08

Динамика лазерных пучков в массиве углеродных нанотрубок под действием механической нагрузки

© Р.Р. Трофимов, Н.Н. Конобеева ¶

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
„Волгоградский государственный университет“,
Волгоград, Россия

¶ E-mail: yana_nn@volsu.ru

Поступила в Редакцию 30 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 8 сентября 2025 г.
Принята к публикации 11 ноября 2025 г.

Изучается воздействие поля напряжений, формирующегося в массиве углеродных нанотрубок под механической нагрузкой, на свойства распространяющихся в этой среде лазерных пучков. Методом медленно меняющихся амплитуд и фаз на основе волнового уравнения получено уравнение, характеризующее изменение интенсивности электрического поля гауссового пучка. Проведен анализ влияния поля напряжений на параметры лазерного излучения.

Ключевые слова: наноструктурированные среды, электромагнитное излучение, поле деформаций.

DOI: 10.61011/FTT.2025.12.62443.8108k-25

1. Введение

Изучение особенностей взаимодействия высокоинтенсивного лазерного излучения с веществом представляет собой важнейшее направление исследований в нелинейной оптике. Как показывают современные теоретические [1–3] и экспериментальные работы, такие исследования способствуют как открытию новых физических явлений, так и поиску перспективных материалов для эффективного управления характеристиками лазерного излучения. Особый интерес в этом контексте представляют углеродные нанотрубки (УНТ), демонстрирующие уникальную способность поддерживать стабильное распространение электромагнитных полей [4].

Ключевым фактором управления характеристиками лазерного излучения (такими как локализация, интенсивность [5], увеличение выходной мощности [6]) является нелинейность среды. В качестве сред с нелинейными свойствами могут выступать как традиционные керровские среды [7] и плазма [8], обеспечивающие управление поляризацией при взаимодействии с контрольным пучком, так и современные материалы с ярко выраженной нелинейностью — в частности, углеродные нанотрубки.

Кроме того, на параметры электромагнитного излучения можно влиять с помощью внешних полей. Так в работах [9,10] показана возможность управления предельно короткими оптическими импульсами в анизотропных кристаллах при помощи магнитного и акустического полей. Все перечисленные результаты были получены на основе решения уравнений Максвелла без использования приближения медленно меняющихся амплитуд и фаз.

2. Теоретическая часть

В настоящем исследовании применяется указанное приближение для вывода аналога нелинейного уравнения Шрёдингера, описывающего динамику лазерного пучка в среде с УНТ под действием поля деформаций.

Рассмотрим распространение электромагнитного пучка сквозь диэлектрическую среду с углеродными нанотрубками. Волновой вектор направлен под прямым углом к массиву УНТ. В работе используется предположение, что все нанотрубки ориентированы вдоль оси x, а также не учитываются неоднородности электромагнитного поля вдоль их оси, поскольку показано, что для рассматриваемых фемтосекундных импульсов это не дает существенного вклада [11].

Зависимость энергии Δ от квазиимпульса для углеродных нанотрубок zig-zag типа описывается выражением [12]:

$$\Delta(p, s) = \pm\gamma_0\sqrt{1+4\cos(a\,p)\cos(s\,\pi/m)+4\cos^2(s\,\pi/m)}, \tag{1}$$

p — компонента квазиимпульса электрона вдоль оси УНТ, $s = \overline{1, m}$ — число, характеризующее квантование импульса по периметру нанотрубки $(m = 7)$, которое определяется диаметром УНТ $(\approx 0.55\,\text{nm})$, $a = 1.5b/\hbar$, b — расстояние между атомами углерода в графеновой решетке, $\hbar$ — постоянная Планка, $\gamma_0 \approx 2.7\,\text{eV}$ — интеграл перекрытия. Знак „+“ соответствует зоне проводимости, знак „−“ — валентной зоне.

Электрическое поле лазерного пучка и плотность электрического тока, протекающего через поперечное сечение УНТ имеют вид $\mathbf{E} = \big(E(y, z, t), 0, 0\big)$ и $\mathbf{j} = \big(j(y, z, t), 0, 0\big)$. Уравнение для компоненты векторного потенциала лазерного излучения вдоль

оси УНТ —

$$\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} + \frac{4\pi}{c} j(A), \tag{2}$$

Здесь c — скорость света в вакууме, ε — диэлектрическая проницаемость среды, в которой находятся нанотрубки.

