

09

Распространение предельно коротких оптических импульсов в массиве углеродных нанотрубок с полимерами под действием постоянного магнитного поля

© Е.Н. Галкина¹, М.Б. Белоненко²

¹ Первый Московский государственный медицинский университет Минздрава России (Сеченовский университет), 119991 Москва, Россия

² Волгоградский государственный университет, 400062 Волгоград, Россия

e-mail: galkina@mail.com

Поступила в редакцию 22.01.2021 г.

В окончательной редакции 23.06.2021 г.

Принята к публикации 01.07.2021 г.

Изучено воздействие постоянного магнитного поля на поведение предельно коротких оптических импульсов, распространяющихся в среде, состоящей из углеродных нанотрубок и полимеров. В качестве основного уравнения, описывающего распространение электромагнитного поля в рассматриваемой среде, выбрано уравнение Максвелла. Получены зависимости формы оптических импульсов от концентрации полимера в исследуемой среде.

Ключевые слова: предельно короткий импульс, углеродные нанотрубки, магнитное поле, полимер.

DOI: 10.21883/OS.2021.10.51494.1838-21

Введение

Исследование предельно коротких оптических импульсов, распространяющихся в средах, содержащих углеродные нанотрубки, показывает уникальные электрофизические свойства данных систем, которые раскрывают огромный потенциал для их практического применения в многообразии полупроводниковой техники и электронных наноустройств [1–4]. Спектр применения электронных устройств, в основе которых лежат нанотрубки, довольно распространенный, в том числе наноинженерия, бионанотехнология, наномедицина, а также нанофармакология.

Авторы с различных континентов достаточно плотно изучают динамику как одномерных, так и двумерных, и трехмерных электромагнитных волн, распространяющихся в массиве углеродных наноструктур. Широко известны исследования данных сред с наложением внешних электрических и магнитных полей [5–8]. Кроме того, в ряде работ авторами было рассмотрено распространение предельно коротких световых импульсов в массиве углеродных нанотрубок с примесями [9–10]. Однако несмотря на активный интерес исследователей в этой области, по настоящее время остаются без внимания некоторые вопросы, касающиеся распространения электромагнитных волн в массиве углеродных нанотрубок с примесями и с приложенными внешними электрическими и магнитными полями.

Помимо изучения нанотрубок всё большее внимание исследователей завоевывают полимерные нанокompозиты. Их создание базируется на фундаментальных исследованиях физико-химических процессов

формирования материалов и эволюции их структуры, обеспечивающей широкий спектр функциональных свойств. В последнее время в качестве наполнителя часто используются углеродные нанотрубки, так как они считаются идеальным армирующим материалом для полимеров [11]. Углеродные нанотрубки в комплексе с полимерами улучшают механические характеристики материала (жесткость, предел прочности при растяжении), повышают электропроводность, увеличивают теплопроводность, термостойкость и придают нанокompозиту новые функциональные свойства. Существуют различные пути получения стабильных нанокompозитов [12], а также способы равномерного распределения углеродных нанотрубок в полимерной матрице и для эффективной передачи напряжений на нанотрубки [13].

Также необходимо заметить, что постоянное магнитное поле может иметь значительное влияние на поведение электромагнитных волн вследствие того, что постоянное магнитное поле может сильно изменить одноэлектронный спектр изучаемой задачи, как было показано в работе [14]. В настоящей работе предпринимается попытка рассмотреть влияние внешнего постоянного магнитного поля, приложенного параллельно оси нанотрубок, на динамику трехмерных предельно коротких оптических импульсов, распространяющихся в системе углеродных нанотрубок с полимерами. Решение задачи о распространении предельно короткого оптического импульса в случае, когда постоянное магнитное поле параллельно оси углеродной нанотрубки, представляет особый интерес, так как в данном случае, как представлено в [14], одноэлектронный спектр не может быть найден точно, а это вызывает необходимость

