ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2022, том 86, № 7, с. 1042–1046

УДК 535.5:538.9

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА НА ДИНАМИКУ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКОГО ИМПУЛЬСА В ОПТИЧЕСКИ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

© 2022 г. Н. Н. Конобеева[1, *], М. Б. Белоненко[1]

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

*E-mail: yana_nn@volsu.ru

Поступила в редакцию 14.02.2022 г.
После доработки 28.02.2022 г.
Принята к публикации 23.03.2022 г.

Исследовано влияние параметра порядка на динамику трехмерного предельно короткого оптического импульса в нелинейной анизотропной оптической среде, содержащей углеродные нанотрубки. Исследована зависимость формы трехмерного предельно короткого оптического импульса от расстояния от точки фазового перехода и угла между электрическим полем импульса и осью углеродных нанотрубок.

DOI: 10.31857/S036767652207016X

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы наблюдается повышенный интерес исследователей к изучению нелинейных сред, испытывающих фазовый переход. Общая характеристика фазового перехода состоит в том, что он либо включает в себя разрыв параметра порядка согласно парадигме фазовых переходов Ландау [1, 2], либо изменение топологического инварианта [3, 4]. Определение характеристик и контроль различных фаз – одна из важных задач физики конденсированного состояния и материаловедения. В частности, изучение фазовых переходов в двумерных системах сыграло решающую роль в понимании механизмов фазовых переходов [5–7]. К двумерным системам можно отнести и углеродные нанотрубки (УНТ), которые обладают уникальными нелинейными свойствами [8, 9] и способны выдерживать электрические поля большой напряженности. С этой точки зрения важной практической задачей является изучение неравновесной динамики параметра порядка в присутствии внешних переменных полей. С другой стороны, хорошо известно, что среды с УНТ оказывают стабилизирующий эффект на распространяющиеся в них локализованные электромагнитные волны, т. н. световые пули [10, 11]. Это свойство делает возможным применять УНТ для исследования спектра среды и внутренней динамики. Ранее нами были изучены особенности распространения предельно коротких импульсах в средах со скалярным [12] и векторным [13] параметром порядка. При этом не учитывалась оптическая анизотропия среды. Рассмотрим распространение электромагнитных волн в диэлектрическом кристалле, ось которого не сонаправлена оси УНТ, что связано с необходимостью учесть вторую компоненту электрического поля.

МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим влияние скалярного параметра порядка в среде с УНТ. Для описания динамики изучаемой системы воспользуемся уравнением движения, которое следует из теории фазовых переходов [14, 15]:

$$\frac{dP}{dt} = -\Gamma\frac{\delta\Phi}{\delta \mathrm{P}}, \tag{1}$$

где $\Gamma = 1$ – кинетический коэффициент, P – параметр порядка, Φ – плотность функционала свободной энергии. Параметр порядка позволяет описывать системы с различными физическими свойствами. Это могут быть сегнетоэлектрики, ферромагнетики и т.д. В роли параметра порядка в этом случае будет выступать поляризация, намагниченность и другие характеристики [15]. Использование подходов Паташинского и Покровского позволяет описать с помощью одного уравнения различные по свойствам системы. Рассмотрим в качестве параметра поляризацию электрического поля, направленного вдоль оси нанотрубок.

Плотность функционала свободной энергии зададим в виде:

$$\Phi = \Phi_0 + \rho P^2 + \beta P^4 + \chi EP. \tag{2}$$

При этом необходимо учесть, что электроны в УНТ будут находится под действием как электромагнитного поля самого импульса, так и поля среды:

$$E_s = \frac{\delta \Phi}{\delta P}. \tag{3}$$

Определим геометрию задачи следующим образом. Оси OX, OY и OZ сонаправлены осям кристалла. Ось УНТ лежит в плоскости XOY и образует с осью OX угол α (рис. 1). Для простоты задачи выберем направления электрического поля вдоль оси кристалла OX.

