ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2021, том 85, № 12, с. 1706–1710

УДК 535.5:538.9

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИХ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В ОПТИЧЕСКИ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ С ПРИМЕСНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

© 2021 г. Н. Н. Конобеева[1], *, М. Б. Белоненко[1]

[1]*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образовани "Волгоградский государственный университет", Волгоград, Россия*

**E-mail: yana_nn@volsu.ru*

Поступила в редакцию 05.07.2021 г.
После доработки 26.07.2021 г.
Принята к публикации 27.08.2021 г.

Исследовано распространение электромагнитных волн в нелинейной оптически анизотропной среде с углеродными нанотрубками, содержащими примеси, для описания которых выбрана четырехуровневая модель. Получено эффективное уравнение на векторный потенциал электромагнитного поля импульса с учетом второй компоненты поляризации. Выявлена зависимость компонент поля импульса от параметров задачи.

DOI: 10.31857/S0367676521120127

ВВЕДЕНИЕ

Важной задачей современной оптики является изучение распространения электромагнитных волн в различных нелинейных средах, поскольку вопросы, возникающие в данном контексте крайне важны при проектировании и разработке устройств опто- и нано-электроники [1]. Установление баланса между дисперсией и нелинейностью позволяет получать импульсы с фиксированной амплитудой и формой, что важно для практических приложений, например, при конструировании волноводов [2, 3].

Отметим, что получению импульсов с заданными характеристиками способствуют и свойства среды, в которой происходит их распространение. Например, хорошо известно, что среды, содержащие углеродные нанотрубки (УНТ) [4], оказывают стабилизирующее действие на импульс [5]. В проведенных ранее исследованиях учитывалась только одна поляризация света, когда вектор электрического поля был сонаправлен оси углеродных нанотрубок. В данной работе будут учтены не только оптически анизотропные свойства нелинейной среды, но и примеси, содержащиеся в углеродных нанотрубках, которые также могут оказать существенное влияние на распространение электромагнитных импульсов в изучаемых средах. Поскольку введение примесей изменяет структуру углеродных нанотрубок, а значит и их свойства.

Поэтому представляется актуальным изучить особенности эволюции электромагнитных импульсов в массиве полупроводниковых углеродных нанотрубок с учетом примеси, а также влияние параметров среды, в которой они распространяются.

МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим диэлектрическую анизотропную среду, в которую помещены углеродные нанотрубки с примесью. Оси декартовой системы координат сонаправлены осям кристалла. Оси углеродных нанотрубок лежат в плоскости $X0Y$ и образуют с осью $0X$ угол α. Направление электрического поля совпадает с осью $0X$ [6].

Будем считать, что примесь по объему массива УНТ распределена равномерно. То есть используем приближение, в котором расстояние между примесями во много раз меньше, чем характерная длина волны электрона в зоне проводимости. Для определенности рассмотрим четырехуровневую примесь.

Для определения спектра углеродных нанотрубок с учетом примеси мы используем длинноволновое приближение, в котором эффективный гамильтониан системы можно записать в виде [7]:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & f \\ f^* & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \nu_{1,1} & \nu_{1,2} & \nu_{1,3} & \nu_{1,4} \\ \nu_{2,1} & \nu_{2,2} & \nu_{2,3} & \nu_{2,4} \end{pmatrix} \times$$
$$\times \begin{pmatrix} \nu_{1,1}^* & \nu_{2,1}^* \\ \nu_{1,2}^* & \nu_{2,2}^* \\ \nu_{1,3}^* & \nu_{3,2}^* \\ \nu_{1,4}^* & \nu_{4,2}^* \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} W_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W_4 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где f – закон дисперсии электронов в УНТ, $\nu_{i,j}$ – интегралы перескока, с учетом концентрации примеси между i-ым узлом подрешетки УНТ и примесным уровнем j, W_j – энергия электрона примесном уровне с номером j. Нас не будет интересовать геометрия и структура примеси в данном исследовании. Важным является то, что примесные уровни находятся достаточно далеко от зонной структуры УНТ.

