

## 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.

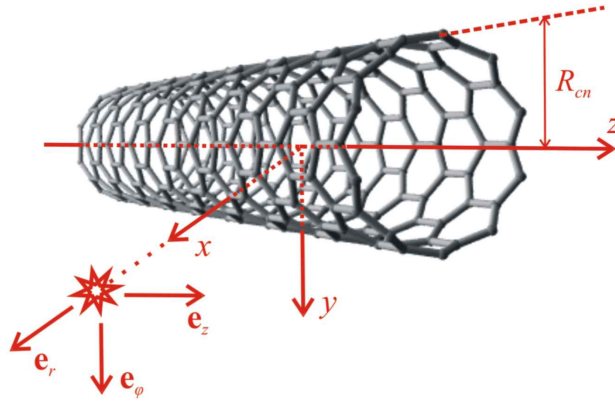


Рис. 1. Геометрия задачи при рассмотрении квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных УН (атом может находиться как снаружи, так и внутри нанотрубки)

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  $\varepsilon_{zz}$  и азимутальной  $\varepsilon_{\varphi\varphi}$  составляющих тензора диэлектрической проницаемости среды в присутствии УН [27]. При этом единственная отличная от единицы компонента  $\varepsilon_{zz}$  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  $\mathbf{R} = \{R_{cn}, \phi, Z\}$  – радиус-вектор произвольной точки поверхности УН,  $\hat{f}(\mathbf{R}, \omega)$  – вторично квантованный скалярный Бозе-оператор, уничтожающий одноквантовое возбуждение фотонного типа частоты  $\omega$  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):

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

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:

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

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

где  $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{R} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}, \omega) = 2\hat{\mathbf{J}}(R_{cn}, \varphi, z, \omega) \delta(r - R_{cn})$  – 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  $\hat{\phi}(\mathbf{r})$  в изначальном полном гамильтониане в окрестности координаты  $\mathbf{r}_A$  центра масс атома и удерживать 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):

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

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

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

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  $\omega_A$ . Эта («голая», неперенормированная) 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

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

– 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 аксиальных 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

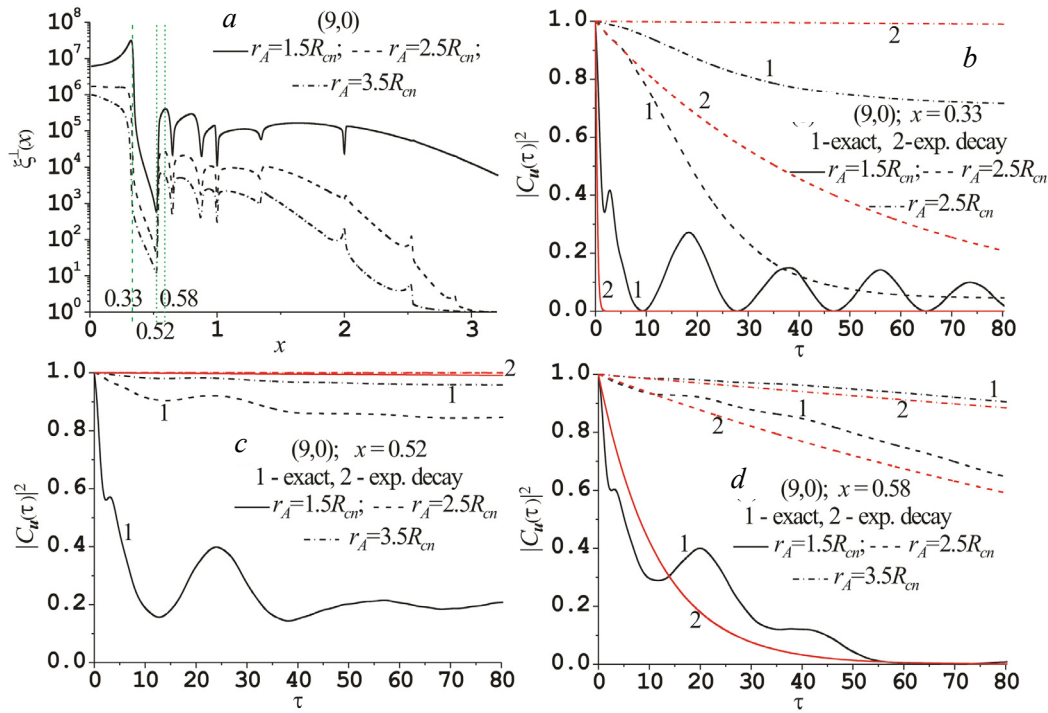


Рис. 2. (a) Частотные зависимости поперечной плотности фотонных состояний для двухуровневого атома снаружи нанотрубки (9,0) на различных расстояниях от ее стенки. (b), (c), (d) Динамика спонтанного распада заселенности возбужденного атомного состояния, полученная прямым численным решением интегрального 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  $\tau$  – 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 возрастаая 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.

