ЖУРНАЛ НАНО- ТА ЕЛЕКТРОННОЇ ФІЗИКИ *JOURNAL OF NANO- AND ELECTRONIC PHYSICS*
Том **9** № 1, 01017(4сс) (2017) Vol. **9** No 1, 01017(4pp) (2017)

Поверхневі плазмони у вуглецевих нанотрубках еліптичного перерізу

А.В. Коротун[1,*], І.М. Тітов[2], А.О. Коваль[1]

[1] *Запорізький національний технічний університет, вул. Гоголя 64, 69063 Запоріжжя,Україна*
[2] *Таврійський державний агротехнологічний університет, пр. Б. Хмельницького 18, 72310 Мелітополь, Україна*

(Одержано 31.10.2016, опубліковано online 20.02.2017)

У роботі на основі повної системи рівнянь Максвелла описуються поверхневі плазмові хвилі у металевих вуглецевих нанотрубках. З використанням методу збурення форми межі отримано дисперсійне рівняння для плазмонів у нанотрубках із еліптичним поперечним перерізом. Проведено порівняння розрахованих дисперсійних кривих із дисперсійними кривими для поверхневих плазмонів у інших системах. Показано, що збільшення деформації поперечного перерізу нанотрубки призводить до зміщення дисперсійних залежностей у довгохвильовий бік спектра.

Ключові слова: Вуглецева нанотрубка, Поверхневі плазмони, Ексцентриситет, Збурення форми межі, Дисперсійне рівняння.

DOI: 10.21272/jnep.9(1).01017 PACS numbers: 73.20.Mf, 78.67.Ch

1. ВСТУП

Вуглецеві нанотрубки (ВНТ) знаходять широке використання в наноелектроніці як одноелектронні транзистори, провідники струму, комірки пам'яті, дипольні антени, мікрорезонатори, елементи дисплеїв, що працюють на матриці ВНТ. Крім того, нанотрубка може розглядатися як вістря для скануючого тунельного мікроскопа [1, 2].

У теперішній час електромагнітні і, насамперед, оптичні властивості ВНТ є предметом інтенсивних теоретичних та експериментальних досліджень. Так, в роботах [3, 4] досліджено оптичні та плазмонні властивості ВНТ, пов'язані з міжпідзонними переходами з використанням наближення випадкових фаз (RPA). За допомогою імпедансних граничних умов у рамках навпівкласичного та квантово-механічного підходів авторами [5] досліджено динамічну провідність одно- та багатостінних ВНТ із різними хіральностями. Розрахунки поверхневої провідності металевих і напівпровідникових ВНТ zigzag-конфігурації проведено в [6].

Спектри плазмонів в одношаровій та багатошаровій ВНТ у потенціальному наближенні для самоузгодженого електромагнітного поля хвилі розраховано в [3]. Проте, нехтування ефектами запізнення в міжелектронній взаємодії обмежує область застосовності потенціального наближення умовою малості фазової швидкості досліджуваних хвиль у порівнянні зі швидкістю світла в діелектрику, що оточує ВНТ. Крім того, нехтування магнітним полем хвилі і вихровою складовою електричного поля виключає можливість опису процесів збудження і радіаційного загасання плазмонів. В [7] із системи рівнянь Максвелла для полів і ліанеризованих рівнянь гідродинаміки для 2D-електронного газу з відповідними граничними умовами отримано дисперсійне рівняння для поверхневих плазмон-поляритонів у металевих одностінних ВНТ.

