

УДК: 532.783; 535.016; 53.043

Н. В. Каманина^{1,2,3*}, А. С. Тойкка^{1,2,3}, Д. Г. Квашнин^{4,5,6}

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ С WS_2 НАНОЧАСТИЦАМИ В ЭФФЕКТЕ ОГРАНИЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

¹ Санкт-Петербургский электротехнический университет («ЛЭТИ»),
ул. Профессора Попова, д. 5, 197376 Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ Курчатовский институт – Институт ядерной физики (ПИЯФ),
мкр. Орлова роща, д. 1, 188300 Гатчина, Россия

³ Государственный оптический институт им. С. И. Вавилова, отдел «Фотофизика сред с нанообъектами»,
Кадетская линия, д. 5, корп. 2, 199053 Санкт-Петербург, Россия

АО «НПО «ГОИ им. С. И. Вавилова», ул. Бабушкина, д. 36, корп. 1, 192171 Санкт-Петербург, Россия

⁴ Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН (ИБХФ РАН),
ул. Косыгина, д. 4, 119334 Москва, Россия

⁵ Российский Национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова,
ул. Островитянова, д. 1, 117997 Москва, Россия

⁶ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Ленинский проспект, д. 4, 119049 Москва, Россия

*E-mail: nvkamanina@mail.ru

В настоящей работе рассмотрены возможности проявления эффекта оптического ограничения излучения видимого и ближнего ИК-диапазона спектра на примере жидкокristаллических (ЖК) систем в сравнении с сенсibilизированными растворами, суспензиями и тонкопленочными структурами. Впервые эффект оптического ограничения излучения показан для системы: жидкий кристалл – наночастицы WS_2 , облучаемой на длине волны импульсного Er-лазера 1,54 микрона. Экспериментальные результаты подкреплены квантово-химическими расчетами. На основе проанализированных экспериментальных данных предложено эффективно использовать разработанные ЖК-ячейки с разными типами наноструктур для лазерной и биомедицинской индустрии.

Ключевые слова: органические материалы, жидкие кристаллы, WS_2 наночастицы, фуллерены, углеродные нанотрубки, механизмы ограничения.

DOI: 10.18083/LCAppl.2021.2.73

N. V. Kamanina^{1,2,3*}, *A. S. Toikka*^{1,2,3}, *D. G. Kvashnin*^{4,5,6}

LIQUID CRYSTAL SYSTEMS WITH WS₂ NANOPARTICLES IN THE OPTICAL LIMITING EFFECT

¹Saint-Petersburg Electrotechnical University («LETI»),
5 Prof. Popova St., Saint-Petersburg, 197376, Russia

²National Research Center «Kurchatov Institute» – Petersburg Institute of Nuclear Physics,
1 Orlova rostcha, Gatchina, 188300, Russia

³Laboratory for Photophysics of media with nanoobjects at Vavilov State Optical Institute,
5 Kadetskaya Liniya V.O., korpus 2, St.- Petersburg, 199053, Russia
Scientific and Production Association «Vavilov State Optical Institute»,
36/1 Babushkina St., Saint-Petersburg, 192171, Russia

⁴Emanuel Institute of Biochemical Physics of Russian Academy of Science,
4 Kosygin St., Moscow, 119334, Russia

⁵Pirogov Russian National Research Medical University,
1 Ostrovityanov St., Moscow, 117997, Russia

⁶National University of Science and Technology «MISiS»,
4 Leninsky prospect, Moscow, 119049, Russia

*E-mail: nvkamanina@mail.ru

The possibilities of displaying the effect of optical limiting of radiation in the visible and near IR-spectrum on the example of liquid crystal (LC) systems are considered and compared with sensitized solutions, suspensions and thin-film structures. For the first time, the effect of optical limiting is shown for a liquid crystal – WS₂ nanoparticle system irradiated at the wavelength of the pulsed Er-laser of 1.54 microns. Experimental results are supported by quantum-chemical simulations. Based on the analyzed experimental data, it is proposed that the developed LC cells with different types of nanostructures can be effectively used for laser and biomedical industries.

Key words: organic materials, liquid crystals, WS₂ nanoparticles, fullerenes, carbon nanotubes, optical limiting mechanisms.