Далее учтем, что УНТ подвергаются деформациям сжатия и растяжения, что приводит к возникновению поля механических напряжений [13]. Это, в свою очередь, вносит поправку в поле импульса:

$$A' = d \cdot u, \tag{3}$$

где d — коэффициент пропорциональности, зависящий от электронного параметра Грюнайзена (для углеродных нанотрубок равен 2) [14], коэффициента Пуассона и γ_0, u — поле упругих деформаций.

В настоящей работе мы не приводим детального расчета [15] зависимости векторного потенциала от поля деформации (3), а лишь показываем ее общий вид.

Далее запишем выражение для x-компоненты плотности электрического тока:

$$j = 2e\sum_{s=1}^{m}\int_{\mathrm{BZ}}^{\infty} v(p,s)\cdot F\cdot dp, \tag{4}$$

где $v(p,s) = \partial\Delta(p,s)/\partial p$ — скорость электронов, F — функция распределения Ферми–Дирака, BZ — зона Бриллюэна.

С учетом разложения дисперсионного соотношения в ряд Фурье и в рамках бесстолкновительного приближения, уравнение (4) преобразуется к следующей форме:

$$j = -en_0\gamma_0 a\sum_{q=1}^{\infty}\sum_{s=1}^{m} b_{s,q}\sin\left(\frac{qa(eA+A')}{c}\right), \tag{5}$$

здесь n_0 определяет концентрацию электронов,

$$b_{s,q} = -q\frac{\alpha_{s,q}}{\gamma_0}\frac{\int_{-\pi}^{\pi}\cos(qr)\exp\left(-\sum_{q=1}^{\infty}\frac{\alpha_{s,q}\cos(qr)}{k_{\mathrm{B}}T}\right)dr}{\int_{-\pi}^{\pi}\exp\left(-\sum_{q=1}^{\infty}\frac{\alpha_{s,q}\cos(qr)}{k_{\mathrm{B}}T}\right)dr}, \tag{6}$$

$k_{\mathrm{B}} \approx 1.38\,\mathrm{J/K}$, T — температура,

$$\alpha_{s,q} = \frac{a}{\pi}\int_{\mathrm{BZ}}^{\infty}\cos(p\cdot a\cdot q)\Delta(p,s)dp. \tag{7}$$

С учетом приведенных формул (5)–(7), волновое уравнение (2), описывающее динамику лазерного излучения в среде с углеродными нанотрубками при наличии деформационного поля, может быть записано в виде:

$$\frac{ea}{c}\left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 A}{\partial z^2}\right) - \frac{ea\varepsilon}{c^3}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \omega_0^2\sum_{q=1}^{\infty}\sum_{s=1}^{m} b_{s,q}\sin\left(\frac{qa}{c}(eA+A')\right) = 0,$$

$$\omega_0 = 2ea\sqrt{\pi n_0\gamma_0} \tag{8}$$

или, с учетом синуса суммы,

$$\frac{ea}{c}\left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 A}{\partial z^2}\right) - \frac{ea\varepsilon}{c^3}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \omega_0^2\sum_{q=1}^{\infty}\sum_{s=1}^{m}\left[b^1_{s,q}\sin\left(\frac{qae}{c}A\right) + b^2_{s,q}\cos\left(\frac{qae}{c}A\right)\right] = 0,$$

$$b^1_{s,q} = b_{s,q}\cos\left(\frac{qa}{c}A'\right), \quad b^2_{s,q} = b_{s,q}\sin\left(\frac{qae}{c}A'\right). \tag{9}$$

Представим обезразмеренную компоненту векторного потенциала в виде

$$\tilde{\mathbf{A}} = \frac{ea}{c}A = \tilde{\mathbf{A}}_0(y,z)\cos(\omega t - kz - \varphi), \tag{10}$$

$\tilde{\mathbf{A}}_0(y,z)$ — огибающая x-компоненты векторного потенциала, $k = \omega\sqrt{\varepsilon}/c$ — модуль волнового вектора, φ — начальная фаза.

На основе метода медленно меняющихся амплитуд и фаз [16] можно получить уравнение на интенсивность электромагнитного пучка $|\Phi|^2 = |\tilde{\mathbf{A}}_0(y,z)|^2$, с учетом представления $\sin(\mu\cos\eta)$ и $\cos(\mu\cos\eta)$ при помощи функций Бесселя первого рода и усреднения по периоду $2\pi/\omega$:

