



www.volsu.ru

DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2023.4.1>

УДК 535.3

ББК 22.343.4



## ТРЕХМЕРНЫЕ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИЕ ОПТИЧЕСКИЕ ИМПУЛЬСЫ В ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК<sup>1</sup>

**Юлия Владимировна Двужилова**

Кандидат физико-математических наук, доцент,  
кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
nevzorova@volsu.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Россия

**Илья Сергеевич Двужиллов**

Кандидат физико-математических наук, доцент,  
кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
dvuzhilov.ilya@volsu.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Россия

**Иван Аркадьевич Челнынец**

Студент, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
nim-221\_473718@volsu.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Россия

**Тимур Бахтиярович Шилов**

Студент, кафедра судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
nim-221\_692257@volsu.ru  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Россия

**Аннотация.** На основании решения уравнений Максвелла, получено эффективное уравнение, описывающее поведение интенсивности электрического поля трехмерного предельно короткого оптического импульса в среде фотонного кристалла на основе полимерной матрицы, допированной полупроводниковыми углеродными нанотрубками. Показано численное решение полученного уравнения, представляющее временную эволюцию импульсов. Установлено устойчивое распространение импульсов в нелинейной среде фотонного кристалла на основе полимера и углеродных нанотрубок.

**Ключевые слова:** предельно короткие оптические импульсы, углеродные нанотрубки, нелинейная оптика, уравнения Максвелла, полимерная матрица.

## Введение

Под фотонным кристаллом принято понимать нелинейную периодическую среду, с периодом порядка длины волны падающего излучения. Интерес к получению периодических структур на основе углеродных нанотрубок (далее – УНТ) возник в 1998 г., после выхода работ [13; 14; 18]. Там большие массивы выровненных УНТ были впервые изготовлены на подложках с использованием химического осаждения из паровой фазы, усиленного плазмой, где контролировались диаметр и длина каждой углеродной нанотрубки. Размещение и расположение нанотрубок осуществлялось с помощью электронно-лучевой литографии для создания рисунка никелевых точек, которые служат катализатором роста нанотрубок.

Для того, чтобы УНТ оставались в вертикальном положении и, для необходимой при построении фотонного кристалла, периодичности структуры подходит полимерная матрица, внутри которой помещены нанотрубки. Отметим, что углеродные нанотрубки 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 углеродными нанотрубками [7; 8].

Интерес к коротковолновым импульсам фемтосекундной длительности не угасает уже последние несколько десятилетий [12; 15; 16], среди неопсоримых достоинств которых, особенно ценны следующие: энергия сосредоточена в ограниченной области пространства на

протяжении длительного времени; высокая направленность излучения; стабильность формы и повышенная устойчивость к внешним возмущениям [4; 9; 17].

Нелинейные оптические среды на основе полимерной матрицы, допированной углеродными нанотрубками могут широко применяться для создания источников когерентного излучения, создания источников света с переменной частотой, полностью оптических линий задержки, полностью оптических буферов и т. д. [10].

## Физическая модель и основные уравнения

Для решения поставленной задачи, при построении физической модели, использовались некоторые приближения, в частности, приближение сплошной среды; отсутствие учета электрического поля подложки; бесконечная длина УНТ (такое приближение справедливо, так как вертикальный геометрический размер импульса много меньше типичной длины нанотрубки); при решении трехмерной задачи, в силу цилиндрической симметрии, производной по углу можно пренебречь (это допустимо, так как эффект накопления заряда в какой-либо области не превышает 5 %).

Уравнения Максвелла, описывающие динамику вектор-потенциала трехмерного предельно короткого импульса, имеют вид [5; 6]:

$$\Delta A - \frac{n^2(z)}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} j_{CNT}(A) + \frac{4\pi}{c} j_{POL}(A) = 0, \quad (1)$$

где  $A$  – вектор-потенциал электрического поля коротковолнового импульса,  $n(z)$  задает периодический показатель преломления, т.е. фотонный кристалл,  $c$  – скорость света,  $j_{CNT}$  – компонента плотности тока, описывающая УНТ,  $j_{POL}$  – компонента плотности тока, описывающая полимер.

