this article the modification of the photonic density of states in vicinity of the single-wall finite-length carbon nanotube is investigated. The method of the finite-length nanotube Green tensor calculation is elaborated to calculate the photonic density of states. The strong influence of the CNT on the photonic density of states in the near-field zone is demonstrated. In particular, the resonance structure of the photonic density of states spectrum in the vicinity of the metallic CNT is demonstrated thus revealing the strong influence of the edge effects on the photonic density of states redistribution.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ	
<i>Барышевский В. Г., Ровба А. А.</i> Двухлучепреломление и спиновый дихроизм дейтронов в нуклонной мишени в области энергий 5–20 МэВ.....	8
<i>Барышевский В. Г., Ширвель А. Р.</i> Осцилляции спина и спиновый дихроизм дейтронов, вращающихся в накопительном кольце.....	18
<i>Силенко А. Я.</i> Тензорная электрическая поляризуемость дейтрона в экспериментах в накопительных кольцах.....	25
<i>Силенко А. Я.</i> Динамика спина в экспериментах по поиску электрических дипольных моментов частиц, проводимых в накопительных кольцах.....	47
<i>Барышевский В. Г., Черкас С. Л.</i> Чувствительность нейтронного кристалл-дифракционного эксперимента к электрическому дипольному моменту нейтрона и P-, T-нечетным ядерным силам.....	71
<i>Барышевский В. Г., Черкас С. Л., Мацукевич Д. Н.</i> Использование лазера, помещенного в аксиальное электрическое поле, для поиска нарушения P-, T-инвариантности.....	79
<i>Тихомиров В. В., Мальшиц В. В., Сягло С. Э., Целков Ю. А.</i> О возможностях исследования начальной стадии эволюции Вселенной.....	96
<i>Веренич К. А., Калашиников В. Л., Черкас С. Л.</i> Квантовая механика замкнутой коллапсирующей Вселенной.....	111
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА ЧАСТИЦ И ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ	
<i>Коржик М. В., Качанов В. А., Анненков А. Н., Мисевич О. В., Федоров А. А.</i> Сцинтилляционные кристаллы вольфрамата свинца для точной электромагнитной калориметрии на ускорителях с высокой светимостью.....	118
<i>Дорменев В. И., Дробышев Г. Ю., Коржик М. В., Мисевич О. В.</i> Электромагнитный калориметр на основе кристаллов вольфрамата свинца для эксперимента PANDA (GSI, Германия).....	127
<i>Дробышев Г. Ю., Борисевич А. Е., Войтик О. Л., Делендик К. И.</i> Источник позитрониев на основе анодного оксида алюминия для эксперимента по измерению массы антиводорода.....	132
<i>Дробышев Г. Ю., Борисевич А. Е., Дорменев В. И., Коржик М. В., Корнеев А. Е., Мечинский В. А.</i> Применение кристаллов PWO в компенсированных гибридных калориметрах для экспериментальной физики высоких энергий.....	140
<i>Гниненко С. Н., Дробышев Г. Ю., Кирсанов М. М., Корнеев А. Е., Красников Н. В., Матвеев В. А.</i> Поиск тяжелого нейтрино в эксперименте CMS на LHC.....	151
<i>Барышевский В. Г., Батраков К. Г., Грубич А. О., Гуринович А. А., Лобко А. С., Ровба А. А., Сафронов П. Ф., Столярский В. И., Тарнопольский Б. А., Ульянов А. П., Феранчук И. Д.</i> Когерентное тормозное и параметрическое рентгеновское излучение нерелятивистских электронов (КТПРИ).....	156
<i>Етиоре Г., Агафонов С. И., Грубич А. О., Лобко А. С., Лаптев А. И., Лопатик А. Р., Кутень С. А., Хрущинский А. А.</i> Подводный спектрометр для системы мониторинга нейтринного телескопа KM3NeT.....	175
ЭЛЕКТРОДИНАМИКА НАНОСТРУКТУР	
<i>Максименко С. А., Слепян Г. Я., Батраков К. Г., Кужир П. П., Мадьяров А. В., Немиленцев А. М., Хрущинский А. А., Шуба М. В.</i> Электромагнитные волны в наноструктурах.....	180

<i>Бондарев И. В.</i> Квантово-электродинамические явления в атомно-допированных углеродных нанотрубках	213
<i>Хрущинский А. А., Пушкарчук А. Л., Кутень С. А., Килин С. Я., Низовцев А. П.</i> Исследование механических параметров уединенных углеродных нанотрубок методами молекулярной динамики.....	228
<i>Мадьяров А. В.</i> Процессы взаимодействия квантовой точки с электромагнитными полями.....	239
<i>Немиленцев А. М.</i> Плотность фотонных состояний вблизи однослойной углеродной нанотрубки конечной длины.....	247

ПРИКЛАДНАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

<i>Барышевский В. Г., Белоус Н. А., Гуринович А. А., Евдокимов В. А., Лобко А. С., Молчанов П. В., Оськин А. В., Столярский В. И.</i> Экспериментальное исследование объемного лазера на свободных электронах с сеточным резонатором.....	251
<i>Барышевский В. Г., Гуринович А. А.</i> Электродинамические свойства объемного лазера на свободных электронах с сеточным резонатором с переменными параметрами	261
<i>Сытова С. Н.</i> Первые шаги в исследовании хаотической динамики объемных лазеров на свободных электронах.....	270
<i>Карпович В. А., Слепян Г. Я., Родионова В. Н., Волынец Г. И., Савук А. А., Танана О. В., Гринчук И. А.</i> Электродинамика специальных высокочастотных резонансных систем и микроволновые технологии.....	290

МАГНИТНАЯ КУМУЛЯЦИЯ ЭНЕРГИИ

<i>Барышевский В. Г., Гуринович А. А.</i> Влияние радиационных потерь на процесс излучения в системе «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка»	321
<i>Сытова С. Н., Тихомиров В. В., Черкас С. Л.</i> Одномерная и двумерная модели спирального магнитокумулятивного генератора: численный анализ и сравнение с экспериментом.....	327

МЕТОДЫ АНАЛИЗА СОСТАВА ВЕЩЕСТВА

<i>Дойников А. А.</i> Пространственно-временная динамика микропузырьковых контрастных агентов в ультразвуковых полях.....	336
<i>Shekhtman A.</i> Protein chemical ligation as an invaluable tool for structural NMR.....	353
<i>Кутень С. А., Хрущинский А. А., Миненко В. Ф., Кухта Т. С.</i> Использование Монте-Карло моделирования для оценки дозовых нагрузок на органы и ткани пациента во время рентгенологических исследований.....	359
<i>Иванов В. И., Лазарчик А. Н.</i> Концепция, задачи и результаты создаваемой сети компьютерного цитогенетического мониторинга населения Республики Беларусь в постчернобыльский период	379
<i>Черепица С. В., Бычков С. М., Коваленко А. Н., Мазаник А. Л., Макоед Н. М., Гремяко Н. Н., Кузменков Д. Е., Лучинина Я. Л.</i> Определение инспектируемых параметров дизельного топлива методом газовой хроматографии.....	392
<i>Черепица С. В., Бычков С. М., Коваленко А. Н., Мазаник А. Л., Селемина Н. М., Серединская О. Б.</i> Использование этанола в качестве внутреннего стандарта при газохроматографическом количественном определении содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом. От идеи до внедрения в повседневную практику.....	402

CONTENTS

INTRODUCTION.....	5
FUNDAMENTAL PROBLEMS OF NUCLEAR AND PARTICLE PHYSICS	
<i>Baryshevsky V. G., Rouba A. A.</i> Birefringence and spin dichroism for deuterons with energy 5 – 20 MeV in nucleon target.....	8
<i>Baryshevsky V. G., Shyrvel A. R.</i> Spin oscillations and spin dichroism (the birefringence effect) of deuterons rotating in a storage ring	18
<i>Silenko A. J.</i> Tensor electric polarizability of the deuteron in storage-ring experiments.....	25
<i>Silenko A. J.</i> Spin dynamics in experiments on a search for electric dipole moments of particales, performed in storage rings.....	47
<i>Baryshevsky V. G., Cherkas S. L.</i> Sensitivity of the neutron crystal diffraction experiment to the neutron EDM and to the nuclear P-T-violating forces	71
<i>Baryshevsky V. G., Cherkas S. L. , Matsukevich D. N.</i> Laser in axial electric field as a tool to search for P-, T- invariance violation.	79
<i>Tikhomirov V. V., Malyshchits V. V., Siahlo S. E., Tsalkou Yu. A.</i> On the possibility of investigation of the first stage of the Universe evolution	96
<i>Verenich K. A., Kalashnikov V. L., Cherkas S. L.</i> Quantum mechanics of a closed collapsing Universe.....	111
EXPERIMENTAL HIGH ENERGY AND PARTICLE PHYSICS	
<i>Korzhih M. V., Kachanov V. A., Annenkov A. N., Missevitch O. V., Fedorov A. A.</i> Lead tungstate scintillation crystals for precise electromagnetic calorimetry on high luminosity accelerators.....	118
<i>Dormenev V. I., Drobychev G. Yu., Korzhik M. V., Missevitch O. V.</i> Electromagnetic calorimeter based on the lead tungstate crystals for the PANDA experiment (GSI, Germany).....	127
<i>Drobychev G. Yu., Borisevich A. E., Voitik O. L., Delendik K. I.</i> Positronium source on a basis of anodic aluminum oxide for the experiment on a anti-hydrogen mass measurements.....	132
<i>Drobychev G. Yu., Borisevich A. E., Dormenev V. I., Korjik M. V., Karneyeu A. E., Mechinsky V. A.</i> Application of PWO crystals for construction of compensated hybrid calorimeters for experimental high energy physics.....	140
<i>Gninenko S. N., Drobychev G. Yu., M. Kirsanov M. M. , Korneev A. E., Krasnikov N. V., Matveev V. A.</i> Search for heavy neutrino on CMS experiment at LHC.....	151
<i>Baryshevsky V. G., Bartrakov K. G., Grubich A. O., Gurinovich A. A., Lobko A. S., Rouba A. A., Safronov P. F., Stolyarsky V. I., Tarnopolsky B. A., Ulyanenko A. P., Feranchuk I. D.</i> Coherent bremsstrahlung and parametric x-rays (CB&PXR) from non-relativistic electrons.....	156
<i>Etiopie G., Agafonov S. I., Grubich A. O., Lobko A. S., Laptev A. I., Lopatik A. R., Kuten S. A., Khruschinsky A. A.</i> Underwater spectrometer for monitoring system of KM3NeT neutrino telescope.....	175
ELECTRODYNAMICS OF NANOSTRUCTURES	
<i>Maksimenco S. A., Slepyan G. Ya., Batrakov K. G., Kuzhir P. P., Magyarov A. V., Nemilentsau A. M., Khrutchinski A. A., Shuba M. V.</i> Electromagnetic waves in nanostrutures.....	180

