

05

Нанолазер на углеродной нанотрубке

© И.В. Дзедолик, А.А. Кузьмин, В.Е. Поляков

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, Физико-технический институт, Симферополь, Россия

e-mail: igor.dzedolik@cfuv.ru

Поступила в редакцию 01.11.2025 г.

В окончательной редакции 04.12.2025 г.

Принята к публикации 05.12.2025 г.

Рассмотрена теоретическая модель нанолазера на углеродной нанотрубке с хиральностью „зигзаг“, имеющей полупроводниковые свойства. На концах нанотрубки реализованы периодические неоднородности поверхности, образующие брэгговские решетки, т.е. такая нанотрубка представляет собой нанорезонатор. Показано, что при накачке нанорезонатора излучением оптического диапазона в нанолазере при превышении порога генерации возникает когерентный поток поверхностных плазмон-поляритонов.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, нанорезонатор, нанолазер, плазмон-поляритон.

DOI: 10.61011/OS.2026.01.62613.8732-25

Введение

Современные тенденции к миниатюризации оптических и телекоммуникационных систем вызывают новые требования к проектированию и разработке соответствующих устройств [1–4]. В последние годы значительные достижения в области производства оптических микро- и наноструктур позволили существенно уменьшить размеры многих оптических компонентов. Уменьшение габаритов устройств способствует не только сокращению энергопотребления, но и позволяет увеличить плотность размещения наноустройств на фотонных чипах, что особенно актуально для высокотехнологичных систем, где требуется компактность и эффективность.

В этой связи плазменная схемотехника перспективна для применения в различных областях, таких как наноэлектроника, оптоэлектроника, нанофотоника, оптоволоконная связь. Элементная база плазменной схемотехники базируется на основе нановолноводов и нанорезонаторов [4], а также плазмонных логических элементов [5–7]. Помимо этого для реализации плазменной схемотехники необходимо наличие наноразмерных источников излучения — генераторов плазмонного сигнала — нанолазеров [3,8–10].

Отдельного внимания заслуживает концепция нанолазера с минимальными размерами — спазера, предложенная для усиления и генерации когерентного ближнего поля [11,12]. Спазер представляет собой наноразмерное устройство, состоящее из металлической наночастицы, поддерживающей плазмонные возбуждения, и усиливающей среды с инверсной населенностью. Усиливающая среда возбуждается внешней накачкой, что, в свою очередь, возбуждает локализованные плазмонные моды в металлической наночастице. Спазеры реализованы и находят применение в нанофотонике для создания сверхкомпактных источников когерентного света [13,14], однако степень когерентности излучения спазера мала.

В настоящее время разработано и реализовано большое число разнообразных нанолазеров, в том числе на основе графена [15–17], квантовых ям [18], на полупроводниковых нанопроволоках [19–22], на высокоиндексных диэлектрических наноструктурах, используемых для неплазмонных нанолазеров [23]. Генераторы терагерцевого диапазона на основе углеродных нанотрубок (УНТ) были предложены в работе [24].

Генерация плазмонного потока вместо фотонного в нанолазере позволяет преодолеть дифракционный предел в результате экспоненциального затухания поля поверхностных плазмонов, т.е. реализовать нанометровый источник когерентного излучения. Нанолазеры обладают способностью генерировать когерентное электромагнитное, в том числе оптическое излучение на субволновых масштабах, что делает их незаменимыми в новых поколениях вычислительных систем и сенсорных устройств.

Как и любой другой лазер, нанолазер состоит из трех ключевых элементов: резонатора, усиливающей среды и внешнего источника энергии (накачки). В нанолазерах разрабатываемые резонаторы должны обеспечивать субволновый размер оптического пучка либо плазмонного потока и обладать достаточной добротностью, что необходимо для генерации когерентного излучения при разумных уровнях накачки [4]. Высокая добротность позволяет снизить пороговые значения накачки, что критически важно для эффективной работы нанолазеров в миниатюрных устройствах. Чем выше добротность резонатора и эффективность взаимодействия накачки с усиливающей средой, тем ниже необходимый порог накачки, что делает такие системы более экономичными и эффективными.

УНТ представляют собой однослойные или многослойные структуры в форме трубок, состоящие из атомов углерода, упорядоченно расположенных по поверхности нанотрубки в форме шестиугольников, а также

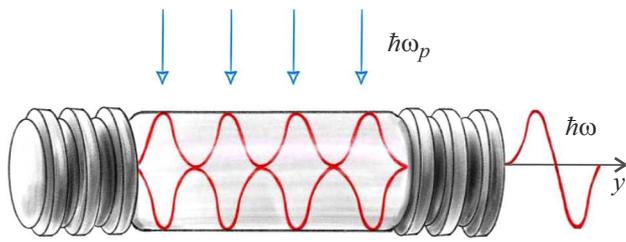


Рис. 1. Схема нанолазера на УНТ.

пяти- и семиугольников в области изгиба нанотрубки [25–28]. УНТ обладают как полупроводниковыми, так и металлическими свойствами в зависимости от типа кристаллической решетки — хиральности УНТ. При распространении ультракоротких импульсов оптического диапазона УНТ проявляют нелинейные свойства [29,30]. Помимо этого, форма ультракоротких лазерных импульсов влияет на вероятность возбуждения атомов [31,32] в УНТ. Современная элементная база плазмонной схемотехники ориентирована для функционирования на телекоммуникационных частотах [4].

В настоящей работе предложена и исследована теоретически модель нанолазера на УНТ, работающего на телекоммуникационной частоте. В нанолазере предложено использовать УНТ с хиральностью типа „зигзаг“, имеющую полупроводниковые свойства. На концах нанотрубки должны быть реализованы периодические неоднородности поверхности, образующие брэгговские решетки, т.е. такая нанотрубка представляет собой резонатор. Изготовить нанорезонатор с брэгговскими решетками возможно с помощью технологий выращивания УНТ при варьировании режимов их роста [33].

При накачке резонатора нанолазера на УНТ оптическим излучением в нем при превышении порога генерации возникает когерентный поток плазмон-поляритонов на телекоммуникационной частоте, которая определяется длиной резонатора. Поток когерентных плазмон-поляритонов из резонатора нанолазера на УНТ может быть направлен в плазмонный волновод, в том числе волновод на основе УНТ, соединенный с зеркалом резонатора. Когерентный плазмонный поток возможно использовать в плазмонных логических элементах. Помимо этого, нанолазер на УНТ может использоваться как усилитель сигналов в плазмонной схемотехнике.

Модель нанолазера

Рассмотрим предлагаемую модель нанолазера на УНТ. Усиливающей средой (рабочим телом) и резонатором для нанолазера является УНТ типа „зигзаг“ с полупроводниковыми свойствами, на концах которой имеются периодические неоднородности поверхности в форме брэгговских решеток, а накачка нанолазера осуществляется излучением в оптическом диапазоне (рис. 1).

Плазмонные моды УНТ

Электромагнитная волна с частотой ω взаимодействует с электронами проводимости и связанными электронами в нанотрубке, генерируя в УНТ поверхностные плазмон-поляритоны. Для тонкой нанотрубки радиусом r_0 , если ее толщина много меньше длины волны моды, $r_0 \ll \lambda = 2\pi/\beta$, решения уравнений Максвелла имеют физический смысл для компонент электромагнитного поля, которые стремятся к нулю с увеличением расстояния $r \rightarrow \infty$ от оси нанотрубки.

Выражения для компонент плазмон-поляритонной монохроматической ($\sim \exp(-i\omega t)$) поверхностной волны, распространяющейся вдоль УНТ, можно получить из системы уравнений Максвелла для немагнитной среды ($\mu = 1$) с диэлектрической проницаемостью ϵ . Векторные уравнения Максвелла для компонент поля $\nabla \times \mathbf{H} = -ik_0\epsilon\mathbf{E}$ и $\nabla \times \mathbf{E} = ik_0\mathbf{H}$, где $k_0 = \omega/c$, в цилиндрической системе координат (r, φ, z) имеют решения вне нанотрубки в форме функций Макдональда [7]:

$$\begin{aligned} E_r &= \frac{r_0^2}{w^2} \left[A \frac{-i\beta w}{r_0 K_l(w)} K_l' \left(\frac{wr}{r_0} \right) + B \frac{k_0}{K_l(w)} \frac{l}{r} K_l \left(\frac{wr}{r_0} \right) \right], \\ E_\varphi &= \frac{r_0^2}{w^2} \left[A \frac{\beta}{K_l(w)} \frac{l}{r} K_l \left(\frac{wr}{r_0} \right) + B \frac{ik_0 w}{r_0 K_l(w)} K_l' \left(\frac{wr}{r_0} \right) \right], \\ H_r &= \frac{r_0^2}{w^2} \left[B \frac{-i\beta w}{r_0 K_l(w)} K_l' \left(\frac{wr}{r_0} \right) - A \frac{k_0 \epsilon}{K_l(w)} \frac{l}{r} K_l \left(\frac{wr}{r_0} \right) \right], \\ H_\varphi &= \frac{r_0^2}{w^2} \left[B \frac{\beta}{K_l(w)} \frac{l}{r} K_l \left(\frac{wr}{r_0} \right) - A \frac{ik_0 \epsilon w}{r_0 K_l(w)} K_l' \left(\frac{wr}{r_0} \right) \right], \\ E_z &= A \frac{K_l(wr/r_0)}{K_l(w)}, \quad H_z = B \frac{K_l(wr/r_0)}{K_l(w)}, \end{aligned} \quad (1)$$

где штрих обозначает производную функции по ее аргументу, $w^2 = r_0^2(\beta^2 - k_0^2\epsilon)$. Зависимость мод от времени, азимутальной и продольной координат имеет вид

$$E_j, H_j \sim \exp(-i\omega t + il\varphi + i\beta z), \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

ϵ — диэлектрическая проницаемость среды, окружающей УНТ.

