ЖУРНАЛ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ, 2021, том 66, № 3, с. 364–370

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 539.149

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ ВДОЛЬ ОСИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

П. Н. Дьячков[a], *, Е. П. Дьячков[a]

[a] *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия*

**e-mail: p_dyachkov@rambler.ru*

Поступила в редакцию 06.09.2020 г.
После доработки 08.10.2020 г.
Принята к публикации 12.10.2020 г.

Рассчитаны фазовые и групповые скорости распространения электрического и магнитного поля вдоль оси металлических углеродных нанотрубок. Рассмотрение проведено в рамках модели, согласно которой электронное распределение в нанотрубках описывается цилиндрическим слоем почти свободного электронного газа с учетом эффектов его возмущения внешним электрическим полем и межэлектронным взаимодействием. Для поперечного магнитного поля (ТМ-типа) и поперечного электрического поля (ТЕ-типа) определены зависимости частоты поля и фазовых и групповых скоростей от волнового числа k_z. Установлено, что частоты всех ТЕ-мод с увеличением k_z монотонно растут, групповые скорости положительны и направления распространения фазовой и групповой волн совпадают. Для мод ТМ-типа при низких значениях k_z групповая скорость отрицательна и направления распространения фазовой волны и групповой волны противоположны, что может иметь практическое значение для создания на их основе средств управления передачей сигналов и энергии между элементами наноэлектроники.

Ключевые слова: моделирование, углеродные нанотрубки, электромагнитные поля, распространение

DOI: 10.31857/S0044457X21030077

ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки (**УНТ**) образованы неметаллическими атомами, тем не менее некоторые УНТ обладают металлическим электронным типом зонной структуры и высокой электропроводностью вплоть до сверхпроводимости и баллистического электронного и спинового транспорта при низких температурах [1–4]. Геометрию одностенных УНТ можно представить как результат сворачивания в виде цилиндра ленты, вырезанной из графитового слоя (графена), причем ориентация углеродных шестиугольников в УНТ определяется целыми индексами n_1 и n_2 [1, 2]. Все УНТ (n, n) с одинаковыми значениями $n_1 = n_2 = n$ металлические. Благодаря высокой электропроводности, теплопроводности и термической стабильности они могут использоваться в качестве проводов для переноса заряда и электромагнитного излучения между элементами наноэлектроники [1, 2]. В последнем случае металлические УНТ служат в качестве нановолноводов, в которых перенос фотонов вдоль нанопровода осуществляется с участием поверхностных плазмонов, т.е. возбужденных электронных состояний, связанных с электромагнитным излучением [5–11]. Ведущая роль поверхности нанотрубки обусловлена тем, что лазерное излучение не может быть сконцентрировано в областях менее сотен нанометров, т.е. ниже дифракционного предела света.

Цель настоящей работы – рассчитать частотные зависимости фазовых и групповых скоростей распространения электрического и магнитного поля вдоль оси УНТ (n, n) с n = 5, 10, 15 и 20. Будем считать, что УНТ не содержат дефектов строения и являются идеальными проводящими системами, в которых отсутствуют потери энергии. При этом задача сводится к определению структуры и условий существования электромагнитных полей, которые будем считать монохроматическими. Задача определения поля, т.е. векторов **E** и **H**, тогда сводится к интегрированию волновых уравнений с учетом граничных условий на поверхности трубки. Рассмотрение будет проведено в рамках развитой ранее так называемой линеаризованной гидродинамической модели, согласно которой электронное распределение в УНТ описывается цилиндрическим слоем почти свободного электронного газа [12–19]. Эта модель первоначально была предложена для изучения диэлектрических свойств и коллективных возбуждений σ- и π-электронов в УНТ, для расчетов эффектов торможения заряженных частиц, движущихся перпендикулярно и параллельно оси УНТ, и для интерпретации спектров энергетических потерь электронов в УНТ [5, 12, 20, 21].

