УДК 535.3

СВЕРХМОЩНЫЕ ЛАЗЕРНЫЕ ИМПУЛЬСЫ В ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ПОЛИМЕРОМ

© 2022 г. Ю. В. Двужилова¹, И. С. Двужилов^{1, *}, М. Б. Белоненко¹

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Волгоградский государственный университет", Волгоград, Россия

> **E-mail: dvuzhilov.ilya@volsu.ru* Поступила в редакцию 30.06.2022 г. После доработки 15.07.2022 г. Принята к публикации 22.07.2022 г.

Представлены результаты численного моделирования динамики мощного лазерного импульса, фемтосекундной длительности, в фотонном кристалле на основе полупроводниковых углеродных нанотрубок и полимера. Установлено квазиустойчивое распространение импульса в такой среде. Построены зависимости напряженности импульса от параметров модуляции показателя преломления фотонного кристалла, а также от концентрации полимера в нем.

DOI: 10.31857/S0367676522110084

введение

Научные достижения в прикладной нелинейной оптике, а также в областях нанофотоники и оптоэлектроники, во много обязаны мощным развитием нанотехнологий, которые позволяют выращивать материалы, имеющие периодическую структуру, период которой порядка длины волны света или даже много меньше нее [1].

Материалы, обладающие пространственно переменным показателем преломления, в частности, фотонные кристаллы (ФК), открывают большие перспективы исследования и управления лазерным излучением, проходящим сквозь него. Так, на основе ФК возможно создание пространственных модуляторов, переключателей, разветвителей, циркуляторов и т.д. [2, 3].

Под мощным лазерным излучением, в работе понимаются предельно короткие импульсы (ПКИ) фемтосекундной длительности, которые содержат 1–5 периодов колебания электрического поля. Энергия таких импульсов остается локализованной в ограниченной области пространства, а также они обладают высокой направленностью их излучения, стабильностью формы и устойчивостью к возмущениям [4–6]. Причем, пространственная модуляция показателя преломления ФК, является уникальной средой, обладающей нелинейными свойствами, в которой возможно устойчивое распространение локализованных солитоноподобных импульсов [7].

Дополнительную нелинейность, необходимую для стабилизации ПКИ, вносят полупроводниковые углеродные нанотрубки (УНТ), обладающие нелинейными свойствами в оптическом диапазоне [8, 9]. УНТ совместно с полимерами, не только улучшают механические свойства материала, но и, например, повышают электропроводность, теплопроводность, теплостойкость и придают нанокомпозиту новые функциональные свойства. Отметим, что достаточно давно разработаны и запатентованы различные механизмы получения нанокомпозитов допированных УНТ [10, 11], в которых поброны описаны методы равномерного распределения нанотрубок в полимерной матрице. Таким образом, задача динамики ПКИ в ФК на основе полимера, допированного УНТ является весьма актуальной.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Исследуемая задача имеет следующую геометрию: направление распространения лазерного импульса и направление пространственной модуляции показателя преломления фотонного кристалла совпадают с осью *OZ*. Электрическое поле и ток, совпадают с осью нанотрубок и ориентированы вдоль оси *OY*. Отметим, что поскольку характерные пространственные длины нанотрубок много меньше типичного размера пространственной области, в которой локализован импульс, таким образом, можно использовать приближение сплошной среды и считать ток распределенным по объему.

Для описания эволюции трехмерного импульса в среде фотонного кристалла воспользуемся уравнениями Максвелла, с использованием Кулоновской калибровки ($E = -\partial A/c\partial t$) [12, 13]:

$$\Delta \vec{A} - \frac{n^2(\vec{z})}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{CNT} \left(\vec{A} \right) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{Pol} \left(\vec{A} \right) = 0, \quad (1)$$

здесь $\vec{A} = (0, A(x, y, z, t), 0)$ – вектор-потенциал электрического поля импульса; n(z) = 1 ++ $\mu \cos(2\pi z/\chi)$ – пространственно-модулированный показатель преломления среды, который задает фотонный кристалл (μ – глубина модуляции показателя преломления, χ – период модуляции показателя преломления); c – скорость света; \vec{j}_{CNT} – плотность электрического тока, связанного с углеродными нанотрубками; \vec{j}_{Pol} – плотность электрического тока, связанного с полимером.

Компонента плотности тока, который образуется благодаря взаимодействию поля импульса с электронами в зоне проводимости нанотрубок, имеет вид:

$$j_{CNT} = e \sum_{ps} \upsilon_s(p) \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) \left\langle C_{ps}^+ C_{ps} \right\rangle,$$

$$\upsilon_s(p) = \frac{\partial \varepsilon_s(p)}{\partial p}, \qquad (2)$$

 $\varepsilon_s(p) = \pm \gamma_0 \left(1 + 4\cos(ap)\cos(\pi s/m) + \cos^2(\pi s/m) \right)^{1/2},$

где $v_s(p)$ – групповая скорость электронов; e – заряд электрона; $\varepsilon_s(p)$ – закон дисперсии π -электронов в полупроводниковых нанотрубках [9]; γ_0 – интеграл перекрывания ($\approx 2.7 \ \text{эB}$); a – постоянная решетки углеродной нанотрубки; p – квазиимпульс электрона; m – количество гексагонов по периметру нанотрубки; C_{ps}^+ , C_{ps} – операторы рождения и уничтожения электронов с квазиимпульсом (p, s); (\rangle – усреднение с неравновесной матрицей плотности $\rho(t)$: (B) = $Sp(B(0)\rho(t))$.