Компоненты мод с нулевым азимутальным индексом $l = 0$ найдем из выражений (1) с учетом свойства функции Макдональда $K_0' = -K_1$:

ТМ-мода

$$\begin{aligned} E_r &= i \frac{\beta_0 r_0}{w} A \frac{K_1(wr/r_0)}{K_0(w)}, \quad H_\varphi = i \frac{\epsilon k_0 r_0}{w} A \frac{K_1(wr/r_0)}{K_0(w)}, \\ E_z &= A \frac{K_0(wr/r_0)}{K_0(w)}, \end{aligned} \quad (2)$$

ТЕ-мода

$$\begin{aligned} H_r &= i \frac{\beta_0 r_0}{w} B \frac{K_1(wr/r_0)}{K_0(w)}, \quad E_\varphi = -i \frac{k_0 r_0}{w} B \frac{K_1(wr/r_0)}{K_0(w)}, \\ H_z &= B \frac{K_0(wr/r_0)}{K_0(w)}, \end{aligned} \quad (3)$$

где β_0 — постоянная распространения соответствующей моды.

Модовое дисперсионное уравнение

Для определения постоянных распространения $\beta(\omega)$ плазмон-поляритонных мод в УНТ необходимо получить дисперсионное уравнение. Используем граничные условия Леонтовича $E_z = \xi H_\phi$ и $H_z = E_\phi/\xi$ на поверхности нанотрубки при $r = r_0$, где $\xi = \sqrt{\mu_c/\epsilon_c}$ — поверхностный импеданс проводящей поверхности [34]. Учитывая, что для УНТ $\mu_c = 1$, т.е. импеданс равен $\xi = 1/\sqrt{\epsilon_c}$, из системы уравнений (1) получаем дисперсионное уравнение для постоянных распространения $\beta_l(\omega)$ плазмон-поляритонных мод УНТ (Приложение А)

$$K_l^2(w) + \epsilon \frac{k_0^2 r_0^2}{w^2} K_l'^2(w) + i \frac{\epsilon - \epsilon_c}{\sqrt{\epsilon_c}} \times \frac{k_0 r_0}{w} K_l(w) K_l'(w) = l^2 \frac{\beta^2 r_0^2}{w^4} K_l^2(w). \quad (4)$$

Аргумент функции Макдональда $w = r_0(\beta^2 - k_0^2 \epsilon)^{1/2}$ должен иметь действительное значение, т.е. $\beta > k_0 \sqrt{\epsilon}$, где диэлектрическая проницаемость окружающей среды ϵ — действительная величина.

Для мод с нулевым азимутальным индексом $l = 0$ из уравнения (4) получаем дисперсионное уравнение в виде

$$K_0^2(w) + \epsilon \frac{k_0^2 r_0^2}{w^2} K_1^2(w) - i \frac{\epsilon - \epsilon_c}{\sqrt{\epsilon_c}} \frac{k_0 r_0}{w} K_0(w) K_1(w) = 0. \quad (5)$$

На поверхности нанотрубки ($r = r_0$) моды с нулевым азимутальным индексом $l = 0$ трансформируются в плоские волны. Это следует из подстановки в выражения для мод (2) и (3) соотношения $K_1(w)/K_0(w)$, полученного из дисперсионного уравнения (5) (Приложение А), где нужно взять $\frac{K_1(w)}{K_0(w)} = -i \frac{w \sqrt{\epsilon_c}}{\epsilon k_0 r_0}$ для ТМ-моды и $\frac{K_1(w)}{K_0(w)} = i \frac{w}{\sqrt{\epsilon_c} k_0 r_0}$ для ТЕ-моды. Амплитуды компонент мод с нулевым азимутальным индексом имеют вид:

ТМ-мода —

$$E_r = \frac{\beta_0 \sqrt{\epsilon_c}}{\epsilon k_0} A, \quad H_\phi = \sqrt{\epsilon_c} A, \quad E_z = A, \quad (6)$$

ТЕ-мода —

$$H_r = -\frac{\beta_0}{\sqrt{\epsilon_c} k_0} B, \quad E_\phi = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_c}} B, \quad H_z = B. \quad (7)$$

Постоянные распространения мод определяем из соотношения K_1/K_0 , учитывая, что

$$\sqrt{\epsilon_c} = (\epsilon_c'^2 + \epsilon_c''^2)^{1/4} \exp(i\delta) = \sqrt{|\epsilon_c|} (\cos \delta + i \sin \delta),$$

где $\delta = \arctan(\epsilon_c''/\epsilon_c')$, ϵ_c' и ϵ_c'' — действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости УНТ. Тогда получаем дисперсионные уравнения для ТМ-моды

$$w K_0(w) - \epsilon_{\text{TM}} K_1(w) = 0, \quad (8)$$

для ТЕ-моды

$$w K_0(w) - \epsilon_{\text{TE}} K_1(w) = 0, \quad (9)$$

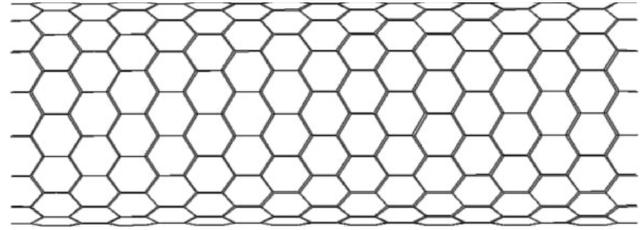


Рис. 2. УНТ „зигзаг“ с индексами хиральности (17,0); расстояние между соседними атомами углерода $d_0 = 0.142$ нм.

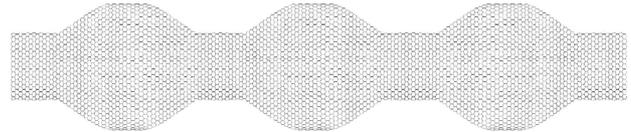


Рис. 3. Брегговская решетка — периодические неоднородности поверхности на конце УНТ с индексами хиральности (13,0)–(17,0).

где $\epsilon_{\text{TM}} = \frac{\epsilon k_0 r_0}{\sqrt{|\epsilon_c|}}$, $\epsilon_{\text{TE}} = \sqrt{|\epsilon_c|} k_0 r_0$. В уравнениях (8)

и (9) учтено, что мнимая часть уравнений равна нулю ($i \epsilon_{\text{TM,TE}} \cos(\delta) = 0$), как и действительная часть, т.е. $\delta = \pi/2$, и $\sin(\delta) = 1$. Объем V поля моды оценим с учетом выражения для функций Макдональда:

$$K_n \approx \sqrt{\pi r_0 / 2wr} \exp(-wr/r_0),$$

полагая $r = (\beta^2 - k_0^2 \epsilon)^{-1/2}$; тогда $V = \pi(r^2 - r_0^2)L$, где L — длина резонатора.

Резонатор нанолазера на УНТ

Резонатор нанолазера (рис. 1) представляет собой УНТ с хиральностью типа „зигзаг“ (рис. 2) с периодическими неоднородностями границы на концах нанотрубки — брегговскими решетками в качестве зеркал. Брегговские решетки реализуются с помощью периодического изменения диаметра УНТ без нарушения ее хиральности (рис. 3).