МЕТОД РАСЧЕТА

Следуя [13–16], будем рассматривать УНТ как бесконечно тонкую и длинную цилиндрическую оболочку радиуса a и полагать, что валентные электроны равномерно распределены по поверхности УНТ с такой же плотностью $n_0 = 1.52 \times 10^{20}$ м$^{-2}$, что и в графене. Используем цилиндрические координаты $\mathbf{r} = (r, \varphi, z)$ и рассмотрим гармоническую электромагнитную волну с частотой ω, распространяющуюся вдоль оси нанотрубки z:

$$\mathbf{E}(r,\varphi,z,t) = \mathbf{E}(r,\varphi)\, e^{i(\omega t - k_z z)}, \tag{1}$$

$$\mathbf{B}(r,\varphi,z,t) = \mathbf{B}(r,\varphi)\, e^{i(\omega t - k_z z)}, \tag{2}$$

где k_z характеризует периодичность поля вдоль оси системы и называется волновым числом или постоянной распространения направляемой волны.

Электромагнитная волна будет возмущать однородное распределение электронов, которое можно рассматривать как заряженную жидкость с полем скоростей $\mathbf{u}(\mathbf{r}_S, t)$ и возмущенной плотностью $n_1(\mathbf{r}_S, t)$, где $\mathbf{r}_S = (\varphi, z)$ – координаты точки на цилиндрической поверхности УНТ. Смещения электронов должны подчиняться уравнению непрерывности [13–16]:

$$\frac{\partial n_1(\mathbf{r}_S,t)}{\partial t} + n_0 \nabla_\parallel \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}_S,t) = 0 \tag{3}$$

и условию сохранения импульса:

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{r}_S,t)}{\partial t} = -\frac{e}{m_e}\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}_S,t) - \frac{\alpha}{n_0}\nabla_\parallel n_1(\mathbf{r}_S,t) + \frac{\beta}{n_0}\nabla_\parallel\left(\nabla_\parallel^2 n_1(\mathbf{r}_S,t)\right), \tag{4}$$

где $\mathbf{E}_\parallel = E_z\hat{e}_z + E_\phi\hat{e}_\phi$ – тангенциальная составляющая электромагнитного поля, e – заряд, а m_e – масса электрона. Оператор

$$\nabla_\parallel = \hat{e}_z\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{a}\hat{e}_\phi\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{5}$$

отвечает дифференцированию по касательной к поверхности нанотрубки. Выражение $e\mathbf{E}_\parallel(\mathbf{r}_S,t)$ в правой части уравнения (4) – это сила, действующая на электрон на поверхности нанотрубки; второе и третье слагаемые моделируют силы межэлектронного взаимодействия в электронном газе. Здесь $\alpha = v_F^2/2 \approx 6.4 \times 10^{12}$ м^2/с^2 выражается через скорость Ферми двумерного электронного газа v_F в графене, а $\beta = (a_B v_B)^2/4 \approx 3.3 \times 10^{-9}$ м^4/с^2 – через боровские радиус a_B и скорость v_B.

Векторы электрического $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и магнитного $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ поля могут быть найдены из волновых уравнений и вместе с индуцированной электронной плотностью $n_1(\mathbf{r}_S, t)$ представлены в виде разложения в ряды Фурье. Соответствующие выражения приведены в работах [13–16]. Таким образом, с учетом граничных условий для электрического и магнитного поля, согласно которым в присутствии индуцированной электронной плотности на поверхности нанотрубки радиальная составляющая электрического поля претерпевает разрыв при $r = a$, магнитное поле непрерывно и отсутствуют градиенты поля на поверхности идеального проводника, можно определить дисперсионные соотношения между частотой ω и k_z в высокочастотном режиме, когда $k_z \gg \omega/c$ [13–16]:

