09

Предельно короткие импульсы в смешанном массиве углеродных нанотрубок

© Н.Н. Янюшкина

Волгоградский государственный университет,
Волгоград, Россия

e-mail: yana_nn@volsu.ru

Поступила в редакцию 10.07.2026 г.
В окончательной редакции 24.07.2026 г.
Принята к публикации 11.08.2026 г.

Целью работы является теоретическое исследование закономерностей распространения электромагнитных импульсов в смешанном массиве углеродных нанотрубок, содержащем нанотрубки зигзагообразных (zigzag) и кресельных (armchair) типов. Для численного моделирования эволюции предельно коротких импульсов фемтосекундного диапазона используется модифицированное нелинейное волновое уравнение, в котором плотность тока определяется суперпозицией вкладов от нанотрубок с различными индексами хиральности. Обнаружено, что изменение пропорций между нанотрубками разных типов позволяет модулировать свойства проходящего сигнала, что открывает путь к созданию устройств и сред с управляемым оптическим откликом.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, различная хиральность, предельно короткие оптические импульсы.

DOI: 10.61011/OS.2026.10.63940.10000-26

Введение

С момента своего открытия однослойные углеродные нанотрубки (УНТ) [1] привлекают пристальное внимание исследователей благодаря уникальному сочетанию физико-химических свойств, обусловленных их квазиодномерной структурой. Особый интерес представляет взаимодействие электромагнитного излучения с массивами УНТ, что открывает широкие перспективы для создания элементов наноэлектроники, сверхбыстрых оптических переключателей, устройств терагерцовой фотоники и сенсоров [2–4]. Электронные и оптические свойства нанотрубок критическим образом зависят от их хиральности — геометрии свертки графенового листа [5]. В частности, трубки типа armchair обладают металлическим типом проводимости, в то время как трубки типа zigzag могут проявлять как металлические, так и полупроводниковые свойства в зависимости от диаметра. Это разнообразие свойств делает актуальным исследование не просто массивов, состоящих из трубок одного типа, а именно смешанных массивов.

Распространение электромагнитных импульсов, в том числе предельно коротких, содержащих всего несколько колебаний поля [6–8], в средах на основе УНТ является активно развивающейся областью теоретической и экспериментальной физики. Показано, что в массивах нанотрубок возможно существование электромагнитных солитонов, а параметры распространения (форма, интенсивность, ширина импульса) сильно зависят от характеристик среды [9,10]. Исследования инфракрасного поглощения в ахиральных нанотрубках демонстрируют осциллирующий характер диэлектрической функции и коэффициента поглощения, причем для трубок кресельного (armchair) типа осцилляции начинаются в области более низких частот по сравнению с трубками зигзагообразного (zigzag) типа. Это указывает на существенную роль хиральности в частотной дисперсии отклика нанотрубок.

Однако подавляющее большинство теоретических работ рассматриваются массивы, состоящие из нанотрубок одного типа (либо только zigzag, либо только armchair). В реальных синтезируемых образцах, как правило, присутствует смесь трубок с различной хиральностью [11–13]. Поэтому решение задачи о распространении электромагнитных импульсов в таких гетерогенных средах является актуальной. Наличие смеси металлических (armchair) и полупроводниковых (zigzag) трубок должно приводить к возникновению эффективной анизотропной среды со сложной нелинейностью, что потребует учета перераспределения энергии импульса между компонентами массива и возможного возникновения новых эффектов.