Рассмотрим распространение мод с азимутальным индексом $l = 0$ по поверхности УНТ (выражения (6) и (7)). Плазмон-поляритонная мода с постоянной распространения β_0 , которая определяется диэлектрическими постоянными окружающей среды ϵ и УНТ ϵ_c , а также радиусом нанотрубки r_0 , падает на неоднородность границы — брегговскую решетку. Для максимума отражения от брегговской решетки должна иметь место конструктивная интерференция волн ($2n_{\text{эф}}d = \lambda/2$) при отражении от слоя с коэффициентом преломления $n_{\text{эф}}$ и толщиной d , т.е. толщина слоя должна быть $d = \lambda/4n$. В УНТ для мод в неоднородности границы имеем $2\beta_h d = \pi$, т.е. длина неоднородности должна быть $d = \lambda_h/4$. При отражении плазмон-поляритонных волн от зеркал нанорезонатора имеют место условия

для возникновения стоячей волны, т.е. многократной стимулированной эмиссии поверхностных плазмонов в УНТ, что приводит к генерации когерентного плазмон-поляритонного потока, который выводится из нанолазера в плазмонный волновод. Неоднородности границы УНТ представляют собой периодические изменения радиуса нанотрубки, т.е. брэгговскую решетку (рис. 3), которую характеризует матрица (Приложение Б)

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Амплитудные коэффициенты отражения ρ имеют вид: для ТМ-моды

$$\rho = \frac{E_{rr}}{E_{ri}} = \frac{m_{11} + m_{12} \frac{\epsilon k_0}{\beta_0} - \frac{\beta_0}{\epsilon k_0} m_{21} - m_{22}}{m_{11} + m_{12} \frac{\epsilon k_0}{\beta_0} + \frac{\beta_0}{\epsilon k_0} m_{21} + m_{22}}, \quad (11)$$

для ТЕ-моды

$$\rho = \frac{E_{\varphi r}}{E_{\varphi i}} = \frac{m_{22} - \frac{k_0}{\beta_0} m_{21} - m_{11} + \frac{\beta_0}{k_0} m_{12}}{m_{11} - \frac{\beta_0}{k_0} m_{12} - \frac{k_0}{\beta_0} m_{21} + m_{22}}. \quad (12)$$

Когерентная генерация нанолазера

Для работы нанолазера в режиме когерентной генерации необходимо, чтобы усиление излучения за один цикл (проход потока туда и обратно между зеркалами) превосходило потери в резонаторе и лазерное излучение. Цикл работы нанолазера включает два последовательных отражения от зеркал с эффективными коэффициентами отражения R_1 и R_2 , учитывающими все потери, включая потери на излучение. Ослабление потока пропорционально произведению коэффициентов отражения $R_1 R_2$ на пути длиной $2L$ за один цикл, где L — длина резонатора. Усиление электромагнитного потока в нанолазере за один цикл равно [35–37]

$$I = I_0 R_1 R_2 e^{2\alpha L} = I_0 \exp[2\alpha L - \ln(R_1 R_2)].$$

Генерация возникает при $2\alpha L > |\ln(R_1 R_2)|$, т.е. порог генерации нанолазера равен

$$\alpha_0 = \frac{|\ln(R_1 R_2)|}{2L}. \quad (13)$$

Определим добротность резонатора нанолазера как $Q = E/\delta E$, где $E = w_r S_r L$ — запасенная в резонаторе энергия, w_r — плотность энергии прямого и обратного потоков, S_r — площадь поперечного сечения резонатора, ΔE — потери энергии за цикл. Потери энергии за цикл можно найти как

$$\Delta E = \frac{1}{2} w_r S_r L [1 - \exp(-\ln(R_1 R_2))].$$

Время одного цикла равно $t = 2L/v$, где v — скорость волны, а период $T_r = 2\pi/\omega$, тогда за одно колебание

потери энергии составляют

$$\begin{aligned} \delta \tilde{E} &= \frac{\Delta E}{2L/v} T_r = \frac{w_r S_r L v T_r}{4L} \left(1 - \frac{1}{\exp(\ln(R_1 R_2))} \right) \\ &\approx \frac{1}{4} w_r v S_r T_r |\ln(R_1 R_2)|. \end{aligned}$$

Отсюда находим добротность нанорезонатора на УНТ

$$Q = \frac{N_{\lambda/2}}{|\ln(R_1 R_2)|},$$

где $N_{\lambda/2} = 2L/(\lambda/2)$ — число полуволин стоячей волны в нанорезонаторе, $\lambda = vT_r$ — длина волны. Выражая порог генерации через добротность нанорезонатора, получаем $\alpha_0 = N_{\lambda/2}/Q2L$ или $\alpha_0 \lambda/2 = Q^{-1}$.

Длину нанорезонатора определим по числу полуволин возбужденных мод: $L = (\lambda/2)n = (\pi/\beta)n$, где $n = 1, 2, \dots$, а минимальную длину нанорезонатора найдем с учетом коэффициента усиления $\alpha \geq \alpha_0$ при $\alpha \lambda/2 \geq Q^{-1}$ как $L_{\min} = 1/\alpha Q$.

Электронный спектр УНТ

Для генерации плазмон-поляритонного потока УНТ должна обладать полупроводниковыми свойствами. Зонную структуру УНТ определяет дисперсионное уравнение [28]

$$\Delta E = \pm \gamma_{AB} \left\{ 1 + 4 \cos \frac{k_y a}{2} \left[\cos \frac{\sqrt{3} k_x a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \right] \right\}^{1/2}, \quad (14)$$

где γ_{AB} — интеграл перекрытия для ближайших атомов решетки графена. Условие квантования волнового вектора электрона в УНТ представим в виде

$$\mathbf{Rk} = (m\mathbf{r}_1 + n\mathbf{r}_2)(\mathbf{1}_x k_x + \mathbf{1}_y k_y) = 2\pi s, \quad (15)$$

где $\mathbf{R} = m\mathbf{r}_1 + n\mathbf{r}_2$, $\mathbf{k} = \mathbf{1}_x k_x + \mathbf{1}_y k_y$ — волновой вектор электрона, \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 — базисные векторы элементарной ячейки графена, $r_1 = r_2 = a$ — постоянная решетки графена, (m, n) — индексы хиральности УНТ, $s = 1, 2, 3, \dots$ — целое число, нумерующее разрешенные состояния электрона.

В частном случае УНТ имеет структуру типа „зигзаг“ $(m, 0)$, для которой $k_y = \frac{2\pi}{\sqrt{3}d_0 m}$, $s = 1, 2, 3, \dots, m$, тогда получаем выражения для полуширины запрещенной зоны УНТ

$$\Delta E = \gamma_{AB} \left(1 + 4 \cos \frac{\pi s}{m} \cos \frac{3k_x d_0}{2} + 4 \cos^2 \frac{\pi s}{m} \right)^{1/2}. \quad (16)$$

Ширина запрещенной зоны $E_g = 2\Delta E$ в УНТ „зигзаг“ с полупроводниковыми свойствами с индексами $(m, 0)$ и диаметром $D = \frac{\sqrt{3}d_0}{\pi} m$, где $d_0 = 0.142 \text{ nm}$ — расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости, определяется с помощью выражения (16). При этом индекс m УНТ „зигзаг“ не должен быть кратен

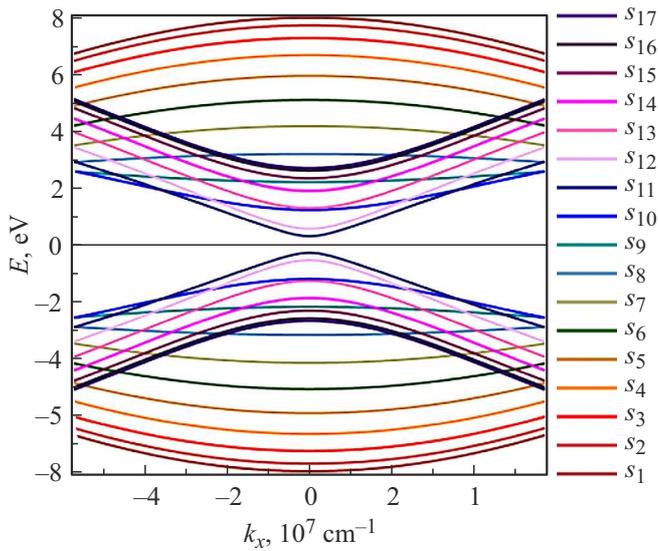


Рис. 4. Электронный спектр УНТ „зигзаг“ с индексами хиральности (17,0); число подзон $s = 1, \dots, 17$.

трет, тогда полуширина запрещенной зоны не равна нулю, $\Delta E \neq 0$ [26,28].

Полагаем, что вектор k_x меняется в первой зоне Бриллюэна: $k_x = (-\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{T})$, где $T = a\sqrt{t_1^2 + t_2^2}$ — модуль вектора трансляции $\mathbf{T} = t_1\mathbf{r}_1 + t_2\mathbf{r}_2$ (перпендикулярный вектору \mathbf{R}), $t_1 = \frac{2n+m}{d}$, $t_2 = -\frac{2m+n}{d}$, d — наибольший общий делитель для $2n+m$ и $2m+n$, $a = \sqrt{3}d_0$ [28]. Электронный спектр УНТ „зигзаг“ с индексами (17,0) представлен на рис. 4. Из анализа графиков на рис. 4 следует, что запрещенная зона в УНТ „зигзаг“ с индексами (17,0) определяется разностью энергий валентной зоны и зоны проводимости E_g одиннадцатой подзоны s_{11} .