Отже, питання дослідження колективних збуджень електронної підсистеми ВНТ, зокрема плазмових хвиль, є актуальним. Проте випадок поширення плазмових хвиль у ВНТ із деформованим перерізом не розглядався. Тому метою даної роботи є одержання дисперсійного рівняння для плазмових коливань у ВНТ із еліптичним поперечним перерізом.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Розглянемо одношарову вуглецеву НТ з еліптичним перерізом, ефективний радіус якої r_0 ($r_0 = (a+b)/2$, a і b – велика і мала напівосі еліпсу) а вісь орієнтована уздовж осі z декартової системи координат. Вважаємо, що товщина стінок НТ набагато менша за її ефективний радіус, а довжина L настільки велика, що крайовими ефектами можна знехтувати. Крім того, НТ розміщена в однорідному, ізотропному, непровідному, немагнітному середовищі зі сталою діелектричною проникністю ϵ, а міжелектронна взаємодія враховується в наближенні самоузгодженого поля. В класичному наближенні поле власних (плазмових) коливань електронного газу можна описати за допомогою неоднорідного хвильового рівняння для векторного потенціалу $\boldsymbol{\mathcal{A}}$

$$\Delta\boldsymbol{\mathcal{A}} - \frac{\epsilon}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{\mathcal{A}}}{\partial t^2} = -\mu_0\mathbf{j}\,. \qquad (1)$$

Внаслідок відповідної симетрії системи , що розглядається, зручно скористатися еліптичною циліндричною системою координат. Проте, у випадку, коли ексцентриситет ВНТ є малим ($\varepsilon = \sqrt{1-\frac{b^2}{a^2}} \ll 1$) можна використовувати метод збурення форми межі, запропонований у роботі [8]. Відповідно до ідеології цього методу задачу можна розв'язувати в циліндричній системі координат зі "збуреними" граничними умовами.

У зв'язку з тим, що ВНТ має нескінченно тонкі

* andko@zntu.edu.ua

стінки, густину струму можна представити через поверхневий струм

$$j_z(r,z,t)=j_z(z)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\delta(r-r_0)\,. \tag{2}$$

Відповідно до цього векторний потенціал буде мати тільки одну ненульову компоненту $\mathcal{A}_z$ і розв'язок (1) шукатимемо у вигляді

$$\mathcal{A}_z(r,z,t)=\mathcal{A}_z(r,z)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,. \tag{3}$$

Тоді рівняння (1) запишемо так

$$\Delta\mathcal{A}_z+\frac{\epsilon\omega^2}{c^2}\mathcal{A}_z=-\mu_0 j_z(z)\,\delta(r-r_0)\,. \tag{4}$$

Застосовуючи до (4) перетворення Фур'є за координатою z, з урахуванням матеріального співвідношення, яке встановлює зв'язок між поверхневою густиною струму j_z та напруженістю $\mathscr{E}$ електричного поля

$$j_z(\kappa)=\sigma_0\mathscr{E}(r_0,\kappa)\,, \tag{5}$$

де

$$\sigma_0=\mathrm{i}\,\frac{e^2 n_s}{m^*\omega}$$

σ_0- провідність Друде; m^* – ефективна маса електронів; n_s – поверхнева концентрація електронів та зв'язку напруженості електричного поля з векторним потенціалом, рівняння (4) перепишемо у вигляді [9]:

$$\begin{gathered}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\kappa_q^2\right)\mathcal{A}_z(r,\,\kappa_q)=\\ =\delta(r-r_0)\frac{1}{\epsilon_0\epsilon}\,\mathrm{i}\,\frac{\sigma_0}{\omega}\kappa_q^2\mathcal{A}_z(r_0,\,\kappa_q)\end{gathered}\,, \tag{6}$$

де

$$\kappa_q^2=q^2-\frac{\epsilon\omega^2}{c^2}\,,$$

а q – поздовжнє хвильове число.

Оскільки вся неоднорідність рівняння (6) зосереджена на поверхні ВНТ ($r=r_0$), розв'язок цього рівняння можна знайти, зшиваючи розв'язки відповідного однорідного рівняння

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\kappa_q^2\right)\mathcal{A}_z(r,\kappa_q)=0 \tag{7}$$

для областей всередині і ззовні нанотрубки

$$\mathcal{A}_z(r,\kappa_q)=\begin{cases}\mathcal{A}_{1z}=C_1 I_0(\kappa_q r), & r<r_0;\\ \mathcal{A}_{2z}=C_2 K_0(\kappa_q r), & r>r_0,\end{cases} \tag{8}$$

де $I_m(x)$ та $K_m(x)$ – функції Інфельда і Макдональда.