Компонента для описания плотности тока полупроводниковых УНТ, была получена, например, в работе [3] и имеет вид:

$$j_{CNT} = e \sum_{ps} v_s(p) \left( p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle C_{ps}^+ C_{ps} \rangle, \quad (2)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $p$  – квазиимпульс электрона,  $t$  – время,  $C_{ps}^+$ ,  $C_{ps}$  – операторы рождения и уничтожения электронов с квазиимпульсом  $(p, s)$ ;  $\langle \rangle$  – усреднение с неравновесной матрицей плотности  $c(t)$ . Слагаемое  $v_s(p)$  представляет собой групповую скорость электронов и имеет вид [3]:

$$v_s(p) = \frac{\partial \varepsilon_s(p)}{\partial p}, \quad (3)$$

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

где  $\gamma_0$  – интеграл перекрытия ( $\approx 2.7$  эВ),  $a$  – постоянная решетки УНТ,  $m$  – количество гексагонов по периметру нанотрубки.

Выражение, описывающее плотность тока полимерной матрицы, можно описать по аналогии с системой квантовых точек с прыжковой проводимостью [1]. Принимая во внимание выесказанное выражение для  $j_{Pol}$  будет иметь вид:

$$j_{Pol} = e \sum_{ps\sigma} v_s(p) \left( p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle C_{ps\sigma}^+ C_{ps\sigma} \rangle, \quad (4)$$

Выражения для компонент плотности тока нанотрубок (2) и полимерной матрицы (4), подставим в волновое уравнение и получим эффективное уравнение на вектор-потенциал электрического поля трехмерного предельно короткого оптического импульса, распространяющегося в нелинейной среде фотонного кристалла:

$$\Delta A - \frac{n^2(z)}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4en_{CNT}}{c} \sum_q q b_q \sin\left(\frac{qaeA}{c}\right) + \frac{4en_{Pol}}{c} \sin\left(\frac{a_{Pol}eA}{c}\right) = 0, \quad (5)$$

здесь  $n_{CNT}$  – концентрация электронов в нанотрубках;  $n_{Pol}$  – концентрация полимера в фотонном кристалле;  $a_{Pol}$  – длина связи в полимере;  $\Delta$  – лапласиан в цилиндрической системе координат. Отметим, что коэффициенты  $b_q$  имеют следующий вид:

$$b_q = \sum_{s=1} a_{sq} \int_{ZB} \cos(apq) \cdot \frac{\exp\left\{-\frac{\varepsilon_s(p)}{k_B T}\right\}}{1 + \exp\left\{-\frac{\varepsilon_s(p)}{k_B T}\right\}} \cdot dp, \quad (6)$$

где  $ZB$  – первая зона Бриллюэна;  $a_{sq}$  – коэффициенты разложения закона дисперсии электронов [11] в ряд Фурье;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура.

Начальное условие на вектор-потенциал электрического поля импульса выбиралось в виде Гаусса и имеет вид:

$$A_{t=0} = A_0 \exp\left\{-\frac{r^2}{u_r^2}\right\} \exp\left\{-\frac{z^2}{u_z^2}\right\}, \quad (7)$$

$$\left. \frac{dA}{dt} \right|_{t=0} = \frac{2Vz}{u_z^2} A_0 \exp\left\{-\frac{r^2}{u_r^2}\right\} \exp\left\{-\frac{z^2}{u_z^2}\right\},$$

где  $u_r$ ,  $u_z$  – параметры, определяющие ширину импульса вдоль осей  $z$  и  $r$ , соответственно;  $A_0$  – начальная амплитуда импульса;  $V$  – скорость входа импульса в массив ориентированных УНТ.

Эффективное уравнение (5) решалось численно, при помощи явной конечно-разностной схемы типа «крест», на равномерной сетке по времени и координате, со вторым порядком погрешности [2].

Отметим, что вектор-потенциал электрического поля импульса связан с его напряженностью посредством калибровки Кулона:

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{c \partial t}, \quad (8)$$

а квадрат напряженности электрического поля импульса пропорционален его интенсивности.