Межзонные электронные переходы

Если электрон в УНТ с полупроводниковыми свойствами взаимодействует с электромагнитным полем накачки, то вероятность перехода электрона в состояние n' из состояния n в единицу времени равна

$$w_{nn'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{H}'_{nn'}|^2 \delta(E_n - E_{n'} - \hbar\omega)$$

(„золотое правило“ Ферми) [37]. Гамильтониан возмущения при взаимодействии электрона с электромагнитным полем представим в форме

$$\hat{H}' = \frac{e}{2} \mathbf{r} \mathbf{E}_a (e^{i\omega t - i\mathbf{k}_{\text{опт}} \mathbf{r}}) + \text{c.c.},$$

где $\mathbf{E}_a = \text{const}$ — амплитуда электрического поля. В этом случае матричный элемент оператора возмущения имеет вид

$$\hat{H}'_{vc} = \frac{e}{2} \int d^3r \psi_{vk}^*(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \mathbf{E}_a) \psi_{ck'}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{k}_{\text{опт}}) \mathbf{r}}.$$

Величина этого интеграла из-за осциллирующего множителя стремится к нулю за исключением случая $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{опт}}$.

При абсолютном нуле температуры $T = 0$ все состояния валентной зоны (v) полупроводниковой УНТ заполнены, зона проводимости (c) пустая. В приближении параболической формы для подзон валентной зоны и зоны проводимости (рис. 4) при условии прямого межзонного перехода ($k' = k \equiv k_x$) энергия электрона равна разности энергий зон плюс энергия запрещенной зоны [37]:

$$E_c - E_v = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v} \right) + E_g.$$

Вероятность перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости в единицу времени в этом случае равна

$$w_{vc} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{H}'_{vc}|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{vc}} + E_g - \hbar\omega\right),$$

где $m_{vc} = m_v m_c / (m_v + m_c)$ — приведенная эффективная масса электрона.

Число электронных переходов

$$N = \int_0^\infty dk w_{vc} \rho(k)$$

при плотности электронных состояний

$$\rho(k) = 2 \frac{4\pi k^2}{8\pi^3} V = \frac{k^2 V}{\pi^2}$$

для тела объемом V равно [37]

$$N = \frac{2V}{\hbar\pi} \int_0^\infty dk k^2 |\hat{H}'_{vc}|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{vc}} + E_g - \hbar\omega\right).$$

При $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{vc}} + E_g = \hbar\omega$ число межзонных переходов в УНТ равно

$$N = \frac{V(2m_{vc})^{3/2}}{\hbar^4 \pi} |\hat{H}'_{vc}|^2 \sqrt{\hbar\omega - E_g}. \quad (17)$$

Диэлектрическая проницаемость УНТ

Диэлектрическую проницаемость УНТ представим в виде (Приложение В)

$$\epsilon_c(\omega) = 1 + \frac{2m\omega_e^2}{\hbar} \sum_n |r_{n0}|^2 \frac{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2}{(\omega_{n0} - i\Gamma_n/2)^2 - \omega^2}, \quad (18)$$

где $\omega_e^2 = 4\pi e^2 N_e / m_{\text{эф}}$ — квадрат электронной плазменной частоты, $m_{\text{эф}}$ — эффективная масса электрона, N_e — число электронов в единице объема. Полагаем, что плазмон-поляритонные моды (выражения (1)–(3)) возбуждаются на частоте прямого электронного перехода

$\omega = \omega_{nn'}$ в УНТ. Тогда диэлектрическая проницаемость УНТ при излучении (поглощении) фотона на частоте электронного перехода ω равна

$$\varepsilon_c(\omega) = 1 + \frac{8\pi e^2 |r_{nn'}|^2 N_e}{\hbar} \left[\frac{4\omega}{16\omega^2 + \Gamma^2} + \frac{i}{\Gamma} \left(1 + \frac{\Gamma^2}{16\omega^2 + \Gamma^2} \right) \right]. \quad (19)$$

Оценим коэффициент перед квадратными скобками в выражении (19) при прямом переходе электрона в процессе рекомбинации из зоны проводимости в валентную зону. Полагая для электрона $e^2/r_{nn'} = \hbar\omega$, получаем

$$\frac{8\pi e^2 |r_{nn'}|^2 N_e}{\hbar} = \frac{8\pi e^6 N_e}{\hbar^3 \omega^2}.$$

Частота релаксации для такого электронного перехода равна $\Gamma = \frac{2e^6 \omega}{3\hbar^3 c^3}$ (Приложение В). Подставляя выражение для Γ в коэффициент $\frac{8\pi e^6 N_e}{\hbar^3 \omega^2} = \frac{12\pi c^3 N_e}{\omega^3} \Gamma$, получаем выражение для диэлектрической проницаемости УНТ на частоте перехода ω в виде

$$\varepsilon_c(\omega) = 1 + 12\pi c^3 N_e \left[\frac{4\Gamma}{\omega^2(16\omega^2 + \Gamma^2)} + \frac{i}{\omega^3} \left(1 + \frac{\Gamma^2}{16\omega^2 + \Gamma^2} \right) \right]. \quad (20)$$

Коэффициент поглощения

Коэффициент поглощения УНТ определим как отношение поглощенной мощности в единице объема, $P_a = N\hbar\omega/V$, к средней плотности мощности падающего потока электромагнитного излучения, проходящего через единичную площадь:

$$\alpha(\omega) = \frac{N\hbar\omega}{|\bar{\mathbf{S}}|V}, \quad (21)$$

где $|\bar{\mathbf{S}}| = \frac{c}{8\pi} |\overline{\mathbf{E} \times \mathbf{H}}|$ — средний по времени вектор Пойнтинга (Приложение Г). Для мод УНТ с нулевым азимутальным индексом $l = 0$ из выражения (21) находим коэффициенты поглощения для ТМ- и ТЕ-мод, подставляя в него число межзонных переходов (17),

$$\alpha_{\text{ТМ}}(\omega) = \frac{(2m_{vc})^{3/2}}{\hbar^3 \pi} \frac{|\hat{H}'_{vc}|^2}{(c/4\pi)S_{\text{ТМ}}A^2} \omega \sqrt{\hbar\omega - E_g}, \quad (22)$$

$$\alpha_{\text{ТЕ}}(\omega) = \frac{(2m_{vc})^{3/2}}{\hbar^3 \pi} \frac{|\hat{H}'_{vc}|^2}{(c/4\pi)S_{\text{ТЕ}}B^2} \omega \sqrt{\hbar\omega - E_g}, \quad (23)$$

где

$$S_{\text{ТМ}} = \sqrt{\beta_0^2/k_0^2 + \varepsilon}, \quad S_{\text{ТЕ}} = |\varepsilon|^{-1} \sqrt{\beta_0^2/k_0^2 + \varepsilon},$$

β_0 — постоянная распространения ТМ- или ТЕ-моды соответственно. Подставляя в выражения (22) и (23)

квадраты матричных элементов (Приложение Г), получаем коэффициенты поглощения для ТМ- и ТЕ-мод:

$$\alpha_{\text{ТМ}}(\omega) = \frac{e^2(2m_{vc})^{3/2}}{c\hbar^3 \sqrt{\beta_0^2/k_0^2 + \varepsilon}} |y_{vc}|^2 \omega \sqrt{\hbar\omega - E_g}, \quad (24)$$

$$\alpha_{\text{ТЕ}}(\omega) = \frac{e^2(2m_{vc})^{3/2}}{c\hbar^3 \sqrt{\beta_0^2/k_0^2 + \varepsilon}} r_0^2 |\varphi_{vc}|^2 \omega \sqrt{\hbar\omega - E_g}. \quad (25)$$

Коэффициент усиления

При $T \neq 0$ зона проводимости УНТ частично заполнена электронами до уровня Ферми E_{Fc} , а валентная зона — пустая до уровня Ферми E_{Fv} . Электроны из зоны проводимости переходят в валентную зону с излучением фотона в диапазоне энергий $E_g < \hbar\omega < E_{Fc} - E_{Fv}$, (где $E_{Fv} < 0$), при этом коэффициенты поглощения (24) и (25) $I = I_0 R_1 R_2 e^{2\alpha L}$ меняют знак с минуса на плюс [37]. В этом случае возникает усиление плазмон-поляритонной волны, т.е. генерация нанолазера. Если энергия фотона внешнего электромагнитного поля (накачки) $\hbar\omega_p < E_g$, то коэффициент поглощения $\alpha_{\text{ТМ,ТЕ}}(\omega) = 0$, а поглощение $\alpha_{\text{ТМ,ТЕ}}(\omega) < 0$ имеет место при энергии фотона накачки $\hbar\omega_p > E_{Fc} - E_{Fv}$. Таким образом, при накачке возникает инверсия энергетического состояния в системе, если энергия фотонов накачки принадлежит диапазону $\hbar\omega_p > E_{Fc} - E_{Fv}$, а излучаются инвертированной средой УНТ фотоны с энергией $E_g < \hbar\omega < E_{Fc} - E_{Fv}$.

