

Поверхностные плазмон-поляритоны в упорядоченных массивах металлических углеродных нанотрубок с диэлектрическим наполнением

© В.А. Зайцев¹, С.А. Афанасьев¹, С.Г. Моисеев^{1,2}, И.А. Рожлейс¹, Д.Г. Санников^{1,¶}, А.В. Сыса^{1,3}, Ю.П. Шаман^{1,3}

¹ Ульяновский государственный университет,
Ульяновск, Россия

² УФИРЭ им. В.А. Котельникова РАН,
Ульяновск, Россия

³ НПК „Технологический центр“,
Москва, Россия

¶ e-mail: sannikov-dg@yandex.ru

Поступила в редакцию 30.04.2025 г.

В окончательной редакции 12.07.2025 г.

Принята к публикации 24.10.2025 г.

Исследованы дисперсионные характеристики поверхностных плазмон-поляритонов (ППП) терагерцевого диапазона частот в упорядоченном массиве одно- и двустенных углеродных нанотрубок, погруженных в диэлектрическую среду. Аналитически получены дисперсионные соотношения для ППП в уединённой нанотрубке с диэлектрическим окружением, используемые далее для верификации решений, полученных с помощью численного моделирования. Для массивов разной плотности численным моделированием получены частотные зависимости постоянных распространения и затухания, коэффициента замедления ППП. Установлено, что в плотных массивах УНТ постоянные распространения и длина пробега ППП принимают значения меньше, чем в уединенных нанотрубках. Коэффициент замедления возрастает с увеличением диаметра нанотрубок и диэлектрической проницаемости вмещающей среды.

Ключевые слова: одностенные и двустенные углеродные нанотрубки, плотный массив нанотрубок, поверхностные плазмон-поляритоны, замедление поверхностной волны.

DOI: 10.61011/OS.2025.10.61950.7957-25

Введение

К настоящему времени созданы различные технологии получения упорядоченных массивов углеродных нанотрубок (УНТ) с контролируемыми параметрами [1,2]. Одним из способов улучшения функциональных характеристик таких массивов является размещение УНТ в прозрачной диэлектрической матрице из полимерных материалов [3,4]. Такие структуры представляют большой практический интерес для генерации и управления электромагнитным излучением. В частности, УНТ могут поддерживать распространение сверхмедленных (с фазовой скоростью на два порядка величины меньше скорости света в вакууме) поверхностных плазмон-поляритонов (ППП) [5,6]. В условиях, когда фазовая скорость ППП близка к скорости дрейфа свободных носителей заряда, взаимодействие поверхностной волны с током, протекающим по стенкам УНТ, может приводить к её усилению [7]. На основе этого эффекта могут быть созданы компактные источники когерентного терагерцевого излучения [8]. В настоящей работе исследуются дисперсионные характеристики ППП терагерцевого диапазона частот в массивах одно- и двустенных УНТ (ОУНТ и ДУНТ) с учётом омических потерь и

наличия вмещающей диэлектрической среды. В качестве базисной модели выбран упорядоченный массив параллельных нанотрубок с идентичными параметрами.

Дисперсионное уравнение для поверхностных плазмон-поляритонов в одиночных одно- и двустенных нанотрубках

Решая волноводную электродинамическую задачу, можно получить дисперсионное соотношение, связывающее частоту ω ППП с его постоянной распространения (ПР) для одиночных нанотрубок. Для начала рассмотрим более общий случай нанотрубки с двумя стенками (ДУНТ).

Моделью ДУНТ служит система двух коаксиальных цилиндров радиусами a_1 и $a_2 > a_1$ с типичным расстоянием между стенками 0.34 нм. Полагается, что длина ДУНТ $L \gg a_{1,2}$, поэтому она рассматривается как бесконечно протяжённая. Задача решается в цилиндрической системе координат (r, φ, z) , где r — радиальная координата, φ — азимутальный угол, z — координатная ось, направленная вдоль оси симметрии ДУНТ. Области

внутри ($r < a_1$) и снаружи ($r > a_2$) нанотрубки в общем случае заполнены прозрачными диэлектриками с проницаемостями ϵ_1 и ϵ_2 соответственно.

