

УДК 535.3:538.9

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ В МАССИВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ПОДХОДА

© 2023 г. Н. Н. Конобеева¹ *, Р. Р. Трофимов¹, М. Б. Белоненко¹

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

*E-mail: yana_nn@volsu.ru

Поступила в редакцию 24.07.2023 г.

После доработки 14.08.2023 г.

Принята к публикации 28.08.2023 г.

Выполнено моделирование распространения квазимонохроматического лазерного пучка в среде с углеродными нанотрубками. Получены уравнения, описывающие динамику лазерных пучков в массиве углеродных нанотрубок на основе гидродинамического подхода для нелинейного уравнения Шрёдингера. Данное уравнение решено численно с использованием метода сплавленных частиц. Проанализирована эволюция пучка в зависимости от частоты электрического поля.

DOI: 10.31857/S0367676523703040, EDN: QKEFOV

ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки (УНТ) [1] и их композиты [2] обладают не только выдающимися механическими, электрическими и тепловыми свойствами, но и уникальными нелинейными оптическими свойствами, которые находят широкое применение в области нелинейно-оптических приложений [3], в том числе для генерации оптических импульсов малой длительности [4]. В последние годы даже выделилось направление, связанное с оптикой предельно коротких импульсов [5], одной из важных проблем которого является поиск условий для стабильного распространения электромагнитного излучения [6], а также генерации предельно коротких импульсов [7, 8]. Отметим, что есть уже и экспериментальные подтверждения успешного применения углеродных нанотрубок в этих целях, например, для генерации субнаносекундных световых импульсов [9], а также при создании волоконных лазеров [10].

С появлением все более сложных задач возникает необходимость в мощных вычислительных ресурсах и применении новых компьютерных технологий, в том числе параллельных. К таким задачам относится и моделирование динамики лазерного пучка в среде, содержащей углеродные нанотрубки.

Метод сплавленных частиц (SPH — smoothed-particle hydrodynamics) [11] является полностью лагранжевым и не использует пространственной

сетки, позволяющей аппроксимировать производные. Это вносит существенный вклад в особенности нахождения решения. Также отметим, что в сеточных методах решение уравнения Шрёдингера сопряжено с прогонками, которые показывают плохие результаты при распараллеливании [12]. Поэтому в данной работе было решено остановить свой выбор на методе SPH, хорошо зарекомендовавшем себя в различных научных областях, в том числе астрофизике [13], механике сплошной среды [14] и др.

МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим распространение лазерного пучка в массиве зигзагообразных углеродных нанотрубок, помещенном в диэлектрическую среду, в перпендикулярном массиву направлении (ось OZ). Оси УНТ считаем сонаправленными и параллельными оси OX (рис. 1).

Энергетический спектр электронов в УНТ можно записать в виде [15]:

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

где $s = 1, \dots, m$, нанотрубка имеет тип $(m, 0)$, p_x — проекция квазиимпульса электрона проводимости на ось УНТ, $\gamma_0 \approx 2.7$ эВ — интеграл перескока, определяющий энергию, которую необходимо сообщить электрону для перемещения между соседними узлами в решетке, $a = 3b/2\hbar$, $b = 0.142$ нм — расстояние между соседними атомами углерода.

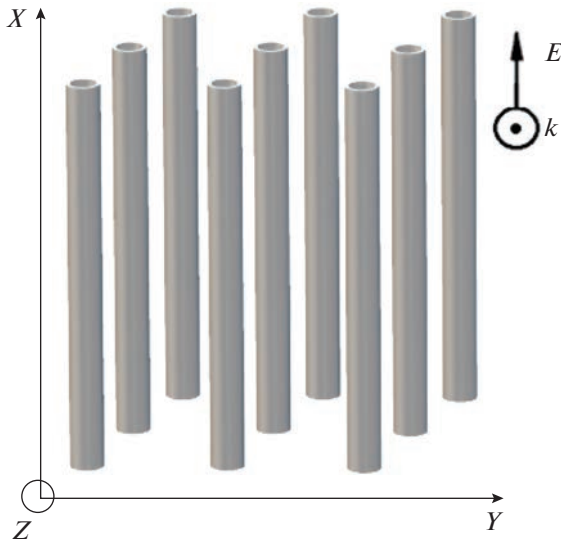


Рис. 1. Схематическое изображение геометрии задачи.