$$\omega_m^{TE} = \left(\alpha\left(k_z^2 + \frac{m^2}{a^2}\right) + \beta\left(k_z^2 + \frac{m^2}{a^2}\right)^2 - \Omega_p^2 k_z^2 a^2 I_m'(k_z a)\, K_m'(k_z a)\right)^{1/2}, \tag{6}$$

$$\omega_m^{TM} = \left(\alpha\left(k_z^2 + \frac{m^2}{a^2}\right) + \beta\left(k_z^2 + \frac{m^2}{a^2}\right)^2 + \Omega_p^2\left(\frac{m^2}{a^2 k_z^2} + 1\right) I_m(k_z a)\, K_m(k_z a)\right)^{1/2}, \tag{7}$$

где $m = 0, 1,...$ нумерует собственные состояния в порядке возрастания энергии, $I_m(x)$, $K_m(x)$, $I_m'(x)$ и $K_m'(x)$ – модифицированные функции Бесселя и их производные, а

$$\Omega_p = \left(\frac{e^2 n_0}{\varepsilon_0 m_e a}\right)^{1/2}. \tag{8}$$

Электромагнитное поле в нанотрубке, как и в любой системе с цилиндрической симметрией, можно представить как сумму полей двух типов: поперечного магнитного поля (ТМ-типа) и поперечного электрического поля (ТЕ-типа). В первом случае поле не имеет магнитных составляющих вдоль оси z трубки ($H_z = 0$ и $E_z \neq 0$), а во втором – $H_z \neq 0$ и $E_z = 0$, т.е. отсутствует компонента z электрического поля. Наконец, зная дисперсионные соотношения (6) и (7) между частотой и волновым числом k_z, определяющим периодичность полей ТЕ- и ТМ-типа вдоль оси нанотрубки, можно определить фазовые скорости:

$$v_{ph,m} = \omega_m / k_z, \tag{9}$$

т.е. скорости перемещения точки постоянной фазы вдоль оси системы, и групповые скорости:

$$v_{gr,m} = d\omega_m / dk_z, \tag{10}$$

т.е. скорости распространения энергии и электромагнитных сигналов вдоль нанотрубки.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Для УНТ разного диаметра на рис. 1 приведены рассчитанные зависимости частот ω_m ($m = 0$, 1 и 2) от волнового числа k_z для основного ($m = 0$) и двух возбужденных состояний. В случае ТЕ-мод минимальные значения ω_m соответствуют точке $k_z = 0$, и увеличение k_z сопровождается монотонным возрастанием ω_m. Для $m = 0$ дисперсионные кривые $\omega_m(k_z)$ проходят через начало координат. Увеличение m сопровождается смещением дисперсионной кривой в высокочастотную область, а переход к трубкам большего диаметра – к низкочастотному сдвигу кривых. Вид дисперсионных кривых $\omega_m(k_z)$ предопределяет зависимости фазовых (v_{ph}) и групповых (v_{gr}) скоростей ТЕ-мод от k_z (рис. 2 и 3). Для дисперсионной кривой, отвечающей основному состоянию $m = 0$, вблизи начала координат частота ω_0 приближенно пропорциональна k_z, поэтому фазовая скорость $v_{ph,0} = \omega_0/k_z \approx 1 \times 10^7$ м/с почти не меняется с увеличением волнового числа. Совершенно иная картина наблюдается для дисперсионных кривых с $m \neq 0$ и ненулевыми частотами при нулевой величине k_z. Здесь фазовая скорость быстро падает от бесконечных значений при $k_z = 0$ до v_{ph} порядка 1×10^7 м/с при $k_z \approx 3$ нм$^{-1}$, причем при $k_z > 3$ нм$^{-1}$ v_{ph} почти не зависит от m, k_z и диаметра УНТ. Зависимости групповой скорости $v_{gr,m} = d\omega_m/dk_z$ от волнового числа приведены на рис. 3. Они отражают скорость изменения частоты с ростом k_z. Поскольку частоты всех ТЕ-мод с увеличением k_z монотонно растут, все групповые скорости положительны, т.е. направления распространения фазовой и групповой скоростей совпадают. Рост k_z сопровождается уменьшением $v_{gr,0}$ от 0.9×10^7 до 0.3×10^7 м/с и ростом $v_{gr,1}$ и $v_{gr,2}$ от 0.1×10^7 до 0.3×10^7 м/с. Для основной моды $m = 0$ вблизи начала координат частота ω_0 пропорциональна k_z, поэтому групповая и фазовая скорости здесь совпадают. Для остальных значений m групповые скорости меньше фазовых, и особенно сильно это различие проявляется вблизи $k_z = 0$.