Векторный потенциал зададим в виде: $\vec{A} = \left(A_x(x,y,z,t), A_y(x,y,z,t), 0\right)$, тогда плотность электрического тока будет иметь вид: $\vec{j} = \left(j_x(x,y,z,t), j_y(x,y,z,t), 0\right)$.

Запишем трехмерное волновое уравнение для компоненты электрического поля, направленной под углом к оси УНТ в виде:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial z^2} + \frac{4\pi}{c}\vec{j}\left(\vec{A}\right), \tag{4}$$

где c – скорость света.

Переходя в цилиндрическую систему координат, перепишем уравнение (4) для двух компонент (x, y) поля:

$$\frac{1}{\nu_o^2}\frac{\partial^2 A_x}{\partial t^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_x}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 A_x}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 A_x}{\partial \phi^2} + \frac{4\pi}{c} j_x(A_x),$$

$$\frac{1}{\nu_e^2}\frac{\partial^2 A_y}{\partial t^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_y}{\partial r}\right) + \tag{5}$$

$$+\frac{\partial^2 A_y}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 A_y}{\partial \phi^2} + \frac{4\pi}{c} j_y(A_y),$$

$$\nu_o = c/n_x, \quad \nu_e = c/n_y,$$

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

Учтем, что закон дисперсии электронов зигзаг УНТ имеет вид [16]:

$$\varepsilon_s(p) = \pm\gamma\sqrt{1 + 4\cos(ap)\cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)}, \tag{6}$$

где $s = 1, 2 \ldots m$, нанотрубка имеет тип $(m, 0)$, $\gamma \approx 2.7$ эВ, $a = 3b/2\hbar$, $b = 0.142$ нм – межатомное расстояние в графеноподобных структурах.

Проводя вычисления аналогично [10], запишем выражение для плотности тока:

$$j_0 = -en_0 \sum_k D_k \sin\left(\frac{ke}{c}A(t)\right),$$

$$D_k = \sum_{s=1}^{m}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dp' A_{ks}\cos(kp')\frac{\exp\left(-\varepsilon_s(p')/k_B T\right)}{1+\exp\left(-\varepsilon_s(p')/k_B T\right)}, \tag{7}$$

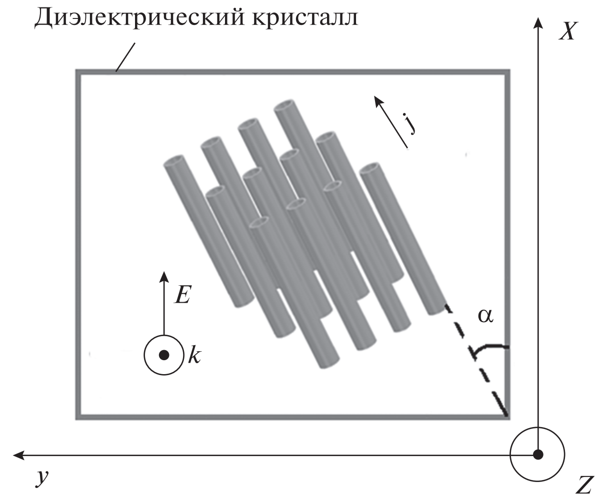

Рис. 1. Схематичное изображение геометрии задачи.

где n_0 – концентрация электронов в УНТ, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К, T – температура, A_{ks} – коэффициенты разложения скорости электронов в ряд Фурье.