Введение

Известно, что благодаря широкому использованию лазерных источников в оптоэлектронике проблема нелинейного взаимодействия оптического излучения с новыми средами является актуальной как с точки зрения фундаментального исследования физических процессов, происходящих при взаимодействии света с веществом, так и в силу большой практической значимости систем, регистрирующих мощные световые потоки, ослабляющих их, а также обеспечивающих реверсивную запись оптической информации. В этом ключе одно из приоритетных мест занимает эффект ограничения оптического излучения, обсуждение которого позволяет применять полученные знания в широ-

кой области, включая, кроме оптоэлектроники, биомедицину и образовательный процесс.

Стоит обратить внимание, что именно открытие фуллеренов, углеродных нанотрубок (УНТ), квантовых точек (КТ), других наночастиц стимулировало процесс поиска новых сред, эффективно поглощающих лазерное излучение в широком диапазоне спектра и интенсивностей засветки [1–10]. В работе [4] приведена многоуровневая система фуллерена C₆₀ и детально рассмотрен процесс обратного насыщенного поглощения как основной механизм ограничения. В публикации [7] рассмотрен эффект оптического ограничения для УНТ и композитов на их основе на разных длинах волн облучения системы, при разных длительностях импульса и плотности энергии.

Определены требования к оптическому ограничителю, приводятся эффективные функциональные материалы для этих целей (фуллерены, фталоцианины, порфирины, неорганические наночастицы, металлические комплексы и кластеры, углеродные нанотрубки, др.); выясняются механизмы ограничения. При этом более детально отмечены: механизм поглощения (многофотонное поглощение органических молекул, квантовых точек, др.), обратное насыщенное поглощение (фуллерены, фталоцианины, порфирины, др.), нелинейное рассеяние (растворы, суспензии, др.), поглощение на свободных носителях (полупроводниковые наночастицы, нанокompозиты, металл, др.).

Налицо актуальность исследования именно π -сопряженных органических систем [6, 8], включая жидкие кристаллы [5, 9, 10], допускающих моделирование физических свойств путем введения различного рода сенситизаторов (допирующих молекул и кластеров) сравнительно малой концентрации, легко проявляющих индуцированные светом нелинейные эффекты.

В настоящей работе продолжены исследования нового композита на основе системы: ЖК- WS_2 , начатые ранее и частично показанные в публикациях [11, 12]. Впервые показано проявление эффекта оптического ограничения излучения на длине волны 1,54 мкм в данном материале, в сравнении с характеристиками, описывающими нелинейное поглощение, дискутируемыми для растворов, суспензий, полимерных систем и ЖК.

Экспериментальные условия

В данном исследовании использовались ЖК-структуры 4-pentyl-4-biphenylcarbonitrile, 98 %, приобретенные в фирме *Aldrich Co*. Вручную собирались ЖК-ячейки толщиной 100 микрометров в *twist*-конфигурации. Ориентирующий рельеф был выполнен с помощью обработки ИТО-проводящего контакта поверхностной электромагнитной волной [13], таким образом, ИТО реализует две функции, а именно: ориентанта и проводника. Наночастицы WS_2 были предоставлены специалистами группы профессора *Reshef Tenne*, скрупулезно изучающими свойства данных систем [14, 15]. Размер наночастиц по диаметру был равен ~ 30 нм. Тестировались ЖК-ячейки с определенной концентрацией вводимых наночастиц WS_2 , а именно: 0,1 мас. %, для которых ранее было получено квази-сметическое состояние.

В качестве источника облучения использовался наносекундный Ег-лазер, функционирующий на длине волны 1,54 микрона; ширина пятна варьировалась от 1,5 мм до 500 микронов, чтобы более точно найти уровни насыщения без заметного разрушения материала ячейки.

Результаты и обсуждение

Результаты экспериментов по оптическому ограничению для системы ЖК- WS_2 наночастицы приведены на рис. 1, а также в сравнительной таблице [10, 16–28].

