

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]:

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

p — компонента квазиимпульса электрона вдоль оси УНТ, $s = \overline{1, m}$ — число, характеризующее квантование импульса по периметру нанотрубки ($m = 7$), которое определяется диаметром УНТ (≈ 0.55 nm), $a = 1.5b/\hbar$, b — расстояние между атомами углерода в графеновой решетке, \hbar — постоянная Планка, $\gamma_0 \approx 2.7$ 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 $\mathbf{E} = (E(y, z, t), 0, 0)$ и $\mathbf{j} = (j(y, z, t), 0, 0)$. Уравнение для компоненты векторного потенциала лазерного излучения вдоль

оси УНТ —

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

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:

$$A' = d \cdot u, \quad (3)$$

где d — коэффициент пропорциональности, зависящий от электронного параметра Грюнайсена (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:

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

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:

$$j = -en_0\gamma_0a \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m b_{s,q} \sin\left(\frac{qa(eA + A')}{c}\right), \quad (5)$$

здесь n_0 определяет концентрацию электронов,

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

$k_B \approx 1.38$ J/K, T — температура,

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

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:

$$\begin{aligned} & \frac{ea}{c} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} \right) - \frac{ea\varepsilon}{c^3} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} \\ & - \omega_0^2 \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m b_{s,q} \sin\left(\frac{qa}{c} (eA + A')\right) = 0, \\ & \omega_0 = 2ea\sqrt{\pi n_0 \gamma_0} \end{aligned} \quad (8)$$

или, с учетом синуса суммы,

$$\begin{aligned} & \frac{ea}{c} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} \right) - \frac{ea\varepsilon}{c^3} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} \\ & - \omega_0^2 \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m \left[b_{s,q}^1 \sin\left(\frac{qa\varepsilon}{c} A\right) + b_{s,q}^2 \cos\left(\frac{qa\varepsilon}{c} A\right) \right] = 0, \\ & b_{s,q}^1 = b_{s,q} \cos\left(\frac{qa}{c} A'\right), \quad b_{s,q}^2 = b_{s,q} \sin\left(\frac{qa\varepsilon}{c} A'\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Представим обезразмеренную компоненту векторного потенциала в виде

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

$\tilde{A}_0(y, z)$ — 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 $|\Phi|^2 = |\tilde{A}_0(y, z)|^2$, с учетом представления $\sin(\mu \cos \eta)$ и $\cos(\mu \cos \eta)$ при помощи функций Бесселя первого рода и усреднения по периоду $2\pi/\omega$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi^2} + 2i\kappa \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} - \Phi \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m \left(qb_{s,q}^1 \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r q^{2r+1} |\Phi|^{2r}}{2^{2r} r! (r+1)!} \right) \\ & - \Phi \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m \left(b_{s,q}^2 \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r q^{2r} |\Phi|^{2r}}{2^{2r} r! r!} \right) \\ & \times \left(1 - \frac{q^2 |\Phi|^2}{2(r+1)(r+2)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

(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 q только десятью слагаемыми.

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

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

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

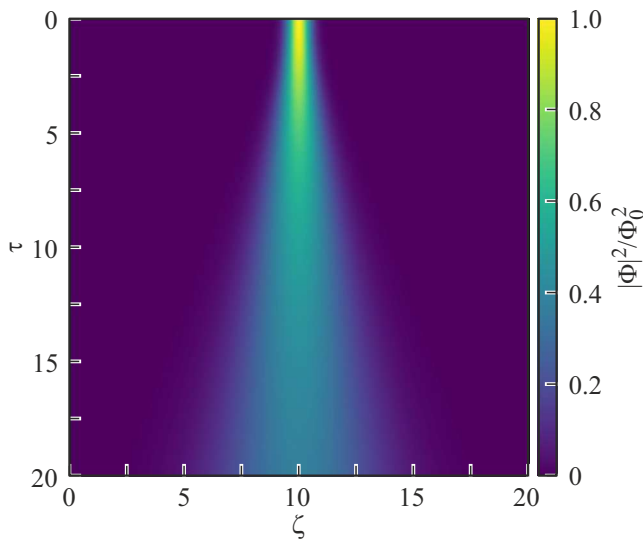


Рис. 1. Зависимость интенсивности лазерного пучка от координат ξ и τ .

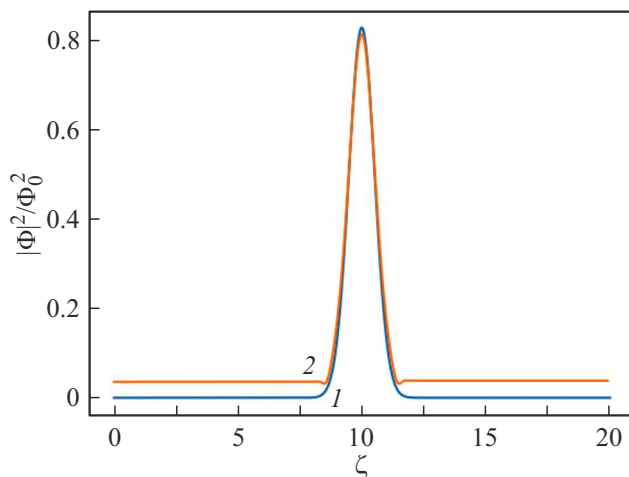


Рис. 2. Зависимость интенсивности лазерного пучка от координаты ξ при $\tau = 15$: кривая 1 — без учета деформации, 2 — с учетом деформации.

3. Результаты

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

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

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

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 $\omega = 2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ абсолютное изменение ширины пучка по отношению к первоначальной ($\sim 6 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$) составляет $6.6 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$, для $\omega = 10^{15} \text{ s}^{-1}$ — $2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}$.

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. Eletsii 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