В настоящей работе ограничимся анализом фундаментальной ППП моды, для которой отсутствует зависимость компонент волновых полей от азимутального угла φ . В терагерцевом диапазоне частот эта мода не имеет отсечки, и она характеризуется невысокими значениями коэффициента затухания (длина пробега может составлять микрометры) [8,9]. Стенки ДУНТ являются электропроводящими и характеризуются тензором поверхности проводимости $\hat{\sigma}_j$ ($j = 1, 2$ — номер стенки), аксиальная компонента которого имеет следующий вид [6]:

$$\sigma_{zz,j}^{(0)} = \sigma_0 \omega \tilde{\omega} / \Omega, \quad (1)$$

где $\sigma_0 = 2iV_F e^2 / (\pi^2 \hbar a_j \tilde{\omega})$, $\Omega = \omega \tilde{\omega} - V_F^2 q^2 / 2$, q — ПР поверхности волны, $\tilde{\omega} = \omega + i\tau^{-1}$, τ — время релаксации, V_F — скорость Ферми ($V_F = 10^6$ м/с), e — элементарный заряд, \hbar — постоянная Планка. Выражение (1) учитывает диссипативные потери и пространственную дисперсию ППП в УНТ [6].

Для нахождения направляемых мод в одиночной ДУНТ решается волноводная электродинамическая задача с учётом граничных условий на её стенках. Решения уравнения Гельмгольца для фундаментальной моды записываются через модифицированные функции Бесселя I_0 и K_0 нулевого порядка. В приближении $q \gg k_0$ ($k_0 = \omega/c$, c — скорость света в вакууме) детерминантное уравнение для этой моды имеет следующий вид:

$$\det \begin{pmatrix} \Omega M_{11} - \omega_{p1}^2(qa_1) I_0^2(qa_1) & \Omega M_{12} - \omega_{p1}^2(qa_1) K_0(qa_1) I_0(qa_1) \\ \Omega M_{21} - \omega_{p2}^2(qa_2) I_0(qa_2) K_0(qa_2) & \Omega M_{22} - \omega_{p2}^2(qa_2) K_0^2(qa_2) \end{pmatrix} = 0, \quad (2)$$

где $\omega_{pj}^2 = 2V_F e^2 / (\pi 2 \hbar \epsilon_0 a_j^2)$ — квадрат плазменной частоты для стенки радиуса a_j ,

$$M_{12} = \epsilon_1 K_0(qa_1) I'_0(qa_1) - I_0(qa_1) K'_0(qa_1),$$

$$M_{21} = K_0(qa_2) I'_0(qa_2) - \epsilon_2 I_0(qa_2) K'_0(qa_2),$$

$$M_{11} = (\epsilon_1 - 1) I_0(qa_1) I'_0(qa_1),$$

$M_{22}(1 - \epsilon_2) K_0(qa_2) K'_0(qa_2)$, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная. Уравнение (2) сводится к биквадратному уравнению относительно частоты ω , два положительных корня которого соответствуют двум ветвям дисперсионной зависимости для ППП в ДУНТ — высокочастотной (ВЧ) и низкочастотной (НЧ).

Аналогично может быть рассмотрен более простой для анализа случай одиночной нанотрубки, содержащей только одну цилиндрическую стенку радиуса a , обладающую проводимостью вида (1). В отличие от случая ДУНТ дисперсионная зависимость для ОУНТ содержит только одну дисперсионную ветвь, описываемую соотношением

$$\omega \tilde{\omega} = V_F q^2 / 2 + \omega_p^2 q a I_0(qa) K_0(qa) / C. \quad (3)$$

Параметр $C = C_1 + C_2$ является положительной величиной, поскольку при $\epsilon_{1,2} > 0$, $C_1 = \epsilon_1 I'_0(qa) K_0(qa) > 0$, $C_2 = -\epsilon_2 I_0(qa) K'_0(qa) > 0$. Анализ уравнения (3) показывает, что при фиксированном значении q увеличение ϵ_1 или ϵ_2 приводит к уменьшению частоты ω ППП и, как следствие, увеличению коэффициента замедления $K_{dec} = q'/k_0 = q' c / \omega$, где q' — действительная часть ПР ППП. На заданной частоте ω величина K_{dec} минимальна при $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$, т.е. для ОУНТ в воздухе. Следует отметить, что на терагерцевых частотах слагаемое C_1 пренебрежимо мало по сравнению с C_2 , и поскольку $C_1 \sim \epsilon_1$ и $C_2 \sim \epsilon_2$, оптические свойства материала внутри ОУНТ практически не влияют на дисперсионные характеристики ППП.