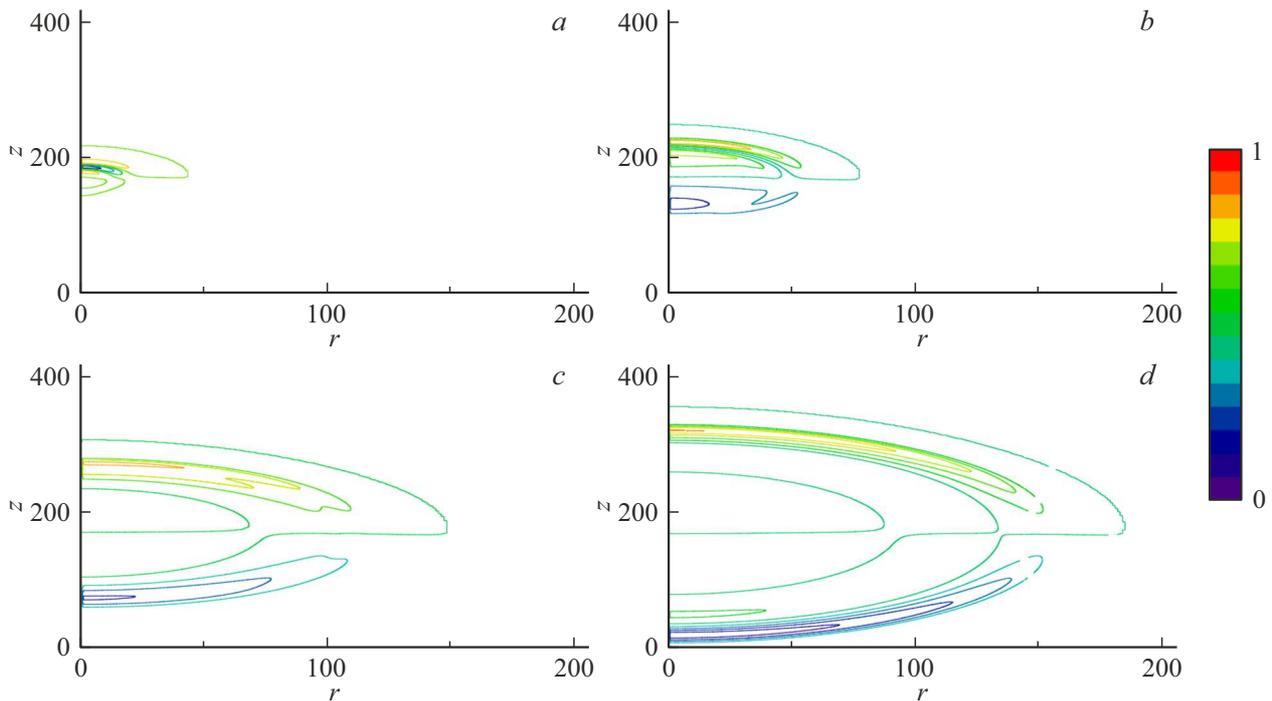


Рис. 1. Интенсивность трехмерного оптического импульса $I(r, z, t) = E^2(r, z, t)$: (a) исходная форма импульса $t = 2 \cdot 10^{-12}$ s; (b) $t = 6 \cdot 10^{-12}$ s; (c) $t = 1.2 \cdot 10^{-11}$ s; (d) $t = 1.8 \cdot 10^{-11}$ s; $\Phi/\Phi_0 = \pi/2$; $v/c = 0.93$. Величины, указанные на рисунке, представлены в безразмерных единицах. Градация цвета соответствует интенсивности электрического поля I/I_{\max} .

использовать численные методы для выявления отличий, связанных с присутствием и отсутствием в системе постоянного магнитного поля.

В связи с изложенным выше было проведено настоящее исследование и проанализировано поведение электромагнитных импульсов в рассматриваемых условиях.

Основные вычисления

Геометрия задачи такова, что приложенное к изучаемой системе постоянное магнитное поле параллельно электрической составляющей распространяющегося по системе трехмерного предельно короткого электромагнитного импульса и совпадает с осью углеродных нанотрубок (ось y). Трехмерный импульс распространяется вдоль оси z . В свою очередь, исследуемая система — это среда, состоящая из углеродных нанотрубок с полимерами. Рассматриваемый в задаче массив неоднороден, а тип углеродных нанотрубок, которые составляют этот массив, — zig-zag $(m, 0)$, где m — это число гексагонов вдоль окружности нанотрубки.