Накачка нанолазера должна осуществляться оптическим излучением с частотой, при которой поглощаемая энергия фотонов накачки позволит перейти электронам из валентной зоны в зону проводимости УНТ „зигзаг“ на незанятые энергетические уровни. При этом электроны из зоны проводимости переходят в валентную зону с излучением фотонов на частоте лазерного перехода, которая определяется длиной нанорезонатора, образованного в УНТ брэгговскими решетками. Поверхностные плазмоны возбуждаются в нанорезонаторе плазмонного лазера в результате гибридизации излученных фотонов на частоте лазерного перехода и осцилляций электронов в зоне проводимости УНТ, что приводит к генерации когерентных плазмонных волн.

В выражения для коэффициентов усиления (24) и (25) входят квадраты матричных элементов гамильтониана дипольного возмущения для ТМ- и ТЕ-мод, которые могут быть определены через частоту релаксации $\Gamma = A_{mn}$ (Приложение В). Тогда получаем коэффициент усиления нанолазера в виде

$$\alpha(\omega) = \frac{3c^2(2m_{vc})^{3/2}\Gamma \sqrt{\hbar\omega - E_g}}{2\sqrt{\beta_0^2/k_0^2 + \varepsilon} \hbar^2 \omega^2}, \quad (26)$$

где β_0 — постоянная распространения ТМ- или ТЕ-моды УНТ соответственно.

Изменение населенности уровней в УНТ для генерации когерентных плазмонных волн в нанолазере при его накачке и излучении обусловлена также нелинейными эффектами [35–37], что приводит к насыщению коэффициентов усиления мод:

$$\alpha_{\text{TM}}, \alpha_{\text{TE}} \sim (1 + I_{\omega}/I_s)^{-1},$$

где I_{ω} и I_s — интенсивность потока плазмонов на частоте генерации и значение интенсивности насыщения усиления нанолазера.

Параметры нанолазера

Предположим, что генерация нанолазера происходит на телекоммуникационной частоте $\omega = 2\pi c/\lambda_0 = 1.216 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ($\lambda_0 = 1.55 \mu\text{m}$ в воздухе, 0.8 eV). Полагаем, что значение интеграла перекрытия $\gamma_{\text{AB}} = 2.7 \text{ eV}$ (в дисперсионном уравнении (14)), а число электронов в единице объема УНТ „зигзаг“ $N_e = 1.8 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ (в выражении (20)). В этом случае диэлектрическая проницаемость УНТ на этой частоте имеет величину $\varepsilon_c \cong 1.0 + i1.0$. При данной концентрации электронов в зоне проводимости, частоте релаксации $\Gamma = \frac{2e^6\omega}{3\hbar^3c^3} = 3.13 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$, диэлектрической проницаемости УНТ ε_c , а окружающей УНТ среды $\varepsilon = 2.09$ для УНТ „зигзаг“ с индексами (17,0) с радиусом $r_0 = 0.665 \text{ nm}$ для мод с нулевыми азимутальными индексами из уравнений (8) и (9) находим постоянные распространения: ТМ-моды $\beta_{0\text{TM}} = 5.62 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda_{\text{TM}} = 112 \text{ nm}$) и ТЕ-моды $\beta_{0\text{TE}} = 4.51 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda_{\text{TE}} = 140 \text{ nm}$).

УНТ „зигзаг“ с индексами (17,0) имеет радиус $r_0 = 0.665 \text{ nm}$, неоднородности границы УНТ, представляющие брэгговские решетки резонатора (рис. 3), имеют радиус $r_h = 0.509 \text{ nm}$ (индексы УНТ (13,0)). Для входного зеркала (левой брэгговской решетки, рис. 1) при повторе областей УНТ (13,0) $n_1 = 4$ раза и для выходного зеркала (правой решетки, рис. 1) при повторе $n_2 = 4$ раза коэффициенты отражения нанорезонатора по интенсивности найдем как $R_1 = \rho_{(n_1)}\rho_{(n_1)}^*$ (входное) и $R_2 = \rho_{(n_2)}\rho_{(n_2)}^*$ (выходное) зеркала. Постоянные распространения мод для неоднородностей УНТ (13,0) имеют величины $\beta_{0\text{TM}} = 6.27 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ и $\beta_{0\text{TE}} = 5.04 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$, коэффициенты отражения $R_{1\text{TM}} = R_{2\text{TM}} = 0.173$ и $R_{1\text{TE}} = R_{2\text{TE}} = 0.175$, добротность $Q_{\text{TM}} = 10$ и $Q_{\text{TE}} = 8$, пороговые коэффициенты генерации (выражение (13)) $\alpha_{0\text{TM}} = 1.76 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ и $\alpha_{0\text{TE}} = 1.74 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

Из выражения (16) при $k_x = 0$ находим значение ширины запрещенной зоны в УНТ „зигзаг“, равное $E_g = 0.586 \text{ eV}$. Для значений волнового вектора электрона $k = 0.51 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$ при прямом межзонном переходе на частоте $\omega = 1.216 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (0.8 eV) определяем приведенную эффективную массу электрона

$m_{vc} = m_v m_c / (m_v + m_c)$. На частоте генерации с учетом симметрии спектральных ветвей (рис. 4) из выражения (16) находим $m_v = m_c = (d^2\Delta E/dp_x^2)^{-1}$, где $p_x = \hbar k_x$, и получаем значение приведенной массы $m_{vc} = m_c/2 = 0.91 \cdot 10^{-28} \text{ g}$.

Подставляя расчетные параметры в выражение (26), находим значения коэффициентов усиления нанолазера для ТМ-моды $\alpha_{\text{TM}} = 5.10 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ и для ТЕ-моды $\alpha_{\text{TE}} = 6.34 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$, которые превосходят пороговые значения генерации для нанорезонатора на УНТ „зигзаг“ для ТМ-моды в 2.9 раза и для ТЕ-моды в 3.6 раза.

Для нанорезонатора минимальной длины с учетом брэгговских решеток $L_{\text{TM}} \cong 592 \text{ nm}$ (объем поля моды $V_{\text{TM}} = 5.94 \cdot 10^5 \text{ nm}^3$) при генерации на ТМ-моды величина коэффициента Парселла $F_{\text{TM}} = \frac{3\lambda_{\text{TM}}^3}{4\pi} \frac{Q}{V} = 1.79$. Нанолазер на УНТ при превышении порога генерации для интенсивности плазмон-поляритонного потока генерирует когерентное излучение на ТМ-моды с частотой $\omega = 2\pi c/\lambda_0 = 1.216 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ и шириной линии $\Delta\omega_r = F_{\text{TM}}\Gamma = 5.59 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. При генерации на ТЕ-моды нанолазер имеет следующие параметры: $L_{\text{TE}} \cong 737 \text{ nm}$ ($V_{\text{TE}} = 11.6 \cdot 10^5 \text{ nm}^3$), $F_{\text{TE}} = 1.42$, $\Delta\omega_r = 4.45 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$.

Для накачки нанолазера, генерирующего на телекоммуникационной частоте (0.8 eV), можно использовать полупроводниковую квантовую точку, например на основе GaAs с энергией фотонов $1.25\text{--}1.48 \text{ eV}$, т. е. энергия фотонов накачки должна быть больше разности уровней требуемого лазерного перехода 0.8 eV .

Для полупроводниковой квантовой точки, а также от УНТ в нанолазере должен быть реализован теплоотвод для выполнения условия для числа активированных межзонных переходов:

$$N_c/N_v = \exp[(E_c - E_v)/k_B T] > 1,$$

что следует из формулы Больцмана, где k_B — постоянная Больцмана, T — температура УНТ при генерации плазмонных волн в нанолазере. Для стабильной генерации когерентных плазмонных волн в нанолазере требуется термостабилизация системы.

В рассматриваемой линейной идеализированной модели исследован стационарный режим генерации с целью демонстрации реализуемости нанолазера на УНТ.

