

Моделирование эволюции лазерных пучков в примесных углеродных нанотрубках с использованием подхода Маделунга

Е.А. Кувшинов
Волгоградский государственный
университет
Волгоград, Россия
eakuvshin@rambler.ru

Р.Р. Трофимов
Волгоградский государственный
университет
Волгоград, Россия
r.trofimov@volsu.ru

Н.Н. Конобеева
Волгоградский государственный
университет
Волгоград, Россия
yana_nn@volsu.ru

Аннотация — В настоящей работе построен алгоритм и выполнена его численная реализация при помощи метода сглаженных частиц для моделирования распространения лазерного пучка в нелинейной среде, содержащей примесные углеродные нанотрубки. Уравнения модели получены в рамках подхода Маделунга для нелинейного уравнения Шрёдингера. Продемонстрировано поведение пучка в зависимости от вида его начального профиля и параметров примеси.

Ключевые слова — лазерные пучки, углеродные нанотрубки, примеси, гидродинамический подход

I. ВВЕДЕНИЕ

Поиск сред не только для устойчивого распространения электромагнитных импульсов, но и для управления их характеристиками является одной из актуальных задач современной нелинейной оптики [1]. В этой связи стоит выделить среды, содержащие углеродные наноструктуры, в том числе углеродные нанотрубки (УНТ) [2]. При этом важной частью подобных исследований является численное моделирование таких систем с большим количеством параметров, когда приходится решать сложные вычислительные задачи. Это в свою очередь требует применения мощных вычислительных ресурсов и новых компьютерных технологий, в том числе параллельных вычислений. Что влечет за собой необходимость применения современных методов и разработки новых алгоритмов.

Одним из таких методов является метод сглаженных частиц (SPH - Smoothed-particle hydrodynamics) [3], который широко используется в последнее время при решении задач из самых разных научных областей.

Отметим, что в работе [4] изучалось распространение квазистационарных лазерных пучков в массиве полупроводниковых углеродных нанотрубок без примесей. Данный вопрос является важным для практических приложений, поскольку наличие примесей может приводить к изменению ряда свойств УНТ [5, 6], и, следовательно, влиять на поведение лазерного пучка.

II. МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Мы рассматриваем лазерный пучок, распространяющийся перпендикулярно оси углеродных нанотрубок, помещенных в диэлектрическую среду. Будем считать, что УНТ содержат примесь, которая равномерно распределена по всему массиву. Также примем приближение о четырех уровнях энергии

электрона, локализованного на примеси. Геометрия задачи представлена на рис. 1.

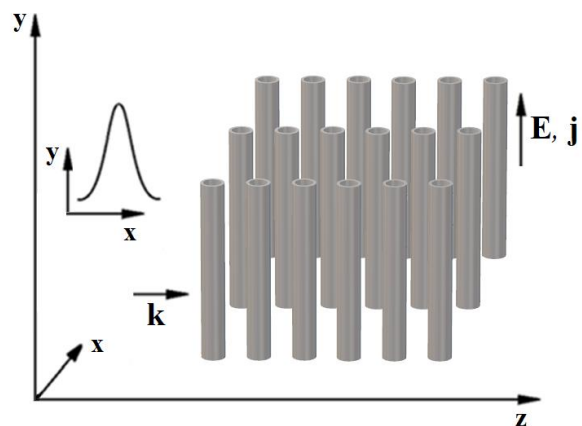


Рис. 1. Геометрия задачи

Уравнение, описывающее эволюцию электрического поля импульса, при переходе к векторному потенциалу $E = c^{-1} \partial A / \partial t$, имеет вид:

$$\frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} + \frac{4\pi}{c} j(A), \quad (1)$$

где c – скорость света в вакууме, ε – диэлектрическая проницаемость среды. Неоднородности поля вдоль оси УНТ рассмотрены не были.

Выражение для у-компоненты плотности тока может быть записано следующим образом:

$$j = 2e \sum_{s=1}^m \int v(p_y, s) \cdot F(p_y, s) dp_y, \quad (2)$$

где e – заряд электрона, p_y – компонента квазиимпульса электрона проводимости вдоль оси нанотрубок, $F(p_y, s)$ – функция распределения Ферми, интегрирование по квазиимпульсу проводится в пределах первой зоны Бриллюэна (BZ), $v(p_y, s)$ – скорость электронов проводимости, определяемая через закон дисперсии электронов УНТ ε_{imp} :

$$\varepsilon_{imp} = \frac{R + Q + \sqrt{(R - Q)^2 - 4(D \cdot (f + f^*) - \varepsilon^2 - D^2)}}{2} \quad (3)$$

ε - закон дисперсии для электронов УНТ без учета примеси, R , Q - параметры, описывающие переходы электрона между примесными уровнями и подрешетками нанотрубок, D - параметр, описывающий переходы между двумя подрешетками УНТ, $|f| = \varepsilon$.

Мы будем исследовать интенсивность лазерного пучка, определяемую как: $I = |E_y|^2 \propto |\psi|^2$, ψ определяет амплитуду векторного потенциала, при использовании приближения медленно меняющихся амплитуд и фаз [7].