## Результаты

Временная эволюция напряженности трехмерного предельно короткого импульса при его распространении в фотонном кристалле на основе полимерной матрицы, допированной УНТ, представлена на рисунке 1. Параметры показателя преломления фотонного кристалла следующие: глубина модуляции показателя преломления – 0.25, период модуляции – 100 мкм; скорость входа импульса в фотонный кристалл –  $0.93c$ .

При временной эволюции напряженности электрического поля происходят существенные изменения формы огибающей импульса, однако, его энергия остается сосредоточенной в ограниченной пространственной области. Амплитуда импульса практически не претерпевает изменений с течением времени.

Далее показана зависимость срезов интегральной интенсивности электрического поля импульса от координаты, в различные моменты времени (рис. 2).

Исходя из рисунка 2 можно сказать, что интегральная интенсивность растет с течением времени, что имеет важное значение, например, для скорости фотоионизации электро-

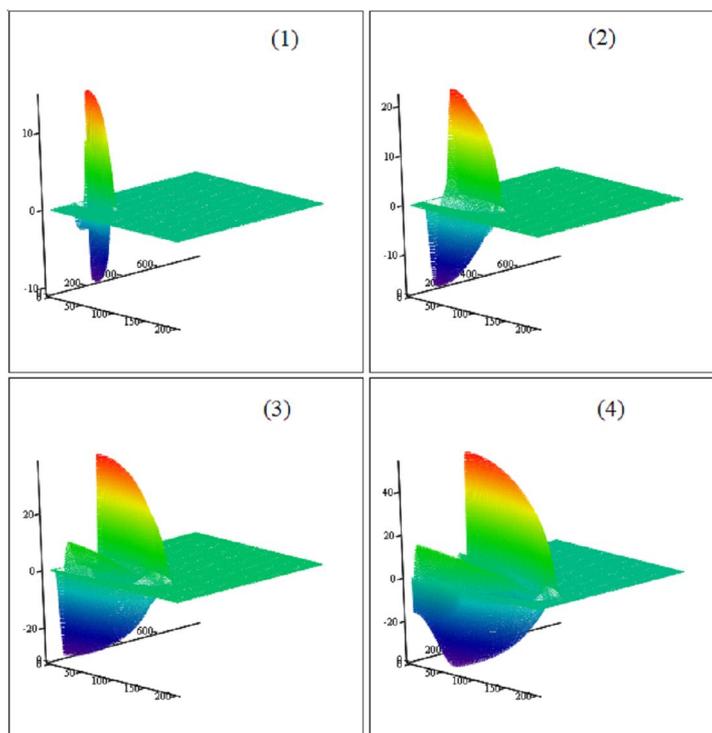


Рис. 1. Зависимость напряженности электрического поля импульса в фотонном кристалле из полимерной матрицы с УНТ в фиксированные моменты времени: (1) 5 пс, (2) 10 пс, (3) 15 пс, (4) 20 пс. По горизонтальным осям отложены координаты в мкм, по вертикальной оси отложена напряженность в В/мкм

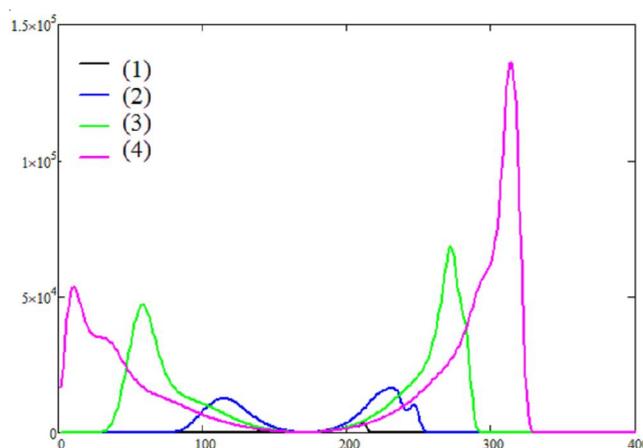


Рис. 2. Продольные срезы интегральной интенсивности электрического поля импульса в фотонном кристалле из полимерной матрицы с УНТ в фиксированные моменты времени: (1) 5 пс, (2) 10 пс, (3) 15 пс, (4) 20 пс. По горизонтальной оси отложена координата в мкм, по вертикальной оси отложена интенсивность в отн. ед.