С учетом формулы (7) система уравнений (5) может быть представлена в виде:

$$\begin{cases} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_x}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 A_x}{\partial z^2} - \frac{1}{v_o^2}\frac{\partial^2 A_x}{\partial t^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 A_x}{\partial \varphi^2} + \\ + g\cos\alpha \sum\limits_{k=1}^{\infty} D_k \sin\left(C_k(A_x, A_y) + \frac{aekA_s}{c}\right) = 0 \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial A_y}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 A_y}{\partial z^2} - \frac{1}{v_e^2}\frac{\partial^2 A_y}{\partial t^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 A_y}{\partial \varphi^2} + \\ + g\sin\alpha \sum\limits_{k=1}^{\infty} D_k \sin\left(C_k(A_x, A_y)\right) = 0 \end{cases} \tag{8}$$

$$C_k(A_x, A_y) = \frac{aek\left(A_x\cos\alpha + A_y\sin\alpha\right)}{c}, \quad g = \frac{4en_0\gamma_0 a}{c}.$$

Здесь (A_x, A_y) соответствуют компонентам электрического поля предельно короткого импульса, A_s – электрическому полю среды: $E_s = -c^{-1}\,\partial A_s/\partial t$ (3).

В дальнейшем рассмотрении не будем учитывать производную по углу в силу цилиндрической симметрии, а также пренебрежем накоплением заряда в массиве УНТ вследствие неоднородности поля импульса [17].

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Исследуемые уравнения (8) решались численно [18] при следующих параметрах системы: УНТ типа zigzag (13, 0), коэффициенты D_k вычислялись при $T = 293$ K. Время релаксации в УНТ $t_{rel} \approx$

