

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ВОЗМОЖНОСТИ УСИЛЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ КОНТИНУУМА НАНОТРУБОК

Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин

На основе квантового подхода показана возможность накачки среды, состоящей из нанотрубок. Накачка производится нестационарным электрическим полем, перпендикулярным к оси симметрии нанотрубки. Задача решается на основе теории свободных электронов и модели независимых электронов. Процесс математически промоделирован на основе системы материальных уравнений.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, электромагнитное излучение, наночастицы, нестационарное электрическое поле.

Введение. Если в случае фуллеренов воспользоваться теорией свободных электронов (электроны не взаимодействуют с ионами) и моделью независимых электронов (электроны не взаимодействуют друг с другом), движение электронов в фуллеренах можно описать с помощью квантового подхода. В этом случае движение электронов в фуллерене можно считать аналогичным движению в потенциальном поле тонкого сферического слоя [1,2]. Полная система ортогональных и нормированных одночастичных волновых функций в этом случае определяется из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \Delta_{\theta, \varphi} \Psi = (W - U_0) \Psi, \quad (1)$$

где $U_0 = \text{const}$, W - энергия, m_e - масса электрона.

Воспользуемся аналогичной моделью для описания процесса усиления излучения с помощью удлиненных нанотрубок. В данной работе на основе квантового подхода покажем возможность накачки среды, состоящей из нанотрубок. Накачку среды можно производить нестационарным электрическим полем, перпендикулярным к оси симметрии нанотрубки. Задачу будем решать на основе теории свободных электронов и модели независимых электронов. На основе системы материальных уравнений процесс усиления электромагнитного излучения математически промоделируем.

Нанотрубки представляют собой цилиндрические молекулы с нанометровым диаметром и нанометровой длиной [3-5]. Такое необычное сочетание масштабов длины и диаметра приводит к уникальным свойствам нанотрубок, одним из которых является возможность генерации СВЧ-излучения [6, 7]. Приступим к рассмотрению сформулированной задачи.

О возможности накачки среды с помощью нанотрубок нестационарным электрическим полем. При наличии оператора возмущения $\hat{V}(t)$ (наличие нестационарного электрического поля) в цилиндрической системе координат получим

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Psi + (U_0 + \hat{V}(t)) \Psi, \quad \hat{V} = -eRE_0 \cos \varphi, \quad (2)$$

где E_0 - нестационарное электрическое поле, которое направлено перпендикулярно оси нанотрубки; R - радиус нанотрубки. В данной задаче волновая функция одночастичных стационарных состояний, в которых может находиться каждая из частиц, кроме магнитного квантового числа m , будет характеризоваться квантовым числом n за счет квантования в продольном направлении. При этом плотность энергетических уровней W_n за счет большой протяженности по сравнению с поперечными размерами нанотрубок будет значительно больше плотности энергетических уровней W_m . Для проведения оценок предположим, что переход из возбужденного состояния в невозбужденное осуществляется за счет изменения числа частиц в состояниях $\Psi_{n,m}, \Psi_{n,m+1}$, где волновая функция $\Psi_{n,m} = \Psi_m(\varphi) \chi_n(z)$.

Из уравнения (2) при отсутствии оператора возмущения полной системой ортогональных и нормированных одночастичных волновых функций будут функции:

$$\Psi_m = \frac{\cos(m\varphi)}{\sqrt{\pi}}, \quad W_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2m_e R^2}, \quad (3)$$

где $m=1,2,3\dots$. При $m=0$ имеем $\Psi_0 = \pi/2$.

Для проведения дальнейших оценок определим приближенно собственную функцию и собственное значение энергии в момент времени $t \rightarrow \infty$ для оператора возмущения в формуле (2) при выполнении условия $\hbar\Omega = W_m - W_{m-1} \sim |V_{m-1,m}|$. Для этого представим решение в виде линейной комбинации Ψ_m и Ψ_{m-1} , в результате в базисе двух собственных функций получим задачу на собственные значения энергии и собственные функции при наличии стационарного возмущения (задача может быть обобщена на случай большего числа собственных функций):

$$\Psi_{II} = C(\Psi_m + \kappa\Psi_{m-1}), \quad W_{II} = \tilde{W} + \beta, \quad \Psi_I = C(\Psi_{m-1} - \kappa^*\Psi_m), \quad W_I = \tilde{W} - \beta. \quad (4)$$

$$\kappa = \frac{V_{m-1,m}}{\hbar\Omega/2 + \beta}, \quad \beta = \left((\hbar\Omega/2)^2 + |V_{m-1,m}|^2 \right)^{1/2}, \quad V_{m-1,m} = \int_0^{2\pi} \Psi_{m-1}^* \hat{V} \Psi_m d\varphi, \quad (5)$$

где $C = \text{const}$.