нов в фотонном кристалле. Следует заметить, что импульс испытывает дисперсионное расщепление с течением времени.

Следующие результаты касаются зависимости свойств импульса от параметров модуляции показателя преломления фотонного кристалла (глубины и периода) и показаны на рисунке 3.

Влияние глубины модуляции показателя преломления фотонного кристалла сказывается на групповой скорости волнового пакета (с увеличением глубины модуляции групповая скорость падает) и его амплитуде (рис. 3, 1). Период модуляции показателя преломления

также оказывает влияние на групповую скорость импульса, увеличивая ее (рис. 3, 2).

Поведение импульса при различных соотношениях концентрации полимера и УНТ в фотонном кристалле показано на рисунке 4.

Из представленного рисунка 4 видно, что увеличение концентрации полимера в фотонном кристалле приводит к усилению импульса, т.е. его амплитуда увеличивается, а форма огибающей сужается. Таким образом, фотонный кристалл на основе полимерной матрицы и углеродных нанотрубок может служить устройством для усиления фемтосекундных предельно коротких импульсов.

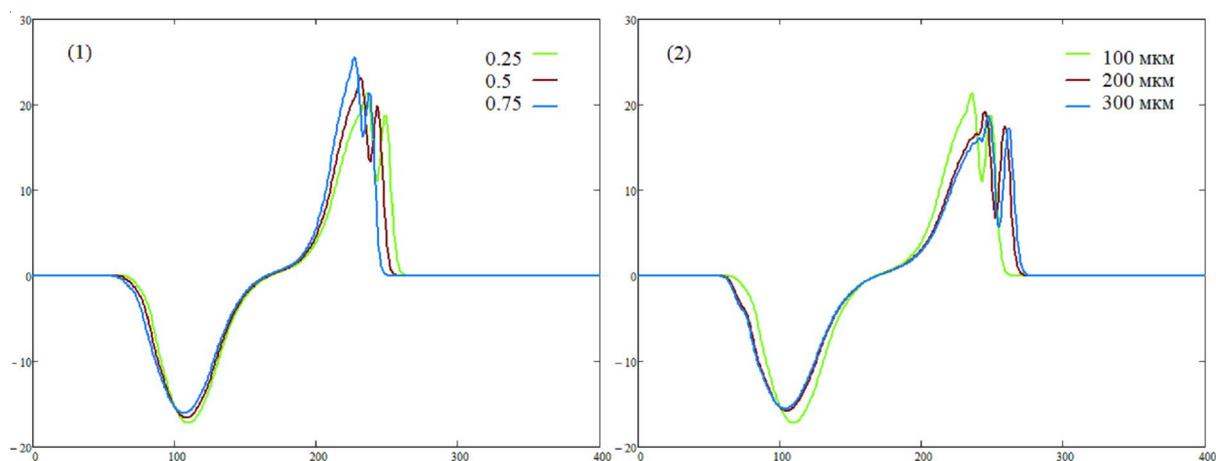


Рис. 3. Продольные срезы напряженности электрического поля импульса от координаты при его распространении в фотонном кристалле на основе полимерной матрицы и УНТ, в момент времени 10 пс, при различных значениях глубины модуляции показателя преломления (1) и периода модуляции показателя преломления (2). По горизонтальной оси отложена координата в мкм, по вертикальной оси отложена напряженность в В/мкм