Внаслідок малості ексцентриситету еліптичного перерізу ВНТ векторний потенціал можна розкласти в ряд Тейлора за степенями ексцентриситету при $r=r_0$. Обмежуючись першими двома членами розкладу, запишемо граничні умови у вигляді:

$$\begin{gathered}\mathcal{A}_{1z}(r_0,\,\kappa_q)+\varepsilon r_0\frac{\partial}{\partial r}\mathcal{A}_{1z}(r_0,\,\kappa_q)=\mathcal{A}_{2z}(r_0,\,\kappa_q)+\varepsilon r_0\frac{\partial}{\partial r}\mathcal{A}_{2z}(r_0,\,\kappa_q);\\ \frac{\partial}{\partial r}\mathcal{A}_{2z}(r_0,\,\kappa_q)-\frac{\partial}{\partial r}\mathcal{A}_{1z}(r_0,\,\kappa_q)+\varepsilon r_0\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\mathcal{A}_{2z}(r_0,\,\kappa_q)-\frac{\partial^2}{\partial r^2}\mathcal{A}_{1z}(r_0,\,\kappa_q)\right)=\frac{1}{\epsilon_0\epsilon}\,\mathrm{i}\,\frac{\sigma_0}{\omega}\kappa_q^2\left(\mathcal{A}_{1z}(r_0,\,\kappa_q)+\varepsilon r_0\frac{\partial}{\partial r}\mathcal{A}_{1z}(r_0,\,\kappa_q)\right)\end{gathered} \tag{9}$$

Підставляючи розв'язок (8) в граничні умови (9), матимемо

$$\begin{gathered}C_1\left[I_0(\kappa_q r_0)+\varepsilon r_0\kappa_q I_0'(\kappa_q r_0)\right]-C_2\left[K_0(\kappa_q r_0)+\varepsilon r_0\kappa_q K_0'(\kappa_q r_0)\right]=0;\\ -C_1\left[I_0'(\kappa_q r_0)+\varepsilon r_0\kappa_q I_0''(\kappa_q r_0)+\frac{1}{\epsilon_0\epsilon}\,\mathrm{i}\,\frac{\sigma_0}{\omega}\kappa_q\left(I_0(\kappa_q r_0)+\varepsilon r_0\kappa_q I_0'(\kappa_q r_0)\right)\right]+C_2\left[K_0'(\kappa_q r_0)+\varepsilon r_0\kappa_q K_0''(\kappa_q r_0)\right]=0\end{gathered} \tag{10}$$

Як відомо, розв'язки такої системи існують лише у тому випадку, коли її визначник дорівнює нулю. Використовуючи цей факт, а також відомі співвідношення для похідних функцій Інфельда та Макдональда [10], отримуємо дисперсійне співвідношення для плазмових хвиль у ВНТ еліптичного поперечного перерізу:

$$\begin{gathered}\omega^2=\frac{e^2 n_s}{\epsilon_0 m^*}\frac{\kappa_q}{\epsilon}\frac{I_0(\kappa_q r_0)K_0(\kappa_q r_0)-\varepsilon r_0\kappa_q\left[I_0(\kappa_q r_0)K_1(\kappa_q r_0)-I_1(\kappa_q r_0)K_0(\kappa_q r_0)\right]}{I_0(\kappa_q r_0)K_1(\kappa_q r_0)+I_1(\kappa_q r_0)K_0(\kappa_q r_0)}\times\\ \times\left\{1+\frac{1}{2}\varepsilon r_0\kappa_q\frac{K_0(\kappa_q r_0)I_2(\kappa_q r_0)-I_0(\kappa_q r_0)K_2(\kappa_q r_0)}{I_0(\kappa_q r_0)K_1(\kappa_q r_0)+I_1(\kappa_q r_0)K_0(\kappa_q r_0)}\right\}.\end{gathered} \tag{11}$$

