19

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

© В.А. Зайцев [1], С.А. Афанасьев [1], С.Г. Моисеев [1,2], И.А. Рожлейс [1], 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 nm. 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 поверхностной проводимости $\hat{\sigma}_j$ ($j = 1, 2$ — номер стенки), аксиальная компонента которого имеет следующий вид [6]:

$$\sigma^{(0)}_{zz,j} = \sigma_0 \omega \tilde{\omega}/\Omega, \tag{1}$$

где $\sigma_0 = 2iV_{\mathrm{F}}e^2/(\pi^2\hbar a_j\tilde{\omega})$, $\Omega = \omega\tilde{\omega} - V_{\mathrm{F}}^2 q^2/2$, q — ПР поверхностной волны, $\tilde{\omega} = \omega + i\tau^{-1}$, τ — время релаксации, V_{F} — скорость Ферми ($V_{\mathrm{F}} = 10^6$ m/s), 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:

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

где $\omega_{pj}^2 = 2V_{\mathrm{F}}e^2/(\pi 2\hbar\varepsilon_0 a_j^2$ —квадрат плазменной частоты для стенки радиуса a_j,

$$M_{12} = \varepsilon_1 K_0(qa_1)I_0'(qa_1) - I_0(qa_1)K_0'(qa_1),$$

$$M_{21} = K_0(qa_2)I_0'(qa_2) - \varepsilon_2 I_0(qa_2)K_0'(qa_2),$$

$M_{11} = (\varepsilon_1 - 1)I_0(qa_1)I_0'(qa_1)$,
$M_{22}(1 - \varepsilon_2)K_0(qa_2)K_0'(qa_2)$, 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

$$\omega\tilde{\omega} = V_{\mathrm{F}}q^2/2 + \omega_p^2 qaI_0(qa)K_0(qa)/C. \tag{3}$$

Параметр $C = C_1 + C_2$ является положительной величиной, поскольку при $\varepsilon_{1,2} > 0$, $C_1 = \varepsilon_1 I_0'(qa)K_0(qa) > 0$, $C_2 = -\varepsilon_2 I_0(qa)K_0'(qa) > 0$. 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 $K_{\mathrm{dec}} = q'/k_0 = q'c/\omega$, где q' — действительная часть ПР ППП. На заданной частоте ω величина K_{dec} минимальна при $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$, т.е. для ОУНТ в воздухе. Следует отметить, что на терагерцевых частотах слагаемое C_1 пренебрежимо мало по сравнению с C_2, и поскольку $C_1 \sim \varepsilon_1$ и $C_2 \sim \varepsilon_2$, 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 равноудалены 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 мнимой 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 $\tau = 10^{-12}$ s [10]. Недопустимые значения межчастичного расстояния d (менее внешнего диаметра нанотрубки $2a$) показаны заштрихованными областями в левой части графиков. Здесь и далее использованы следующие нормировочные параметры: $a_0 = 1$ nm, $\omega_0 = (e/\pi a_0)(2V_{\mathrm{F}}/\varepsilon_0\hbar)^{1/2} \approx 2.36 \cdot 10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$.

Из представленных зависимостей видно, что для разреженных массивов ($d \gg 2a$) ПР практически не зависит от расстояния между ОУНТ, поскольку поверхностные 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 эванесцентного поля снаружи нанотрубки, наблюдается

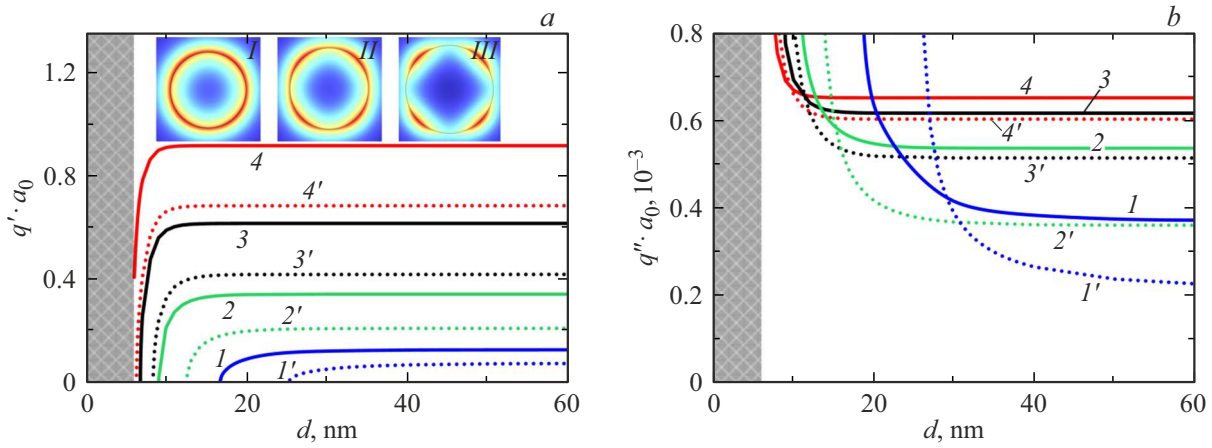

Рис. 1. Зависимости действительной (a) и мнимой (b) частей компонент ПР фундаментальной моды ППП от периода массива ОУНТ для разных диэлектрических проницаемостей сред: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$ (воздух) — пунктирные кривые *1′–4′*, $\varepsilon_1 = 1$ и $\varepsilon_2 = 4$ (полиэтилен) — сплошные 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 $a = 3$ nm. Вставка на панели (a): модуль электрического поля фундаментальной моды на частоте $0.4\omega_0$ при $d = 10$ nm (*I*), 9 nm (*II*), 8 nm (*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 $\varepsilon_2 > 1$ 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 $d \to \infty$). 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 $\varepsilon_2 > 1$ 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 ($K_{\text{dec}} > 300$ 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