Обратимся теперь к дисперсионным кривым ТМ-мод (рис. 1). В этом случае независимо от m при $k_z = 0$ все частоты ω_m стремятся к бесконечности, быстро спадают с ростом k_z, достигая минимальных значений (1–3) $\times 10^{16}$ с$^{-1}$ при $k_z \sim$ ~ 3–5 нм$^{-1}$, и затем медленно приближенно линейно возрастают при дальнейшем увеличении волнового числа. Соответственно, фазовые скорости в диапазоне $0 < k_z < 3$–5 нм$^{-1}$ резко падают от бесконечности до ~1×10^7 м/с и далее почти не меняются (рис. 2). Первоначальное уменьшение и последующий рост частот ω_m в зависимости от k_z приводят к изменению знака групповой скорости $v_{gr,m} = d\omega_m/dk_z$ (рис. 3). При низких значениях k_z групповая скорость отрицательна, а значит, направления распространения фазовой волны и групповой волны противоположны. Переход к большим значениям k_z приводит к смене знака v_{gr} на положительный, при этом фазовые и групповые волны распространяются в одном направлении. Изменение знака v_{gr} позволяет использовать нанотрубку для передачи энергии и информации между элементами молекулярной электроники в противоположных направлениях путем варьирования волнового числа или частоты ТМ-мод.

Заметим, что в последнее время проводится интенсивный поиск материалов, в которых свойственные им возбуждения обладают отрицательной групповой скоростью, и выполняются экспериментальные исследования распространения импульсов света с отрицательными групповыми скоростями в различных оптических средах. Это явление, помимо фундаментального, может иметь практическое значение для создания на его основе средств управления сигналами [22–29].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Определены фазовые и групповые скорости распространения электрического и магнитного поля вдоль оси четырех УНТ типа “кресло”. Установлено, что направления распространения фазовой и групповой волн совпадают в случае ТЕ-мод. Для мод ТМ-типа при низких значениях k_z групповая скорость отрицательна и направления распространения фазовой волны и групповой волны противоположны, причем переход к большим величинам k_z сопровождается изменением направления распространения групповых волн.

Наконец, отметим, что данная модель, в которой не учитываются тонкие детали атомной и зонной структуры металлических нанотрубок, а сами они характеризуются только диаметром a и поверхностной электронной плотностью n_0, вполне применима для моделирования аналогичных электромагнитных свойств других углеродных и даже неуглеродных, например золотых, нанотрубок. Достаточно определить n_0 и задать значения a.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований.