Модель и основные уравнения

Рассматривается распространение предельно короткого оптического импульса в нелинейной среде, сформированной массивом вертикально выровненных УНТ [14]. Причем для анализа влияния типа проводимости исследуется среда, состоящая из двух различных групп нанотрубок: zigzag и armchair (рис. 1). Массив нанотрубок ориентирован вертикально, т. е. их оси параллельны друг другу, при этом ось Oz направлена перпендикулярно плоскости массива и совпадает с направлением

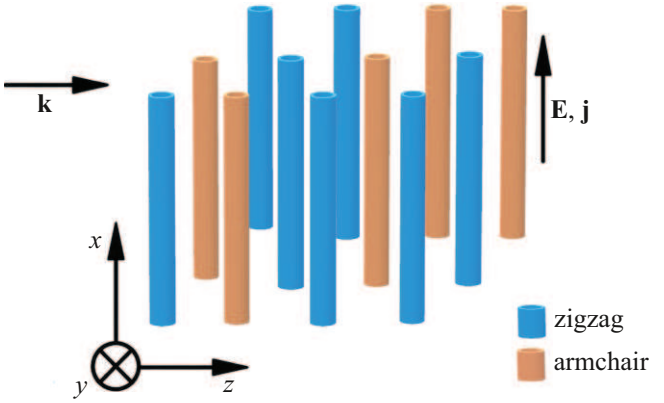


Рис. 1. Схематичное изображение геометрии системы со смешанным массивом УНТ.

распространения лазерного импульса, тогда как ось Ox выбрана вдоль направления поляризации электрического поля импульса и сонаправлена с осями нанотрубок. Вектор напряженности электрического поля имеет единственную ненулевую компоненту $\mathbf{E} = (E(y, z, t), 0, 0)$, что означает линейную поляризацию поля строго вдоль осей нанотрубок и является условием эффективного возбуждения электронов. Такая поляризация поля обеспечивает генерацию электрического тока вдоль трубок, поэтому плотность тока также имеет единственную компоненту $\mathbf{j} = (j(y, z, t), 0, 0)$, а зависимость поля от поперечной координаты y позволяет моделировать пространственную структуру импульса.

Волновое уравнение на x-компоненту векторного потенциала $\mathbf{A} = (A(y, z, t), 0, 0)$ с учетом калибровки $cE = -\partial A/\partial t$ может быть записано следующим образом:

$$\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} + \frac{4\pi}{c} j(A). \tag{1}$$

Здесь ε — диэлектрическая проницаемость среды, плотность электрического тока j складывается из двух составляющих — j_z (вклад УНТ типа zigzag) и j_{arm} (вклад УНТ типа armchair).

В бесстолкновительном пределе ($\tau_p \ll \tau_{\text{rel}}$), где τ_p — длительность импульса, а τ_{rel} — время релаксации, плотность тока определяется формулой [15]

$$J_{\text{CNT}} = -\frac{|e|N}{\pi\hbar}\int\limits_{\text{BZ}} d\tilde{p} v\left(\tilde{p} - \frac{|e|A}{c}\right) f(\tilde{p}), \tag{2}$$

e — заряд электрона, $\tilde{p}$ — обобщенный квазиимпульс, смещенный внешним полем, N — плотность размещения нанотрубок, $f(\tilde{p})$ — функция распределения, BZ — границы первой зоны Бриллюэна, $v(\tilde{p})$ — скорость электронов в УНТ. Закон дисперсии электронов УНТ типа armchair (n, n) имеет вид [16]:

$$\varepsilon_{\text{arm}} = \gamma_0\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\pi q}{n}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}kb}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}kb}{2}\right)}, \tag{3}$$

где $\gamma_0 = 2.7\,\text{eV}$ — интеграл перескока, $b = 1.42$ Å, k — аксиальный волновой вектор, ограниченный первой зоной Бриллюэна, $q = 1, \ldots, 2n$ — целое число. Для нанотрубок типа zigzag $(m, 0)$ [17]

$$\varepsilon_z = \gamma_0\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{3kb}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)}, \tag{4}$$

$s = 1, 2, \ldots, m$.