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\xi^2} + 2i\kappa\frac{\partial\Phi}{\partial\tau} - \Phi\sum_{q=1}^{\infty}\sum_{s=1}^{m}\left(qb^1_{s,q}\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r q^{2r+1}|\Phi|^{2r}}{2^{2r}r!(r+1)!}\right) - \Phi\sum_{q=1}^{\infty}\sum_{s=1}^{m}\left(b^2_{s,q}\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-1)^r q^{2r}|\Phi|^{2r}}{2^{2r}r!r!}\times\left(1-\frac{q^2|\Phi|^2}{2(r+1)(r+2)}\right)\right) = 0 \tag{11}$$

(ξ,τ) представляют собой безразмерные координаты, κ — безразмерный волновой вектор, $b_{s,q}$ определяются в ходе вычисления скорости электронов проводимости в углеродных нанотрубках. Поскольку эти коэффициенты достаточно быстро убывают с ростом q, ограничимся в сумме по qтолько десятью слагаемыми.

Для решения уравнения (11) применяется конечно-разностная схема Бессе [17] второго порядка точности, с начальными условиями в форме гауссова пучка:

$$\Phi(\xi,0) = \Phi_0\cdot\exp\left(\frac{\xi^2}{L^2}\right). \tag{12}$$

Здесь Φ_0 — начальная интенсивность, зависящая от частоты и амплитуды электрического поля пучка, L — ширина пучка.

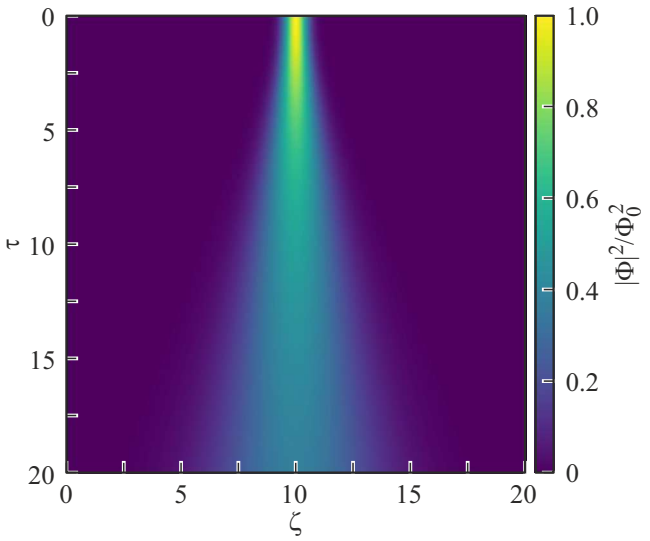

Рис. 1. Зависимость интенсивности лазерного пучка от координат ξ и τ.

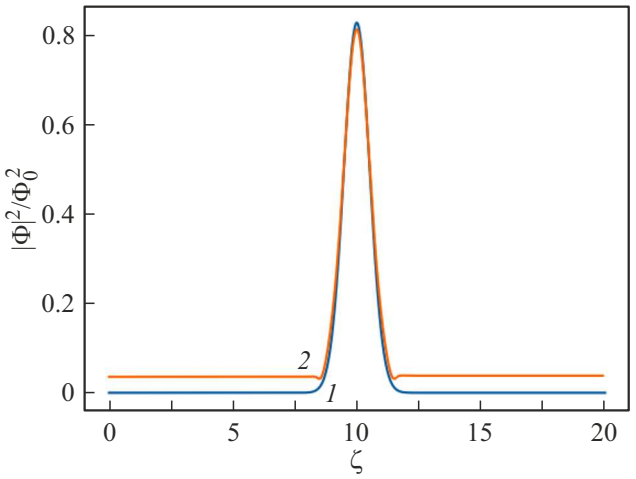

Рис. 2. Зависимость интенсивности лазерного пучка от координаты ξ при $\tau = 15$: кривая *1* — без учета деформации, *2* — с учетом деформации.

3. Результаты

На рис. 1 представлено распределение интенсивности поля в массиве УНТ (7,0) при следующих параметрах:

$$T = 77\,\mathrm{K}, \quad \varepsilon = 4, \quad n_0 = 2 \cdot 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3},$$

$$\gamma_0 = 2.7\,\mathrm{eV}, \quad \omega_0 \approx 10^{14}\,\mathrm{s}^{-1}.$$

Наблюдается существенное расплывание пучка с течением времени, что приводит к снижению амплитуды на величину около 35% от первоначальной. Наши исследования показали, что степень уширения зависит от частоты и начальной амплитуды электрического поля лазерного луча. А именно, лазерные лучи большей амплитуды менее подвержены дифракции, аналогичное поведение наблюдается и при увеличении частоты ω. Так, для $\omega = 2 \cdot 10^{14}\,\mathrm{s}^{-1}$ абсолютное изменение ширины пучка по отношению к первоначальной ($\sim 6 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{cm}$) составляет $6.6 \cdot 10^{-4}\,\mathrm{cm}$, для $\omega = 10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$ — $2 \cdot 10^{-5}\,\mathrm{cm}$.