Если предположить, что стационарное возмущение \hat{V} в точке $z=0$ «мгновенно» включается при $t=0$, то из нестационарного уравнения Шредингера (2) с учетом соотношений (4) и (5) получим

$$\Psi(t) = A\Psi_{II} \exp(-i\tilde{W}t/\hbar - i\beta t/\hbar) + B\Psi_I \exp(-i\tilde{W}t/\hbar + i\beta t/\hbar). \quad (6)$$

С учетом выражения (6) решение окончательно запишется в виде

$$\Psi(t) = \left[\left\{ (A - \kappa^*B)\Psi_m + (B + \kappa A)\Psi_{m-1} \right\} \cos(\beta t/\hbar) - \right. \\ \left. - i \left\{ (-B + \kappa A)\Psi_{m-1} + (A + \kappa^*B)\Psi_m \right\} \sin(\beta t/\hbar) \right] \exp(-i\omega t/2). \quad (7)$$

В соответствии с формулами (2) и (3) матричный элемент при $m \neq 1$ равен $V_{m-1,m} = -eRE_0/2$.

Предполагая, что при $t=0$ вероятность распределения удовлетворяет распределению Больцмана, получим $\left| (A - \kappa^*B)/(B + \kappa A) \right|^2 = \exp(-2\beta/(kT)) = \alpha^2$.

При $m=40$, $R=10^{-8} \text{ м}$, $E_0=3 \cdot 10^6 \text{ В/м}$ получим $\hbar\Omega \approx 3,1 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$; $|V_{m-1,m}| = 1,5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$; $\beta \approx 2,1 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$; $\kappa \approx 0,42$; $\alpha \approx 0,5$; $A \approx 1,16 \text{ В}$.

Следует отметить, что использование в качестве базисных функций только двух функций оправдано тем, что вероятность нахождения электрона в возбужденном состоянии при $\hbar\Omega = W_m - W_{m-1} \sim |V_{m-1,m}|$ в соответствии с распределением Больцмана при увеличении m быстро убывает. Для увеличения точности оценок можно было бы использовать три состояния W_{m-1}, W_m, W_{m+1} .

Из полученных оценок следует, что вероятность $|A|^2$ нахождения электрона в возбужденном состоянии W_+ больше вероятности $|B|^2$ электрона в состоянии W_- . Это означает, что рассматриваемая система оказывается возбужденной (накаченной ([3]) с величиной накачки $N = KZ_0(|A|^2 - |B|^2)$, где K – концентрация наночастиц, Z_0 – число свободных электронов, которые находятся в возбужденном состоянии (величина будет определена ниже).

Оценка коэффициента усиления в резонаторе. Из полученных выше результатов следует, что если в активной среде, состоящей из множества нанотрубок с определенной ориентацией (ось симметрии наночастицы перпендикулярна направлению нестационарного поля), будет происходить усиление излучения с частотой $\omega \approx 2\beta/\hbar$. Аналогичное усиление будет происходить и в резонаторе. Оценим коэффициент усиления в резонаторе.

В случае резонатора процесс усиления будет описываться с помощью уравнения для излучения E_z и системы двух материальных уравнений для поляризации P_z и величины населенности N ([8], с. 111)

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial t} + \frac{1}{2\tau_c} \tilde{E} = i \frac{\omega}{2\epsilon\epsilon_0} \tilde{P}, \quad \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{N - N_0}{T_1} = \frac{2}{\hbar} (\tilde{E} \tilde{P}^* - \tilde{P} \tilde{E}^*),$$

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \left(\frac{1}{T_2} - i(\Omega - \omega) \right) \tilde{P} = -i \frac{|d_{I,II}|^2}{3\hbar} N \tilde{E}, \quad (8)$$