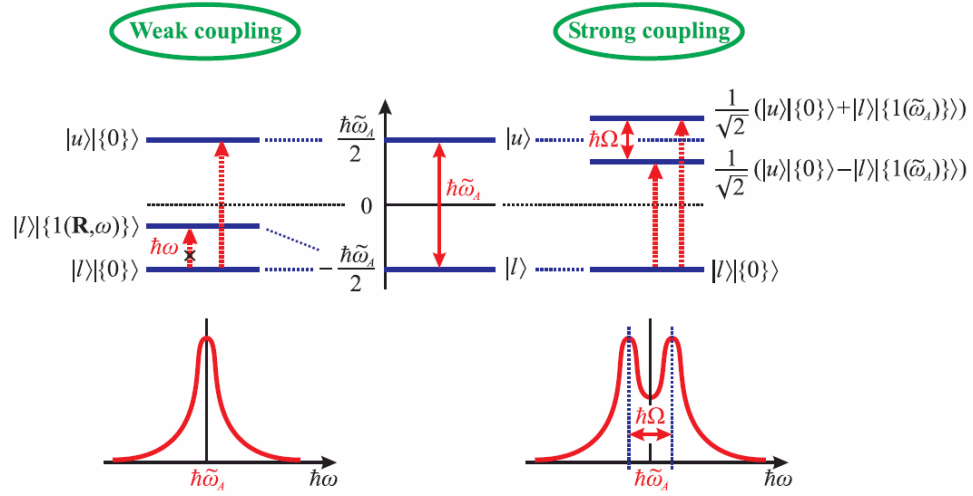


Рис. 3. Схема уровней двухуровневого атома (в центре), взаимодействующего с вакуумным полем УН, в режимах слабой (слева) и сильной (справа) связи. Вертикальными восходящими стрелками слева и справа показаны разрешенные и запрещенные (перечеркнуты) переходы при возбуждении системы «Атом–УН» внешним оптическим 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*

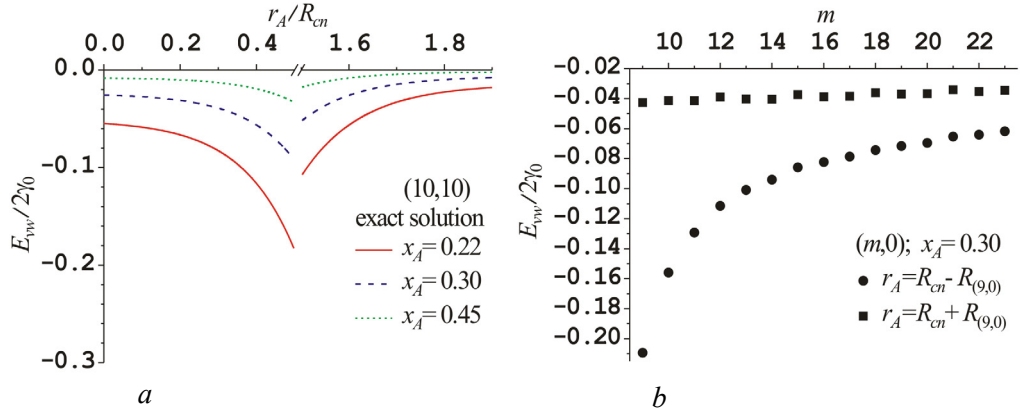


Рис. 4. (а) Энергии Ван-дер-Ваальса двухуровневого атома в основном состоянии около УН (10,10) как функции местоположения атома для трех типичных (безразмерных) частот атомного перехода  $x_A$ . (б) Энергии Ван-дер-Ваальса для атома на фиксированном расстоянии от поверхностей УН типа  $(m,0)$  возрастающего 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  $\omega_A$ ) 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  $\sim 10^2$  нм<sup>3</sup> для УН диаметром  $\sim 1$  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  $\omega_A$  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  $\sim 1$  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 вандер-ваальсовых взаимодействий атома с УН, обсуждавшимся выше.