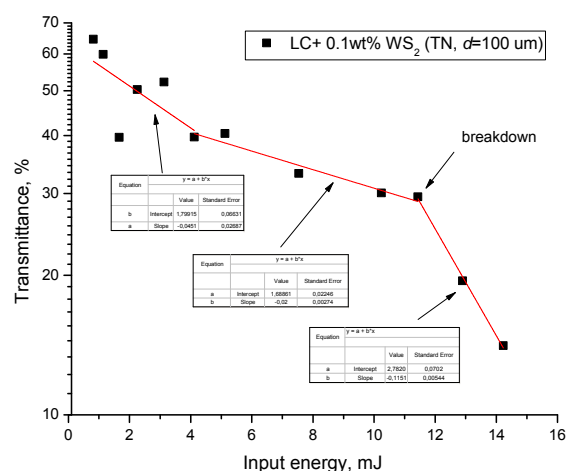


Рис. 1. Зависимость нелинейного пропускания (в логарифмической интерпретации) от энергии падающего излучения на длине волны 1,54 микрометра

Fig. 1. Dependence of the nonlinear transmission (in the logarithmic scale) on input energy density at the wavelength of 1,54 microns

Анализируя вид зависимости, представленной на рис. 1, стоит обратить внимание на тот факт, что для исследуемой системы ЖК+ WS_2 на данной телекоммуникационной длине волны наблюдается несколько нелинейных участков. При изменении падающей энергии в диапазоне 0,5–4 мДж наблюдается поглощение излучения квази-сметическим состоянием вещества; при увеличении энергии облучения от 4 до 10 мДж процесс обусловлен насыщением поглощения, вызванного функционированием комплекса между WS_2 и CN-группой жидкого кристалла; при увеличении энергии более 10 мДж происходит существенный нагрев с последующей деструкцией системы.

Таблица. Сравнительные данные по оптическому ограничению излучения, проявляемому материалами в разных спектральных диапазонах

Table. Comparative data on optical limiting of radiation displayed by the materials in different spectral ranges

Система	Начальное пропускание, %	Длина волны, нм	Длительность воздействующего импульса, нс	Порог ограничения, Дж/см ²	Порог разрушения системы, Дж/см ²	Возможные предложенные механизмы ограничения	Ссылка
Композит на основе галогенида серебра с наночастицами Ag		3800–4200	250	0,005–0,025		Плазмонный резонанс, изменение диэлектрической проницаемости за счет тепловых эффектов	[16]
2-(<i>n</i> -prolinol)-5-nitropyridine-C ₆₀	65–70	2940	500 мкс	0,9–1,0	≥1,5	Комплексообразование, индуцированное световой засветкой	[17]
Polymer-embedded carbon nanotubes		1570	68–75 fs, 85 MHz.	0,5 ~1 GW/cm ²		Обратное насыщенное поглощение, многофотонное поглощение системы полиимид-УНТ	[18]
SWCNT–polyvinylalcohol		1560	370 fs, 50 MHz)	10 ⁸ W/cm ²		Насыщенное поглощение	[19]
ЖК+WS ₂ nanotubes	65	1540	90	~1,0	~2,0	Переориентация ЖК-диполей под воздействием лазерного излучения (переход из квази-смектика в нематическую фазу), свето-индуцированное рассеяние, тепловой нагрев	Настоящая работа
Полиимид-C ₇₀	80	1315	50	0,08–0,1	~2,0	Светоиндуцированное комплексообразование, влияние эффекта двухспектрального управления	[20]
Zn-Pc-C ₆₀	75–80	1064	Наносекундный диапазон			Светоиндуцированное комплексообразование	[21]

Продолжение табл.

Carbon-black suspensions в воде и в CS_2	~80	1064	10	0,12–0,7		Термодинамические процессы в суспензиях при их нагреве лазерными импульсами с плотностью энергии ≥ 10 Дж/см ²	[22]
Carbon-black suspensions в воде и в хлороформе	≥ 90	1064	5	0,15–0,35		Нелинейное рассеяние, сублимация углеродных наночастиц	[23]
Раствор C_{60}	~85	1064	35 пс	~3		Двухфотонное поглощение	[24]
Полиимид- C_{70}	~79–85	1047	8	0,6–0,7	~2,5–3	Поглощение фуллерена C_{70} , изменение показателя преломления за счет высокочастотного эффекта Керра	[25]
Раствор C_{60}	84	710–740	10	2		Обратное насыщенное поглощение	[26]
Water soluble CdSe quantum dots (QDs)		532	7 нс, 10 Гц	0,35–0,57 GW/cm ²		Двухфотонное поглощение, влияние размера квантовых точек на поглощение	[27]
ЖК+комплекс полиимид- C_{70}		532	15	0,4–0,7		Переориентация ЖК, светоиндуцированное изменение показателя преломления, тепловые эффекты	[10, 28]