Для расчета компоненты плотности тока раскладываем законы дисперсии в ряд Фурье, перейдя от волнового вектора к квазиимпульсу:

$$j_l = en_l\gamma_0\sum_{r=1}^{\infty} rG_r^l \sin\left(\frac{\text{rea}A}{c}\right), \quad l = \{a, z\},$$

$$G_r^l = -\sum_{s=1}^{m}\frac{B_{r,z}^l}{\gamma_0} \times \int\limits_{1\text{BZ}} \frac{\cos\left(\frac{ra\tilde{p}}{c}\right)}{1 + \exp\left(\sum\limits_{k=1}^{\infty} B_{r,z}^l \cos\left(\frac{ra\tilde{p}}{c}\right) - \mu\right)} d(a\tilde{p}), \tag{5}$$

где $a = \sqrt{3}b$ — постоянная решетки, $B_{q,s}$ — коэффициенты разложения (3) и (4), причем верхний индекс (z или a) относится к двум типам нанотрубок, n_z — концентрация электронов проводимости в УНТ типа zigzag ($\approx 2 \cdot 10^{17}\,\text{cm}^{-3}$), n_a — концентрация электронов проводимости в УНТ типа armchair ($\approx 10^{18}\,\text{cm}^{-3}$). Отметим, что такая большая концентрация n_z в УНТ типа zigzag объясняется использованием метода электростатического легирования [18,19]. Поскольку в чистых УНТ $(m, 0)$ при m, не кратном 3, имеется достаточно большая щель (например, для УНТ (10,0) $E_g = 1.05\,\text{eV}$), то для ее преодоления необходимо сдвинуть уровень Ферми ($\mu \neq 0$), что можно сделать благодаря упомянутому выше способу без добавления посторонних примесей. УНТ типа armchair проявляют металлическую проводимость и при приложении напряжения их концентрация сильно не изменится.

Результаты численного моделирования

Уравнение (1) с учетом (5) после приведения к безразмерному виду решалось при помощи метода конечных разностей [20]. Начальное условие задавалось при помощи функции Гаусса:

$$A(y, z, 0) = A_0\exp\left(-\frac{z^2}{\gamma_z^2}\right)\exp\left(-\frac{y^2}{\gamma_y^2}\right),$$

$$\frac{dA(y, z, 0)}{dt} = \frac{2A_0 z v_z}{\gamma_z^2}\exp\left(-\frac{z^2}{\gamma_z^2}\right)\exp\left(-\frac{y^2}{\gamma_y^2}\right). \tag{6}$$

Здесь A_0 — векторный потенциал импульса в начальный момент времени, $v_z = 0.95c$ — его скорость в момент