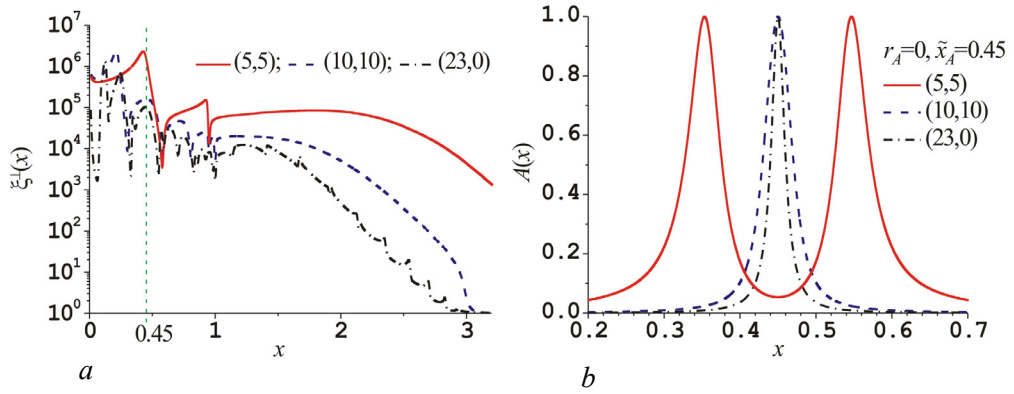


Рис. 5. (а) Частотные зависимости поперечной плотности фотонных состояний для двухуровневого атома, расположенного в центре трех нанотрубок возрастающего радиуса. (б) Соответствующие профили оптического поглощения в окрестности частоты атомного перехода (показана вертикальная штриховая линия на рис.5, 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  $\sim 1$  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].

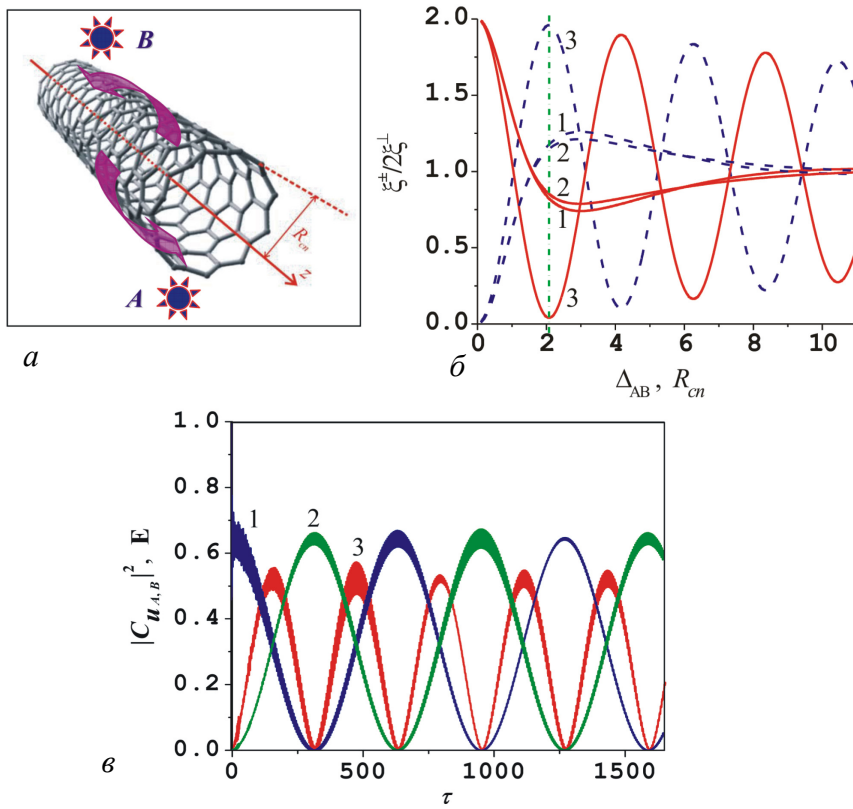


Рис. 6. (а) Иллюстрация взаимодействия и перепутывания двух пространственно-разнесенных атомов посредством обмена поверхностными фотонными возбуждениями нанотрубки. (б) Нормированные двухчастичные функции локальной плотности фотонных состояний  $\xi^+$  (сплошные линии) и  $\xi^-$  (штриховые линии) на частотах пиков одночастичных функций поперечных плотностей фотонных состояний  $\xi^{\pm}(x)$  (см. рис. 2, а, 5, а) как функции расстояния  $\Delta_{AB}$  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  $|C_{u_i}(\tau)|^2$  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 ( $\sim 1$  нм) в режиме сильной связи парные локальные плотности фотонных состояний  $\xi^\pm$  (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  $\approx 7.4$  Å друг от друга (соответствующие значения функций  $\xi^\pm$  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  $\sim 0.6$ , 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., Slepian G. Ya., Maksimenko S. A. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 115504.
24. Ахуезер 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 ( $\sim 1$  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.