Дисперсионные характеристики поверхностных плазмон-поляритонов в массивах одно- и двустенных нанотрубок

Рассмотрим бесконечный упорядоченный массив ОУНТ с квадратной элементарной ячейкой, в которой центры соседних нанотрубок равнодistantы друг от друга на расстояние d (период массива). Для расчета дисперсионных характеристик ППП воспользуемся электродинамическим моделированием методом конечных элементов, реализованном в пакете программ Comsol Multiphysics. Для элементарной ячейки со стороной d , включающей одну нанотрубку, применим периодические граничные условия, что позволяет учесть влияние соседних нанотрубок на характеристики ППП.

Результаты численного моделирования представлены на рис. 1 в виде зависимостей действительной и минимой компонент ПР $q = q' + iq''$ фундаментальной моды ППП от периода массива d . Зависимости построены для массивов ОУНТ в разных вмещающих средах (воздух, полиэтилен) на нескольких частотах терагерцевого диапазона при $\tau = 10^{-12}$ с [10]. Недопустимые значения межчастичного расстояния d (менее внешнего диаметра нанотрубки $2a$) показаны заштрихованными областями в левой части графиков. Здесь и далее используются следующие нормировочные параметры: $a_0 = 1$ нм, $\omega_0 = (e/\pi a_0)(2V_F/\epsilon_0 \hbar)^{1/2} \approx 2.36 \cdot 10^{15}$ с⁻¹.

Из представленных зависимостей видно, что для разреженных массивов ($d \gg 2a$) ПР практически не зависит от расстояния между ОУНТ, поскольку поверхность электромагнитные волны даже соседних нанотрубок взаимодействуют слабо и, как следствие, их дисперсионные характеристики остаются такими же, как в уединённых нанотрубках. В этом случае численные решения, представленные на рис. 1, совпадают с аналитическими решениями уравнения (3), полученными для уединённых ОУНТ.

В случае плотных массивов, для которых $d < 2(a + \Delta)$, где $\Delta \approx 2/q'$ — масштаб затухания эманационного поля снаружи нанотрубки, наблюдается