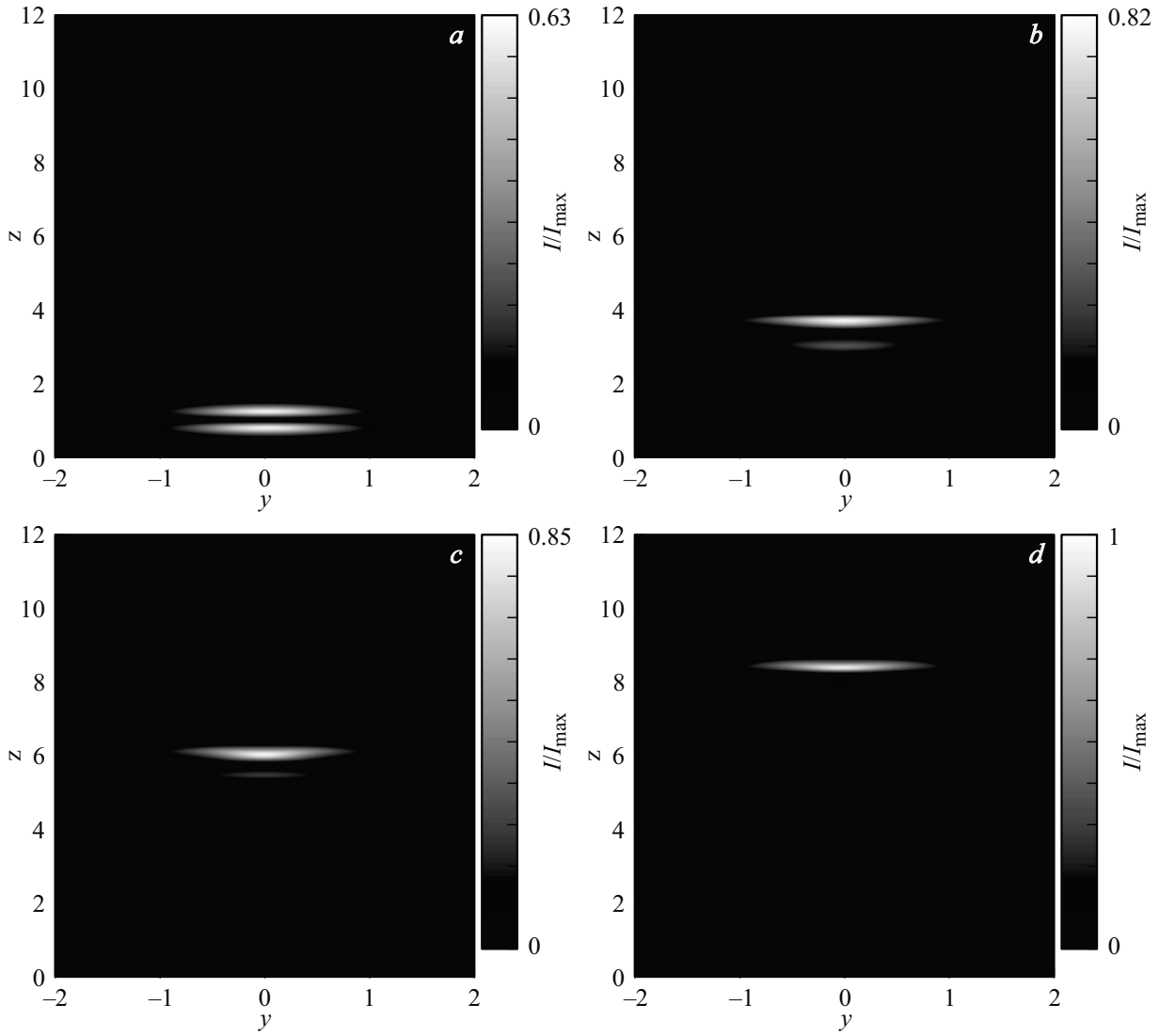


Рис. 2. Интенсивность электрического поля импульса в различные моменты времени ($n_z = 80\,\%$, $n_a = 20\,\%$): *a* — $t = 0$; *b* — $t = 42$ fs; *c* — $t = 84$ fs; *d* — $t = 126$ fs. Цветовая шкала приведена для интенсивности, отнесенной к максимуму интенсивности для всех рисунков (*a*–*d*).

времени $t = 0$, γ_x, γ_z определяют начальную ширину предельно короткого импульса вдоль заданных направлений.

Интенсивность электрического поля предельно короткого импульса определяется квадратом напряженности электрического поля: $I \propto E^2$.

Рисунок 2 демонстрирует эволюцию интенсивности двумерного предельно короткого оптического импульса в ходе его прохождения через смешанный массив УНТ со следующей пропорцией zigzag- и armchair-нанотрубок — 80:20.

Отметим, что с течением времени интенсивность импульса для данной пропорции нанотрубок возрастает, чего не наблюдалось ранее для массива из УНТ типа zigzag. Это объясняется конкуренцией двух факторов — дисперсии и нелинейности среды, причем нелинейные эффекты доминируют над дисперсионными. В целом импульс распространяется локализовано, сохраняя свою форму.

На рис. 3 представлен предельно короткий оптический импульс в зависимости от доли УНТ типа armchair и УНТ типа zigzag.

Отметим, что даже небольшая доля УНТ типа armchair в массиве (10 %, рис. 3, *b*) приводит к уменьшению расплывания в поперечном направлении и увеличению амплитуды импульса. Также при значительной доле n_a (рис. 3, *c* и *d*) наблюдается замедление предельно короткого импульса, что связано как с возбуждением плазмонов и возникновением дополнительной „инерции“ импульса, так и с увеличением эффективного показателя преломления при росте доли УНТ типа armchair.