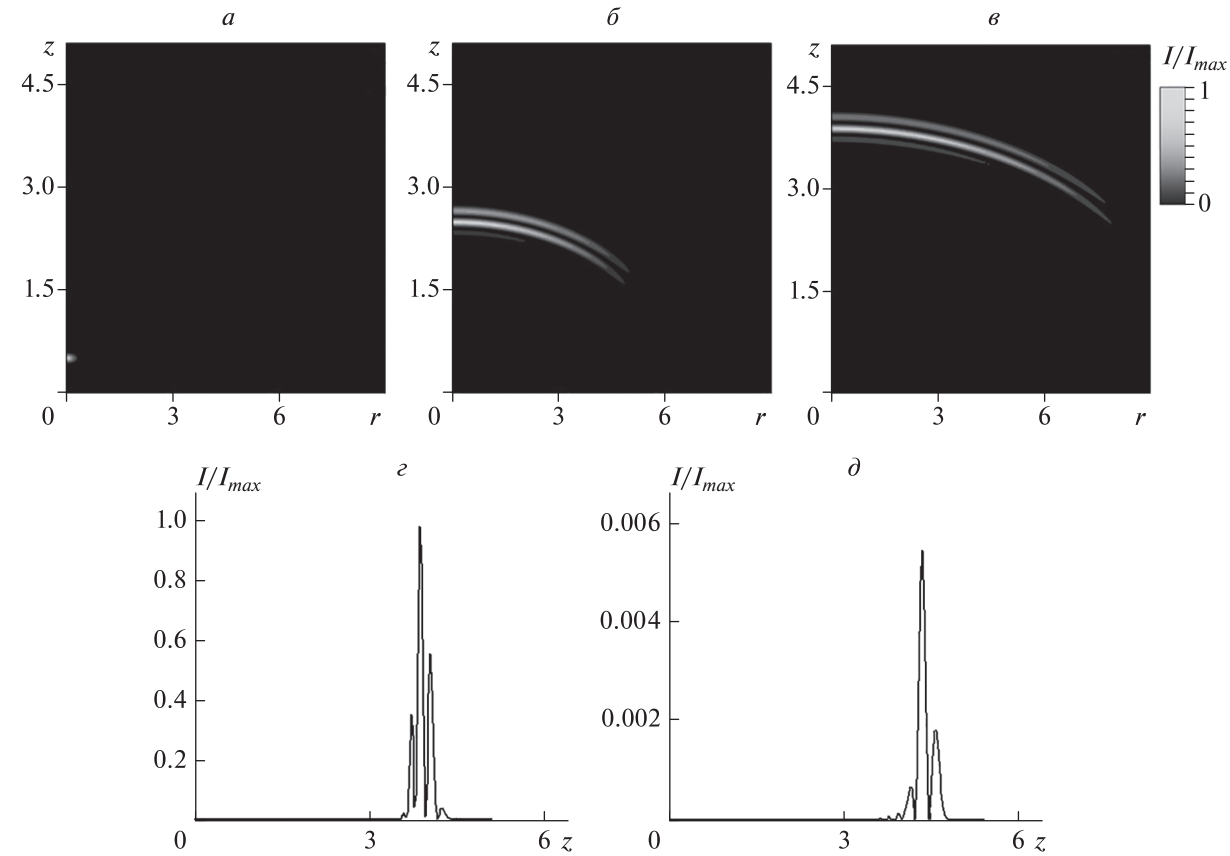

Рис. 2. Интенсивность трехмерного электромагнитного импульса $I(r,z,t) = E_x^2(r,z,t)$ в различные моменты времени ($\rho = 0.2$, $\beta = -1$, $\alpha = 0.6$ рад): исходная форма импульса (*а*); $t = 6$ (*б*); 10 отн. ед. (*в*). Рисунки (*г*) и (*д*) – продольные сечения при $t = 10$ отн. ед.: для E_x- (*г*) и E_y- (*д*) компоненты электрического поля. I_{max} – максимальное значение интенсивности.

$\approx 10^{-11}$ с, длительность импульса $t_{pulse} = 2 \cdot 10^{-14}$ с, таким образом $t_{pulse} \ll t_{rel}$.

Начальное условие выбиралось в виде:

$$A_x(r,z,0) = Q\exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{l_z^2}\right)\exp\left(-\frac{(r-r_0)^2}{l_r^2}\right),$$

$$\frac{dA_x(r,z,0)}{dt} =$$

$$= 2\upsilon_0\frac{(z-z_0)}{l_r^2}Q\exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{l_z^2}\right)\exp\left(-\frac{(r-r_0)^2}{l_r^2}\right), \quad (9)$$

$$A_y(r,z,0) = 0, \quad \frac{dA_y(r,z,0)}{dt} = 0,$$

$$\Phi(r,z,0) = \sqrt{\left|\frac{2\rho}{\beta}\right|}, \quad r = \sqrt{x^2+y^2}, \quad \mathrm{tg}\,\varphi = \frac{y}{x},$$

где Q – амплитуда электромагнитного импульса на входе в среду с УНТ, l_z, l_r – определяют ширину импульса вдоль направлений z и r соответственно, (r_0, z_0) – начальная координата центра импульса, υ_0 – начальная скорость импульса.

Эволюционная картина для электромагнитного поля при движении импульса в анизотропной среде с УНТ показана на рис. 2. Из рис. 2*а*–2*в* видно, что импульс, распространяющийся в анизотропной оптической среде, претерпевает дисперсионное уширение. При этом наблюдается ограниченная область пространства, в которой сосредоточена большая часть энергии предельно короткого импульса. Поэтому можно говорить об устойчивом характере распространения электромагнитного поля в образце. Следует отметить, что интенсивность импульса при этом уменьшается. Это связано с взаимодействием возникающего в углеродных нанотрубках тока с подсистемой, описываемой параметром порядка. Релаксационный характер динамики этой подсистемы вызывает уменьшение электрического поля импульса. Рисунки 2*г*–2*д* демонстрируют, что вторая компонента электрического поля E_y примерно в 100 раз меньше по амплитуде, чем компонента поля E_x, и на дальнейших рисунках она не показана. Однако следует отметить, что наличие второй компоненты приводит к более значительному