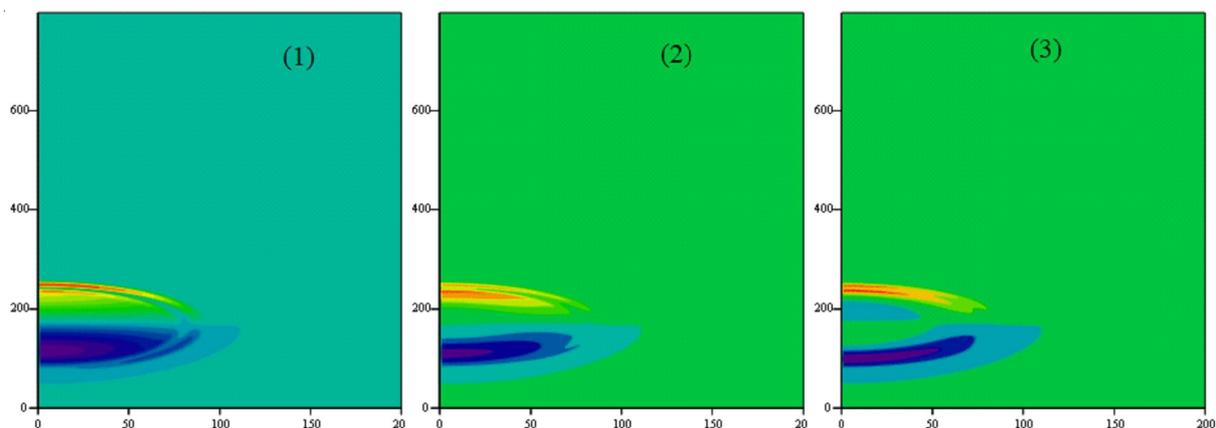


Рис. 4. Картины напряженности электрического поля импульса при его распространении в фотонном кристалле на основе полимерной матрицы и УНТ, в момент времени 10 пс, при различных значениях концентрации полимера и УНТ: (1) 1:2, (2) 1:1, (3) 2:1. По осям отложены координаты в мкм, цветовая шкала отражает напряженность

**Выводы**

Проведенное исследование динамики трехмерного предельно короткого оптического импульса в нелинейной среде фотонного кристалла на основе полимерной матрицы, допированной углеродными нанотрубками, показало, что:

1. Присутствие полимера в фотонном кристалле усиливает предельно короткий импульс.
2. Параметры модуляции показателя преломления фотонного кристалла оказывают существенное влияние на время задержки импульса, позволяя контролировать ее.

**ПРИМЕЧАНИЕ**

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема “FZUU-2023-0001”).

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Басс, Ф. Г. Высоочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками / Ф. Г. Басс, А. А. Булгаков, А. П. Тетеров. – М. : Наука, 1989. – 288 с.
2. Бахвалов, Н. С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения) / Н. С. Бахвалов. – М. : Наука, 1975. – 632 с.
3. Белоненко, М. Б. Электромагнитные солитоны в пучках углеродных зигзагообразных нанотрубок / М. Б. Белоненко, Е. В. Демущкина, Н. Г. Лебедев // ФТТ. – 2008. – Т. 50, № 2. – С. 368.
4. Кившарь, Ю. С. Оптические солитоны. От световодов к фотонным кристаллам / Г. П. Кившарь, Ю. С. Агравал. – М. : Физматлит, 2005. – 648 с.
5. Ландау, Л. Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 8. Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1982. – 624 с.
6. Ландау Л.Д. Теория поля / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1973. 509 с.
7. Патент № 2400462 С1 Российская Федерация, МПК С07С 1/00, В82В 1/00. Способ изготовления композита полимер/углеродные нанотрубки на подложке / О. А. Агеев, Ю. В. Сюрлик ; заявитель Федер. гос. образоват. учреждение высш. проф. образования «Юж. федер. ун-т». – № 2009113378/04 ; заявл. 09.04.2009 ; опубл. 27.09.2010.
8. Патент № 2417891 С1 Российская Федерация, МПК В29С 70/04, В29С 70/28, В82В 1/00. Способ изготовления полимерного композита с ориентированным массивом углеродных нанотрубок

/ Б. Г. Коноплев, О. А. Агеев, Ю. В. Сюрлик ; заявитель Федер. гос. автоном. образоват. учреждение высш. проф. образования «Юж. федер. ун-т». – № 2009131991/05 ; заявл. 24.08.2009 ; опубл. 10.05.2011.