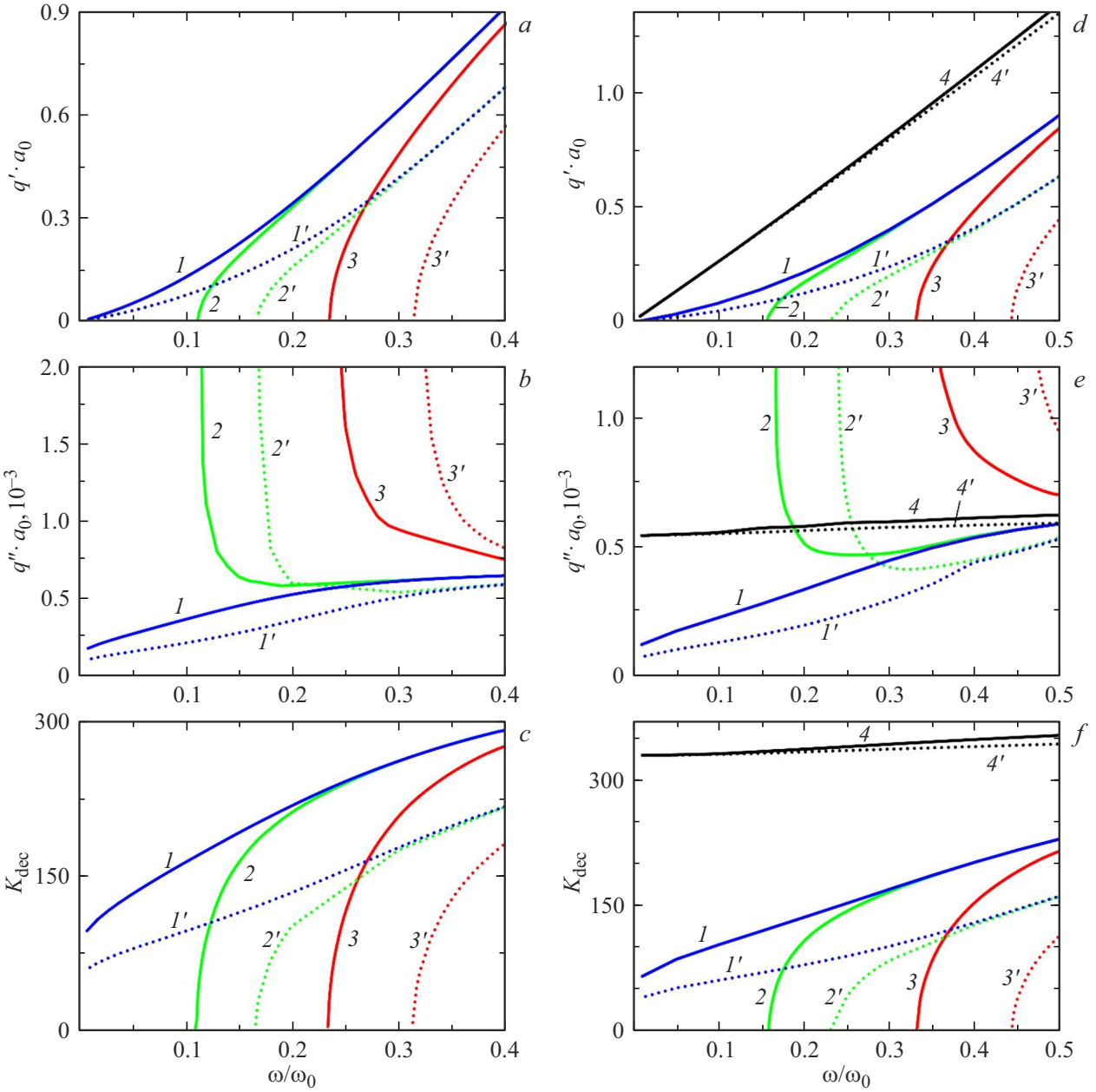

Рис. 2. Дисперсионные зависимости действительной (a, d), мнимой (b, e) компонент ПР и коэффициента замедления (c, f) для фундаментальной ППП моды в массивах ОУНТ (a, b, c) и ДУНТ (d, e, f) для разных диэлектрических проницаемостей сред: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$ — пунктирные кривые *1′–4′*, $\varepsilon_1 = 1$ и $\varepsilon_2 = 2.4$ — сплошные кривые *1–4*. Для массива ОУНТ: зависимости для $d = (\infty, 15, 8)$ nm показаны парами кривых *1* и *1′*, *2* и *2′*, *3* и *3′* соответственно. Для массива ДУНТ: ВЧ ветви для $d = (\infty, 15, 8)$ nm показаны парами кривых *1* и *1′*, *2* и *2′*, *3* и *3′* соответственно; НЧ ветви для $d = 8$ nm — кривыми *4* и *4′*. Радиус ОУНТ $a = 3$ nm. Радиус стенок ДУНТ $a_1 = 2.66$ nm, $a_2 = 3$ nm.

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/PHOTONICS10121317

[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