На рис. 2 приведены зависимости интенсивности пучка от пространственной координаты при наличии/отсутствии поля деформаций.

4. Заключение

Из приведенных зависимостей можно сделать вывод, что наличие деформации углеродных нанотрубок (рассматривались величины до 10%) оказывает слабое воздействие на параметры лазерного пучка и проявляется в уменьшении интенсивности не более чем на 1.5%.

Таким образом, на основе построенной модели, описывающей динамику лазерного пучка в среде с УНТ, находящихся под действием поля деформаций, выявлено, что сжатие/растяжение углеродных нанотрубок не приводит к существенным изменениям пучка. Это позволяет использовать УНТ в оптических приложениях, где возможна механическая нагрузка, например, в волноводных системах.

Финансирование работы

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (РНФ) (грант № 23-71-00016, https://rscf.ru/project/23-71-00016/), с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] P.V. Bulat, K.N. Volkov, E.Ye. Ilyina. IEJME — Mathematics education **11**, *8*, 3009 (2016).
[2] G. Miloshevsky. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **30**, *8*, 083001 (2022). https://doi.org/10.1088/1361-651X/ac8abc
[3] V.A. Khalyapin, A.N. Bugay. Chaos, Solitons & Fractals **156**, 111799 (2022). https://doi.org/10.1016/j.chaos.2022.111799
[4] S. Iijima. Nature **354**, *6348*, 56 (1991). https://doi.org/10.1038/354056a0
[5] D. Mihalache. Rom. Rep. Phys. **76**, 402 (2024).
[6] S.M. Redmond, D.J. Ripin, C.X. Yu, S.J. Augst, T.Y. Fan, P.A. Thielen, J.E. Rothenberg, G.D. Goodno. Opt. Lett. **37**, *14*, 2832 (2012). https://doi.org/10.1364/OL.37.002832
[7] А.П. Сухоруков, В.А. Трофимов. Изв. АН СССР. Сер. физ. **46**, 1933 (1982). [Bull. RAS]
[8] P. Michel, E. Kur, M. Lazarow, T. Chapman, L. Divol, J.S. Wurtele. Phys. Rev. X **10**, *2*, 021039 (2020). https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.021039
[9] N.N. Konobeeva, M.B. Belonenko. Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics **12**, *4*, 430 (2021). DOI: 10.17586/2220-8054-2021-12-4-430-435

[10] N.N. Konobeeva, A.S. Kulbina, M.B. Belonenko. Nanobiotechnol. Rep. **17**, *6*, 890 (2022). https://doi.org/10.1134/S2635167622060052
[11] A.V. Zhukov, R. Bouffanais, E.G. Fedorov, M.B. Belonenko. J. Appl. Phys. **114**, *14*, 143106 (2013). https://doi.org/10.1063/1.4824370
[12] А.В. Елецкий. УФН **167**, *9*, 945 (1997). https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199709b.0945 [A.V. Eletskii Phys. Usp. **40**, *9*, 899 (1997).]
[13] M.A.H. Vozmediano, M.I. Katsnelson, F. Guinea. Phys. Rep. **496**, *4–5*, 109 (2010). https://doi.org/10.1016/j.physrep.2010.07.003
[14] Д.С. Сандитов, В.В. Мантатов, М.В. Дармаев, Б.Д. Сандитов. ЖТФ **79**, *3*, 59 (2009). [D.S. Sanditov, V.V. Mantatov, M.V. Darmaev, B.D. Sanditov. Tech. Phys. **54**, *3*, 385 (2009).]
[15] О.С. Ляпкосова, Н.Г. Лебедев, М.Б. Белоненко. ФТТ **55**, *12*, 2474 (2013). [O.S. Lyapkosova, N.G. Lebedev, M.B. Belonenko. Phys. Solid State **55**, *12*, 2602 (2013).]
[16] Н.Н. Ахмедиев, А. Анкевич. Солитоны. Нелинейные импульсы и пучки. Физматлит, М. (2003). С. 13–20. [N.N. Akhmediev, A. Ankevich. Solitons, Nonlinear Pulses and Beams. Chapman & Hall, London (1997).]
[17] C. Besse. SIAM J. Numerical Analysis **42**, *3*, 934 (2004).

Редактор Е.В. Толстякова