Электронная структура углеродных нанотрубок была исследована нами в приближении сильной связи в рамках анализа динамики π -электронов. Закон дисперсии электронов углеродных нанотрубок с приложенным постоянным магнитным полем, вектор напряженности

которого параллелен оси нанотрубки, есть [14]:

$$\epsilon_s(k_x, k_z, H) = \pm \gamma \times \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{3ak_z}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}ak_x}{2}\right)}, \quad (1)$$

где $a = 1.4 \text{ \AA}$, $\gamma \approx 2.7 \text{ eV}$, $k_x = \frac{2\pi}{\sqrt{3}am} \left(s + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)$, k_z — волновой вектор вдоль оси трубки, Φ — магнитный поток через поперечное сечение трубки, $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$, $s = 1, 2, \dots, m$.

В уравнениях Максвелла внешнее электрическое поле запишем с учетом калибровки Кулона: $\mathbf{E} = -1/c \cdot \partial \mathbf{A} / \partial t$, а импульс q заменим на обобщенный импульс: $q \rightarrow q - eA/c$ (здесь e — заряд электрона, c — скорость света) и получим уравнения Максвелла в следующем виде для трехмерного случая [15,16]:

$$\frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial z^2} - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_1 - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_2 = 0, \quad (2)$$

где \mathbf{A} — вектор-потенциал электрического поля, который имеет вид $\mathbf{A} = (0, (x, y, z, t), 0)$. Такое представление соответствует тому, что электромагнитное поле поляризовано вдоль оси углеродных нанотрубок. Исследуемая среда при этом не вращает поляризацию, нанотрубки ориентированы одинаково, что позволяет нам пренебречь эффектами, которые связаны с действием магнитного поля электромагнитной волны. Здесь \mathbf{j}_1 —