Находя собственные значения гамильтониана, получаем выражение для энергетического спектра электронов примесных углеродных нанотрубок [8]:

$$\varepsilon_{imp}(p,s) = \frac{1}{2}\Big(R + Q + \sqrt{(R-Q)^2 - 4\left(D(f+f^*) - \varepsilon(p,s)^2 - D^2\right)}\Big), \quad (2)$$

где R, Q – параметры, описывающие переходы электрона между примесными уровнями и подрешетками нанотрубок, D – параметр, описывающий переходы между двумя подрешетками УНТ, $|f| = \varepsilon(p,s)$ – закон дисперсии для электронов углеродных нанотрубок без учета примеси [9]:

$$\varepsilon(p,s) = \pm\gamma_0\sqrt{1 + 4\cos(ap)\cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)}, \quad (3)$$

где $s = 1, 2 \ldots m$, нанотрубка имеет тип $(m, 0)$, $\gamma_0 \approx 2.7$ эВ, $a = 3b/2\hbar$, b – расстояние между соседними атомами углерода.

Вектор потенциал имеет вид: $\vec{A} = (A_x(x,y,z,t), A_y(x,y,z,t), 0)$, плотность электрического тока $\vec{j} = (j_x(x,y,z,t), j_y(x,y,z,t), 0)$.

Используя переход к цилиндрической системе координат, а также учитывая калибровку: $\vec{E} = -c^{-1}\partial\vec{A}/\partial t$ запишем трехмерное волновое уравнение на две компоненты векторного потенциала:

$$\frac{1}{\nu_o^2}\frac{\partial^2 A_x}{\partial t^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_x}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 A_x}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 A_x}{\partial \phi^2} + \frac{4\pi}{c} j_x(A_x, A_y), \quad \frac{1}{\nu_e^2}\frac{\partial^2 A_y}{\partial t^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_y}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 A_y}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 A_y}{\partial \phi^2} + \frac{4\pi}{c} j_y(A_x, A_y), \quad \nu_o = c/n_x, \quad \nu_e = c/n_y \quad (4)$$

r, z, φ – координаты в цилиндрической системе, n_x, n_y – показатели преломления в направлении x и y соответственно, c – скорость света.

Запишем стандартное выражение для плотности тока вдоль оси УНТ [9]:

$$j = 2e\sum_{s=1}^{m}\int \nu(p,s)F(p,s)\,dp, \quad (5)$$

где e – заряд электрона, здесь и далее $\hbar = 1$, интегрирование ведется по первой зоне Бриллюэна, p – компонента квазиимпульса электрона проводимости вдоль оси нанотрубки, $\nu(p,s) = \partial\varepsilon_{imp}(p,s)/\partial p$ – скорость электронов, $F(p,s)$ – функция распределения Ферми.

В работе [10] показано, что накопление заряда вследствие неоднородности поля для предельно коротких импульсов не дает существенного вклада. Поэтому цилиндрическая симметрия в распределении поля сохраняется и производную по углу можно не рассматривать. В этом случае получаем эффективное уравнение на компоненты векторного потенциала:

$$\begin{cases} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_x}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 A_x}{\partial z^2} - \frac{1}{\nu_o^2}\frac{\partial^2 A_x}{\partial t^2} + \frac{4en_0\gamma_0 a\cos\alpha}{c}\sum_{q=1}^{\infty} b_q \sin\left(\frac{aeq(A_x\cos\alpha + A_y\sin\alpha)}{c}\right) = 0 \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_y}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 A_y}{\partial z^2} - \frac{1}{\nu_e^2}\frac{\partial^2 A_y}{\partial t^2} + \frac{4en_0\gamma_0 a\sin\alpha}{c}\sum_{q=1}^{\infty} b_q \sin\left(\frac{aeq(A_x\cos\alpha + A_y\sin\alpha)}{c}\right) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

n_0 – концентрация электронов,

$$b_q = \sum_s \frac{q}{\gamma_0} a_{sq} \int_{1Bz} dp' \cos(p'q) \times \frac{\exp(-\varepsilon_{imp}(p',s)/k_B T)}{1 + \exp(-\varepsilon_{imp}(p',s)/k_B T)}, \quad (7)$$

k_B – постоянная Больцмана, T – температура, a_{sq} – коэффициенты в разложении закона дисперсии электронов (2) в ряд Фурье:

$$\varepsilon_{imp}(p',s) = \frac{1}{2\pi}\sum_{q=1}^{\infty} a_{sq}\cos(p'q), \quad (8)$$