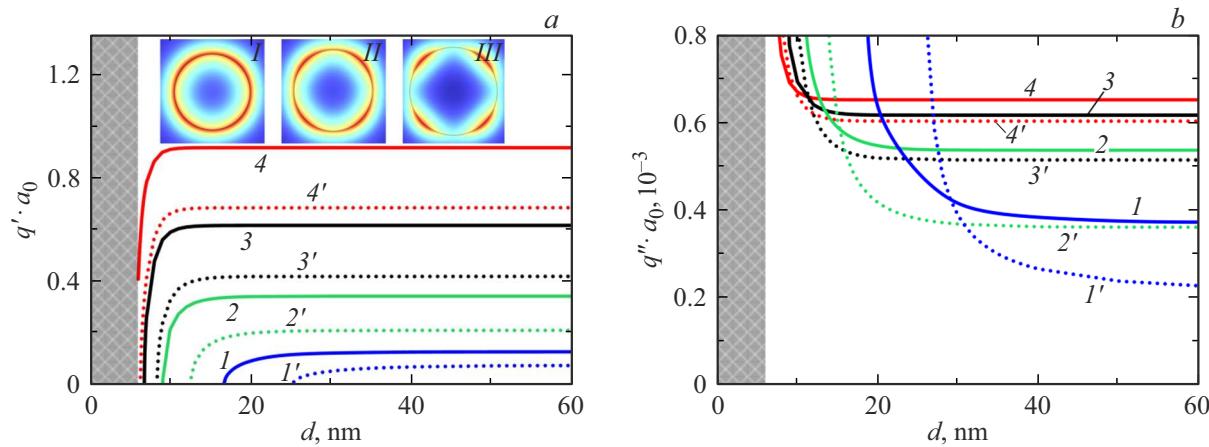


Рис. 1. Зависимости действительной (*a*) и мнимой (*b*) частей компонент ПР фундаментальной моды ППП от периода массива ОУНТ для разных диэлектрических проницаемостей сред: $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ (воздух) — пунктирные кривые $I'-4'$, $\epsilon_1 = 1$ и $\epsilon_2 = 4$ (полиэтилен) — сплошные кривые $1-4$. Пары кривых 1 и $1'$, 2 и $2'$, 3 и $3'$, 4 и $4'$ отвечают частотам (0,1, 0,2, 0,3, 0,4) ω_0 соответственно. Радиус ОУНТ $a = 3$ нм. Вставка на панели (*a*): модуль электрического поля фундаментальной моды на частоте $0.4\omega_0$ при $d = 10$ нм (*I*), 9 нм (*II*), 8 нм (*III*).

изменение дисперсионных характеристик ППП. Вставка на рис. 1, *a* иллюстрирует процесс трансформации фундаментальной моды в массиве ОУНТ по мере увеличения его плотности, проявляющийся в формировании „лепестковой“ структуры (азимутальной зависимости) распределения волнового поля. При уменьшении d уменьшается действительная и увеличивается мнимая части ПР, что означает уменьшение коэффициента замедления и длины пробега ППП.

Из рис. 1 также видно, что наличие внешней среды с $\epsilon_2 > 1$ приводит к увеличению действительной и мнимой (за исключением очень узкого диапазона значений периода d вблизи отсечки для массива нанотрубок в воздухе на той же частоте ППП) частей ПР ППП, а также к расширению (в сторону меньших значений) диапазона значений d , для которых могут существовать ППП в массиве ОУНТ.

На рис. 2 представлены дисперсионные зависимости ПР и коэффициента замедления K_{dec} для фундаментальной ППП моды в массивах ОУНТ и ДУНТ, а также в уединённых нанотрубках (случай $d \rightarrow \infty$). В первую очередь отметим общие черты этих зависимостей для нанотрубок двух типов. В плотных массивах имеются низкочастотные области отсечки (кривые 2–4 и $2'-4'$), которые отсутствуют в случае уединённых нанотрубок (кривые 1 и $1'$). При наличии вмещающей среды с $\epsilon_2 > 1$ частотная область существования ППП расширяется, коэффициент замедления и длина пробега ППП уменьшаются (за исключением узкого диапазона частот вблизи частоты отсечки для массива нанотрубок в воздухе).

Дисперсионные зависимости для массивов ДУНТ (рис. 2, $d-f$) имеют особенности, связанные с наличием двух дисперсионных ветвей. Для ВЧ ветви дисперсионные свойства ППП аналогичны наблюдаемым для

массива ОУНТ, однако коэффициент замедления поверхностной волны в массиве ДУНТ принимает значительно меньшие значения. НЧ ветвь фундаментальной моды характеризуется высокой степенью локализации поля в области между стенками нанотрубки, что приводит к слабой чувствительности её дисперсионных характеристик к плотности массива и диэлектрической проницаемости окружающей среды. Локализация поля моды внутри нанотрубки также приводит к отсутствию отсечки в плотных массивах практически вплоть до минимально возможного значения периода $d \approx 2a$. НЧ ветви характеризуются значительно более высоким замедлением ($K_{dec} > 300$ в рассматриваемом диапазоне частот), но меньшей длиной пробега по сравнению как с модой массива ОУНТ, так и с ВЧ ветвью массива ДУНТ.

