УДК 517.957:537.9

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УЕДИНЕННЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ

© 2023 г. О. Ю. Бабина<sup>1</sup>, С. Ю. Глазов<sup>1, 2, \*</sup>, И. Н. Федулов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Волгоградский государственный социально-педагогический университет", Волгоград, Россия <sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Волгоградский государственный медицинский университет" Министерства здравоохранения Российской Федерации, Волгоград, Россия

<sup>3</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Югорский государственный университет", Ханты-Мансийск, Россия

> \**E-mail: ser-glazov@yandex.ru* Поступила в редакцию 29.08.2022 г. После доработки 16.09.2022 г. Принята к публикации 26.09.2022 г.

Изучено взаимное влияние солитонов, распространяющихся вдоль осей двумерной сверхрешетки на основе графена по взаимоперпендикулярным направлениям. Показано, что вследствие неаддитивности энергетического спектра структуры область перекрытия солитонов претерпевает характерные изменения, связанные с образованием импульсов, распространяющихся вдоль фронтов взаимодействующих уединенных волн.

DOI: 10.31857/S0367676522700053, EDN: JHFRGW

#### **ВВЕДЕНИЕ**

Изучение оптических свойств графеновых структур – важное и актуальное направление современных исследований физики графена. Несмотря на пока еще существующие сложности технологического плана в получении графеновых сверхструктур, активно ведутся теоретические и экспериментальные исследования одномерных [1, 2] и двумерных (2D) [3–9] сверхрешеток на основе графена (ГСР). На сегодняшний день в данной области получено множество интересных результатов. В ГСР возможна генерация и усиление электромагнитных волн, в частности уединенных электромагнитных импульсов [10–15], что уже в недалеком будущем несомненно будет иметь важное практическое значение [16, 17]. Одномерная ГСР представляет собой слой графена на полосчатой подложке из чередующихся полос, например, оксида и карбида кремния (SiO<sub>2</sub> и SiC) соответственно. Подложка из SiO<sub>2</sub> не влияет на энергетический спектр графена, а в результате взаимодействия графена с подложкой из SiC появляется запрещенная зона ("щель") шириной 0.26 эВ. Чередование щелевой и бесшелевой модификации графена приводит к образованию минизонного спектра. Ось сверхрешетки в этом случае направленно перпендикулярно чередующимся полосам SiO<sub>2</sub> и SiC. Если же вместо полосчатой взять подложку, образуемую периодически чередующимися в шахматном порядке прямоугольными областями оксида и карбида кремния, то получится 2D ГСР. Модельный энергетический спектр такой сверхрешетки предложен в работе [3], а в работах [5, 6] исследовалось распространение электромагнитных импульсов в 2D ГСР. В данной работе численно исследовано взаимодействие уединенных электромагнитных импульсов (УЭИ), распространяющихся вдоль осей 2D ГСР по взаимоперпендикулярным направлениям.

#### ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Спектр 2D ГСР, состоящей из чередующихся в шахматном порядке прямоугольных областей щелевого и бесщелевого графена, в одноминизонном приближении имеет вид [3]

$$\frac{\varepsilon(\vec{p}) =}{\pm \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2 \left(1 - \cos(p_x d_1)\right) + \Delta_2^2 \left(1 - \cos(p_y d_2)\right)}}, \quad (1)$$

где  $p_x, p_y$  — проекции квазиимпульса электрона на оси СР, а параметры  $\Delta_0, \Delta_1$  и  $\Delta_2$  были выбираются путем численного решения дисперсионного уравнения (здесь и далее  $\hbar = 1$ ). Подробное исследование свойств спектра 2D ГСР было предпринято в работах [4—7]. Отметим, что присущая данному спектру непараболичность предопределяет нелинейные свойства двумерной ГСР, в частности возможность распространения в ней уединенных электромагнитных импульсов (УЭИ) [18].

Эволюция УЭИ описывается уравнением д'Аламбера для векторного потенциала с учетом столкновений

$$\frac{\partial^2 \vec{\mathbf{A}}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{A}}}{\partial y^2} - \frac{1}{\mathbf{V}^2} \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{A}}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_0(\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y) = -\frac{4\pi}{c} \vec{j}_{st}(\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y),$$
(2)

где V = с $\chi^{-1/2}$ ,  $\chi$  – эффективная диэлектрическая проницаемость среды. Векторный потенциал связан с напряженностью электрического поля  $\vec{E} = -(1/c)\partial\vec{A}/\partial t$ . При решении задачи мы выбираем кулоновскую калибровку векторного потенциала.