Обмежуючись у дисперсійному рівнянні (11) членами першого порядку за ексцентриситетом, отримуємо остаточно

$$\omega^2=\frac{e^2 n_s}{\epsilon_0 m^*}\frac{\kappa_q}{\epsilon}\frac{1}{I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_1\left(\kappa_q r_0\right)+I_1\left(\kappa_q r_0\right)K_0\left(\kappa_q r_0\right)}\Big\{I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_0\left(\kappa_q r_0\right)-$$
$$-\varepsilon r_0\kappa_q\left[I_1\left(\kappa_q r_0\right)K_0\left(\kappa_q r_0\right)-I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_1\left(\kappa_q r_0\right)+\frac{1}{2}\times I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_0\left(\kappa_q r_0\right)\frac{K_0\left(\kappa_q r_0\right)I_2\left(\kappa_q r_0\right)-I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_2\left(\kappa_q r_0\right)}{I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_1\left(\kappa_q r_0\right)+I_1\left(\kappa_q r_0\right)K_0\left(\kappa_q r_0\right)}\right]\Big\}. \quad (12)$$

Розглянемо деякі граничні випадки рівняння (12):

1) у випадку $\varepsilon \to 0$ (циліндрична ВНТ), як і в роботі [9], матимемо

$$\omega^2=\frac{e^2 n_s}{\epsilon_0 m^*}\frac{\kappa_q}{\epsilon}\frac{I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_0\left(\kappa_q r_0\right)}{I_0\left(\kappa_q r_0\right)K_1\left(\kappa_q r_0\right)+I_1\left(\kappa_q r_0\right)K_0\left(\kappa_q r_0\right)}; \quad (13)$$

2) для довгохвильових плазмонів ($\kappa_q r_0 << 1$), використовуючи асимптотики функцій $I(x)$ та $K(x)$ [10], отримуємо наступне дисперсійне рівняння

$$\omega^2=\frac{e^2 n_s}{\epsilon_0 m^*}\frac{\kappa_q^2 r_0}{\epsilon}(1-\varepsilon)\ln\left(\frac{2}{\gamma\kappa_q r_0}\right), \quad (14)$$

де $\gamma \approx 1{,}78$ – постійна Ейлера.

При $\varepsilon \to 0$ рівняння (14) співпадає з результатом для довгохвильового випадку, отриманим у [9].

3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки було проведено для ВНТ zigzag-конфігурації з різними хіральностями (табл. 1), значеннями: концентрації $n_s = 1{,}53\cdot 10^{14}$ см$^{-2}$ [11], товщини стінок ВНТ $d = 0{,}54$ нм, діелектричної проникності $\epsilon = 1$

Таблиця 1 – Значення хіральностей та відповідних їм ефективних радіусів ВНТ

m	r_0, нм
3	0,117
15	0,587
30	1,170

Плазмонна мода, дисперсійні криві для якої наведені на рис. 1, є аналогом TM_0-моди в суцільному циліндричному металевому дроті, дисперсійна крива для якої наведена в [12].

Відмітимо, що розраховані дисперсійні криві якісно подібні кривим для плазмонів на плоскій межі поділу метал – діелектрик, наведеним у [13].

На рис. 1, а наведено дисперсійні криві для ВНТ різного радіусу з ексцентриситетом $\varepsilon = 0{,}05$. Як видно з рисунку, всі залежності якісно подібні, а у випадку хіральностей $m = 15$ і 30 близькі і кількісно. Результати розрахунків для випадку $m = 3$ суттєво відрізняються від інших, що пов'язане з сильним електростатичним відштовхуванням електронів для ВНТ малого радіуса.