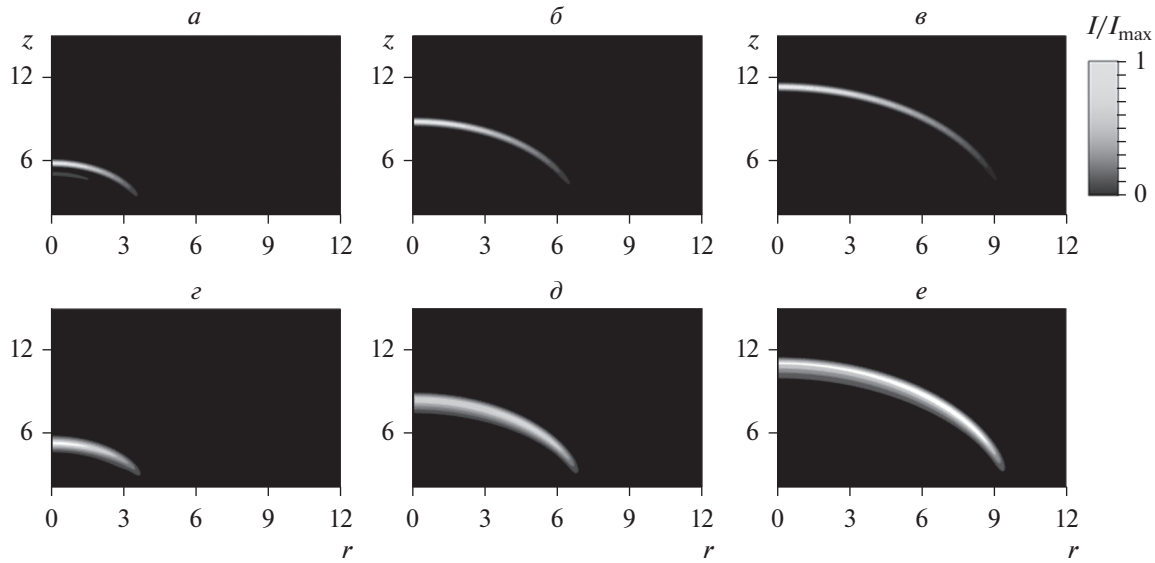

Рис. 1. Зависимость интенсивности для компоненты поля E_x (*а–в*) и для компоненты E_y (*г–е*) от координат: (*а*, *г*) $t = 3.5 \cdot 10^{-14}$ с; (*б*, *д*) $t = 6.5 \cdot 10^{-14}$ с; (*в*, *е*) $t = 9.0 \cdot 10^{-14}$ с. I_{max} – максимум интенсивности для каждого момента времени.

$$a_{sq} = \int_{1Bz} dp' \cos(p'q)\varepsilon_{imp}(p', s). \quad (9)$$

Поскольку коэффициенты, определяемые уравнение (7), уменьшаются с ростом номера q, мы можем учесть только первые 10 слагаемых в уравнениях (6) [11].

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Система уравнений (6) после обезразмеривания была решена с использованием численных методов с начальными условиями вида:

$$A_x = U\exp\left(-\left(\frac{z}{l_z^2}\right)^2\right)\exp\left(-\frac{x^2+y^2}{\gamma_p^2}\right),$$
$$\frac{d}{dt}A_x = \frac{2\nu_o U}{\gamma_p{}^2}\exp\left(-\left(\frac{z}{l_z^2}\right)^2\right)\exp\left(-\frac{x^2+y^2}{\gamma_p^2}\right), \quad (10)$$
$$A_y = 0, \quad \frac{d}{dt}A_y = 0,$$

где U – амплитуда электромагнитного импульса на входе в среду с УНТ, l_z, l_r – ширина импульса вдоль соответствующих направлений.