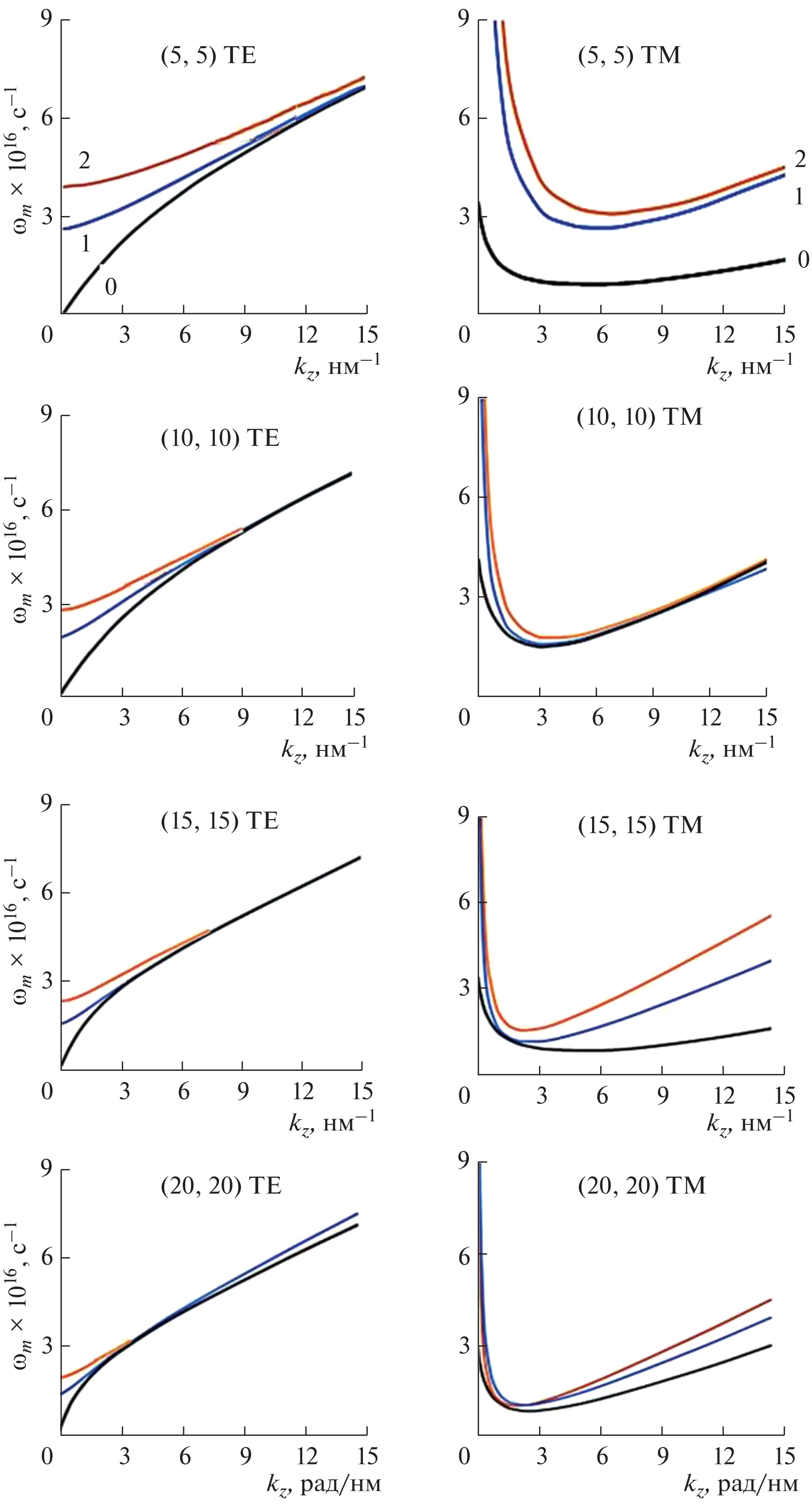

Рис. 1. Зависимости частот электромагнитного поля ω_m от m, волнового числа k_z, геометрии УНТ и типа волны.