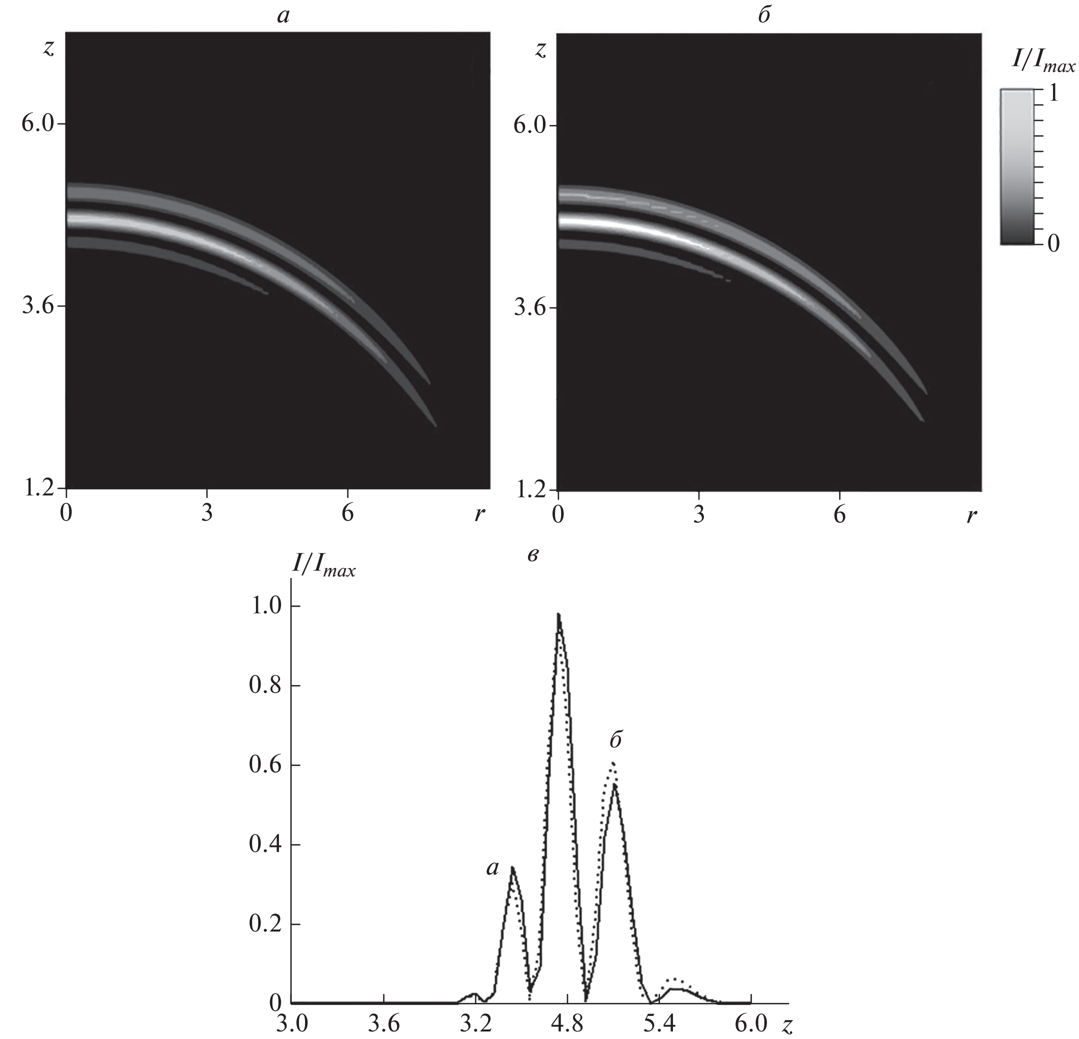

Рис. 3. Интенсивность трехмерного электромагнитного импульса $I(r,z,t) = E_x^2(r,z,t)$ для разных значений параметра ρ (для момента времени, $t = 10$ отн. ед., $\alpha = 0.9$ рад): $\rho = 0.1$ (*а*); 0.6 (*б*); срезы для рис. 3*а* и 3*б* при $r = 0$ (*в*). I_{max} – максимальное значение интенсивности.

уширению импульса, чем в ранее рассмотренных задачах.