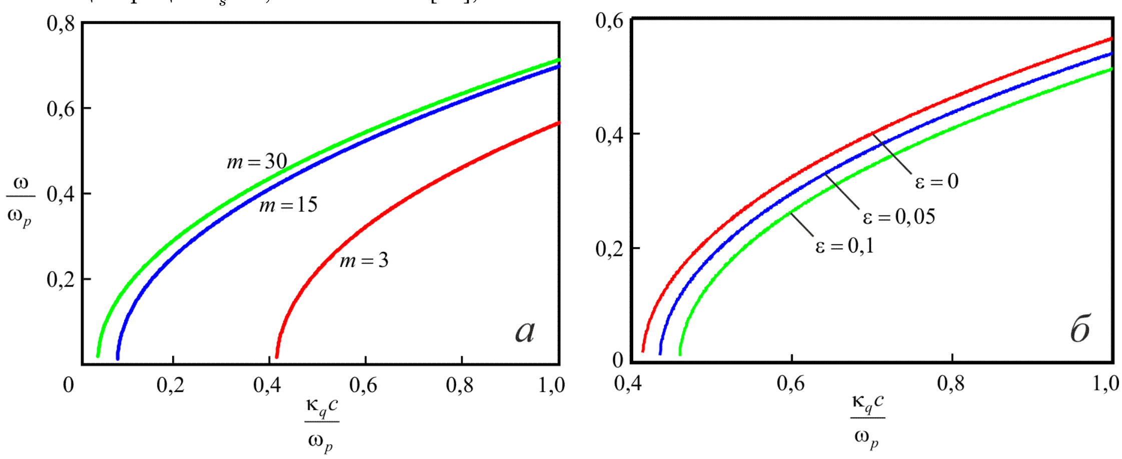

Рис. 1 – Дисперсійні криві для поверхневих плазмонів у ВНТ з різними значеннями ефективного радіусу при $\varepsilon = 0{,}05$ (а) та різними ексцентриситетами для $r_0 = 0{,}117$ нм (б)

На рис. 1, б продемонстровано вплив деформації поперечного перерізу на дисперсійні залежності для ВНТ $(3, 0)$. Значення відносної частоти плазмонів за одних і тих самих хвильових чисел зменшуються зі зростанням ексцентриситету у повній відповідності з формулою (12), тобто відбувається зміщення відносної частоти у довгохвильову область. Ця мода є аналогом плазмонної моди з $\omega_{sp} = \omega_p / \sqrt{1 + a\epsilon_d / b}$ ($a > b$, ϵ_d - діелектрична проникність оточуючого діелектричного середовища), яка існує в металевому циліндричному нанодроті.

4. ВИСНОВКИ

У роботі одержано дисперсійне рівняння для плазмонів у ВНТ з еліптичним поперечним перерізом у першому порядку теорії збурень за ексцентриситетом. Розглянуто граничні випадки – випадок циліндричної нанотрубки та довгохвильовий випадок.

Проведено порівняння розрахованих дисперсійних кривих із дисперсійними кривими для плазмонів на плоскій межі поділу метал – діелектрик і для TM_0 -плазмонів у суцільному циліндричному металевому нанодроті.

Показано, що дисперсійні залежності для плазмонів у ВНТ із фіксованим ексцентриситетом і різною хіральністю, тобто різними значеннями ефективного радіусу якісно подібні, а кількісно суттєво відрізняються для нанотрубок із малою хіральністю, що зумовлене впливом на плазмові коливання кулонівського відштовхування електронів.

Встановлено, що збільшення ексцентриситету еліптичного поперечного перерізу ВНТ призводить до зсуву відносної частоти плазмонів у довгохвильову область спектра.