Для возможности исследования особенностей взаимодействия молекул ЖК с наночастицами WS_2 были проведены детальные квантово-химические расчеты с применением теории функционала электронной плотности, реализованной в программном пакете VASP [29–31]. В связи с тем, что типичные размеры получаемых наночастиц более 5 нм, в качестве поверхности наночастиц был предложен для рассмотрения монослой WS_2 . Расчеты были проведены в рамках функционала обобщенного градиента в параметризации PBE [32]. В качестве базиса был использован метод присоединенных плоских волн [33]. Из-за большого размера рассматриваемой системы расчет равновесной атомной геометрии проводился только в Γ -точке первой зоны Бриллюэна. Оптимизация атомной структуры проводилась до тех пор, пока межатомные силы не становились меньше $0,05 \text{ эВ/\text{\AA}}$. Чтобы избежать нежелательного взаимодействия между структурами

вдоль неперiodического направления, был выбран вакуумный промежуток 15 \AA . Рассматриваемая модель состояла из 147 атомов в слое WS_2 и 44 атомов в составе молекулы ЖК.

В первой части было проведено исследование по определению энергетически выгодной конфигурации присоединения ЖК-молекулы на поверхности WS_2 . На рисунке 2 показаны атомные структуры рассмотренных двух конфигураций. Анализ данных показал на возможность и планарного, и гомеотропного расположения ЖК-молекулы на поверхности WS_2 (полученные значения энергии связывания составили $-1,04 \text{ эВ/мол}$ и $-0,19 \text{ эВ/мол}$ для планарного и гомеотропного расположения), что определенно вносит существенное рассогласование в однородность системы и проявляется в изменении поглощения (дополнительное индуцированное рассеяние) при лазерном воздействии.

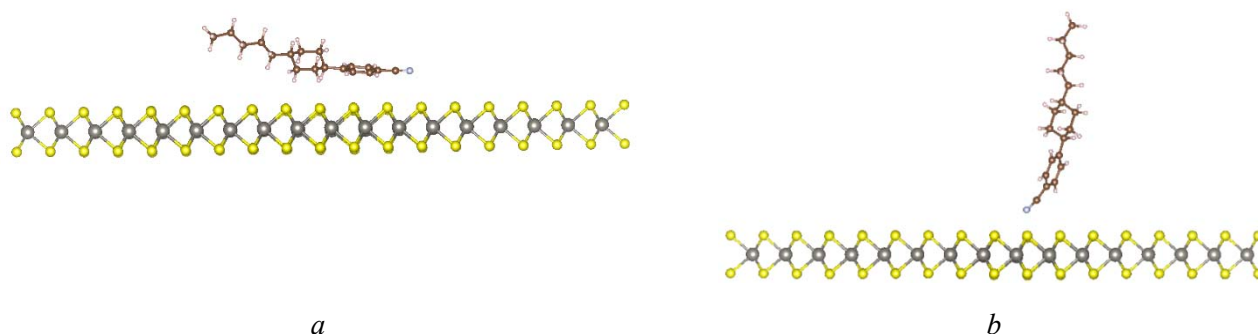


Рис. 2. Планарное (a) и гомеотропное (b) расположение молекулы нематического ЖК по отношению к стенке наночастицы WS_2

Fig. 2. Planar (a) and homeotropic (b) arrangement of the nematic LC molecule with respect to the wall of WS_2 nanoparticle

Возвращаясь к данным таблицы, стоит сказать, что ЖК-системы входят в число материалов, которые возможно использовать для проявления эффекта оптического ограничения излучения, причем в зависимости от концентрационного соотношения вводимых наночастиц, а также от конфигурации сборки ячеек можно варьировать уровнями падающей энергии, что, безусловно, позволит создавать многоканальные ограничители лазерного излучения.

Заключение

Анализируя результаты настоящего краткого сообщения, можно выделить следующие моменты:

- Впервые на телекоммуникационной длине волны $1,54 \text{ мкм}$ рассмотрен эффект оптического ограничения излучения в системе жидкий кристалл–нанотрубки WS_2 . Показаны уровни ограничения и выявлен порог деструкции материала в данной конфигурации ячеек толщиной 100 мкм .
- Приведены сравнительные данные по порогам насыщения и разрушения материалов, основанных на изучении растворов, суспензий, тонких пленок и ЖК, что полезно при выборе конкретной функциональной композиции при решении специальной технической задачи.
- Приведены сравнительные данные (см. таблицу) по разным механизмам нелинейного погло-

щения лазерного излучения, ответственные за проявление технического эффекта ограничения в среднем, ближнем ИК- и видимом диапазонах оптического спектра.