9. Солитоны и нелинейные волновые уравнения / Р. Додд [и др.]. – М. : Мир, 1988. – 696 с.
10. Dmitriev, V. G. Handbook of Nonlinear Optical Crystals / V. G. Dmitriev, G. G. Gurzadyan, D. N. Nikogosyan. – Heidelberg : Springer Berlin, 2014. – 224 p.
11. Dresselhaus, G. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes / G. Dresselhaus, P. C. Eklund // Journal of the American Chemical Society. – 1996. – № 118. – P. 8987.
12. Fibich, G. Optical Light Bullets in a Pure Kerr Medium / G. Fibich, B. Ilan. // Optics Letters. – 2004. – № 29. – P. 887–889.
13. Growth of Highly Oriented Carbon Nanotubes by Plasma-Enhanced Hot Filament Chemical Vapor Deposition / Z. P. Huang [et al.] // Applied Physics Letters. – 1998. – Vol. 73, № 26. – P. 3845.
14. Growth of a Single Freestanding Multiwall Carbon Nanotube on Each Nanonickel Dot / Z. F. Ren [et al.] // Applied Physics Letters. – 1999. – Vol. 75, № 8. – P. 1086.
15. Mihalache, D. Multidimensional Localized Structures in Optical and Matter-Wave Media: A Topical Survey of Recent Literature / D. Mihalache // Romanian Reports in Physics. – 2017. – № 69. – P. 403.
16. Mihalache, D. Localized Structures in Optical and Matter-Wave Media: A Selection of Recent Studies / D. Mihalache // Romanian Reports in Physics. – 2021. – № 73. – P. 403.
17. Sazonov, S. V. Propagation of Few-Cycle Pulses in a Nonlinear Medium and an Integrable Generalization of the Sine-Gordon Equation / S. V. Sazonov, N. V. Ustinov // Physical Review A. – 2018. – № 98. – P. 063803.
18. Synthesis of Large Arrays of Well-Aligned Carbon Nanotubes on Glass / Z. F. Ren [et al.] // Science. – 1998. – Vol. 282. – P. 1105.

**REFERENCES**

1. Bass F.G., Bulgakov A.A., Tetervov A.P. *Vysokochastotnye svoystva poluprovodnikov so sverhreshetkami* [High-Frequency Properties of the Semiconductors with Superlattices]. Moscow, Nauka Publ., 1989. 288 p.
2. Bakhvalov N.S. *Chislennyye metody (analiz, algebra, obyknovennyye differentsialnyye uravneniya)* [Numerical Methods (Analysis, Algebra, Ordinary Differential Equations)]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 632 p.
3. Belonenko M.B., Demushkina E.V., Lebedev N.G. *Elektromagnitnye solitony v puchkakh uglerodnykh*

zigzagobraznykh nanotrubok [Electromagnetic Solitons in Bundles of Carbon Zigzag Nanotubes]. *FTT*, 2008, vol. 50, no. 2, p. 368.

4. Agrawal Yu.S., Kivshar G.P. *Opticheskie solitony. Ot svetovodov k fotonnym kristallam* [Optical Solitons. From Light Guides to Photonic Crystals]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2005. 648 p.

5. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaja fizika. T. 8. Jelektrodinamika sploshnyh sred* [Theoretical Physics. Vol. 8. Electrodynamics of Continuous Media]. Moscow, Nauka Publ., 1982. 624 p.

6. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teorija polja* [Field Theory]. Moscow, Nauka Publ., 1973. 509 p.

7. Ageev O.A., Syurik Y.V. *Sposob izgotovlenija kompozita polimer/uglerodnye nanotrubki na podlozhke* [Method of Manufacturing Polymer/Carbon Nanotube Composite on a Substrate]. Patent RF, no. 2400462, 2010.

8. Konoplev B.G., Ageev O.A., Syurik Y.V. *Sposob izgotovlenija polimernogo kompozita s orientirovannym massivom uglerodnyh nanotrubok* [Method of Manufacturing Polymer Composite with Oriented Array of Carbon Nanotubes]. Patent RF, no. 2417891, 2011.

9. Dodd R., Eilbeck J., Gibbon J., Morris H. *Solitony i nelinejnye volnovye uravnenija* [Solitons and Nonlinear Wave Equations]. Moscow, Mir Publ., 1988. 696 p.

10. Dmitriev V.G., Gurzadyan G.G., Nikogosyan D.N. *Handbook of Nonlinear Optical Crystals*. Heidelberg, Springer Berlin, 2014. 224 p.