где $\omega = 2\beta/\hbar$; μ, μ_0 – соответственно электрическая проницаемость и электрическая постоянная; в уравнениях (8) в отличие от монографии [8] наличествует связь между индукцией и поляризацией $D_z = \epsilon\epsilon_0 E_z + P_z$. В уравнениях (8) введены обозначения (волновая функция Ψ введена формулой (6))

$$d_{I,II} = \int_0^{2\pi} \Psi_I^* (-eR \cos \varphi) \Psi_{II} d\varphi = \frac{1 - \kappa^2}{1 + \kappa^2} \cdot \frac{eR}{2}. \quad (9)$$

Энергия одноуровневых состояний электрона (для m см. (3)), соответствующих стационарным состояниям одного электрона, в плоскости квантовых чисел n, m удовлетворяют условию

$$W_{n,m} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m_e} \left(\frac{n^2}{L^2} + \frac{m^2}{(2\pi R)^2} \right) = W_{\max}. \quad (10)$$

Из соотношения (10) следует, что число энергетических уровней равно $M_1 = LRm_e W_{\max} / (4\hbar^2)$. Пусть расстояние между центрами атомов в нанотрубке $R_0 \approx 1,44 \cdot 10^{-10} m$. Тогда число атомов будет порядка $M_2 \approx 2\pi RL / R_0^2$. Поскольку число атомов равно числу свободных электронов, а число заполненных энергетических уровней в соответствии с принципом Паули примерно в два раза меньше свободных электронов, то получим $W_{\max} \approx 8\pi W_0$, $W_0 = \hbar^2 / (2m_e R_0^2) \approx 1,7 eV$. Рассмотрим уровни с $m = m_0 = 40$. В этом случае $\Delta W_m = W_m - W_{m-1} = \hbar^2 m_0 / (m_e R^2) \approx 0,03 eV$, где $R = 10^{-8} m$ (при этом максимальные значения квантовых чисел при $L = 10^{-7} m$ в соответствии с условием (10) будут $n_{\max} = \frac{1}{2\pi\hbar} (2m_e W_{\max} L^2)^{1/2} \approx 570$, $m_{\max} \approx 315$). При объемной доле наночастиц $c_0 = 10^{-2}$ концентрация наночастиц будет равна $K = c_0 / (\pi R^2 L) \approx 3 \cdot 10^{19}$.

Тогда при $Z_0 = 2$ инверсия населенностей $N = KZ_0 (|A|^2 - |B|^2) = 8,82 \cdot 10^{19} m^{-3}$. В рассматриваемой задаче в уравнениях (8) будет иметь место условие $\dot{P}_z \gg P_z / T_2$. Поэтому в уравнениях (8) при $\omega = \Omega$ в левой части для уравнения поляризации можно пренебречь слагаемым $\sim \tilde{P} / T_2$. В этом случае при $N = 8,82 \cdot 10^{19} m^{-3}$ из уравнений (8) по аналогии с работой [7] получим задачу на собственные значения для коэффициента усиления:

$$\Lambda = |d_{I,II}| \cdot [\omega N / (3\hbar\epsilon_0)]^{1/2} \approx 5,3 \cdot 10^{11} c^{-1}.$$

Применительно к задаче усиления излучения коэффициент усиления будет порядка $\Gamma = c/\Lambda \sim 5,6 \cdot 10^{-4} m$, где длина волны $\lambda = 2\pi c/\omega \approx 4,0 \cdot 10^{-5} m$. Видно, что условие приближения медленно меняющейся амплитуды выполняется.

Из полученных результатов следует, что предположение медленно меняющейся амплитуды поля излучения действительно имеет место.

В качестве нестационарного поля, которое включается «мгновенно», можно использовать поле [10, 11] длительностью $\Delta t = 3 \cdot 10^{-9} c$, с шириной переднего фронта $\Delta T \approx 10^{-10} c$. Предварительно проведенные численные расчеты показывают, что для такого поля также имеет место процесс накачки среды для усиления излучения.

Математическое моделирование процесса усиления излучения. Достоверность утверждений о возможности усиления электромагнитного излучения в среде, насыщенной нанотрубками, в не-малой степени зависит от достоверности результатов решения системы уравнений (8).