Продемонстрируем типичные графики эволюции электромагнитного поля при его распространении по образцу на рис. 1. Из рисунка видно, что наблюдается существенное поперечное расплывание импульса. Также можно отметить и продольную дисперсию для компоненты E_y. Несмотря на это, импульс локализуется в направлении распространения. Здесь существенно дисперсионное растекание импульса, связанное с тем, что в задаче учитываются обе компоненты поля (E_x и E_y).

На рис. 2 построены срезы вдоль оси z по максимуму. Из рисунка видно, что эволюция компонент поля E_x и E_y отличается кардинальным образом. Если для первой компоненты (E_x) наблюдается ее усиление с течением времени, то для второй (E_y) – затухание. Стоить отметить существенный рост второй компоненты поля по сравнению с начальным моментом времени. Также возбужденная составляющая импульса уширяется меньше. Это может быть связано с тем, что здесь с самого начала действуют нелинейные эффекты, которые компенсируют расплывание импульса.

Влияние угла наклона УНТ к оси кристалла OX продемонстрировано на рис. 3. На рис. 3*б* не показана кривая для $\alpha = 0$ рад, поскольку ей в любой точке z соответствует нулевое значение, т.е. когда ось УНТ сонаправлена оси OX кристалла, компонента поля E_y отсутствует. Рисунок 3 демонстрирует, что увеличение угла наклона оси нанотрубок к оси OX по-разному влияет на компоненты электрического поля импульса, что можно связать с сильной зависимостью нелинейности от угла наклона.

Также не было исследовано влияние параметров примеси на распространение импульса. Результаты расчетов показали, что эффекты, связанные с оптически анизотропными свойствами среды, превосходят вклад от примеси в углеродных нанотрубках.

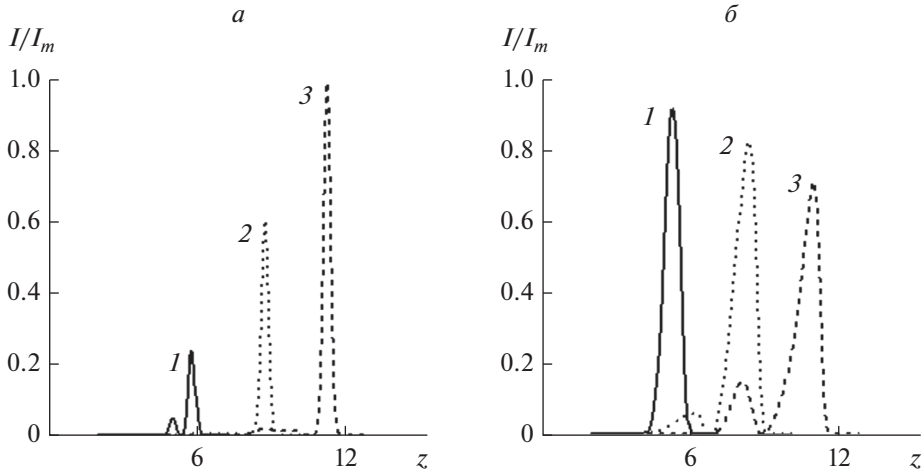

Рис. 2. Продольные срезы интенсивности: (*а*) для компоненты электрического поля E_x; (*б*) для компоненты E_y от координаты z: кривая *1* – $t = 3.5 \cdot 10^{-14}$ с; кривая *2* – $t = 6.5 \cdot 10^{-14}$ с; кривая *3* – $t = 9.0 \cdot 10^{-14}$ с. I_m – максимальное значение интенсивности из трех вариантов для каждой компоненты.