Электрическое поле лазерного пучка имеет вид: $\vec{E} = (E(y, z, t), 0, 0)$, плотность электрического тока $\vec{j} = (j(y, z, t), 0, 0)$.

Для компоненты электрического поля, направленной вдоль оси УНТ с учетом замены: $\vec{E} = -c^{-1} \partial \vec{A} / \partial t$ и разложения энергетического спектра электронов в ряд Фурье, волновое уравнение имеет вид [16]:

$$\frac{ea}{c} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} \right) - \frac{ea\epsilon}{c^3} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \omega_0^2 \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m b_{s,q} \sin\left(\frac{qae}{c} A\right) = 0, \quad (2)$$

где c — скорость света в вакууме, ϵ — диэлектрическая проницаемость среды, ω_0 — характеристическая частота, e — заряд электрона,

$$b_{s,q} = -q \frac{\alpha_{s,q}}{\gamma_0} \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \cos(qr) \exp\left(-\sum_{q=1}^{\infty} \frac{\alpha_{s,q} \cos(qr)}{k_B T}\right) dr}{\int_{-\pi}^{\pi} \exp\left(-\sum_{q=1}^{\infty} \frac{\alpha_{s,q} \cos(qr)}{k_B T}\right) dr}, \quad (3)$$

k_B — постоянная Больцмана, T — температура, $\alpha_{s,q}$ — коэффициенты в разложении закона дисперсии электронов (1) в ряд Фурье.

Введем безразмерную проекцию векторного потенциала на ось Ox следующим образом:

$$\tilde{A} = \frac{ea}{c} A = \tilde{A}_0(y, z) \cos(\omega t - kz - \varphi), \quad (4)$$

$\tilde{A}_0(y, z)$ — огибающая проекции векторного потенциала на ось Ox , $k = \omega \sqrt{\epsilon} / c$ — модуль волнового вектора, φ — начальная фаза.

Подставляем (4) в уравнение (2) и применяем приближение медленно меняющихся амплитуд и фаз [17]. При помощи формулы для функции Бесселя целого порядка и ее разложения получаем эффективное уравнение для функции $\Psi(y, z) = \tilde{A}_0(y, z) \exp(i\varphi)$, определяющей амплитуду векторного потенциала с учетом перехода к безразмерным величинам:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \zeta^2} + 2i\kappa \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} - \Psi \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m \left(b_{s,q} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r q^{2r+1} |\Psi|^{2r}}{2^{2r+1} \Gamma(r+1) \Gamma(r+2)} \right) = 0, \quad (5)$$

здесь $\Gamma(r)$ — гамма-функция, $\kappa = k c^2 / \omega_0^2$, $\zeta = y \omega_0 / c$, $\tau = z \omega_0 / c$.

Далее воспользуемся преобразованием Маделунга [18] и перепишем уравнение (5) в виде, аналогичном уравнениям гидродинамики:

$$\begin{cases} \rho_{\tau} + \frac{\partial}{\partial \zeta}(\rho u) = 0, \\ u_{\tau} + \left(u \frac{\partial}{\partial \zeta}\right) u = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \zeta}(P + P_{CNT}), \\ P = -\frac{1}{4\kappa^2} \left(\rho_{\zeta\zeta} - \frac{\rho_{\zeta}^2}{\rho} \right), \quad P_{CNT} = \end{cases} \quad (6)$$

$$= \frac{1}{2\kappa^2} \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{s=1}^m \left(b_{s,q} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r r q^{2r+1} \rho^{r+1}}{2^{2r+1} (r+1) \Gamma(r+1) \Gamma(r+2)} \right)$$

здесь $\rho = |\Psi|^2$, $u = \kappa^{-1} \partial \varphi / \partial \zeta$, P_{CNT} — слагаемое, определяемое нелинейностью, связанной с УНТ, P — аналог квантового давления. Поскольку уравнение (5) имеет вид аналогичный нелинейному уравнению Шрёдингера, которое описывает волновую функцию квантово-механической системы, поэтому и давление в подходе Маделунга принято называть квантовым. Стоит отметить, что член квантового давления также можно записать в терминах квантового потенциала Бома [19], который управляет движением квантовых частиц. Но для используемого в данной работе метода такая формулировка неудобна.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Мы будем исследовать интенсивность лазерного пучка, пропорциональную величине ρ .