Численные значения параметров, входящих в систему уравнений (8), в системе единиц SI имеют такие значения, что различие в коэффициентах уравнений (8) составляет величину $\sim 10^{50}$. Данное обстоятельство указывает на то, что система дифференциальных уравнений (8), по-видимому, принадлежит к классу сверхжестких дифференциальных уравнений.

По этой причине для численного решения системы (8) была предпринята попытка решить ее с помощью неявного метода Рунге–Кутты–Грина [9]. Этот метод представляет собой многошаговую численную процедуру 5-го порядка аппроксимации, использующую дифференцирование назад для вычисления матрицы Якоби. В том виде, в каком представлены уравнения (8), решение с помощью указанного численного метода получить не удалось.

После введения новой переменной $\Pi = \frac{\omega}{\varepsilon_0} \tilde{P}$ и перехода от системы единиц SI к другой системе единиц, учитывающей характерные масштабы времени и размеров данной задачи, а именно: за единицу времени принято 10^{-9} с, длины 10^{-9} м, массы 10^{-6} кг – решение системы уравнений (8) стало возможным. В качестве начальных условий для уравнений (8) задавались следующие значения: удельная энергия $W = 0,5\varepsilon_0 |\tilde{E}|^2 = 10^{-4}$ Дж/м³, населенности $N = 1,0 \cdot 10^{20}$ м⁻³ и $N_0 = 0,5 \cdot 10^{11}$ м⁻³, поляризация полагалась равной нулю. Расчеты проводились до момента времени $t = 3 \cdot 10^{-9}$ с, их результаты представлены на рис. 1–3. На рис. 1 (график с разрывом на оси абсцисс) приведены результаты расчетов энергии $W(t)$ физической системы по уравнениям (8). На начальном участке $0 \leq t \leq 1,5 \cdot 10^{-9}$ с график функции $W(t)$ имеет быстро осциллирующий характер.

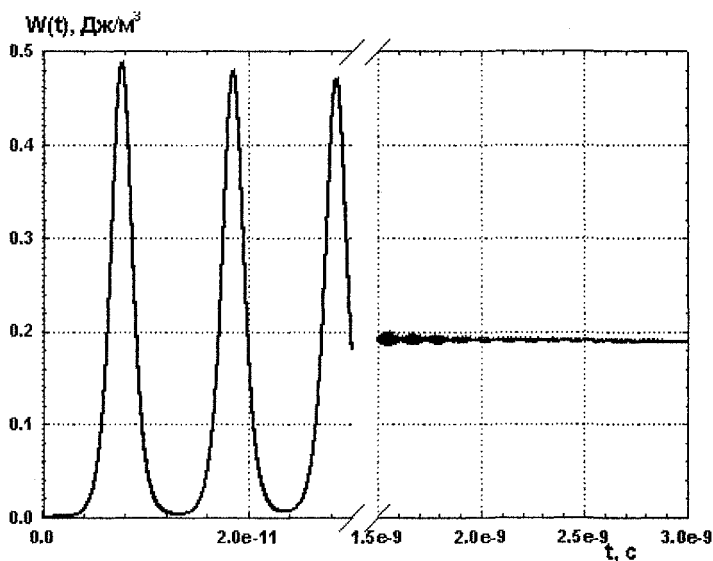


Рис. 1. Зависимость $W = W(t)$

Для выяснения вопроса о природе осцилляции, появляющихся у решений системы уравнений (8) данной работы: то ли они имеют физический смысл, то ли это паразитные колебания, обусловленные численным методом решения – был проведен следующий численный эксперимент. На отрезке $0 \leq t \leq 2,5 \cdot 10^{-11}$ с решались уравнения с шагами вычисления функций по времени Δt_1 и Δt_2 , отличающимися друг от друга в 1000 раз.

Если бы колебания функции имели паразитный характер, то графики функции $W(t)$ отличались бы для разных шагов Δt_1 и Δt_2 как по характеру осцилляции, так и по размаху колебаний. Результаты расчетов численного эксперимента приведены на рис. 2.

Рисунок показывает, что функции, рассчитанные на сильно отличающихся разностных сетках, совпадают вполне. Отсюда делается заключение о том, что колебательный характер поведе-

ния решения обусловлен физическим механизмом. Осциллирующий характер $N(t)$ и $W(t)$ объясняется взаимодействием излучения со средой, в соответствии с законом сохранения энергии. Интересно поведение функции населенности $N(t)$, представленной на рис. 3.