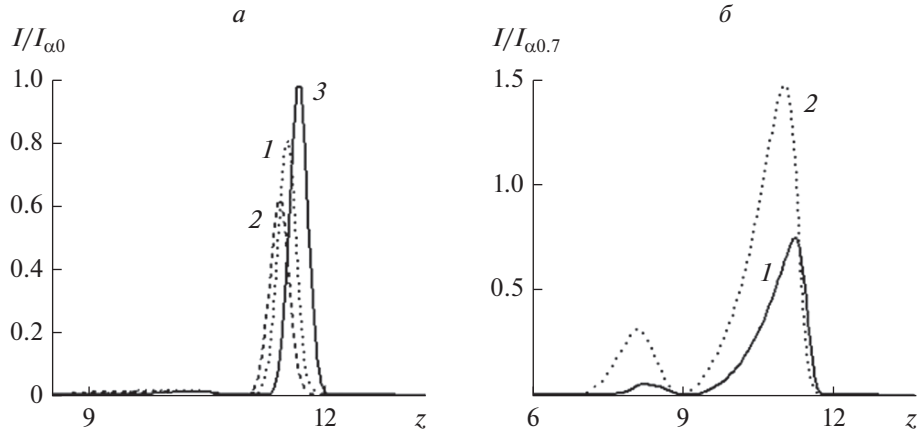

Рис. 3. Зависимость интенсивности импульса: (*а*) для компоненты электрического поля E_x; (*б*) для компоненты E_y от угла α: кривая *1* – α = 0.7 рад.; кривая *2* – α = 0.9 рад.; кривая *3* – α = 0 рад. $I_{\alpha 0}$ – максимальное значение интенсивности для компоненты E_x при α = 0 рад. $I_{\alpha 0.7}$ – максимальное значение интенсивности для компоненты E_y при α = 0.7 рад.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С учетом оптической анизотропии кристалла, в который помещаются УНТ проведено моделирование эволюции предельно коротких оптических импульсов в примесных углеродных нанотрубках. Показано, что в оптически анизотропной среде с примесными углеродными нанотрубками импульс распространяется достаточно устойчиво, сохраняя свою локализацию. Существенная поперечная дисперсия связана с наличием второй компоненты вектора электрического поля, вносящей свой вклад. Угол наклона оси примесных УНТ к оси кристалла позволяет не только управлять продольной дисперсией, но и амплитудой предельно короткого оптического импульса.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ и Совета по грантам Президента РФ (проект № МД-3173.2021.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mihalache D.* // Roman. Rep. Phys. 2021. V. 73. Art. No. 403.
2. *Bendow B., Gianino P.D., Tzoar N., Jain M.* // J. Opt. Soc. Am. 1980. V. 70. No. 5. P. 539.
3. *Mollenauer L.F., Gordon J.P., Islam M.N.* // IEEE J. Quant. Electron. 1986. V. QJ3-22. P. 157.
4. *Iijima S.* // Nature. 1991. V. 354. P. 56.
5. *Konobeeva N.N., Fedorov E.G., Rosanov N.N. et al.* // J. Appl. Phys. 2019. V. 126. Art. No. 203103.
6. *Матвеев А.Н.* Оптика. М.: Высшая школа, 1985. 351 с.

7. *Cortijo A., Guinea F., Vozmediano M.A.H.* // J. Phys. A. 2012. V. 45. Art. No. 383001.
8. *Федоров Э.Г., Конобеева Н.Н., Белоненко М.Б.* // Хим. физ. 2014. Т. 33. № 5. С. 96; *Fedorov E.G., Konobeeva N.N., Belonenko M.B.* // Russ. J. Phys. Chem. B. 2014. V. 8. No. 3. P. 409.
9. *Елецкий А.В.* // УФН. 1997. Т. 167. С. 945; *Eletskii A.V.* // Phys. Usp. 1997. V. 40. No. 9. P. 899.
10. *Zhukov A.V., Bouffanais R., Fedorov E.G., Belonenko M.B.* // J. Appl. Phys. 2013. V. 114. Art. No. 143106.
11. *Belonenko M.B., Demushkina E.V., Lebedev N.G.* // J. Russ. Las. Res. 2006. V. 27. P. 457.

Propagation of ultrashort optical pulses in anisotropic optical media with impurity carbon nanotubes

N. N. Konobeeva[a], *, M. B. Belonenko[a]

[a] *Volgograd State University, Volgograd, 400062 Russia*

**e-mail: yana_nn@volsu.ru*

We investigated the propagation of electromagnetic waves in a nonlinear anisotropic optical medium with carbon nanotubes containing impurities, for which a four-level model has been chosen. An effective equation for the vector potential of the electromagnetic field of the pulse is obtained, taking into account the second component of polarization. The dependence of the components of the pulse field on the parameters of the problem is revealed.