Следует заметить, что:

$$\langle B_0 \rangle = Sp(B(0)\rho(0)),$$

$$\rho(0) = \frac{\exp\left\{-\frac{H}{k_BT}\right\}}{Sp\left(\exp\left\{-\frac{H}{k_BT}\right\}\right)},$$

где k_B — постоянная Больцмана; T — температура.

Вычисление компоненты тока для полимеров проводится аналогично вычислению тока для системы квантовых точек с прыжковой проводимостью [14]. Данная модель имеет подробное описание и обоснование в работе [15]. Таким образом выражение для j_{Pol} имеет следующий вид:

$$j_{Pol} = e \sum_{ps\sigma} \upsilon_s(p) \Big(p - \frac{e}{c} A(t) \Big) \Big\langle C^+_{ps\sigma} C_{ps\sigma} \Big\rangle, \qquad (3)$$

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

Далее, закон дисперсии электронов в углеродных нанотрубках εs(p), разложим в ряд Фурье, и подставим выражения для плотности тока нанотрубок (2) и полимеров (3) в уравнения Максвелла (1), и получим эффективное уравнение на компоненту вектор-потенциала электрического поля лазерного импульса в фотонном кристалле:

$$\Delta A - \frac{n^2(z)}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4en_{CNT}}{c} \sum_q qb_q \sin\left(\frac{qaeA}{c}\right) + \frac{4en_{Pol}}{c} \sin\left(\frac{a_{Pol}eA}{c}\right) = 0,$$
(4)

здесь n_{CNT} — концентрация электронов в нанотрубках; n_{Pol} — концентрация полимера в фотонном кристалле; a_{Pol} — длина связи в полимере; Δ лапласиан в цилиндрической системе координат.

Коэффициенты b_q , убывают с ростом q, таким образом в сумме можно ограничиться первыми 15 слагаемыми, не теряя при этом точности расчетов:

$$b_q = \sum_{s=1}^{n} a_{sq} \int_{ZB} \cos(apq) \frac{\exp\left\{-\frac{\varepsilon_s(p)}{k_BT}\right\}}{1 + \exp\left\{-\frac{\varepsilon_s(p)}{k_BT}\right\}} dp,$$

заметим, что *ZB* – первая зона Бриллюэна; *a_{sq}* – коэффициенты разложения закона дисперсии электронов в ряд Фурье.

Начальные условия на вектор-потенциал электрического поля ПКИ имеют Гауссову форму и выглядят следующим образом:

~

$$A_{t=0} = A_0 \exp\left\{-\frac{r^2}{\gamma^2}\right\} \exp\left\{-(z-z_c)^2/\beta^2\right\},$$

$$\frac{dA}{dt}\Big|_{t=0} = \frac{2\upsilon z}{\gamma^2} A_0 \exp\left\{-\frac{r^2}{\gamma^2}\right\} \exp\left\{-(z-z_c)^2/\beta^2\right\},$$
(5)

где β , γ — параметры, определяющие ширину импульса вдоль осей *z* и *r*, соответственно; A_0 — начальная амплитуда импульса; υ — скорость входа импульса в Φ K; z_c — начальная координата.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Эффективное уравнение на вектор-потенциал электрического поля ПКИ (4) решалось численно, при помощи явной конечно-разностной схемы типа "крест", на равномерной сетке по времени и координате, со вторым порядком погрешности [16].

При численном моделировании исследуемой системы, ее параметры выбирались следующим образом: m = 13, T = 293 K, время релаксации в нанотрубках $\approx 10^{-11}$ с; длительность импульса $\approx 10^{-14}$ с. Значения параметров, определяющих ширину импульса, а также начальную скорость импульса

ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ том 86 № 11 2022



Рис. 1. Зависимость напряженности электрического поля импульса от цилиндрических координат в фиксированные момент времени (5, 10, 15 пс) (*a*); Срезы напряженности при r = 0 (δ). Отношение концентрации УНТ к полимеру 1 : 1.

при входе в среду, задавались следующим образом ($\beta = \gamma \sqrt{1 - \upsilon^2}, \upsilon = 0.95c$).

Эволюция трехмерного импульса электромагнитного поля при его распространении в среде УНТ и полимера, с пространственно-переменным показателем преломления, в случае одного колебания электрического поля представлена на рис. 1. Параметры модуляции показателя преломления ФК задавались следующим образом: период – 2.5 мкм, глубина – 0.25.