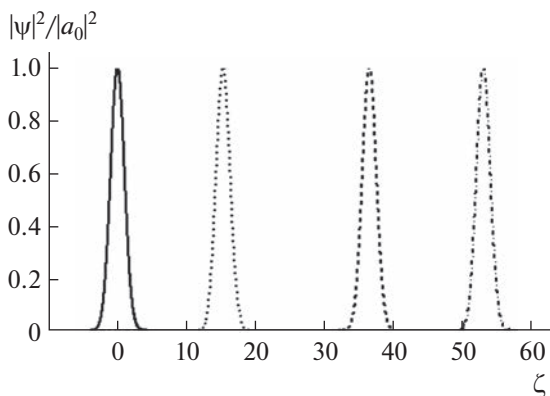


Рис. 2. Распределение интенсивности лазерного пучка в различные моменты времени: сплошная линия соответствует $\tau = 0$, точечная линия — $\tau = 15$, пунктирная линия — $\tau = 35$, штрихпунктирная линия — $\tau = 50$. Единица по оси ζ соответствует $3 \cdot 10^{-6}$ м.

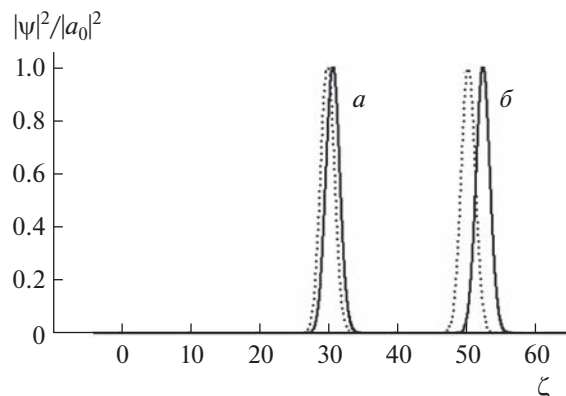


Рис. 3. Распределение интенсивности лазерного пучка для разных значений частоты поля: сплошная линия соответствует $\omega = 4 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$; точечная линия — $\omega = 8 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$; $\tau = 30$ (а), 50 (б). Единица по оси ζ соответствует $3 \cdot 10^{-6}$ м.

Уравнение (6) решалось численно методом SPH с ядром в виде, предложенным Монаганом [20, 21]:

$$W(x, h) = \frac{2}{3h} \begin{cases} 1 - 1.5 \frac{x^2}{h^2} + 0.75 \frac{x^3}{h^3}, & 0 \leq x < 1, \\ 0.25 \left(2 - \frac{x}{h}\right)^3, & 1 \leq x < 2, \\ 0, & x \geq 2. \end{cases} \quad (7)$$

Любая физическая величина $B(x)$ в методе SPH в одномерном случае будет задаваться в виде:

$$B(x) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A(x_j) W(x - x_j, h), \quad (8)$$

здесь m_j — масса j -ой частицы, которая определяется согласно формуле:

$$m_j = a_0^2 d_0 \exp\left(-\frac{2x_j^2}{l_\zeta^2}\right), \quad (9)$$

что соответствует начальному условию: $\psi(\zeta, 0) = a_0 \exp(-\zeta^2/l_\zeta^2)$, a_0 — начальная амплитуда электрического поля пучка, l_ζ — начальная полуширина пучка.

Отметим, что первое уравнение системы (6) — это закон сохранения массы, которому удовлетворяет наша дискретизация. Таким образом, необходимо решить второе уравнение системы, которое описывает движение частиц и позволяет определить ускорение каждой частицы.

Типичное распределение интенсивности лазерного пучка ($|\psi|^2/|a_0|^2$) при его распространении по образцу представлено на рис. 2. Полученные зависимости позволяют говорить о стабильном распространении электромагнитного пучка, ко-

торый проходит расстояние больше дифракционной длины.

Также нами исследовано влияние частоты электрического поля импульса на динамику пучка в нелинейной среде с УНТ. Зависимость формы лазерного пучка от координаты для разных значений величины ω показана на рис. 3.