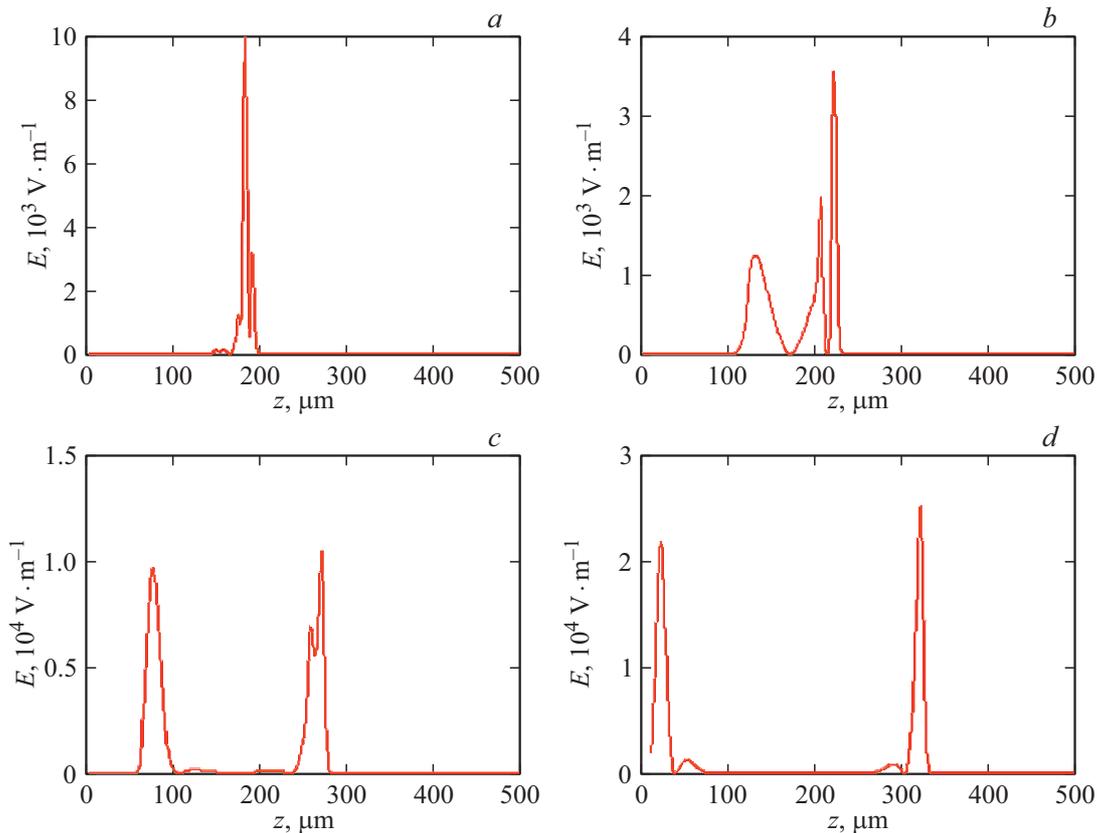


Рис. 2. Срезы, показывающие энергию импульса, сосредоточенную в малой области рядом с осью распространения импульса и проходящие через определенную точку оси z в разные моменты времени (а) $t = 2 \cdot 10^{-12}$ с; (б) $t = 6 \cdot 10^{-12}$ с; (с) $t = 1.2 \cdot 10^{-11}$ с; (д) $t = 1.8 \cdot 10^{-11}$ с; $\Phi/\Phi_0 = \pi/2$; $v/c = 0.93$. Ось ординат — напряженность электрической составляющей.

это плотность тока для углеродных нанотрубок, а плотность тока для полимеров задана величиной \mathbf{j}_2 . В уравнении (2), следующем из уравнения Максвелла, параметр ε — это диэлектрическая проницаемость среды с углеродными нанотрубками, определяющая скорость распространения линейных электромагнитных волн в этой среде. Полагаем, что массив углеродных нанотрубок встроен в диэлектрическую матрицу и результирующий эффективный коэффициент диэлектрической проницаемости системы полагался равным 4, а частотная дисперсия этого параметра в данных условиях не оценивалась [17].

Далее используем стандартное выражение для плотности тока для рассматриваемой системы электронов углеродных нанотрубок [18]:

$$j_1 = e \sum_{ps} v_s \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle C_{ps}^+ C_{ps} \rangle. \quad (3)$$

Здесь $v_s(p) = \frac{\partial \varepsilon_s(p)}{\partial p}$, C_{ps}^+ , C_{ps} соответствуют операторам рождения и уничтожения возбуждений с квазиимпульсом (p, s) , угловыми скобками отмечено усреднение с неравновесной матрицей плотности $\rho(t)$: $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(t))$. Если учесть, что $[C_{ps}^+ C_{ps}, H] = 0$, тогда из уравнений движения

для матрицы плотности можно получить, что $\langle C_{ps}^+ C_{ps} \rangle = \langle C_{ps}^+ C_{ps} \rangle_0$, причем $\langle B \rangle_0 = Sp(B(0)\rho(0))$, $\rho_0 = \exp(-H/kT)/Sp(\exp(-H/kT))$, где k — постоянная Больцмана, T — температура.

Вычисление тока \mathbf{j}_2 для полимеров проводится аналогично вычислению тока для системы квантовых точек с прыжковой проводимостью [19]. С учетом такой модели, подробно обоснованной в [20], выражение для тока имеет вид

$$j_2 = e \sum_{ps\sigma} v_s \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle C_{ps\sigma}^+ C_{ps\sigma} \rangle, \quad (4)$$

где $C_{ps\sigma}^+$, $C_{ps\sigma}$ соответствуют операторам рождения и уничтожения электронов полимера.