Заключение

Проведено численное моделирование дисперсионных характеристик ППП в плотных упорядоченных массивах ОУНТ и ДУНТ с учётом взаимного влияния электромагнитных полей нанотрубок. Аналитически получено дисперсионное уравнение для ППП в уединённых нанотрубках, учитывающее диэлектрическую проницаемость вмещающей среды. Для разреженных массивов УНТ показано согласование результатов численного и аналитического расчетов. Установлено, что в плотных массивах нанотрубок взаимодействие посредством эванесцентных полей приводит к уменьшению ПР и длины пробега, а также появлению частотной отсечки для фундаментальной моды ППП. Показано также, что при наличии вмещающей диэлектрической среды фазовая скорость ППП снижается, а ППП могут быть возбуждены в более плотных массивах нанотрубок. В массиве ДУНТ НЧ ветвь фундаментальной моды

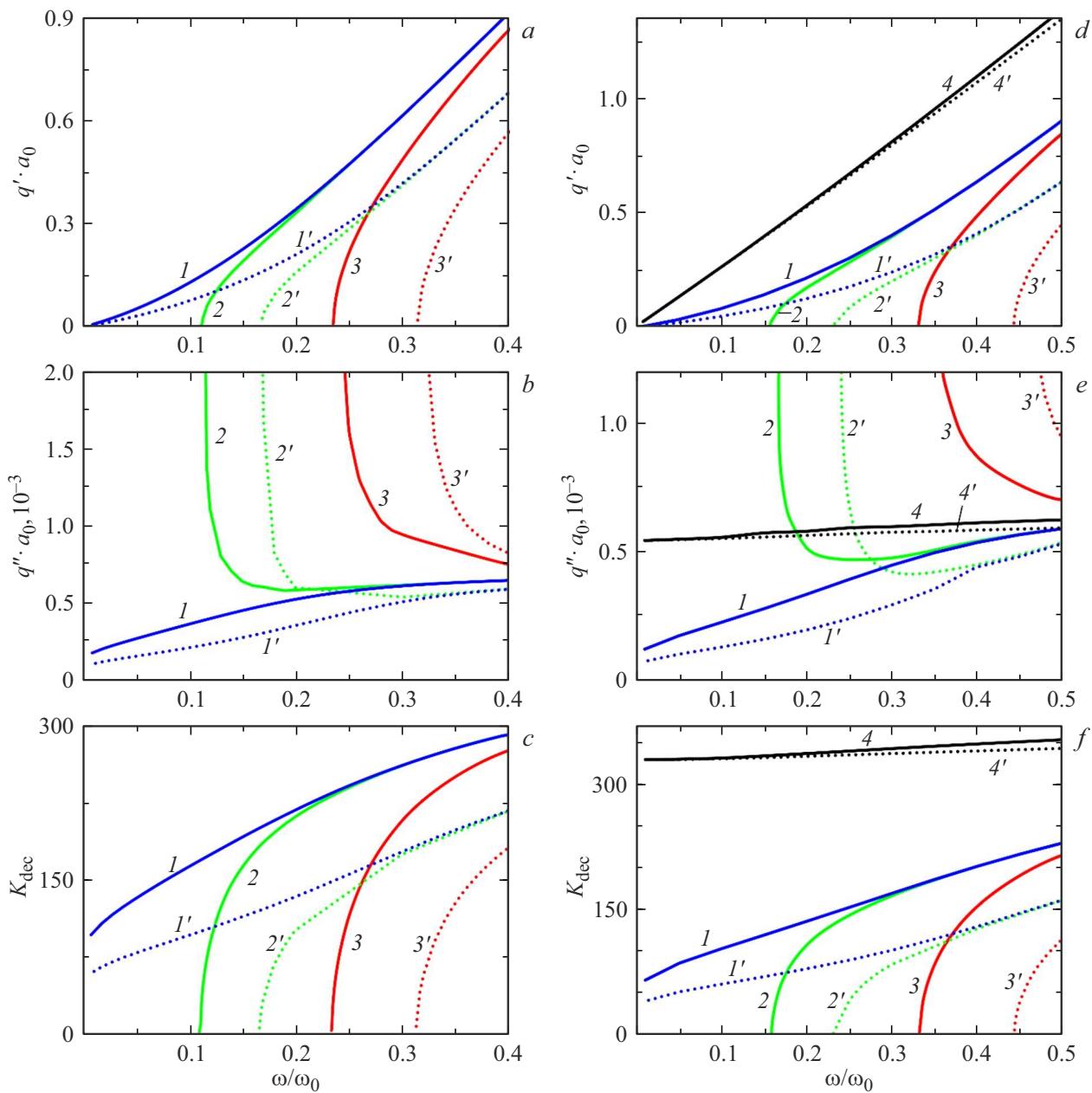


Рис. 2. Дисперсионные зависимости действительной (*a, d*), мнимой (*b, e*) компонент ПР и коэффициента замедления (*c, f*) для фундаментальной ППП моды в массивах ОУНТ (*a, b, c*) и ДУНТ (*d, e, f*) для разных диэлектрических проницаемостей сред: $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ — пунктирные кривые $1' - 4'$, $\epsilon_1 = 1$ и $\epsilon_2 = 2.4$ — сплошные кривые $1 - 4$. Для массива ОУНТ: зависимости для $d = (\infty, 15, 8)$ нм показаны парами кривых 1 и $1'$, 2 и $2'$, 3 и $3'$ соответственно. Для массива ДУНТ: ВЧ ветви для $d = (\infty, 15, 8)$ нм показаны парами кривых 1 и $1'$, 2 и $2'$, 3 и $3'$ соответственно; НЧ ветви для $d = 8$ нм — кривыми 4 и $4'$. Радиус стенок ОУНТ $a = 3$ нм. Радиус стенок ДУНТ $a_1 = 2.66$ нм, $a_2 = 3$ нм.

демонстрирует слабую чувствительность как к плотности массива, так и свойствам вмещающей среды, при этом ВЧ ветвь оказывается чувствительной к изменению электродинамических характеристик окружающей среды. Результаты исследования могут быть полезны для создания сенсоров, модуляторов, а также генераторов ППП на основе массивов УНТ с накачкой дрейфовым током.