Заключение

Накачка оптическим излучением нанорезонатора на УНТ с хиральностью „зигзаг“ с полупроводниковыми свойствами увеличивает концентрацию электронов в зоне проводимости. При этом возникают условия для генерации нанолазером потока поверхностных плазмон-поляритонов в нанорезонаторе с брэгговскими решетками в форме периодических неоднородностей на концах УНТ. При превышении порогового значения коэффициентом усиления нанолазер на УНТ генерирует поток

когерентных поверхностных плазмон-поляритонов, который может быть выведен из нанолазера в плазмонный волновод на УНТ. Длина нанорезонатора определяет длину волны когерентных плазмон-поляритонов, в частности возможна генерация на телекоммуникационной частоте, соответствующей длине волны в воздухе 1.55 μm .

Благодарности

Авторы выражают благодарность С.В. Томилину за плодотворное обсуждение работы.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-72-20154, <https://rscf.ru/project/19-72-20154>.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Приложение А

Подставляя в граничные условия Леонтовича $E_z = \xi H_\varphi$ и $H_z = E_\varphi / \xi$ [34] выражения (1) для компонент мод,

$$AK_l(w) = \xi \frac{r_0}{w^2} [Bl\beta K_l(w) - Aik_0\varepsilon w K_l'(w)],$$

$$BK_l(w) = \frac{r_0}{\xi w^2} [Al\beta K_l(w) + Bik_0 w K_l'(w)],$$

получаем систему однородных линейных уравнений для амплитуд A и B :

$$\left[K_l(w) + i\xi \frac{\varepsilon k_0 r_0}{w} K_l'(w) \right] A - \left[\xi \frac{l\beta r_0}{w^2} K_l(w) \right] B = 0,$$

$$\left[\frac{l\beta r_0}{\xi w^2} K_l(w) \right] A + \left[i \frac{k_0 r_0}{\xi w} K_l'(w) - K_l(w) \right] B = 0 \quad (\text{A1})$$

и находим ее детерминант

$$D = -K_l^2(w) - i\xi \frac{\varepsilon k_0 r_0}{w} K_l(w) K_l'(w) + i \frac{k_0 r_0}{\xi w} K_l(w) K_l'(w) - \varepsilon \frac{k_0^2 r_0^2}{w^2} K_l'^2(w) + l^2 \frac{\beta^2 r_0^2}{w^4} K_l^2(w). \quad (\text{A2})$$

Приравняв нулю детерминант (A2), получаем уравнение

$$K_l^2(w) + \varepsilon \frac{k_0^2 r_0^2}{w^2} K_l'^2(w) + i \left(\xi \varepsilon - \frac{1}{\xi} \right) \times \frac{k_0 r_0}{w} K_l(w) K_l'(w) = l^2 \frac{\beta^2 r_0^2}{w^4} K_l^2(w). \quad (\text{A3})$$

Учитывая, что для УНТ с $\mu_c = 1$ импеданс равен $\xi = 1/\sqrt{\varepsilon_c}$, находим, что коэффициент перед третьим

членом уравнения (A3) равен $\xi \varepsilon - \frac{1}{\xi} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\sqrt{\varepsilon_c}}$. Тогда из уравнения (A3) получаем дисперсионное уравнение для постоянных распространения $\beta_l(w)$ плазмон-поляритонных мод УНТ в виде

$$K_l^2(w) + \varepsilon \frac{k_0^2 r_0^2}{w^2} K_l'^2(w) + i \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\sqrt{\varepsilon_c}} \times \frac{k_0 r_0}{w} K_l(w) K_l'(w) = l^2 \frac{\beta^2 r_0^2}{w^4} K_l^2(w). \quad (\text{A4})$$

Для мод с нулевым азимутальным индексом $l = 0$ из уравнения (A4) с учетом свойства функции Макдональда $K_0'(w) = -K_1(w)$ получаем дисперсионное уравнение

$$K_0^2(w) + \varepsilon \frac{k_0^2 r_0^2}{w^2} K_1^2(w) - i \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\sqrt{\varepsilon_c}} \frac{k_0 r_0}{w} K_0(w) K_1(w) = 0. \quad (\text{A5})$$

Представляя уравнение (A5) в форме

$$\frac{K_1^2(w)}{K_0^2(w)} - i \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon \sqrt{\varepsilon_c}} \frac{w}{k_0 r_0} \frac{K_1(w)}{K_0(w)} + \frac{w^2}{\varepsilon k_0^2 r_0^2} = 0$$

и обозначая $K_1(w)K_0^{-1}(w) = \gamma$, ищем корни квадратного уравнения $\gamma^2 - ia_1\gamma + a_2 = 0$, где $a_1 = \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon \sqrt{\varepsilon_c}} \frac{w}{k_0 r_0}$, $a_2 = \frac{w^2}{\varepsilon k_0^2 r_0^2}$; получаем $\gamma_{1,2} = i \left(\frac{a_1}{2} \pm \sqrt{\frac{a_1^2}{4} + a_2} \right)$. Отсюда находим

$$\gamma_{1,2} = i \frac{w}{k_0 r_0} \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{2\varepsilon \sqrt{\varepsilon_c}} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon - \varepsilon_c)^2}{4\varepsilon^2 \varepsilon_c} + \frac{1}{\varepsilon}} \right),$$

т. е. корни уравнения имеют вид

$$\gamma_1 = i \frac{w}{\sqrt{\varepsilon_c} k_0 r_0}, \quad \gamma_2 = -i \frac{w \sqrt{\varepsilon_c}}{\varepsilon k_0 r_0}.$$

Приложение Б

Условия непрерывности для тангенциальных компонент моды нанорезонатора, падающей на неоднородность в резонаторе (i — падающая, r — отраженная, t — прошедшая), имеют вид [39] для ТМ-моды

$$E_{ri} + E_{rr} = E_{rt}, \quad H_{\varphi i} - H_{\varphi r} = H_{\varphi t}$$

и для ТЕ-моды

$$H_{ri} + H_{rr} = H_{rt}, \quad E_{\varphi i} - E_{\varphi r} = E_{\varphi t}.$$

Из выражений (6) и (7) находим связь компонент ТМ-моды: $H_\varphi = \frac{\varepsilon k_0}{\beta_0} E_r$ и ТЕ-моды: $H_r = -\frac{\beta_0}{k_0} E_\varphi$. Условия непрерывности для прямой (+) и обратной (−) мод внутри неоднородности имеют вид $E = E^+ + E^-$, $H = H^+ + H^-$. Тогда получаем соотношения для ТМ-моды $E_h = E_{ri} + E_{rr}$, $H_h = \frac{\varepsilon k_0}{\beta_0} (E_{ri} - E_{rr})$ и для ТЕ-моды $H_h = (-\frac{\beta_0}{k_0})(E_{\varphi i} + E_{\varphi r})$, $E_h = E_{\varphi i} - E_{\varphi r}$. Эти выражения имеют вид:

для ТМ-моды

$$E_h = Ae^{i\beta_{0h}y} + Be^{-i\beta_{0h}y}, \quad H_h = \frac{\varepsilon k_0}{\beta_{0h}} (Ae^{i\beta_{0h}y} - Be^{-i\beta_{0h}y}) \quad (B1)$$

и для ТЕ-моды

$$E_h = Ae^{i\beta_{0h}y} - Be^{-i\beta_{0h}y}, \quad H_h = \left(-\frac{\beta_0}{k_0}\right) (Ae^{i\beta_{0h}y} + Be^{-i\beta_{0h}y}). \quad (B2)$$

Учитывая непрерывность тангенциальных компонент мод на левой $y = 0$ и правой $y = d$ границах одной неоднородности в УНТ, из выражений (B1) и (B2) получаем системы уравнений. Исключая амплитуды A и B из полученных уравнений, находим унимодулярные матрицы для ТМ-моды

$$\begin{pmatrix} E_0 \\ H_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\beta_{0h}d) & -i\frac{\beta_{0h}}{\varepsilon k_0} \sin(\beta_{0h}d) \\ -i\frac{\varepsilon k_0}{\beta_{0h}} \sin(\beta_{0h}d) & \cos(\beta_{0h}d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_d \\ H_d \end{pmatrix} \\ = M_{TM1} \begin{pmatrix} E_d \\ H_d \end{pmatrix} \quad (B3)$$

и для ТЕ-моды

$$\begin{pmatrix} E_0 \\ H_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\beta_{0h}d) & i\frac{k_0}{\beta_0} \sin(\beta_{0h}d) \\ i\frac{\beta_0}{k_0} \sin(\beta_{0h}d) & \cos(\beta_{0h}d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_d \\ H_d \end{pmatrix} \\ = M_{TE1} \begin{pmatrix} E_d \\ H_d \end{pmatrix}. \quad (B4)$$