Закон дисперсии электронов (1) представим в виде ряда Фурье и получим эффективное уравнение для вектора-потенциала \mathbf{A} :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} + \frac{4en_0}{c} \sum_{q=1}^{\infty} qb_q \sin\left(\frac{qaeA}{c}\right) + \frac{4en_{pol}}{c} \sin\left(\frac{a_{pol}eA}{c}\right) = 0,$$

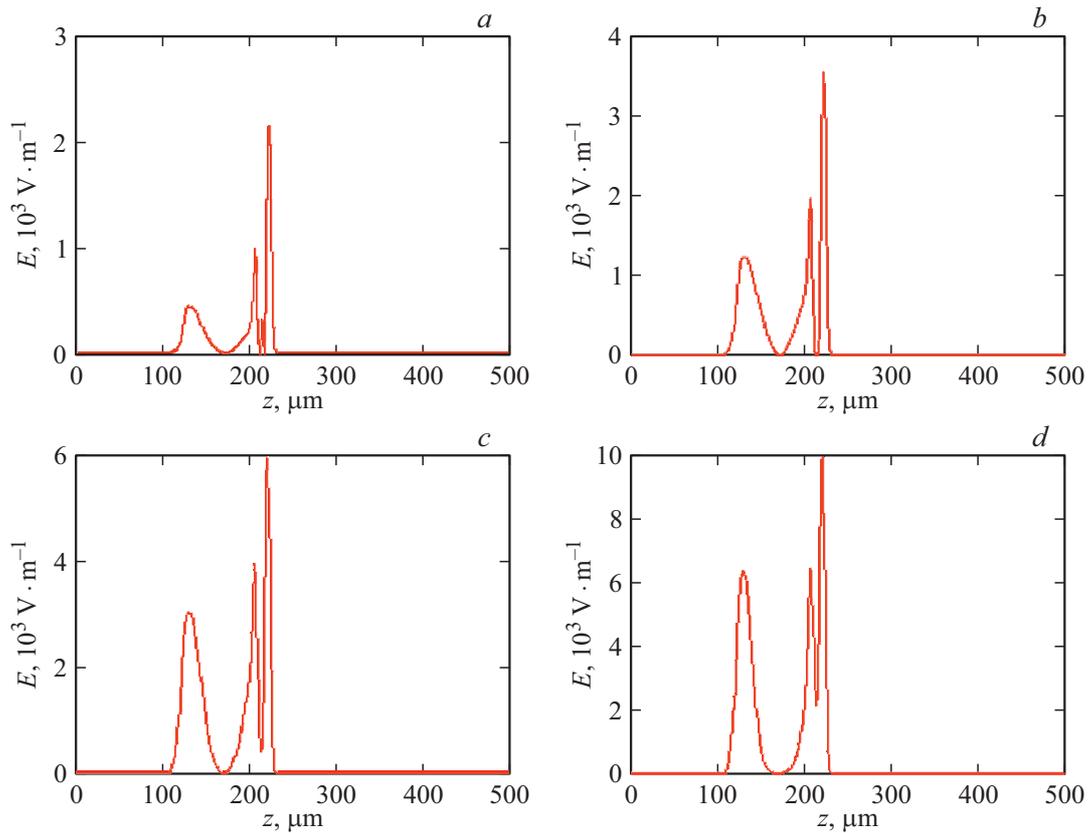


Рис. 3. Срезы, проходящие через определенную точку оси z и показывающие энергию, сосредоточенную в малой области вблизи оси распространения импульса, для разных значений n_{pol}/n_0 : (a) $n_{pol}/n_0 = 1$; (b) $n_{pol}/n_0 = 2$; (c) $n_{pol}/n_0 = 3$; (d) $n_{pol}/n_0 = 4$; $\Phi/\Phi_0 = \pi/2$; $v/c = 0.93$; $t = 6 \cdot 10^{-12}$ s. Ось ординат: напряженность электрической составляющей.

$$b_q = \sum_s a_{sq} \int dp \cos(apq) \frac{\exp(-\varepsilon_s(p)/kT)}{1 + \exp(-\varepsilon_s(p)/kT)}, \quad (5)$$

где $\varepsilon_s(p)$ — закон дисперсии электронов в углеродных нанотрубках, a_{pol} — длина связи углерод–углерод в полимерах, n_{pol} — это концентрация полимера (в отсутствие полимера принимаем $n_{pol} = 0$), n_0 — концентрация электронов в углеродных нанотрубках.