11. Dresselhaus G., Eklund P.C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. *Journal of the American Chemical Society*, 1996, no. 118, p. 8987.

12. Fibich G., Ilan B. Optical light bullets in a pure Kerr medium. *Optics Letters*, 2004, no. 29, pp. 887-889.

13. Huang Z.P., Xu J.W., Ren Z.F., Wang J.H., Siegal M.P., Provencio P.N. Growth of Highly Oriented Carbon Nanotubes by Plasma-Enhanced Hot Filament Chemical Vapor Deposition. *Applied Physics Letters*, 1998, vol. 73, no. 26, p. 3845.

14. Ren Z. F., Huang Z.P., Wang D.Z., Wen J.G., Xu J.W., Wang J.H., Calvet L.E., Chen J., Klemic J.F., Reed M.A. Growth of a Single Freestanding Multiwall Carbon Nanotube on Each Nanonickel Dot. *Applied Physics Letters*, 1999, vol. 75, no. 8, p. 1086.

15. Mihalache D. Multidimensional Localized Structures in Optical and Matter-Wave Media: A Topical Survey of Recent Literature. *Romanian Reports in Physics*, 2017, no. 69, p. 403.

16. Mihalache D. Localized Structures in Optical and Matter-Wave Media: A Selection of Recent Studies. *Romanian Reports in Physics*, 2021, no. 73, p. 403.

17. Sazonov S.V., Ustinov N.V. Propagation of Few-Cycle Pulses in a Nonlinear Medium and an Integrable Generalization of the Sine-Gordon Equation. *Physical Review A*, 2018, no. 98, p. 063803.

18. Ren Z.F., Huang Z.P., Xu J.W., Wang J.H., Bush P., Siegal M.P., Provencio P.N. Synthesis of Large Arrays of Well-Aligned Carbon Nanotubes on Glass. *Science*, 1998, vol. 282, p. 1105.

### THREE-DIMENSIONAL EXTREMELY SHORT OPTICAL PULSES IN A PHOTONIC CRYSTAL BASED ON A POLYMER MATRIX AND CARBON NANOTUBES

**Yulia V. Dvuzhilova**

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,  
Department of Forensic and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
nevzorova@volsu.ru  
Prosp. University, 100, 400062, Volgograd, Russia

**Ilya S. Dvuzhilov**

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,  
Department of Forensic and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
dvuzhilov.ilya@volsu.ru  
Prosp. University, 100, 400062, Volgograd, Russia

**Ivan A. Chelnyntsev**

Student, Department of Forensic and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
nim-221\_473718@volsu.ru  
Prosp. University, 100, 400062, Volgograd, Russia

**Timur B. Shilov**

Student, Department of Forensic and Physical Materials Science,  
Department of Forensic and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
nim-221\_692257@volsu.ru  
Prosp. University, 100, 400062, Volgograd, Russia

**Abstract.** In order for CNTs to remain in the vertical position and for the periodicity of the structure necessary for the construction of a photonic crystal, the polymer matrix, inside which the nanotubes are placed, is suitable. Note that carbon nanotubes together with polymers, not only improve the mechanical properties of the material, but also, for example, increase electrical conductivity, thermal conductivity, heat resistance and give the nanocomposite new functional properties. It should be noted that various mechanisms for obtaining nanocomposites doped with carbon nanotubes have been developed and patented for quite a long time.

Interest in short-wave pulses of femtosecond duration has not died down for the last several decades, among the non-neoplastic advantages of which, the following are especially valuable: energy is concentrated in a limited area of space for a long time; high directivity of radiation; stability of shape and increased resistance to external perturbations.

Based on the solution of Maxwell's equations, an effective equation was obtained that describes the behavior of the electric field intensity of a three-dimensional extremely short optical pulse in the medium of a photonic crystal based on a polymer matrix doped with semiconductor carbon nanotubes. A numerical solution of the resulting equation is shown, representing the time evolution of the pulses. Stable propagation of pulses in the nonlinear medium of a photonic crystal based on a polymer and carbon nanotubes has been established.

**Key words:** extremely short optical pulses, carbon nanotubes, nonlinear optics, Maxwell's equations, polymer matrix.