Зависимость максимума интенсивности от времени для разной доли УНТ типа armchair в массиве показана на рис. 4.

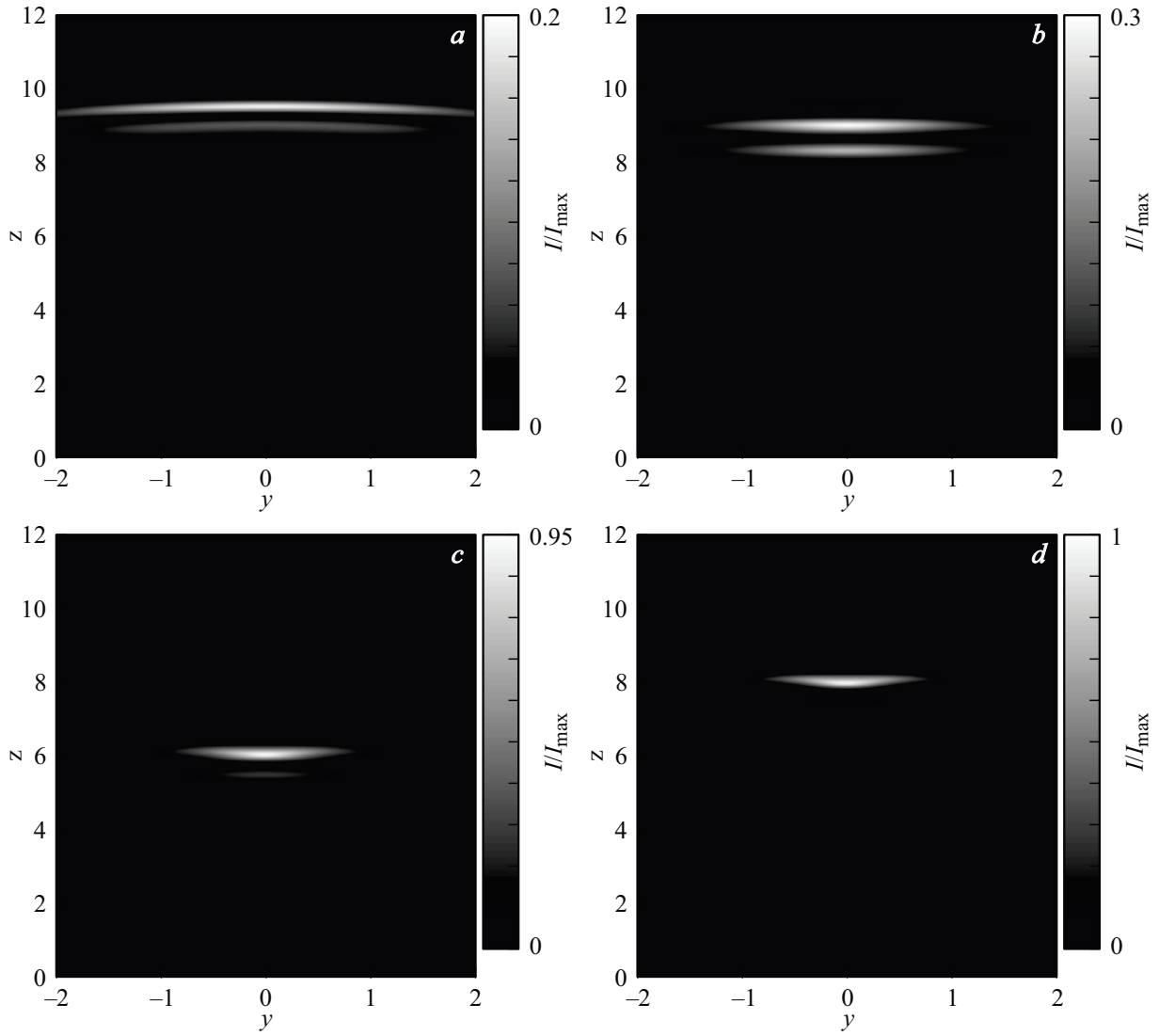


Рис. 3. Интенсивность электромагнитного импульса в момент времени $t = 126$ fs: a — $n_z = 100\,\%$, $n_a = 0\,\%$; b — $n_z = 90\,\%$, $n_a = 10\,\%$; c — $n_z = 80\,\%$, $n_a = 20\,\%$; d — $n_z = 60\,\%$, $n_a = 40\,\%$. Цветовая шкала отображает интенсивность, приведенную к максимуму интенсивности для всех рисунков. Единица по координатным осям соответствует $4.2\,\mu$m.

Из рис. 4 явно видны локальные максимумы и минимумы в случае присутствия УНТ типа armchair в массиве. Такие квазипериодические колебания максимальной интенсивности во времени для смесей с долей armchair от 10 % до 100 % и их отсутствие для чистого zigzag (0 %) объясняются интерференцией волноводных мод, возбуждаемых в массиве нанотрубок. Отсутствие осцилляций для чистого массива с УНТ типа zigzag говорит о том, что такая среда является одномодовой для данных условий возбуждения.

Заключение

1. Разработана модель для описания эволюции предельно короткого импульса в смешанном массиве УНТ с учетом доли УНТ каждого типа (zigzag и armchair).

2. Обнаружено, что с увеличение доли нанотрубок типа armchair происходит увеличение максимума пиковой интенсивности импульса, что обусловлено ростом нелинейной восприимчивости и усилением самофокусировки.