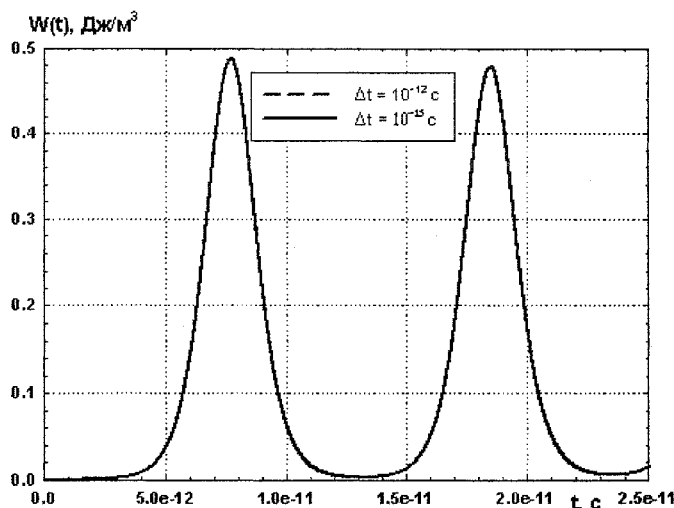


Рис. 2. Зависимость $W = W(t)$. Расчеты проводились с разными шагами по времени такими, что отношение $\Delta t_1/\Delta t_2 = 1000$

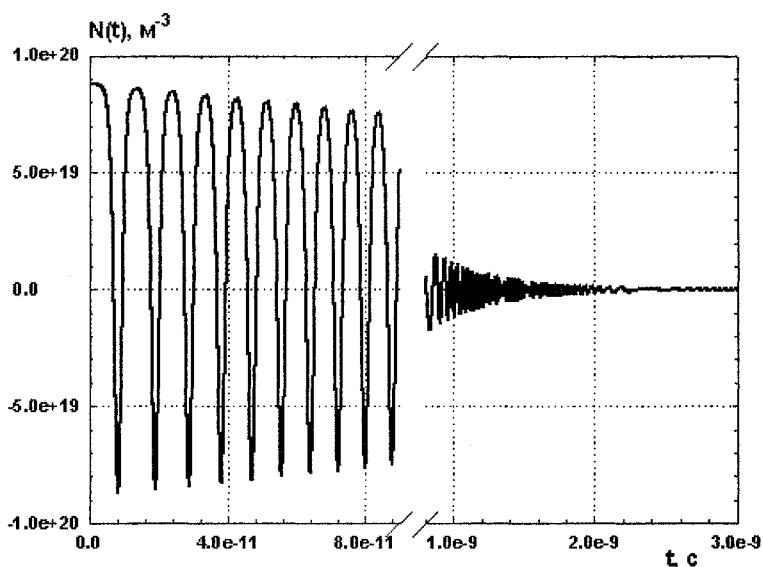


Рис. 3. Зависимость населенности от времени

Колебания происходят от отрицательных значений $N(t)$ до положительных, затухая по амплитуде с увеличением времени. И при значениях времени $t > 10^{-8}$ с населенность $N(t)$ устанавливается около значения $N_0 \sim 10^{11}$ м^{-3} . Объяснение механизма колебательного характера решения $N(t)$ системы уравнений (8) приведено выше.

Обсуждение результатов. В работе на основе квантового подхода теоретически показана возможность генерации излучения с длиной волны $\lambda \approx 4 \cdot 10^{-5}$ м = 40 мкм на основе удлинённых наночастиц с поперечной ориентацией оси симметрии относительно нестационарного поля. При $E_0 = 3 \cdot 10^4$ В/м, $R = 10^{-8}$ м, $L = 10^{-7}$ м и объемной доле частиц $c_0 = 10^{-2}$ плотность энергии генерируемого излучения $W \approx 0,2$ Дж/м³. Плотность генерации излучения можно увеличить в десятки раз, если линейные размеры уменьшить в несколько (например, в три раза). Но при этом величину нестационарного поля нужно увеличить в три раза ($RE_0 = \text{const}$).