Интегрирование ведется в пределах первой зоны Бриллюэна. Вследствие убывания коэффициентов b_q с ростом q в сумме в уравнении (5) можно ограничиться первыми пятнадцатью не исчезающими слагаемыми и получить широко применяемое в приложениях, но неинтегрируемое методом обратной задачи рассеяния обобщенное уравнение sine–Gordon [21]. Выражение закона дисперсии для полимеров ограничивается одним слагаемым в сумме в уравнении (5).

В трехмерном случае и с учетом перехода к цилиндрической системе координат уравнение (5) примет вид

$$A_{tt} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial \phi^2} + 4\pi j_1(\mathbf{A}) + 4\pi j_2(\mathbf{A}). \quad (6)$$

Следуя рассуждениям в работах [22,23], эффектом накопления заряда в данной системе можно пренебречь.

Результаты численного эксперимента

Для численного решения уравнения (6) был использован метод, основанный на конечно-разностной схеме вида крест [24]. Шаги по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости. Шаг разностной схемы последовательно уменьшался в два раза до тех пор, пока решение не изменялось в 8-м значащем знаке. Начальные условия для трехмерного случая были выбраны в следующем виде:

$$A(z, r, 0) = Q \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{\gamma_z}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{\gamma_r}\right),$$

$$\frac{dA(z, r, 0)}{dt} = 2Q - \frac{(z - z_0)v_z}{\gamma_z} \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{\gamma_z}\right) \times \exp\left(-\frac{r^2}{\gamma_r}\right). \quad (7)$$

Здесь Q — амплитуда импульса, v_z — начальная скорость импульса в направлении z , параметр γ_z задает ширину импульса в направлении z ; r — радиус, z_0 — начальное смещение центра импульса. Эволюционной переменной здесь является время. При численном моделировании скорость света принята за единицу.