3. Управляя соотношением zigzag/armchair в массиве УНТ, можно настраивать временную форму и амплитуду прошедшего лазерного импульса, что открывает возможности для создания сред с контролируемой нелинейностью.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проекта FZUU-2026-0005 „Разработка методов моделирования сложных систем на основе интеграции прямых вычислительных экспериментов и интеллектуального анализа данных“.

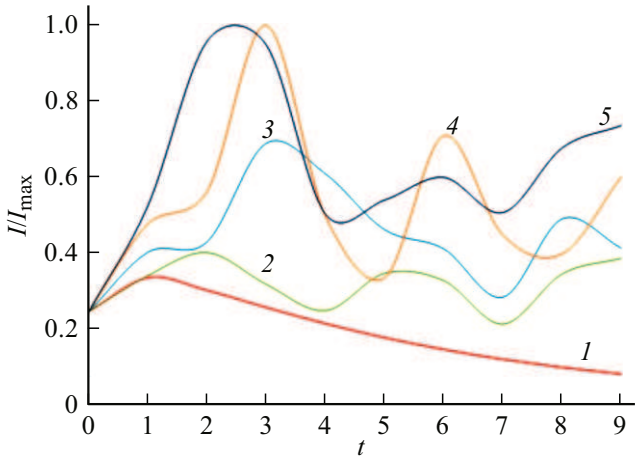


Рис. 4. Зависимость максимального значения интенсивности электромагнитного импульса от времени для разной доли УНТ типа armchair (n_a): *1* — $n_a = 0\,\%$; *2* — $n_a = 20\,\%$; *3* — $n_a = 50\,\%$; *4* — $n_a = 80\,\%$; *5* — $n_a = 100\,\%$. Единица по временной оси соответствует 14 fs.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] S. Iijima. Nature, **354**, 56 (1991). DOI: 10.1038/354056a0

[2] S.S. Abukari, S.Y. Mensah, N.G. Mensah, K.W. Adu, M. Rabiu, K.A. Dompreh, A. Twum. Eur. Phys. J. B, **86** (182) (2013). DOI: 10.1140/epjb/e2013-30771-6

[3] K. Cong, W. Jiang, B.E. Anthonio, G.T. No, H. Liu, H. Kataura, M. Kira, J. Kono. ACS Photonics, **7** (6), 1382 (2020). DOI: 10.1021/acsphotonics.0c00315