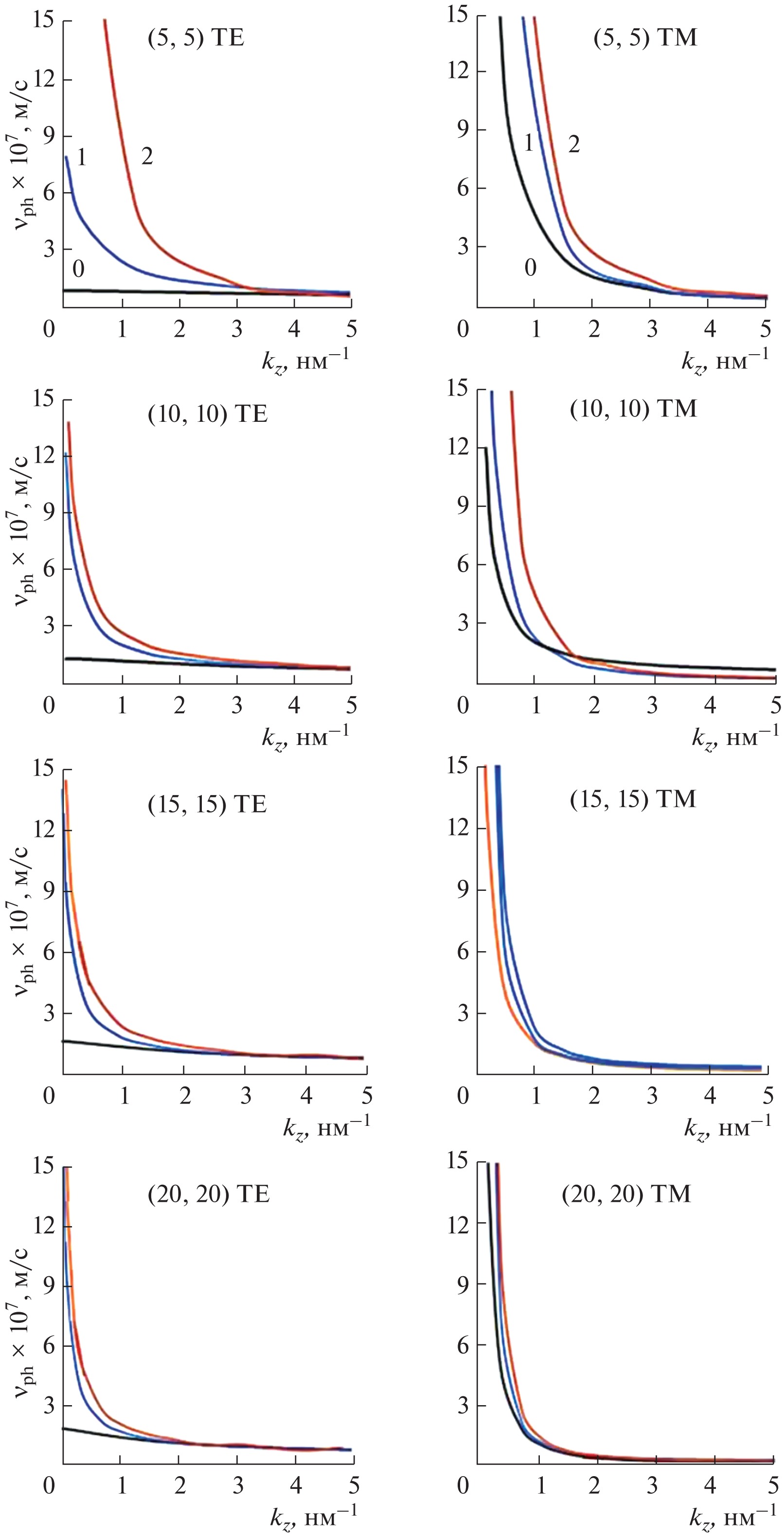

Рис. 2. Зависимости фазовых v_{ph} скоростей от m, волнового числа k_z, геометрии УНТ и типа волны.