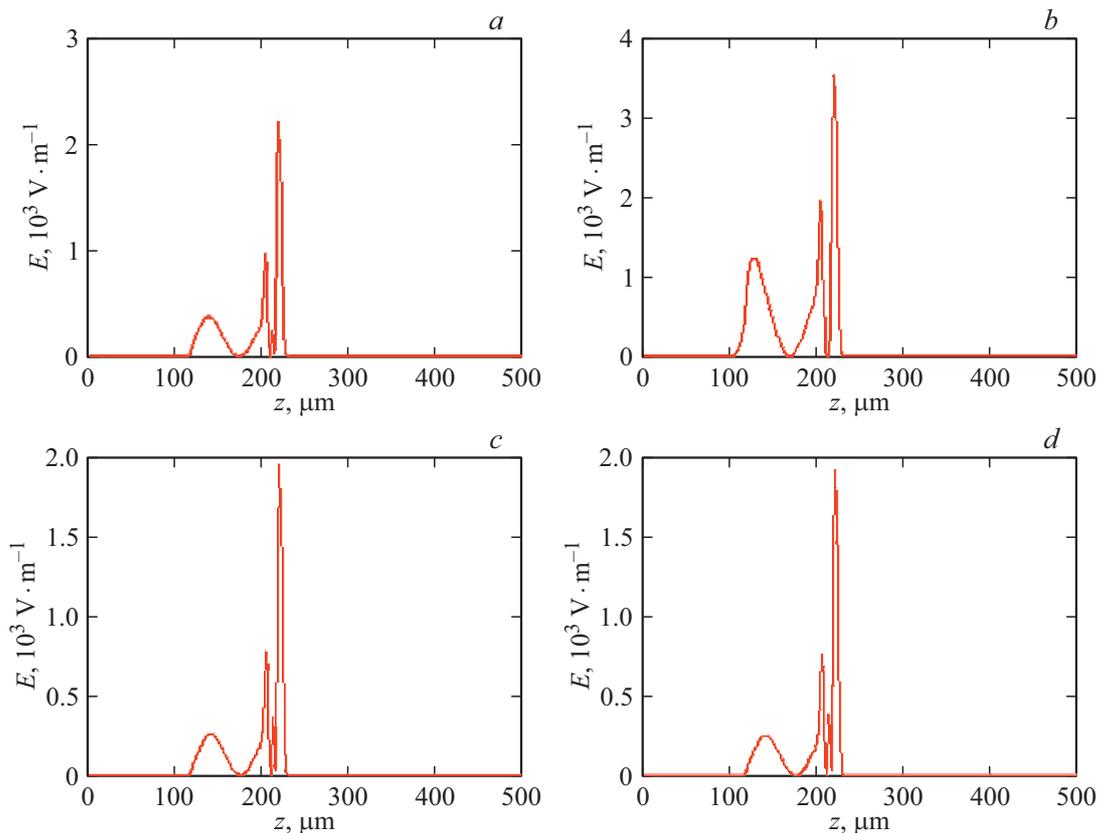


Рис. 4. Срезы, проходящие через определенную точку оси z и показывающие энергию, сосредоточенную в малой области вблизи оси распространения импульса, для разных значений приложенного магнитного поля: (а) $\Phi/\Phi_0 = \pi/4$; (б) $\Phi/\Phi_0 = \pi/2$; (с) $\Phi/\Phi_0 = 3\pi/4$; (д) $\Phi/\Phi_0 = \pi$; $v/c = 0.93$; $t = 6 \cdot 10^{-12}$ s. Ось ординат — напряженность электрической составляющей.

Визуализация распространения электромагнитного поля по изучаемому образцу в трехмерном случае представлена на рис. 1.

Для более подробного исследования картины распространения импульса в системе углеродных нанотрубок с полимерами были сделаны срезы интенсивности электрического поля вблизи оси z в разные моменты времени. На рис. 2 приведены срезы напряженности электрического поля рядом с осью z , другими словами, это срезы, показывающие энергию импульса, сосредоточенную в малой области рядом с осью распространения импульса и проходящие через определенную точку оси z в разные моменты времени.

Из рис. 1 и 2 видно, что первоначально трехмерный импульс распространяется по образцу, не меняя своей формы, затем при увеличении времени распространения расплывается по образцу и распадается на составляющие. Такое поведение импульса объясняется влиянием неинтегрируемых слагаемых в (5), которые вызывают появление за импульсом своеобразного шлейфа, причем величина его площади приближенно равна нулю. Объяснить это можно приближенным выполнением теоремы площадей, как раз поэтому возмущения, вносимые неинтегрируемой частью уравнения (5), не вносят изменений в суммарную площадь под импульсом. Также отмечается

увеличение амплитуды импульса на больших временах вследствие дисперсии электрического поля в среде углеродных нанотрубок.

Срезы интенсивности светового поля вблизи оси z для различных значений концентрации полимера в исследуемой среде представлены на рис. 3.

На рис. 3 мы видим расплывание импульса, его распад на составляющие, а также увеличение амплитуды при изменении концентрации полимеров. Таким образом, мы наблюдаем, что при увеличении концентрации полимера растет энергия не на фронте импульса, а в следующих за ним частях импульса. Это можно связать с инерционностью отклика полимера и последующим переизлучением им энергии.

На рис. 4 отображено, как постоянное магнитное поле влияет на динамику распространения трехмерного предельно короткого импульса в системе углеродных нанотрубок, содержащих полимеры.

Из представленного рис. 4 видно, что при наложении магнитного поля энергия импульса сосредоточена в ограниченной области. Данный факт можно связать с тем, что достигается баланс дисперсии электромагнитного поля и нелинейности среды, содержащей углеродные нанотрубки и полимеры. Также в ходе эксперимента численно установлено, что максимум амплитуды исследуемого импульса увеличивается с увеличением времени.

дуемого импульса достигается при значении магнитного поля $\Phi/\Phi_0 = \pi/2$.

Заключение

В заключение проведенного исследования сформулируем основные выводы.

1. При увеличении времени распространения трехмерного предельно короткого светового импульса по образцу, состоящему из углеродных нанотрубок и полимеров, наблюдается возрастание амплитуды этого импульса, причиной чего является дисперсия электрического поля в среде углеродных нанотрубок. Этот факт позволяет использовать данную среду в устройствах усиления подобных импульсов.

2. Характер распространения импульса в значительной степени зависит от концентрации полимеров, которая определяет характер колебаний в „хвосте“ и отвечает за перераспределение энергии между основным импульсом и „отраженным“.