[4] X. Zhang, Y. Wang, K. Jiang, X. Zhang, G. Sun, L. Ma, Y. Ru. Opt. Lett., **50**, 4182–4185 (2025). DOI: 10.1364/OL.566166

[5] А.В. Елецкий. УФН, **167**, 945 (1997). DOI: 10.3367/UFNr.0167.199709b.0945 [A.V. Eletskii. Phys. Usp., **40**, 899 (1997). DOI: 10.1070/PU1997v040n09ABEH000282].

[6] С.А. Козлов, С.В. Сазонов. ЖЭТФ, **111** (2), 404 (1997). [S.A. Kozlov, S.V. Sazonov. JETP, **84** (2), 221 (1997). DOI: 10.1134/1.558109].

[7] А.В. Пахомов, М.В. Архипов, Н.Н. Розанов, Р.М. Архипов. Опт. и спектр., **132** (4), 440 (2024). DOI: 10.61011/OS.2024.04.58224.6127-24 [A.V. Pakhomov, M.V. Arkhipov, N.N. Rosanov, R.M. Arkhipov. Opt. Spectr., **132** (4), 440 (2024). DOI: 10.61011/OS.2024.04.58224.6127-24].

[8] Н.Н. Розанов, М.В. Архипов, Р.М. Архипов. УФН, **194** (11), 1196 (2024). DOI: 10.3367/UFNr.2024.07.039718 [N.N. Rosanov, M.V. Arkhipov, R.M. Arkhipov. Physics-Uspekhi, 67 (11), 1129 (2024). DOI: 10.3367/UFNe.2024.07.039718].

[9] Н.Н. Янюшкина, М.Б. Белоненко. ЖТФ, **83** (4), 155 (2013). [N.N. Yanyushkina, M.B. Belonenko. Technical Phys., **58** (4), 621 (2013). DOI: 10.1134/S1063784213040270].

[10] N.N. Konobeeva, M.B. Belonenko, E.G. Fedorov. Mod. Phys. Lett. B, **34** (31), 2050358 (2020). DOI: 10.1142/S0217984920503583

[11] V.I. Artyukhov, E.S. Penev, B.I. Yakobson. Nat. Commun., **5**, 4892 (2014). DOI: 10.1038/ncomms5892

[12] S. Zhang, D. Lin, W. Liu, Y. Yu, J. Zhang. Small, **15** (46), 1903896 (2019). DOI: 10.1002/smll.201903896

[13] Y. Li, L. Li, H. Jiang, L. Qian, M. He, D. Zhou, K. Jiang, H. Liu, X. Qin, Y. Gao, Q. Wu, X. Chi, Z. Li, J. Zhang. Sci. Adv., **10**, eadn6519 (2024). DOI: 10.1126/sciadv.adn651

[14] A. Kohls, M.M. Ditty, F. Dehghandehnavi, S.-Y. Zheng. ACS Appl. Mater. Interfaces, **14** (5), 6287 (2022). DOI: 10.1021/acsami.1c20423

[15] Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов. *Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками* (Наука, М., 1989).

[16] C.W. Chiu, F.L. Shyu, C.P. Chang, D.S. Chuu, M.F. Lin. J. Phys. Soc. Jpn., **73** (11), 2936 (2004). DOI: 10.1143/jpsj.73.2936

[17] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (Imperial College Press, London, 1998).

[18] R.J.E. Hueting, G. Gupta. Springer Handbook of Semiconductor Devices. (Springer, Cham, 2022), p. 371–389. DOI: 10.1007/978-3-030-79827-7_11

[19] S. Cristoloveanu, K.H. Lee, H. Park, M.S. Parihar. Solid State Electronics, **155**, 32 (2019). DOI: 10.1016/j.sse.2019.03.017

[20] J.W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations-Finite Difference Methods* (Springer-Verlag, New York, 1995).