Поверхностные плазмоны в углеродных нанотрубках эллиптического сечения

А.В. Коротун[1], И.Н. Титов[2], А.А. Коваль[1]

[1] *Запорожский национальный технический университет, ул. Гоголя 64, 69063 Запорожье, Украина*
[2] *Таврический государственный агротехнологический университет, пр. Б. Хмельницкого 18, 72310 Мелитополь, Украина*

В работе на основе полной системы уравнений Максвелла описываются поверхностные плазменные волны в металлических углеродных нанотрубках. С использованием метода возмущения формы границы получено дисперсионное уравнение для плазмонов в нанотрубках с эллиптическим поперечным сечением. Проведено сравнение рассчитанных дисперсионных кривых с дисперсионными кривыми для поверхностных плазмонов в других системах. Показано, что увеличение деформации поперечного сечения нанотрубки приводит к смещению дисперсионных зависимостей в длинноволновую часть спектра.

Ключевые слова: Углеродная нанотрубка, Поверхностные плазмоны, Эксцентриситет, Возмущение формы границы, Дисперсионное уравнение.

Surface Plasmons in Carbon Nanotubes with Elliptical Cross Section

A.V. Korotun[1], I.M. Titov[2], A.O. Koval'[1]

[1] *Zaporizhzhya National Technical University, 64, Gogol St., 69063 Zaporizhia, Ukraine*
[2] *Taurian State Agrotechnology University, 18, B. Khmelnitsky Pr., 72310 Melitopol, Ukraine*

The paper describes surface plasmons in metallic carbon nanotubes based on the complete system of Maxwell's equations. Dispersion relation for plasmons in nanotubes with an elliptic cross section has been obtained with the use of the boundary perturbation method. The calculated dispersion curves were compared with the dispersion curves for surface plasmons in other systems. It has been shown that a increase of deformation of the cross section nanotube leas to displacement of dispersion dependences on the long-wavelength edge of the spectrum.

Keywords: Carbon nanotube, Surface plasmons, Eccentricity, The boundary shape perturbation, Dispersion relation.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Fundamental and Applied Nano-Electromagnetics* (Ed. A. Maffucci, S.A. Maksimenko) (Dordrecht: Springer: 2016).
2. П.Н. Дьячков, *Электронные свойства и применение нанотрубок* (Москва: Бином: 2011) (P.N. D'yachkov, *Elektronnyye svoystva i primeneniye nanotrubok* (Moskva: Binom: 2011)).
3. M.F. Lin, K.W.-K. Shung, *Phys. Rev. B* **47**, 6617 (1993).
4. M.F. Lin, K.W.-K. Shung, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 3543 (1997).
5. G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko, A. Lakhtakia, O. Yevtushenko, A.V. Gusakov, *Phys. Rev. B* **60**, 17136 (1999).
6. A.V. Korotun, I.M. Titov, Ya.V. Karandas, *J. Nano- Electron. Phys.* **7** No 2, 02021 (2015).
7. A. Moradi, *Photon. Nanostr. Fund. Appl.* **11**, 85 (2013).
8. A.V. Korotun, *Phys. Solid State* **56** No 6, 1245 (2014).
9. Д.В. Гурьевской, *Вест. СПбГУ*, Сер. 4 №4, 48 (2013) (D.V. Gur'yevskoy, *Vest. SPbGU*, Ser. 4 No 4, 48 (2013)).
10. *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами* (Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган) (Москва: Наука, 1979) (*Spravochnik po spetsial'nym funktsiyam s formulami, grafikami i matematicheskimi tablitsami* (Pod red. M. Abramovitsa, I. Stigan) (Moskva: Nauka, 1979)).
11. A. Maffucci, G. Miano, F. Villone, *Int. J. Circ. Theor. Appl.* **36**, 31 (2008).
12. D.V. Guzatov, V.V. Klimov, *Phys. Rev. A* **75**, 052901 (2007).
13. В.В. Климов, *Наноплазмоника* (Москва: Физматлит: 2009) (V.V. Klimov, *Nanoplazmonika* (Moskva: Fizmatlit: 2009)).