Для N неоднородностей с шириной d_j вдоль координаты $y = d_1 + d_2 + \dots + d_N$ получаем в последней плоскости $N + 1$ выражение

$$\begin{pmatrix} E_0 \\ H_0 \end{pmatrix} = M_1 M_2 \dots M_N \begin{pmatrix} E_{N+1} \\ H_{N+1} \end{pmatrix}. \quad (B5)$$

Произведение N унимодулярных матриц характеризует брэгговскую решетку

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^N M_j. \quad (B6)$$

Элементы m_{ij} матрицы M находим с помощью выражений для унимодулярной матрицы для ТМ-моды (B3) и матрицы для ТЕ-моды (B4); получаем уравнения для ТМ-моды

$$E_{ri} + E_{rt} = \left(m_{11} + m_{12} \frac{\varepsilon k_0}{\beta_0}\right) E_{rt}, \\ E_{ri} - E_{rt} = \left(\frac{\beta_0}{\varepsilon k_0} m_{21} + m_{22}\right) E_{rt} \quad (B7)$$

и для ТЕ-моды

$$E_{\phi i} - E_{\phi r} = \left(m_{11} - \frac{\beta_0}{k_0} m_{12}\right) E_{\phi t}, \\ E_{\phi i} + E_{\phi r} = \left(m_{22} - \frac{k_0}{\beta_0} m_{21}\right) E_{\phi t}. \quad (B8)$$

Из уравнений (B7) и (B8) находим амплитудные коэффициенты прохождения τ и отражения ρ для ТМ-моды

$$\tau = \frac{E_{rt}}{E_{ri}} = \frac{2}{m_{11} + m_{12} \frac{\varepsilon k_0}{\beta_0} + \frac{\beta_0}{\varepsilon k_0} m_{21} + m_{22}}, \\ \rho = \frac{E_{rr}}{E_{ri}} = \frac{m_{11} + m_{12} \frac{\varepsilon k_0}{\beta_0} - \frac{\beta_0}{\varepsilon k_0} m_{21} - m_{22}}{m_{11} + m_{12} \frac{\varepsilon k_0}{\beta_0} + \frac{\beta_0}{\varepsilon k_0} m_{21} + m_{22}} \quad (B9)$$

и для ТЕ-моды

$$\tau = \frac{E_{\phi t}}{E_{\phi i}} = \frac{2}{m_{11} - \frac{\beta_0}{k_0} m_{12} - \frac{k_0}{\beta_0} m_{21} + m_{22}}, \\ \rho = \frac{E_{\phi r}}{E_{\phi i}} = \frac{m_{22} - \frac{k_0}{\beta_0} m_{21} - m_{11} + \frac{\beta_0}{k_0} m_{12}}{m_{11} - \frac{\beta_0}{k_0} m_{12} - \frac{k_0}{\beta_0} m_{21} + m_{22}}. \quad (B10)$$

Приложение В

Средний дипольный момент $\langle \mathbf{d}_1 \rangle$ электрона с учетом частот релаксации (спонтанного излучения) для электронных переходов равен [38]

$$\langle \mathbf{d}_1 \rangle = \frac{e^2 \mathbf{E}_a}{2\hbar} \sum_n |r_{n0}|^2 \left(\frac{e^{i\omega t}}{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2 + \omega} + \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2 - \omega} + \frac{e^{i\omega t}}{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2 - \omega} + \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2 + \omega} \right), \quad (B1)$$

откуда находим

$$\langle \mathbf{d}_1 \rangle = \frac{e^2 \mathbf{E}_a \cos(\omega t)}{\hbar} \sum_n |r_{n0}|^2 \\ \times \left(\frac{1}{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2 + \omega} + \frac{1}{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2 - \omega} \right). \quad (B2)$$

Преобразуя выражение (B2), получаем дипольный момент электрона с учетом резонансного поглощения и спонтанного излучения в УНТ в виде

$$\langle \mathbf{d}_1 \rangle = \frac{2e^2 \mathbf{E}_a \cos(\omega t)}{\hbar} \sum_n |r_{n0}|^2 \frac{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2}{(\omega_{n0} - i\Gamma_n/2)^2 - \omega^2}. \quad (B3)$$

Диэлектрическую проницаемость УНТ найдем с помощью выражения для вектора индукции $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \varepsilon\mathbf{E}$ подставляя средний дипольный электронный момент (B2) в вектор поляризации среды $\mathbf{P} = \langle \mathbf{d}_1 \rangle N_e$, где N_e — число электронов в единице объема,

$$\varepsilon_c(\omega) = 1 + \frac{2m\omega_e^2}{\hbar} \sum_n |r_{n0}|^2 \frac{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2}{\omega_{n0} - i\Gamma_n/2)^2 - \omega^2}. \quad (B4)$$

Здесь $\omega_e^2 = 4\pi e^2 N_e / m$ — электронная плазменная частота, m — эффективная масса электрона.

Полагаем, что плазмон-поляритонные моды возбуждаются на частоте прямого электронного перехода

$\omega = \omega_{nn'}$ в УНТ. Тогда электронный дипольный момент (B2) равен

$$\langle \mathbf{d}_1 \rangle = \frac{2E_a \cos(\omega t) e^2 |r_{nn'}|^2}{\hbar} \left(\frac{1}{4\omega - i\Gamma} + \frac{i}{\Gamma} \right). \quad (\text{B5})$$

Подставляя дипольный электронный момент (B5) в вектор поляризации среды, получаем выражение для диэлектрической проницаемости УНТ при излучении (поглощении) фотона на частоте электронного перехода ω ,

$$\varepsilon_c(\omega) = 1 + \frac{8\pi e^2 |r_{nn'}|^2 N_e}{\hbar} \left[\frac{4\omega}{16\omega^2 + \Gamma^2} + \frac{i}{\Gamma} \left(1 + \frac{\Gamma^2}{16\omega^2 + \Gamma^2} \right) \right]. \quad (\text{B6})$$

Найдем частоту релаксации Γ_n как обратную величину времени жизни электрона $\tau_n = 1/A_{n0}$ в зоне проводимости до прямого перехода в валентную зону. Плотность энергии, излучаемой электроном при дипольном переходе в единицу времени, определим с помощью интегрирования вектора Пойнтинга с модулем

$$S = \frac{c}{4\pi} \frac{(d^r)^2}{r^2} \frac{\omega^4}{c^4} \sin^2 \theta$$

при $\omega r/c \ll 1$ по поверхности с радиусом $r = a$, окружающей диполь, $d^r = -er_{n0} \exp(-i\omega t) + \text{с.с.}$ [40]. С учетом значений среднего по времени квадрата дипольного момента

$$\overline{(d^r)^2} = \overline{(2d_0^r \cos \omega t)^2} = 2(d_0^r)^2$$

и интеграла по поверхности

$$r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi S \sin \theta d\theta = \frac{4\pi r^2}{3} \frac{c}{4\pi} \frac{(d^r)^2}{r^2} \frac{\omega^4}{c^4}$$

находим плотность энергии излучения диполя в единицу времени

$$E_1 = \frac{2e^2 \omega_{n0}^4}{3c^3} (r_{n0})^2.$$

Коэффициент Эйнштейна [37,40] для спонтанного излучения осциллятора A_{n0} равен энергии излучения осциллятора в единицу времени, деленной на энергию фотона $\hbar\omega_{n0}$, т.е. частота релаксации равна

$$\Gamma_n = A_{n0} = \frac{2e^2 \omega_{n0}^3}{3\hbar c^3} |r_{n0}|^2.$$

Полагая, что для электрона при прямом переходе из зоны проводимости в валентную зону выполняется соотношение $e^2/r_{n0} = \hbar\omega_{n0}$, находим частоту релаксации $\Gamma_n = \frac{2e^6 \omega_{n0}}{3\hbar^3 c^3}$.

Приложение Г

Вектор Пойнтинга ТМ-моды (E_r, H_φ, E_z) равен

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{1}_r (-E_z H_\varphi) + \mathbf{1}_z (E_r H_\varphi)].$$

Для действительных величин компонент мод усредненный по времени вектор Пойнтинга равен

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{c}{8\pi} [-\mathbf{1}_r (E_z H_\varphi^* + H_\varphi E_z^*) + \mathbf{1}_z (E_r H_\varphi^* + H_\varphi E_r^*)].$$

На поверхности УНТ при $r = r_0$ находим модуль вектора Пойнтинга для ТМ-моды

$$\begin{aligned} \bar{S}_{\text{TM}} &= \frac{c}{8\pi} [(E_z H_\varphi^* + H_\varphi E_z^*)^2 + (E_r H_\varphi^* + H_\varphi E_r^*)^2]^{1/2} \\ &= \frac{c}{4\pi} S_{\text{TM}} A^2, \end{aligned}$$

где $S_{\text{TM}} = \sqrt{\beta_0^2/k_0^2 + \varepsilon}$.