3. Появление вслед за предельно короткими импульсами „хвоста“ может быть применено в приложениях при генерации терагерцовых импульсов.

4. При значении внешнего магнитного поля $\Phi/\Phi_0 = \pi/2$ влияние его на распространение предельно короткого импульса в системе углеродных нанотрубок оказывается наиболее значительным.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] *Akhmanov S.A., Vysloukhy V.A., Chirikin A.S.* Optics of Femtosecond Laser Pulses. NY: AIP, 1992. 366 p.
- [2] *Campbell D.K., Flach S., Kivshar Y.S.* // Phys. Today. 2004. V. 57. N 1. P. 43–49.
- [3] *Leblond H., Kremer D., Mihalache D.* // Phys. Rev. A. 2009. V. 80. P. 053812.
- [4] *Goorjian P.M.* Photonic switching devices using light bullets, 1997. Patent 5,651,079.
- [5] *Галкина Е.Н., Белоненко М.Б.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2011. Т. 75. № 12. С. 1727; *Galkina E.N., Belonenko M.B.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2011. V. 75. N 12. P. 1623.
- [6] *Белоненко М.Б. и др.* // Опт. и спектр. 2011. Т. 110. № 4. С. 598; *Belonenko M.B., Lebedev N.G., Galkina E.N., Tuzalina O.J.* // Opt. Spectrosc. 2011. V. 110. P. 557.
- [7] *Галкина Е.Н., Белоненко М.Б.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 1. С. 23; *Galkina E.N., Belonenko M.B., Evdokimov R.A.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. N 1. P. 17.
- [8] *Белоненко М.Б., Галкина Е.Н.* // Опт. и спектр. 2017. Т. 123. № 1. С. 110; *Belonenko M.B., Galkina E.N.* // Opt. Spectrosc. 2017. V. 123. P. 105.
- [9] *Konobeeva N.N.* // Optik. 2018. V. 157. P. 521.
- [10] *Arash B., Park H.S., Rabczuk T.* // Composites. Part B: Engineering. 2015. V. 80. P. 92.
- [11] *L. Kin-tak* // Chem. Phys. Lett. 2003. P. 399–405.
- [12] *Конюлев Б.Г., Агеев О.А., Сюрюк Ю.В.* // Пат. РФ 2417891, заявл. № 2009131991/05 24.08.2009; публ. 10.05.2011, Бюл. № 13.
- [13] *Агеев О.А., Сюрюк Ю.В.* // Пат. РФ 2400462; заявл. № 2009113378/04, 09.04.2009; публ. 27.09.2010, Бюл. № 27.
- [14] *Овчинников А.А., Отражев В.В.* // ФТТ. 1998. Т. 40. № 10. С. 1950.
- [15] *Landau Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. М.: Наука, 1973. 509 с.
- [16] *Landau Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 624 с.
- [17] *Fedorov E.G., Zhukov A.V., Bouffanais R., Timashkov A.P., Malomed B.A., Leblond H., Mihalache D., Rosanov N.N., Belonenko M.B.* // Phys. Rev. 2018. A 97. 043814.
- [18] *Harris P.J.F.* Carbon Nanotubes and Related Structures: New Materials for the 21st Century. Cambridge: Cambridge University Press, 2009. 301 p.
- [19] *Басс Ф.Г., Булгаков А.А., Тетервов А.П.* Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. М.: Наука, 1989. 288 с.
- [20] *Осинов В.А., Федянин В.К.* // Сообщения ОИЯИ. Дубна: ОИЯИ, 1984. 10 с.
- [21] *Белоненко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2008. Т. 72. № 12. С. 1704; *Belonenko M.B., Glazov S.Yu., Meshcheryakova N.E.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2008. V. 72. N 12. P. 1610.
- [22] *Belonenko M.B., Fedorov E.G.* // Phys. Solid State. 2013. V. 55. N 6. P. 1333–1339.
- [23] *Zhukov A.V., Bouffanais R., Fedorov E.G., Belonenko M.B.* // J. Appl. Phys. 2013. V. 114, art. 143106.
- [24] *Бахвалов Н.С.* Численные методы. М.: Наука, 1975. 632 с.