- Экспериментальные результаты хорошо согласуются с квантово-химическим моделированием, проведенным в программном пакете VASP.

- Поскольку эффект оптического ограничения излучения ярко визуализируется в эксперименте, то подобные исследования полезны для обучения студентов вузов РФ при прохождении ими практики в научных центрах, использующих лазерные источники для своих работ.

Авторы благодарят Prof. R. Tenne и Dr. A. Zak за синтез наночастиц WS₂ и предоставление для изучения их свойств в ЖК-матрице. Авторы выражают признательность коллегам по лаборатории (АО «ГОИ им. С. И. Вавилова» / АО «НПО ГОИ им. С. И. Вавилова», Санкт-Петербург), а также коллективу ПИЯФ (Гатчина) за полезные комментарии к работе. Частично результаты данных исследований были доложены на научно-техническом семинаре в Курчатовском институте – ПИЯФ (Гатчина) в 2020 г. Авторы также благодарны финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 01201253304).

Список литературы / References

1. Tutt L.W., Boggess T.F. A review of optical limiting mechanisms and devices using organics, fullerenes, semiconductors and other materials. *Progress in Quantum Electronics*, 1993, **17** (4), 299–333.
2. Lindle J.R., Pong R.G.S., Bartoli F.J., Kafafi Z.H. Nonlinear optical properties of the fullerenes C₆₀ and C₇₀ at 1,064 μm. *Phys. Rev. B*, 1993, **48** (13), 9447–9451.
3. Liu Huimin, Taheri B., Weiyl Jia. Anomalous optical response of C₆₀ and C₇₀ in toluene. *Phys. Rev. B*, 1994, **49** (15), 10166–10169.
4. Couris S., Koudoumas E., Ruth A.A., and Leach S. Concentration and wavelength dependence of the effective third-order susceptibility and optical limiting of C₆₀ in toluene solution. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 1995, **8**, 4537–4554.
5. Грязнова М. В., Данилов В. В., Каманина Н. В., Смирнов В. А., Федоров С. В. Ячейки Бормана как «оптические переключатели» // *Онм. и спектр.* 1998. Т. 85, № 6. С.1020–1023. [Gryaznova M.V., Danilov V.V., Kamanina N.V., Smirnov V.A., Fedorov S.V. Bormann cells as "optical switches". *Optics and Spectroscopy*, 1998, **85** (6), 1020–1023 (in Russ.)].
6. Белоусов В. П., Белоусова И. М., Гавронская Е. А., Григорьев В. А., Данилов О. Б., Калинин А. Г., Краснополяский В. Е., Смирнов В. А., Соснов Е. Н. О механизме оптического ограничения лазерного излучения фуллеренсодержащими средами // *Онм. и спектр.* 1999. Т. 87, № 5. С. 845–852. [Belousov V. P., Belousova I. M., Gavronskaya E. A., Grigoriev V. A., Danilov O. B., Kalintsev A. G., Krasnopolsky V. E., Smirnov V. A., Sosnov E. N. On the mechanism of optical restriction of laser radiation by fullerene-containing media. *Optics and Spectroscopy*, 1999, **87** (5), 845–852.
7. Wang Jun, Chen Yu and Blau Werner J. Carbon nanotubes and nanotube composites for nonlinear optical devices. *J. Mater. Chem.*, 2009, **19** (40), 7425–7443. DOI: 10.1039/B906294G.
8. Belousova I.M., Belousov V.P., Danilov O.B., Grigor'ev V.A., Kalintsev A.G., Zgonnik V.N., Kamanina N.V., Zhevlakov A.P., Kris'ko A.V., Mironova N.G., Sosnov E.N., Gavronskaya E.A., Smirnov V.A., Yur'ev M.S., Ponomarev A.N., Yashin V.E. Photodynamics of nonlinear fullerene-containing media. *Proceed. SPIE*, 2001, 4353, 75–83.
9. Kamanina N.V., Belousova I.M., Bagrov I.V. Karporskii, L.N., Tul'skii S.A., Zhevlakov A.P. Fullerene-doped polyimide effective optical power limiting materials in visible and IR ranges. *Proceed. SPIE*, 2001, 4353, 115–120.
10. Kamanina N., Putilin S., Stasel'ko D. Nano-, pico- and femtosecond study of fullerene-doped polymer-dispersed liquid crystals: holographic recording and optical limiting effect. *Synthetic Metals*, 2002, **127** (1–3), 129–133.
11. Каманина Н. В., Зубцова Ю. А., Тойкка А. С., Лихоманова С. В., Zak A., Tenne R. Временные характеристики жидкокристаллической ячейки с наночастицами WS₂: сенсibilизация мезофазы и особенности рельефа // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2020. Т. 20, № 1. С. 34–40. [Kamanina N.V., Zubtsova Yu.A., Toikka A.S., Likhomanova S.V., Zak A., Tenne R. Temporal characteristics of a liquid crystal cell with WS₂ nanoparticles: mesophase sensitization and relief features. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2020, **20** (1), 34–40. (in Russ.). DOI: 10.18083/LCApp.2020.1.34].
12. Каманина Н. В., Зубцова Ю. А., Кузиков П. В., Zak A., Tenne R. Корреляционные зависимости между спектральными, временными и ориентационными параметрами жидкокристаллических ячеек с WS₂ наночастицами // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2020. Т. 20, № 3. С. 41–48. [Kamanina N.V., Zubtsova Yu.A., Kuzhakov P.V., Zak A., Tenne R. Correlations between spectral, temporal, and orientation parameters of liquid crystal cells with WS₂ nanoparticles. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2020, **20** (3), 41–48. (in Russ.). DOI: 10.18083/LCAppl.2020.3.41].