Видно, что увеличение частоты электрического поля импульса приводит к замедлению распространения лазерного пучка в среде с углеродными нанотрубками. Ширина пучка при этом остается неизменной. Общие выводы из результатов моделирования для лазерных пучков методом SPH совпадают с полученными ранее результатами на основе решения обобщенного уравнения Шредингера при помощи неявной численной схемы [22]. Также отметим, что метод SPH устойчив и не приводит к расходимостям.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в рамках гидродинамического подхода выведено эффективное уравнение, описывающее распространение монохроматического лазерного пучка в среде с углеродными нанотрубками. Продемонстрирована возможность применения метода сглаженных частиц с использованием параллельных технологий для моделирования динамики монохроматического пучка в массиве нанотрубок. Установлено, что лазерный пучок стабильно распространяется в среде углеродных нанотрубок с незначительными потерями по амплитуде вследствие уширения. Увеличение частоты электрического поля импульса влияет на скорость распространения пучка, что проявляется в ее уменьшении.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 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.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Iijima S.* // Nature. 1991. V. 354. P. 56.
2. *Vasilevsky P.N., Savelyev M.S., Tolbin A.Yu. et al.* // Photonics. 2023. V. 10(5). P. 537.
3. *Yamashita S.* // APL Photonics. 2019. V. 4. Art. No. 034301.
4. *Wang J., Chen Y., Blau W.J.* // J. Mater. Chem. 2009. V. 19. P. 7425.
5. *Kärtner F.X.* Few-cycle laser pulse generation and its applications. Berlin: Springer, 2004.
6. *Konobeeva N.N., Fedorov E.G., Rosanov N.N. et al.* // J. Appl. Phys. 2019. V. 126. Art. No. 203103.
7. *Архипов Р.М., Архипов М.В., Пахомов А.В. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 113. № 4. С. 237; *Arhipov R.M., Arhipov M.V., Pahomov A.V. et al.* // JETP Lett. 2021. V. 113. No. 4. P. 242.
8. *Шахмуратов Р.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 117. № 3. С. 193; *Shakhmuratov R.N.* // JETP Lett. 2023. V. 117. No. 3. P. 189.
9. *Pyatkov F., Khasminskaya S., Kovalyuk V. et al.* // Beilstein J. Nanotechnol. 2017. V. 8. P. 38.
10. *Zhan J., Qin J., Tan S. et al.* // Modern Instrum. 2018. V. 7. P. 24.
11. *Gingold R.A., Monaghan J.J.* // Month. Notes. Royal. Astron. Soc. 1977. V. 181. P. 375.
12. *Вшивков В.А., Тарнавский Г.А., Неупокоев Е.В.* // Автометрия. 2002. Т. 38(4). С. 74.
13. *Cabezón R.M., García-Senz D., Figueira J.* // Astronom. Astrophys. 2017. V. 606. Art. No. A78.
14. *Shutov A., Klyuchantsev V.* // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1268. Art. No. 012077.
15. *Елецкий А.В.* // УФН. 1997. Т. 167. С. 945; *Eletsckii A.V.* // Phys. Usp. 1997. V. 40. No. 9. P. 899.
16. *Энштейн Э.М.* // ФТТ. 1977. Т. 19. С. 3456.
17. *Ахмедиев Н.Н., Анкевич А.* Солитоны. Нелинейные импульсы и пучки. М.: Физматлит, 2003.
18. *Mocz P., Succi S.* // Phys. Rev. E. 2015. V. 91. Art. No. 053304.
19. *Bohm D.* // Phys. Rev. 1952. V. 85. No. 2. P. 166.
20. *Потапов И.И., Решетникова О.В.* // Комп. иссл. и модел. 2021 Т. 13. № 5. С. 979.
21. *Monaghan J.J., Lattanzio J.C.* // Astron. Astrophys. 1985. V. 149. No. 1. P. 135.
22. *Zhukov A.V., Bouffanais R., Belonenko M.B. et al.* // Mod. Phys. Lett. B. 2013. V. 27. No. 7. Art. No. 1350045.

Simulation of the dynamics of laser beams in an array of carbon nanotubes using the hydrodynamic approach

N. N. Konobeeva^a, *, R. R. Trofimov^a, M. B. Belonenko^a

^aVolgograd State University, Volgograd, 400062 Russia

*e-mail: yana_nn@volsu.ru

We simulated the propagation of a quasi-monochromatic laser beam in a medium with carbon nanotubes. Equations describing the dynamics of laser beams in an array of carbon nanotubes are obtained based on the hydrodynamic approach for the nonlinear Schrödinger equation. This equation is solved numerically using the smoothed particle method. The evolution of the beam is analyzed depending on the frequency of the electric field.

Keywords: laser beam, carbon nanotubes, hydrodynamic approach