Оценки показывают, что рассмотренный в работе подход можно обобщить на случай, когда нестационарное поле будет ориентировано вдоль оси наночастиц. В этом случае при длине наночастиц $L = 10^{-6}$ м длина волны усиливаемого излучения будет порядка миллиметра. В такой постановке нужно будет использовать многоуровневую модель.

Авторы благодарят М.И. Яландина за помощь в подборе параметров квазистационарного поля; В.Г. Елецкого - за консультацию по нанотрубкам; А.Н. Еняшина - за консультацию по нанотрубкам и предоставленную литературу по данной тематике.

Работа выполнена по проекту РФФИ № 10-02-96012.

Литература

1. Gordon, J. Miller. Shell Structures in Molecular Orbital Energy Diagrams for "Small" Fullerene Cages: Free-Electron Versus Generator Orbital Models / J. Miller Gordon, G. John // Journal of Mathematical Chemistry. - V. 33, № 1. - 2003. - P. 55.
2. лг-Molecular orbitals in fullerenes and the free electron model / Naomi Mizorogi, Masaki Kiu-chi, Kumiko Tanaka *et al.* // Chemical Physics. - 2003. - V. 378 - P. 598.
3. Satio, R. Physical Properties of Carbon Nanotubes / R. Satio, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. - London: Imperial College Press, 1998. - 260 p.
4. Enyashin, A. Nanosized allotropes of molybdenum disulfide / A. Enyashin, S. Gemming, G. Seifert // Eur. Phys. J. Special Topics. - 2007. -V. 149. - P.103-125.
5. Enyashin, A.N. Structure, stability and electronic properties of TiO_2 / A.N. Enyashin, G. Seifert // Phys. Stat. Sol.(b). - 2005. - V. 242, № 7. - P. 1361-1370.
6. Кибис, О.В. Углеродные нанотрубки как терагерцовые излучатели нового типа / О.В. Кибис, М.Е. Портной // Письма в ЖТФ. - 2005. -Т. 31. - В. 15. - С. 85-88.
7. Садыков, Н.Р. Способ усиления СВЧ-излучения с помощью распыленных в газообразной среде нанотрубок / Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин // Письма в ЖТФ. -2010. - Т. 36. - Вып. 17. - С. 69-78.
8. Пантел, Р. Основы квантовой электроники / Р. Пантел, М. Путхов. - М.: Мир, 1972. - -384 с.
9. Холл, Дж. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Дж. Холл, Дж. Уатт. - М.: Мир, 1979. - 312 с.
10. Месяц, Г.А. Пикосекундная электроника больших мощностей / Г.А. Месяц, М.И. Яландин // УФН. -2005. -Т. 175, № 3. - С. 225.
11. Месяц, Г.А. Законы подобия в импульсных газовых разрядах / Г.А. Месяц // УФН. - 2006. - Т. 176, №10. - С. 1069-1091.

Поступила в редакцию 8 марта 2010г.

QUANTUM-MECHANICAL APPROACH TO DESCRIPTION OF THE POSSIBILITY OF THE REINFORCEMENT OF THE RADIATION BY MEANS OF CONTINUUM NANOTUBES

On base of the quantum approach is shown possibility of the pumping the ambience, consisting of nanotubes. Pumping is produced using non-stationary electric field perpendicular to axis of the symmetries nanotubes. The Problem dares on base of the theories free electron and models independent electron. The Mathematical modeling of the process is realized on base of the system of the material equations.

Keywords: Shredinger's equation, electromagnetic radiation, nanotubes, non-stationary electric field.

Sadykov Nail Rahmatulovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Snezhinsk institute of physics and technology - branch of National Research Nuclear University «МЕРФИ», Snezhinsk.

Садыков Наиль Рахматулович - доктор физико-математических наук, профессор, Снежинский физико-технический институт - филиал НИЯУ МИФИ, г. Снежинск.

Scorkin Nikolai Andreevich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Snezhinsk institute of physics and technology - branch of National Research Nuclear University "МЕРФИ", Snezhinsk.

Скоркин Николай Андреевич - доктор технических наук, профессор, Снежинский физико-технический институт - филиал НИЯУ МИФИ, г. Снежинск.

e-mail: n.a.scorkin@rambler.ru