13. Васильев П. Я., Каманина Н. В. Фуллеренсодержащий жидкокристаллический пространственно-временной модулятор света с обработанным поверхностной электромагнитной волной проводящим покрытием // *Письма в ЖТФ*. 2007. Т. 33, № 1. С. 17–22. [Vasilyev P.Ya., Kamanina N.V. Fullerene-containing liquid crystal spatiotemporal light modulators with surface-electromagnetic-wave-treated conducting layers. *Tech. Phys. Lett.*, 2007, **33** (1), 8–10].
14. Tenne R., Margulis L., Genut M., Hodes G. Polyhedral and cylindrical structures of tungsten disulphide. *Nature*, 1992, **360**, 444–446.
15. Yadgarov L., Visic B., Abir T., Tenne R., Polyakov A.Yu., Levi R., Dolgova T.V., Zubyuk V.V., Fedyanin A.A., Goodilin E.A., Ellenbogen T., Tenne R., Oron D. Strong light–matter interaction in tungsten disulfide nanotubes. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, **20**, 20812–20820. DOI: 10.1039/c8cp02245c.
16. Багров И. В., Жевлаков А. П., Михеева О. П., Сидоров А. И., Судариков В. В. Оптическое ограничение лазерных импульсов в спектральной области 3,8–4,2 микрона композитом с наночастицами серебра // *Письма в ЖТФ*. 2002, Т. 28, № 13. С. 40–43. [Bagrov I.V., Zhevlaikov A.P., Mikheeva O.P., Sidorov A.I., Sudarikov V.V. Optical restriction of laser pulses in the spectral region of 3,8–4,2 microns by a composite with silver nanoparticles. *Tech. Phys. Lett.*, 2002, **28** (13), 40–43].
17. Каманина Н. В., Искандаров М. О., Никитичев А. А. Оптические исследования системы 2-(*n*-пролинол)-5-нитропиридин–фуллерен в среднем ИК-диапазоне спектра // *Письма в ЖТФ*. 2003. Т. 29, № 8. С. 62–68. [Kamanina N.V., Iskandarov M.O. and Nikitichev A.A. Optical properties of 2-(*p*-prolinol)-5-nitropyridine–fullerene system in the middle infrared range. *Tech. Phys. Lett.*, 2003, **29** (4), 337–339].
18. Schibli T.R., Minoshima K., Kataura H., Itoga E., Minami N., Kazaoui S., Miyashita K., Tokumoto M., Sakakibara Y. Ultrashort pulse-generation by saturable absorber mirrors based on polymer-embedded carbon nanotubes. *Optics Express*, 2005, **13** (20), 8025–8031.
19. Rozhin Aleksey G., Sakakibara Youichi, Tokumoto Madoka, Kataura Hiromichi, Achiba Yohji. Near-infrared nonlinear optical properties of single-wall carbon nanotubes embedded in polymer film. *Thin Solid Films*, 2004, **464–465**, 368–372.
20. Каманина Н. В., Багров И. В., Белоусова И. М., Жевлаков А. П. О возможности управления эффектом оптического ограничения маломощным световым сигналом // *Опт. и спектр.* 2001. Т. 91, № 1. С. 5–7. [Kamanina N.V., Bagrov I.V., Belousova I.M., Zhevlaikov A.P. The possibility of controlling the optical limiting effect by a weak light signal. *Opt. and Spectr.*, 2001, **91** (1), 1–2. DOI: 10.1134/1.1388315].
21. Shirk J.S., Pong R.G.S., Bartoli F.J., Snow A.W. Optical limiter using a lead phthalocyanine. *Appl. Phys. Lett.*, 1993, **63** (14), 1880–1882.