Из представленной на рис. 1 временной эволюции импульса можно сказать, что присутствие ФК, приводит к изменению формы импульса. Это происходит благодаря интерференции встречных волн, которые испытывают частичное "отражение". Наличие интерференции также оказывает влияние на групповую скорость волнового пакета импульса, уменьшая ее. Однако, несмотря на изменение формы, энергия импульса остается локализованной в пространстве, что в свою очередь говорит о квазиустойчивом распространении импульса на времени до 15 пс. Также отмечается увеличение амплитуды импульса с течением времени, вследствие дисперсии электрического поля в среде углеродных нанотрубок. Этот факт позволяет использовать данную среду в устройствах усиления подобных импульсов.

На рис. 2 показаны срезы напряженности трехмерного лазерного импульса в зависимости от параметров модуляции показателя преломления ФК.

Увеличение глубины модуляции показателя преломления ФК приводит к замедлению импульса и незначительному увеличению его амплитуды (рис. 2*a*), особенно изменения заметны



Рис. 2. Продольные срезы трехмерного ПКИ в фотонном кристалле из УНТ и полимера (отношение концентрации УНТ к полимеру 1 : 1.) при различных значениях параметров модуляции показателя преломления, при r = 0: глубины (0.25, 0.5, 0.75) (*a*), периода (5, 7.5, 10 мкм) (δ).

на фронте импульса. Изменение периода решетки ФК также оказывает влияние на групповую скорость волнового пакета импульса, с увеличением периода импульс начинает распространяться быстрее (рис. 2*б*), поскольку процессы интерференции, при его столкновении с узлами кристалла, происходят реже. На основании полученного результата можно говорить о том, что, зная время задержки импульса, можно судить об веществе ФК, что в свою очередь является важным результатом в практической области спектроскопии.



Рис. 3. Продольные срезы трехмерного ПКИ в фотонном кристалле при различных значениях концентраций нанотрубок и полипропилена, при r = 0.

Далее мы рассмотрели зависимость напряженности импульса от соотношения концентраций УНТ и полимера в ФК, что показано на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что с увеличением количества полимера в кристалле импульс сужается. Таким образом, влияние этого параметра способствует стабилизации импульса. Это можно связать с инерционностью отклика полимера и последующим переизлучением им энергии.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из проведенного численного исследования динамики трехмерного ПКИ в фотонном кристалле на основе УНТ и полимера можно сделать следующие выводы:

 – распространение импульса в такой среде является стабильным на временах до 15 пс;

исходя из времени задержки импульса, можно судить о параметрах ФК (периоде и глубине модуляции показателя преломления);

 увеличение концентрации полимера в ФК приводит к сужению лазерного импульса.

Двужилова Ю.В., Двужилов И.С. выражают благодарность Министерству науки и высшего образования РФ за финансовую поддержку в рамках гранта Президента РФ (проект № МК-2089.2021.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Sheng P.* Introduction to wave scattering, localization and mesoscopic phenomena. Berlin: Springer-Verlag, 2006. 333 p.
- Mito S., Takagi H., Lim P.B. et al. // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. Art. No. 07E313.

- 3. Wang Z., Fan S. // Opt. Lett. 2005. V. 30. P. 1989.
- 4. Fibich G., Ilan B. // Opt. Let. 2004. V. 29. P. 887.
- Goorjian P.M., Mihalache D. // Rom. J. Phys. 2017. V. 69. P. 403.
- 6. Mihalache D. // Rom. Rep. Phys. 2021. V. 73. P. 403.
- Sazonov S.V., Ustinov N.V. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. Art. No. 063803.
- 8. Eletskii A.V. // Phys. Usp. 1997. V. 40. № 9. P. 899.
- Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. Science of fullerenes and carbon nanotubes. San Diego: Academic Press, 1996. 965 p.
- Коноплев Б.Г., Агеев О.А., Сюрик Ю.В. Способ изготовления полимерного композита с ориентированным массивом углеродных нанотрубок. Пат. РФ № 2417891. 2011.

- Агеев О.А., Сюрик Ю.В. Способ изготовления композита полимер/углеродные нанотрубки на подложке. Пат. РФ № 2400462. 2010.
- 12. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М*. Теория поля. М.: Наука, 1973. 509 с.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 624 с.
- Басс Ф.Г., Булгаков А.А., Тетервов А.П. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. М.: Наука, 1989. 288 с.
- 15. *Осипов В.А., Федянин В.К.* Сообщения ОИЯИ. Дубна: ОИЯИ, 1984. 10 с.
- Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.

High-power laser pulses in a photonic crystal with carbon nanotubes and a polymer

Yu. V. Dvuzhilova^a, I. S. Dvuzhilov^a, *, M. B. Belonenko^a

^aVolgograd State University, Volgograd, 400062 Russia *e-mail: dvuzhilov.ilya@volsu.ru

The results of numerical simulation of the dynamics of a high-power femtosecond laser pulse in a photonic crystal based on semiconductor carbon nanotubes and a polymer are presented. Quasi-stable pulse propagation in such a medium is established. The dependences of the pulse intensity on the modulation parameters of the refractive index of the photonic crystal, as well as on the concentration of the polymer in it, are plotted.

1610