Зависимость формы импульса от параметра порядка (величины ρ) показана на рис. 3. Отметим, что параметр ρ в рамках теории фазовых переходов определяет удаление от точки фазового перехода и пропорционален величине отклонения текущей температуры от температуры, характерной для фазового перехода. Приведенные зависимости позволяют сделать вывод, что для определения точки фазового перехода может служить предельно короткий импульс, а точнее его форма.

Дополнительно была проанализирована зависимость импульса от угла α между УНТ и осью кристалла. Показано, что значение α не оказывает существенного влияния на форму импульса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получено эффективное уравнение для описания динамики трехмерных предельно коротких оптических импульсов в анизотропной оптической среде, содержащей углеродные нанотрубки, с учетом параметра порядка. Обнаружено, что амплитуда импульса уменьшается со временем. Это связано как с релаксационной динамикой параметра порядка, так и с наличием второй компоненты поля E_y, которая учитывается за счет анизотропии. Динамика предельно короткого импульса позволяет определять расстояние от точки фазового перехода в анизотропной оптической среде с углеродными нанотрубками.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ и Совета по грантам Президента РФ (проект № МД-3173.2021.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ма Ш.* Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980. 296 с.
2. *Christian J.W.* The theory of transformations in metals and alloys. Oxford: Pergamon, 2002. 1200 p.
3. *Sachdev S.* Quantum phase transitions. Cambridge: Cambridge University Press, 2011, 478 p.
4. *Fradkin E.* Field theories of condensed matter physics. Cambridge: Cambridge University Press, 2013. 838 p.
5. *Wang Y., Xiao J., Zhu H. et al.* // Nature. 2017. V. 550. P. 487.
6. *Rehn D.A., Li Y., Pop E. et al.* // NPJ Comput. Mater. 2018. V. 4. Art. No. 2.
7. *Duerloo K.-A.N., Reed E.J.* // ACS Nano. 2015. V. 10. P. 289.
8. *Vinogradov G.A., Astakhova T.Yu., Gurin O.D. et al.* Abstracts of invited lectures and contributed papers "Fullerenes and Atomic Clusters". St. Petersburg, 1999. P. 189.
9. *Astakhova T.Yu., Gurin O.D., Menon M. et al.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. Art. No. 035418.
10. *Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Попов А.С.* // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 91. № 9. С. 506; *Belonenko M.B., Lebedev N.G., Popov A.S.* // JETP Lett. 2010. V. 91. No. 9. P. 461.
11. *Белоненко М.Б., Глазов С.Ю., Лебедев Н.Г. и др.* // ФТТ. 2009. Т. 51. № 8. С. 1657; *Belonenko M.B., Glazov S.Y., Lebedev N.G. et al.* // Phys. Solid State. 2009. V. 51. No. 8. P. 1758.
12. *Zhukov A.V., Bouffanais R., Konobeeva N.N. et al.* // J. Appl. Phys. 2017. V. 121. No. 8. Art. No. 084301.
13. *Konobeeva N.N., Belonenko M.B.* // J. Nano-Electron. Phys. 2020. V. 12. No. 4. Art. No. 04016.
14. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Физматлит, 2002. 616 с.
15. *Паташинский А.З., Покровский В.Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982. 256 с.
16. *Харрис П.* Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI в. М.: Техносфера, 2003. 336 с.
17. *Zhukov A.V., Bouffanais R., Fedorov E.G., Belonenko M.B.* // J. Appl. Phys. 2013. V. 114. Art. No. 143106.
18. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. М.: Наука, 1987. 601 с.

Influence of the order parameter on the dynamics of a few-cycle pulse in an anisotropic optical medium with carbon nanotubes

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

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

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

In this work, we study the influence of the order parameter on the dynamics of a three-dimensional few-cycle optical pulse in a nonlinear anisotropic optical medium containing carbon nanotubes. The dependence of the 3D shape of the few-cycle pulse on the distance from the phase transition point and the angle between the electric field of the pulse and the axis of carbon nanotubes is analyzed.