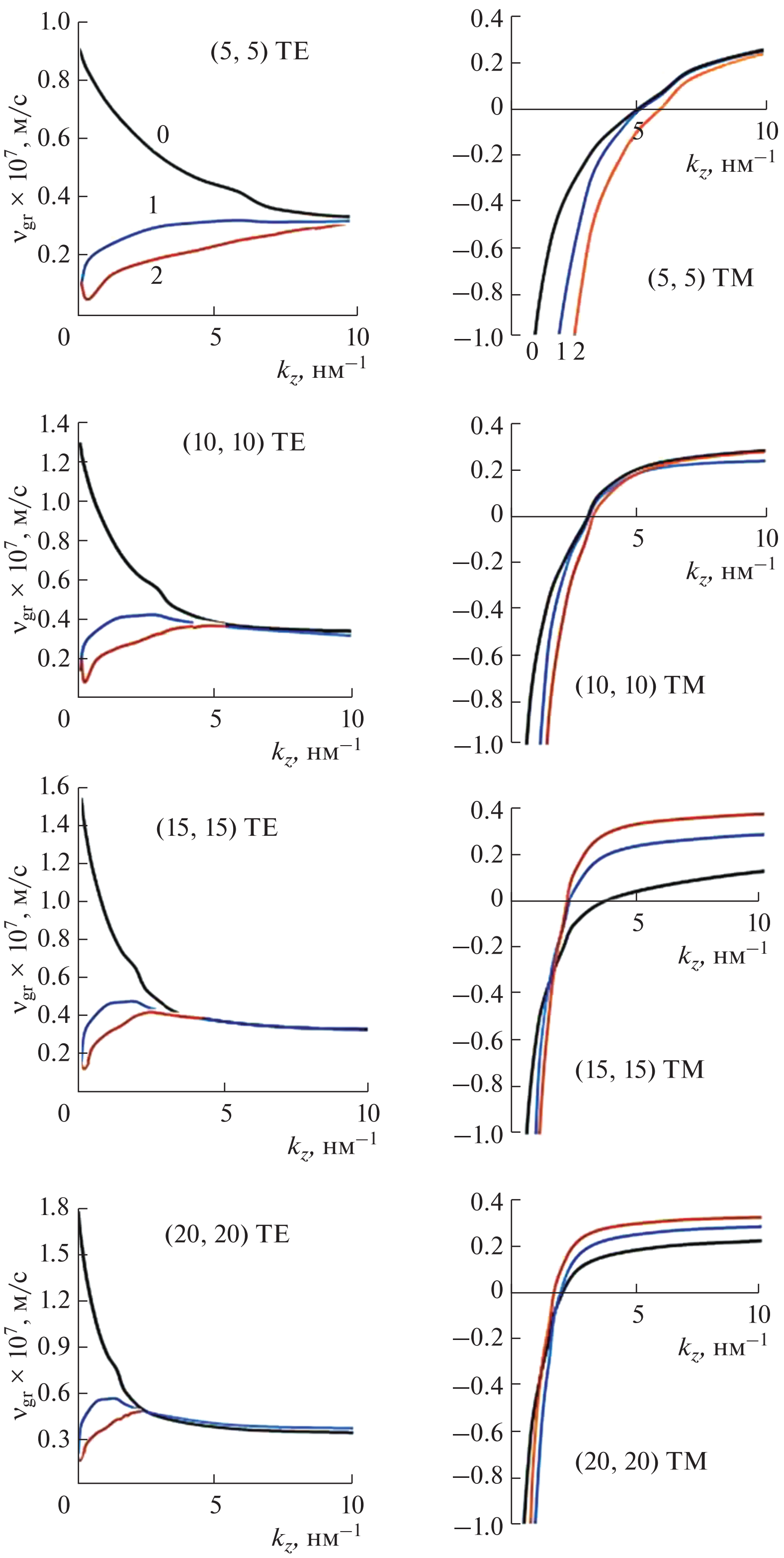

Рис. 3. Зависимости групповых v_{gr} скоростей от m, волнового числа k_z, геометрии УНТ и типа волны.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S.* Physical Properties of Carbon Nanotubes. London: Imperial College Press, 1998.
2. *Дьячков П.Н.* Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: Лаборатория знаний, 2020. 491 с.
3. *D'yachkov P.N.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2018. V. 63. P. 55. [Дьячков П.Н. // Журн. неорган. химии. 2018. Т. 63. № 1. С. 60.] https://doi.org/10.1134/S0036023618010072
4. *Дьячков П.Н., Дьячков Е.П.* // Журн. неорган. химии. 2016. Т. 61. № 10. С. 1320. [*D'yachkov P.N., D'yachkov E.P.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2016. V. 61. № 10. P. 1130. https://doi.org/10.1134/S0036023616100089]
5. *Jiang X.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 13487. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.13487
6. *Liu L., Han Z., He S.* // Opt. Express. 2005. V. 13. P. 6645. https://doi.org/10.1364/OPEX.13.006645
7. *Ozbay E.* // Science. 2006. V. 311. P. 189. https://doi.org/10.1126/science.1114849
8. *Riaz A., Alam A., Balaji P. et al.* // Adv. Electron. Mater. 2018. P. 1800265. https://doi.org/10.1002/aelm.201800265
9. *Islam M.S., Matin M.A., Hossain M.* // Electromagnetic Wave Propagation Characteristics in Single Walled Metallic Carbon Nanotube. 8th International Conference on Electrical and Computer Engineering. Dhaka, Bangladesh, 2014. P. 575.
10. *Moradi A.* // J. Electromagn. Anal. Appl. 2010. V. 2. P. 672. https://doi.org/10.4236/jemaa.2010.212088
11. *Конобеева Н.Н., Белоненко М.Б.* // ФТТ. 2013. Т. 55. № 10. С. 2008.
12. *Wang Y.-N., Miškovic Z.L.* // Phys. Rev. A. 2004. V. 69. P. 022901. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.69.022901
13. *Wei L., Wang Y.N.* // Phys. Lett. A. 2004. V. 333. P. 303. https://doi.org/10.1016/j.physleta.2008.01.085