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-19-00880).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Z.J. Dong, B. Sun, H. Zhu, G.M. Yuan, B.L. Li, J.G. Guo, X.K. Li, Y. Cong, J. Zhang. *New Carbon Mater.*, **36** (5), 873 (2021). DOI: 10.1016/S1872-5805(21)60090-2
- [2] M. He, S. Zhang, J. Zhang. *Chem. Rev.*, **120** (22), 12592 (2020). DOI: 10.1021/ACS.CHEMREV.0C00395
- [3] P.S. Goh, A.F. Ismail, B.C. Ng. *Composites. Part A: Applied Science and Manufacturing*, **56**, 103 (2014). DOI: 10.1016/j.compositesa.2013.10.001
- [4] K. Silakaew, P. Thongbai. *RSC Adv.*, **9** (41), 23498 (2019). DOI: 10.1039/c9ra04933a
- [5] G.Y. Slepyan, S.A. Maksimenko, A. Lakhtakia, O. Yevtushenko, A.V. Gusakov. *Phys. Rev. B*, **60** (24), 17136 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevB.60.17136
- [6] A. Moradi. *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.*, **113** (1), 97 (2013). DOI: 10.1007/s00339-013-7854-5
- [7] A.S. Kadochkin, S.G. Moiseev, V.V. Svetukhin, A.N. Saurov, I.O. Zolotovskii. *Ann. Phys.*, **534** (4), 2100438 (2022). DOI: 10.1002/ANDP.202100438
- [8] S.A. Afanas'ev, A.A. Fotiadi, A.S. Kadochkin, E.P. Kitsyuk, S.G. Moiseev, D.G. Sannikov, V.V. Svetukhin, Y.P. Shaman, I.O. Zolotovskii. *Photonics*, **10** (12), 1317 (2023). DOI: 10.3390/PHTONICS10121317
- [9] С.А. Афанасьев, В.А. Зайцев, С.Г. Моисеев, И.А. Рожлейс, Д.Г. Санников, Г.В. Тертышникова. *ФТП*, **58** (9), 467 (2024). DOI: 10.61011/FTP.2024.09.59302.6326A
- [10] R.A. Jishi, M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus. *Phys. Rev. B*, **47** (24), 16671 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevB.47.16671