Плотность электрического тока определяется в виде

$$\vec{j} = -e \sum n(\vec{p}) \vec{\upsilon} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right), \tag{3}$$

где  $n(\vec{p})$  — функция распределения электронов,  $\upsilon(\vec{p}) = (\partial \varepsilon / \partial p_x, \partial \varepsilon / \partial p_y)$  — скорость электронов. В бесстолкновительном пределе из (3) получаем  $j_0(A_x, A_y)$ . Величина, стоящая в правой части уравнения (2)  $j_{st}(A_x, A_y)$  является нелинейным функционалом возмущения плотности тока  $j_0(A_x, A_y)$  при учете столкновений. Для нахождения функции распределения носителей использовано классическое уравнение Больцмана с модельным интегралом столкновений в приближении постоянной частоты релаксации (v = const)

$$\frac{\partial n(\vec{p})}{\partial t} - \frac{e}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \frac{\partial n(\vec{p})}{\partial \vec{p}} = -v \left( n(\vec{p}) - n_0(\vec{p}) \right). \tag{4}$$

Разлагая скорость электронов в двумерный ряд Фурье и предполагая электронный газ невырожденным, имеем выражение для плотности тока

$$\vec{j}_0 = -\frac{en_0}{a} \left( \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_{nm} \sin(n\varphi_x) \cos(m\varphi_y), \right. \\ \left. \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_{nm} \sin(n\varphi_y) \cos(m\varphi_x) \right),$$
(5)

где  $n_0$  – концентрация 2D электронов, a – толщина графена,  $\bar{\phi} = \frac{e}{c}(A_x d_1, A_y d_2)$  – безразмерный векторный потенциал,  $B_{nm} = a_{nm}I_{nm}/I_{00}$ ,

$$I_{nm} = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) \cos(my) \exp\left[-\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos(x)) + \Delta_2^2 (1 - \cos(y))}/kT\right] dxdy,$$

 $a_{nm} = \frac{\Delta_1^2 d_1}{2\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin(x)\sin(nx)\cos(my)dxdy}{\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos(x)) + \Delta_2^2 (1 - \cos(y))}}.$ *C<sub>nm</sub>* вычисляется аналогично *B<sub>nm</sub>* посредством разложения в ряд Фурье проекции скорости электронов на ось *y*.

#### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Решение уравнения (2) производится численно с использованием схемы типа "крест". Периоды сверхрешетки выбираются равными  $d_1 = d_2 =$  $= d = 2 \cdot 10^{-6}$  см, при таком выборе параметры энергетического спектра (1) составляют  $\Delta_0 =$  $= 0.4217\Delta$  (для SiC  $\Delta = 0.13$  эВ),  $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.3318\Delta$ . Степень неаддитивности спектра будет определяться количеством перекрестных членов в его разложении в ряд Фурье.

$$\varepsilon(\vec{p}) = \Delta \left\{ g_1 - \frac{g_2}{2} \left[ \cos\left(p_x d\right) + \cos\left(p_y d\right) \right] - g_3 \cos\left(p_x d\right) \cos\left(p_y d\right) \right\}.$$
(6)

где  $g_1 = 0.624475$ ,  $g_2 = 0.1787$ ,  $g_3 = 0.01306$ . При решении данной задачи мы ограничивались лишь

первыми членами. Такой подход дает относительное отклонение спектров в 2%, что вполне соответствует случаю слабой неаддитивности. В декартовых координатах система уравнений для компонент безразмерного векторного потенциала приобретает вид:

$$\frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_x (1 + \beta \cos \varphi_y) = 0,$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_y (1 + \beta \cos \varphi_x) = 0,$$
(7)

где  $\tilde{t} = t \varpi / \sqrt{\chi}$ ,  $\tilde{x} = x \varpi / c$ ,  $\tilde{y} = y \varpi / c$ ,  $\varpi^2 = 2\pi n_0 e^2 B_{10} d / a$ ,  $\beta = 2B_{11} / B_{10}$ . В предельном случае аддитивного энергетического спектра (при  $\beta = 0$ ) уравнения (5) представляют собой двумерные уравнения синус-Гордона. В случае слабой неаддитивности спектра ГСР система (7) допускает точное аналитическое решение для некоторых выделенных направлений [5]. При учете столкновений правая часть уравнения (7) модифицируется и вместо нее появляется нелинейный функционал от векторного потенциала, выражающийся через диссипативный ток.

ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ том 87 № 1 2023



**Рис. 1.** Взаимодействие солитонов для  $\tilde{t} = 0$  (*a*), 60 (б).

Большой интерес представляет исследование взаимодействия нелинейных уединенных импульсов. В отсутствие неаддитивности спектра, когда параметр  $\beta = 0$ , солитоны, распространяющиеся вдоль взаимно перпендикулярных направлений, не взаимодействуют, вследствие чего их форма сохраняется. Однако в случае слабой неаддитивности результаты численного расчета показывают взаимное влияние распространяющихся уединенных волн даже в случае малых потенциалов.

Непосредственно результаты численного моделирования столкновений солитонов в 2D ГСР показаны на рис. 1. По горизонтальным осям отложены безразмерные координаты, по верти-





кальной — модуль напряженности электрического поля, также выраженный в безразмерных единицах. На рис.  $1\delta$  хорошо виден результат взаимного влияния солитонов друг на друга. В области перекрытия солитонов наблюдается уменьшение амплитуды с одновременным образованием двух импульсов, со значительной скоростью распространяющихся вдоль фронтов уединенных волн.