14. *Javaherian C., Shokri B.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42. P. 055307. https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/5/055307
15. *Yannouleas C., Bogachek E.N., Landman U.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 10225. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.10225
16. *Moradi A.* // Optics Communications. 2010. V. 283. P. 160. https://doi.org/10.1016/j.optcom.2009.09.038
17. *Moradi A.* // J. Appl. Phys. 2017. V. 122. P. 133103. https://doi.org/10.1063/1.4997454
18. *Moradi A., Sharif F.* // Opt. Commun. 2012. V. 285. P. 11636. https://doi.org/10.1016/j.optcom.2011.11.098
19. *Moradi A.* // Appl. Phys. B. 2013. V. 11. P. 127. https://doi.org/10.1007/s00340-012-5315-z
20. *Stöckli T., Bonard J.M., Chätelain A. et al.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 115424. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.115424
21. *D'yachkov P.N.* Quantum Chemistry of Nanotubes: Electronic Cylindrical Waves. London: CRC Press, Taylor and Francis, 2019. 212 p.
22. *Маньков Ю.И.* // ФТТ. 2013. Т. 55. № 5. P. 850.
23. *Макаров В.П., Рухадзе А.А.* // УФН. 2011. Т. 181. С. 1357. https://doi.org/10.3367/UFNr.0181.201112n.1357
24. *Zhang L., Zhan L., Qian K. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 093. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.093903
25. *Qian K., Zhan L., Zhang L. et al.* // Opt. Lett. 2011. V. 36. P. 2185. https://doi.org/10.1364/OL.36.002185
26. *Boyd R.W., Gauthier D.J.* // Science. 2009. V. 326(5956). P. 1074.
27. *Glasser R.T., Vogl U., Lett P.D.* // Opt. Express. 2012. V. 20. https://doi.org/10.1364/OE.20.01370213702
28. *Dolling G., Enkrich C., Wegener M. et al.* // Science. 2006. V. 312. P. 892. https://doi.org/10.1126/science.1126021
29. *Gehring G.M., Schweinsberg A., Barsi C. et al.* // Science. 2006. V. 312. P. 895. https://doi.org/10.1126/science.1124524