22. Riehl D., Fougéanet F. Thermodynamic modeling of optical limiting mechanisms in carbon-black suspensions (CBS). *Nonlinear Optics*, 1999, **21** (1–4), 391–398.
23. Vivien L., Riehl D., Lancon P., Hache F., Anglaret E. Pulse duration and wavelength effects on the optical limiting behavior of carbon nanotube suspensions. *Optics Letters*, 2001, **26** (4), 223–225.
24. Ганеев Р. А., Кулагин И. А., Каманина Н. В., Ряснянский А. И., Тугушев Р. И., Усманов Т. Исследование нелинейно-оптических характеристик различных сред методами Z-сканирования и генерации третьей гармоники лазерного излучения // *Квантовая электроника*. 2002. Т. 32, № 9. С. 781–788. [Ganeev R.A., Kulagin I.A., Kamanina N.V., Rysnyansky A.I., Tugushev R.I., Usmanov T. Study of nonlinear optical characteristics of various media by the methods of z-scan and third harmonic generation of laser radiation. *Quantum Electronics*, 2002, **32** (9), 781–788. DOI:10.1070/QE2002v032n09ABEH002291].
25. Каманина Н. В., Искандаров М. О., Никитичев А. А. Оптические исследования системы полиимид–фуллерен в ближнем ИК-диапазоне спектра ($\lambda = 1047$ nm) // *Письма в ЖТФ*. 2003. Т. 29, № 16. С. 29–38. [Kamanina N.V., Iskandarov M.O., Nikitichev A.A. Optical properties of a polyimide–fullerene system in the near infrared range ($\lambda = 1047$ nm). *Tech. Phys. Lett.*, 2003, **29** (8), 672–675. DOI:10.1134/1.1606785].
26. Mishra S.R., Rawat H.S., Mehendale S.C. Reverse saturable absorption and optical limiting in C₆₀ solution in the near-infrared. *Appl. Phys. Lett.*, 1997, **71** (1), 46–48.
27. Augustine Anju K., Mathew S., Radhakrishnan P., Nampoori V.P.N., Kailasnath M. Size Dependent Optical Nonlinearity and Optical Limiting Properties of Water Soluble CdSe Quantum Dots. *Journal of Nanoscience*, 2014, **2014**, Article ID 623742 (7 pages). DOI: 10.1155/2014/623742.
28. Каманина Н. В., Капорский Л. Н. Оптическое ограничение лазерного излучения в диспергированных жидкокристаллических структурах с фуллеренами // *Письма в ЖТФ*. 1999. Т. 25, № 7. С. 18–24. [Kamanina N.V., Kaporskii L.N. Optical limiting of laser radiation in dispensed liquid-crystal structures with fullerenes. *Tech. Phys. Lett.* 1999, **25** (4), 257–259.
29. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab-initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 1996, **54** (16), 11169–11186.

30. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Comput. Mater. Sci.*, 1996, **6** (1), 15–50.
31. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B*, 1993, **47** (1), 558–561.
32. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77** (18), 3865–3868.
33. Blöchl P.E. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*, 1994, **50**, 17953–17979.

Поступила 23.04.2021 г.

Received 23.04.2021

Принята 17.05.2021 г.

Accepted 17.05.2021