В результате получено уравнение, имеющее аналог нелинейного уравнения Шрёдингера. Далее применялось преобразование Маделунга, что позволило перейти к гидродинамической форме уравнения и решить его численно методом сглаженных частиц с ядром Монагана с учетом следующих начальных условий двух типов:

1) с гауссовым профилем в плоскости $z=0$:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\psi(x, 0)) &= Q \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{l^2}\right), \\ \operatorname{Im}(\psi(x, 0)) &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

2) с солитоноподобным профилем в плоскости $z=0$:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\psi(x, 0)) &= Q \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{l^2}\right) \cdot \cos(k_0(x - x_0)), \\ \operatorname{Im}(\psi(x, 0)) &= Q \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{l^2}\right) \cdot \sin(k_0(x - x_0)) \end{aligned} \quad (5)$$

где Q - амплитуда лазерного пучка на входе в среду с УНТ, l определяет ширину пучка, x_0 - координата максимальной интенсивности поля пучка вдоль оси Ox , k_0 имеет смысл волнового вектора волны, которая заполняет огибающую представленную гауссовой функцией. Моделирование проводилось на 500 частицах.

Типичное распределение интенсивности лазерного пучка при его распространении по образцу представлено на рис 2.

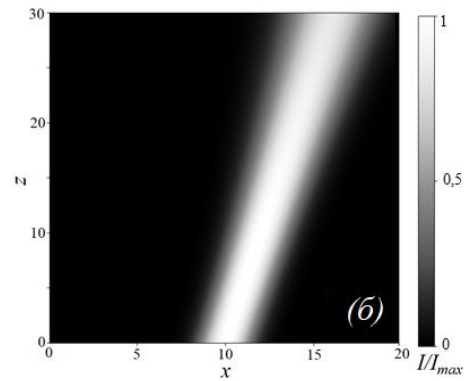
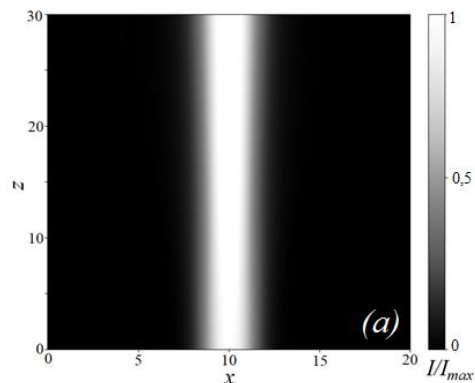


Рис. 2. Распределение интенсивности лазерного пучка: а) гауссов профиль; б) солитоноподобный профиль. I_{max} - максимальное значение интенсивности

III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках гидродинамического подхода получена система уравнений, описывающая распространение лазерного пучка в массиве углеродных нанотрубок с многоуровневыми примесями. Разработан алгоритм “SPH-NLSE” для численного моделирования динамики лазерных пучков в такой среде. Показано, что введение примеси препятствует уширению лазерного пучка. В отсутствие примеси первоначальная ширина больше в 1,4 раза для профиля Гаусса, чем для примесного случая, и в 1,05 раза - для солитоноподобного профиля. При этом варьируя параметры примеси можно добиться увеличения его интенсивности на 50% и 25% соответственно.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (РНФ) (грант № 23-71-00016, <https://rscf.ru/project/23-71-00016/>). Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Kärtner, F.X. Few-cycle laser pulse generation and its applications / F.X. Kärtner - Berlin: Springer, 2004. - 448 p.
- [2] Iijima, S. Helical microtubules of graphitic carbon / S. Iijima // Nature. - 1991. - Vol. 354(6348). - P. 56-58.
- [3] Gingold, R.A. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars / R.A. Gingold, J.J. Monaghan // Mon. Not. R. Astron. Soc. - 1977. - Vol. 181. - P. 375-389.
- [4] Zhukov, A.V. Propagation of laser beams in an array of semiconductor carbon nanotubes / A.V. Zhukov, R. Bouffanais, M.B. Belonenko, E.G. Fedorov // Modern Physics Letters B. - 2013. - Vol. 27. No. 7. - P. 1350045.
- [5] Muhulet, A. Fundamentals and scopes of doped carbon nanotubes towards energy and biosensing applications / A. Muhulet, F. Miculescu, S.I. Voicu, F. Schütt, V.K. Thakur, Y.K. Mishra // Materialstoday Energy. - 2018. - Vol. 9. - P. 154-186.
- [6] Matsubara, M. Optimal thermoelectric power factor of narrow-gap semiconducting carbon nanotubes with randomly substituted impurities / M. Matsubara, K. Sasaoka, T. Yamamoto, H. Fukuyama // J. Phys. Soc. Jpn. - 2021. - Vol. 90. - P. 044702.
- [7] Ахмедиев, Н.Н. Солитоны. Нелинейные импульсы и пучки / Н.Н. Ахмедиев, А. Анкевич - М.: Физматлит, 2003. - 304 с.