Для анализа картины эволюции УЭИ удобно выбрать направление под углом 45° к осям ГСР и наблюдать за изменением потенциала и напряженности электрического поля вдоль этого направления. Результаты моделирования изменения формы УЭИ представлены на рис. 2. Хорошо заметно быстрое уменьшение амплитуды на начальном этапе распространения, а также то, что по достижении амплитудой определенного значения в дальнейшем она перестает изменяться. В процессе распространения изменяется также и форма импульса. В целом картина эволюции формы УЭИ выглядит как подстраивание импульса под среду, в которой происходит его распространение.

При учете столкновений электронов с решеткой амплитуды УЭИ быстро уменьшаются, поэтому основной задачей является увеличение времени его жизни. Для увеличения времени жизни солитонной системы необходимо осуществить подпитку энергии с помощью внешнего электрического поля или тока [5, 6].

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численно исследовано распространение двух взаимодействующих нелинейных УЭИ в 2D ГСР в бесстолкновительном приближении и с учетом столкновений. Получена картина взаимного влияния и эволюции солитонов, распространяющихся вдоль осей сверхрешетки во взаимно перпендикулярных направлениях. В бесстолкновительном режиме после переходного процесса наблюдается состояние с установившейся амплитудой в области перекрытия солитонов и образование импульсов, бегущих вдоль фронтов уединенных волн. Такая эволюция рассматриваемой пары солитонов вызвана неаддитивностью энергетического спектра, приводящей к взаимосвязи ортогональных составляющих векторного потенциала. Разработан программный комплекс для численного моделирования распространения уединенных электромагнитных волн в 2D ГСР.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Ratnikov P.V. // JETP Lett. 2009. V. 90. No. 6. P. 469.
- Ratnikov P.V. // Phys. Rev. B. 2020. V. 101. Art. No. 125301.
- Kryuchkov S.V., Popov C.A. // J. Nano-Electron. Phys. 2017. V. 9. No. 2. Art. No. 02013.
- Бадикова П.В., Глазов С.Ю., Сыродоев Г.А. // ФТП. 2019. Т. 53. № 7. С. 927; Badikova P.V., Glazov S.Yu., Syrodoev G.A. // Semiconductors. 2019. V. 53. No. 7. P. 911.
- Глазов С.Ю., Сыродоев Г.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 1. С. 128; Glazov S.Yu., Syrodoev G.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 1. P. 98.

- Glazov S. Yu., Syrodoev G.A. // J. Phys. Conf. Ser. 2021. V. 1740. No. 1. Art. No. 012062.
- Бадикова П.В., Глазов С.Ю., Сыродоев Г.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 1. С. 38; Badikova P.V., Glazov S.Yu., Syrodoev G.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 1. P. 30.
- 8. Forsythe C., Zhou X., Watanabe K. et al. // Nature Nanotech. 2018. V. 13. P. 566.
- Zhang Y., Kim Y., Gilbert M.J. et al. // NPJ 2D Mater. Appl. 2018. V. 2. P. 31.
- Popa D., Sun Z., Torrisi F. et al. // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 97. Art. No. 203106.
- 11. Martin-Vergara F., Rus F., Villatoro F.R. // Nonlinear Syst. 2018. V. 2. P. 85.
- 12. *Kryuchkov S.V., Kukhar' E.I.* // Physica B. 2013. V. 408. P. 188.
- 13. Smirnova D.A., Shadrivov I.V., Smirnov A.I. et al. // Laser Photon. Rev. 2014. V. 8. P. 291.
- 14. Bludov Yu.V., Smirnova D.A., Kivshar Yu.S. et al. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. Art. No. 045424.
- Кухарь Е.И., Крючков С.В., Ионкина Е.С. // ФТП. 2018. Т. 52. № 6. С. 620; Kukhar E.I., Kryuchkov S.V., Ionkina E.S. // Semiconductors. 2018. V. 52. No. 6. P. 766.
- Крючков С.В., Капля Е.В. // ЖТФ. 2003. Т. 48. № 5.
   P. 53; Kryuchkov S.V., Kaplya E.V. // Tech. Phys. 2003.
   V. 48. No. 5. P. 576.
- 17. Sun Z., Hasan T., Ferrari A.C. // Physica E. 2012. V. 44. P. 1082.
- Эпштейн Э.М. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 11. С. 3456; Epshtein E.M. // Sov. Phys. Solid State. 1977. V. 19. No. 11. P. 2020.

## Interaction of solitary electromagnetic waves in a 2D graphene superlattice

O. Yu. Babina<sup>a</sup>, S. Yu. Glazov<sup>a, b, \*</sup>, I. N. Fedulov<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Volgograd State Socio-Pedagogical University, Volgograd, 400005 Russia <sup>b</sup>Volgograd State Medical University, Volgograd, 400131 Russia <sup>c</sup>Yugra State University, Khanty-Mansiysk, 628012 Russia \*e-mail: ser-glazov@yandex.ru

The mutual influence of solitons propagating along the axes of a two-dimensional graphene superlattice in mutually perpendicular directions has been studied. It is shown that due to the nonadditivity of the energy spectrum of the structure, the overlap region of solitons undergoes characteristic changes associated with the formation of pulses propagating along the fronts of interacting solitary waves.