Вектор Пойнтинга ТЕ-моды (H_r, E_φ, H_z) равен

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{1}_r (E_\varphi H_z) + \mathbf{1}_z (-E_\varphi H_r)],$$

и усредняя по времени, получаем

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{c}{8\pi} [\mathbf{1}_r (E_\varphi H_z^* + H_z E_\varphi^*) - \mathbf{1}_z (E_\varphi H_r^* + H_r E_\varphi^*)],$$

т.е.

$$\begin{aligned} \bar{S}_{\text{TE}} &= \frac{c}{8\pi} [(E_\varphi H_z^* + H_z E_\varphi^*)^2 + (E_\varphi H_r^* + H_r E_\varphi^*)^2]^{1/2} \\ &= \frac{c}{4\pi} S_{\text{TE}} B^2, \end{aligned}$$

где $S_{\text{TE}} = \varepsilon^{-1} \sqrt{\beta_0^2/k_0^2 + \varepsilon}$.

Матричный элемент гамильтониана возмущения на поверхности УНТ при $r = r_0$ для ТМ-моды

$$\hat{H}'_{vc} = \frac{eA}{2} \int dz \psi_v^*(y) z \psi_c(y) = \frac{eE_z}{2} y_{vc},$$

для ТЕ-моды

$$\hat{H}'_{vc} = \frac{er_0 B}{2} \int d\varphi \psi_v^*(\varphi) \varphi \psi_c(\varphi) = \frac{er_0 E_\varphi}{2} \varphi_{vc},$$

квадраты матричных элементов для ТМ-моды

$$|\hat{H}'_{vc}|^2 = \frac{e^2 E_z^2}{4} |y_{vc}|^2 = \frac{e^2 A^2}{4} |y_{vc}|^2,$$

для ТЕ-моды

$$|\hat{H}'_{vc}|^2 = \frac{e^2 r_0^2 E_\varphi^2}{4} |\varphi_{vc}|^2 = \frac{e^2 r_0^2 B^2}{4} |\varphi_{vc}|^2.$$

Список литературы

- [1] M.I. Stockman. *Opt. Express*, **19** (22), 22029 (2011).
- [2] А.П. Виноградов, Е.С. Андрианов, А.А. Пухов, А.В. Дорофеев, А.А. Лисянский. *УФН*, **182** (10), 1122 (2012). DOI: 10.3367/UFNr.0182.201210j.1122
- [3] В.И. Балыкин. *УФН*, **188** (9), 935 (2018). DOI: 10.3367/UFNr.2017.09.038206
- [4] В.В. Климов. *УФН*, **193** (3), 279 (2023). DOI: 10.3367/UFNr.2022.02.039153
- [5] M.Yu. Gubin, A.Yu. Leksin, A.V. Shesterikov, A.V. Prokhorov, V.S. Volkov. *Nanomaterials*, **10**, 122 (2020). DOI: 10.3390/nano10010122
- [6] М.Ю. Губин, И.В. Дзедолик, Т.В. Прохорова, В.С. Перескоков, А.Ю. Лексин. *Опт. и спектр.*, **130** (3), 448 (2022). DOI: 10.21883/OS.2022.03.52176.2700-21
- [7] I.V. Dzedolik, S.V. Tomilin, S.N. Polulyakh, B.M. Yakubenko. *St. Petersburg State Polytech. Univ. J. Phys. Math.*, **16** (3.1), 163 (2023). DOI: 10.18721/JPM.163.129
- [8] S.I. Azzam, A.V. Kildishev, R.-M. Ma, C.-Z. Ning, R. Oulton, V.M. Shalaev, M.I. Stockman, J.-L. Xu, X. Zhang. *Light: Sci. Appl.*, **9**, 90 (2020). DOI: 10.1038/s41377-020-0319-7
- [9] M.Yu. Gubin, A.V. Shesterikov, S.N. Karpov, A.V. Prokhorov. *Phys. Rev. B*, **97**, 085431 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevB.97.085431
- [10] R.-M. Ma, S.-Y. Wang. *Nanophotonics*, **0298** (2021). DOI: 10.1515/nanoph-2021-0298
- [11] D.J. Bergman, M.I. Stockman. *Phys. Rev. Lett.*, **90** (2), 027402 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.027402
- [12] И.Е. Проценко. *УФН*, **182** (10), 1116 (2012). DOI: 10.3367/UFNr.0182.201210i.1116
- [13] M.A. Noginov, G. Zhu, A.M. Belgrave, R. Bakker, V.M. Shalaev, E.E. Narimanov, S. Stout, E. Herz, T. Suteewong, U. Wiesner. *Nature*, **460**, 1110 (2009). DOI: 10.1038/nature08318
- [14] M.I. Stockman. *Adv. Photon.*, **2** (5), 054002 (2020). DOI: 10.1117/1.AP.2.5.054002
- [15] C. Jayasekara, M. Premaratne, M.I. Stockman, S.D. Gunapala. *J. Appl. Phys.*, **118**, 173101 (2015).
- [16] I.O. Zolotovskii, Yu.S. Dadoenkova, S.G. Moiseev, A.S. Kadochkin, V.V. Svetukhin, A.A. Fotiadi. *Phys. Rev. A*, **97**, 053828 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevA.97.053828
- [17] H. Li, Z.-T. Huang, K.-B. Hong, M.-W. Yu, C.-H. Wu, C.-S. Yang, T.-R. Lin, K.-P. Chen, T.-C. Lu. *J. Appl. Phys.*, **131**, 011101 (2022). DOI: 10.1063/5.0061329
- [18] J. Wang, W. Wei, X. Yan, J. Zhang, X. Zhang, X. Ren. *Opt. Express*, **25** (8), 9358 (2017). DOI: 10.1364/OE.25.009358
- [19] M.J.H. Marell, B. Smalbrugge, E.J. Geluk, P.J. van Veldhoven, B. Barcones, B. Koopmans, R. Nötzel, M.K. Smit, M.T. Hill. *Opt. Express*, **19** (16), 15109 (2011).
- [20] C. Couteau, A. Larrue, C. Wilhelm, C. Soci. *Nanophotonics*, **4**, 90 (2015). DOI: 10.1515/nanoph-2015-0005
- [21] L. Xu, F. Li, Y. Liu, F. Yao, S. Liu. *Appl. Sci.*, **9**, 861 (2019). DOI: 10.3390/app9050861
- [22] Z. Gu, Q. Song, S. Xiao. *Front. Chemistry*, **8**, 613504 (2021). DOI: 10.3389/fchem.2020.613504
- [23] M.-S. Hwang, H.-R. Kim, K.-Y. Jeong, H.-G. Park, Yu. Kivshar. *Nanophotonics*, **10** (14), 0265 (2021). DOI: 10.1515/nanoph-2021-0265
- [24] О.В. Кибис, М.Е. Портной. *Письма в ЖТФ*, **31** (15), 85 (2005).
- [25] S. Iijima. *Lett. Nature*, **354** (11), 56 (1991).
- [26] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Appl. Phys. Lett.*, **60** (18), 2204 (1992). DOI: 10.1063/1.107080
- [27] Ю.И. Лозовик, А.М. Попов. *УФН*, **167** (7), 751 (1997).
- [28] T. Ando. *J. Phys. Soc. Japan*, **74** (3), 777 (2005). DOI: 10.1143/JPSJ.74.777
- [29] М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, Е.В. Сочнева. *ФТТ*, **53** (1), 194 (2011).
- [30] И.В. Дзедолик, А.Д. Ляшко. *Опт. и спектр.*, **132** (10), 1087 (2024). DOI: 10.61011/OS.2024.10.59424.5988-24
- [31] И.А. Александров, Д.В. Чубуков, Н.Н. Розанов. *Опт. и спектр.*, **131** (11), 1582 (2023). DOI: 10.61011/OS.2023.11.57029.129-23
- [32] Н.Н. Розанов. *Опт. и спектр.*, **132** (8), 839 (2024). DOI: 10.61011/OS.2024.08.59030.136-24
- [33] П. Харрис. *Углеродные нанотрубы и родственные структуры* (Техносфера, М., 2003).
- [34] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред* (Наука, Физ.-мат. лит., М., 1982).
- [35] Н.В. Карлов. *Лекции по квантовой электронике* (Наука, Физ.-мат. лит., М., 1988).
- [36] Р. Пантел, Г. Путхоф. *Основы квантовой электроники* (Мир, М., 1972).
- [37] А. Ярив. *Квантовая электроника и нелинейная оптика* (Сов. радио, М., 1973).
- [38] А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (Физ.-мат. лит., М., 1963).
- [39] М. Руссо, Ж.П. Матъе. *Задачи по оптике* (Мир, М., 1976).
- [40] Р. Дитчберн. *Физическая оптика* (Физ.-мат. лит., М., 1965).