<i>Bondarev I. V.</i> Quantum electrodynamic phenomena in atomically doped carbon nanotubes.....	213
<i>Khrutchinsky A. A., Pushkarchuk A. L., Kuten S. A., Kilin S. Ja., Nizovtsev A. P.</i> Research of mechanical parameters of individual carbon nanotubes by methods of the molecular dynamic.....	228
<i>Magyarov A. V.</i> The local field influence on signatures of excitonic Rabi oscillations in an isolated quantum dot driven by the coherent light field	239
<i>Nemilentsau A. M.</i> Photonic density of states in the vicinity of the single-wall finite-length CNT	247

APPLIED ELECTRODYNAMICS

<i>Baryshevsky V. G. , Belous N. A., Gurinovich A. A., Evdokimov V. A., Lobko A. S., Molchanov P. V., Oskin A. V., Stolyarsky V. I.</i> Experimental study of a Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator.....	251
<i>Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.</i> Electrodynamical properties of a Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator with variables parameters.....	261
<i>Sytova S. N.</i> First steps in investigation of chaotic dynamics in Volume Free Electron Laser.....	270
<i>Karpovich V. A., Slepyan G. Ya., Rodionova V. N., Volinets G. I., Savuk A. A., Tanana O. V., Grinchuk I. A.</i> Electrodynamics of special high-quality resonance systems and microwave technologies.....	290

MAGNETIC FIELDS CUMULATION

<i>Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.</i> Influence of radiative losses on the oscillation processes in the circuit "flux compression generator – capacitive load".....	321
<i>Sytova S. N., Tikhomirov V. V., Cherkas S. L.</i> One-dimensional and two-dimensional models of the helical flux compression generator: numerical analysis and comparison with experiment.....	327

METHODS OF MATTER ANALYSIS

<i>Doinikov A. A.</i> Spatio-temporal dynamics of microbubble contrast agents in ultrasound fields.....	336
<i>Shekhtman A.</i> Protein chemical ligation as an invaluable tool for structural NMR.....	353
<i>Kutsen S. A., Khrutchinsky A. A., Minenko V. F., Kuhta T. S.</i> Implementation of Monte carlo simulations for assessment of dose burdens on the tissues and organs of patients during diagnostic x-ray investigations	359
<i>Ivanov V. I., Lazarchik A. N.</i> Conception, tasks and results of constructing computer system of cytogenetic monitoring of population of Republic of Belarus in the postchernobyl period.....	379
<i>Charapitsa S. V., Bychkow S. M., Kavalenka A. M., Mazanik A. L., Makajed M. M., Hremiaka N. N., Kuzmiankou D. E., Luchynina J. L.</i> Determination of the basic inspected diesel fuels parameters by gas chromatograph method.....	392
<i>Charapitsa S. V., Bychkov S. M., Kovalenko A. N., Mazanik A. L., Selezmina N. M., Seredinskaya O. B.</i> The basic component (solvent) as the internal standard in the chromatographic quantity determination of impurities.....	402

Научное издание

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**

Сборник научных трудов

В авторской редакции

Технический редактор *Г. М. Романчук*
Корректор *Н. П. Ракицкая*
Компьютерная верстка *С. Н. Сытовой*
Ответственный за выпуск *А. Г. Купцова*

Подписано в печать 22.05.2009. Формат 70×100/16. Бумага офсетная.
Гарнитура Таймс. Печать офсетная. Усл. печ. л. 31,95.
Уч.-изд. л. 25,23. Тираж 200 экз. Зак.

Белорусский государственный университет.
ЛИ № 02330/0494425 от 08.04.2009.
220030, Минск, проспект Независимости, 4.

Отпечатано с оригинала-макета заказчика.
Производственное республиканское унитарное предприятие
«Минсктиппроект».
ЛП № 02330/0494102 от 11.03.2009.
220123, Минск, ул. В. Хоружей, 13/61.