Санкт-Петербургский государственный университет

Физический факультет

Кафедра статистической физики



**Затухание плазменных волн в нанотрубках**

 Магистерская диссертация студента дневного отделения

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ **Гурьевского Дениса Валерьевича**

Научный руководитель:

 д. ф.-м. н., профессор

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ **Кучма А.Е.**

Рецензент:

к. ф.-м. н.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ **Ковалевский Д.В.**

Оглавление

[Введение. 3](#_Toc358577331)

[Постановка задачи и основные соотношения. 6](#_Toc358577332)

[Плазменные волны в идеальной нанотрубке. 10](#_Toc358577333)

[Учёт неоднородности проводимости. 12](#_Toc358577334)

[Радиационное затухание плазменных волн. 15](#_Toc358577335)

[Заключение. 17](#_Toc358577336)

[Литература 18](#_Toc358577337)

# Введение.

 В последние годы нанотрубки стали одним из самых обсуждаемых материалов для применения в различных областях науки и техники [1,2]. Если кратко проследить историю их открытия, то начать можно с открытия фуллеренов в 1985 году [3], удостоенного Нобелевской премии по химии за 1996 год. Разработка технологий для получения фуллеренов в макроскопическом количестве [4] привела к открытию Ииджимой в 1991 году [5] углеродных нанотрубок в качестве побочных продуктов синтеза. Метод получения фуллеренов в макроскопическом количестве был основан на термическом распылении графита в электрической дуге с графитовыми электродами в атмосфере гелия. В процессе дугового разряда в инертной атмосфере графитовые электроды выделяют большое количество сажи, содержащей молекулы C60 и С70. Ииджима заинтересовался отходами реакции, вырастающими на катоде. Как показали соответствующие исследования, выполнение с помощью электронного микроскопа, это были протяжённые полые объекты диаметром в несколько нанометров, состоящие, как правило, из нескольких графитовых монослоёв вложенных друг в друга или навитых на общую ось. Расстояние между слоями составляет примерно 0,34 нм, что соответствует расстоянию между слоями в кристаллическом графите.

 Монослойную углеродную нанотрубку можно представить в виде полого цилиндра, полученного после свёртывания плоской гексагональной сетки графита. Поэтому не удивительно, что научный интерес к этим объектам дополнительно возрос после открытия квазидвумерной моноплёнки кристалла углерода – графена, за создание которого А. Гейм и К. Новосёлов [6,7] были награждены Нобелевской премией по физике за 2010 год. Данное открытие позволяет сравнивать свойства моноплёнки и монотрубки и тем самым выявлять свойства, связанные с геометрией объекта. Различие в свойствах искривлённых и плоских объектов кроется, по-видимому, в особенностях электронной и атомной структуры этих соединений. К примеру, если в плоских слоях σ- и π- связи являются геометрически ортогональными, то в нанотрубках и фуллеренах, за счёт искривления поверхности, это уже не так.

 Нанотрубки демонстрируют целый ряд неожиданных электрических, магнитных и оптических свойств. В зависимости от типа сворачивания графитовой плоскости углеродные нанотрубки могут являться как полупроводниками, так и проводниками или полуметаллами. Также у однослойных углеродных нанотрубок с диаметром 1нм наблюдается переход в сверхпроводящее состояние при Tc ~ 1oK [8] и при Tc ~ 16oK для нанотрубок с диаметром 0,4нм [9]. Что касается механических свойств, то нанотрубки оказались весьма прочными структурами как на растяжение, так и на изгиб. Так, результаты эксперимента и численного моделирования показывают, что модуль Юнга однослойной нанотрубки достигает величин порядка 1-5ТПа, а при достижении критических механических напряжений, они не рвутся и не ломаются, а перестраивают свою структуру. Эти и другие свойства определяют разнообразие областей применения таких объектов.

Сейчас активно обсуждается возможность применения различных углеродных наноструктур в электронике (одноэлектронные транзисторы, проводки тока, ячейки памяти, создание гетероструктур типа металл/полупроводник на стыке двух различных нанотрубок), при создании квантовых компьютеров, уже созданы прототипы тонких плоских дисплеев, работающих на матрице нанотрубок. Нанотрубка может рассматриваться в качестве острия для сканирующего туннельного или атомного силового микроскопа или использоваться при построении других различных композитных материалов. Большие перспективы открывает возможность использования нанотрубок в медицине в качестве оболочки для каких-либо лекарств или вспомогательных объектов для транспортировки последних внутрь клеток. Обсуждается создание на их основе мышечных волокон. Такой разброс в области применения нанотрубок связан отчасти с их разнообразием. Так, их длина изменяется от нанометров до десятков сантиметров (без сшивки). В зависимости от типа «скручивания» графенового листа, они обладают различной хиральностью. Нанотрубки могут быть как с открытыми, так и закрытыми концами, а их толщина зависит от многослойности структуры. Вместе с тем, имеющееся разнообразие структур имеет и свои недостатки - весьма проблематично создать нанотрубку с конкретными, наперед заданными параметрами. На сегодняшний день эта проблема решается путем отбора нужных нанотрубок из множества получающихся в ходе технологического процесса их приготовления.

 Стоит отметить, что активно ведётся синтез и полупроводниковых нанотрубок. Так в 1995-1996 годах появились первые публикации по получению нанотрубок нитрида бора[10,11]. В начале 21 века начались интенсивные исследования по синтезу нанотрубок карбида кремния[12]. Основное отличие полупроводниковых нанотрубок от углеродных состоит в их размере. Так, например, в работе [13] рассмотрен газофазный метод получения волокон карбида кремния диаметром примерно 100 нм.

 Теоретическое исследование фуллеренов, нанотрубок и других искривлённых углеродных структур началось ещё до их практического создания - примерно в 70-ых годах прошлого века [14]. Одним из развиваемых в настоящее время направлений этих исследований является описание коллективных возбуждений электронной системы нанотрубок, в том числе – плазменных и спиновых волн [15-19]. Получены, в частности, дисперсионные соотношения для продольных плазменных волн, распространяющихся вдоль оси нанотрубки. Как в случае монослойной нанотрубки, так и для нанотрубки, состоящей из нескольких монослоев, расчеты спектра плазмонов проведены в потенциальном приближении для самосогласованного электромагнитного поля волны [19]. Пренебрежение эффектами запаздывания в межэлектронном взаимодействии ограничивает область применимости указанного приближения условием малости фазовой скорости исследуемых волн по сравнению со скоростью света в окружающей нанотрубку диэлектрической среде. Кроме того, пренебрежение вихревой составляющей электрического поля и магнитным полем волны исключает возможность описания процессов возбуждения плазменных волн электромагнитным излучением и радиационного затухания плазмонов в электронной системе нанотрубки. В связи с этим представляет интерес описание спектра плазмонов в нанотрубке, основанное на полной системе уравнений Максвелла.

Целью настоящей работы являются получение дисперсионного уравнения для плазменных колебаний, применимость которого не ограничивается областью малых фазовых скоростей волны, и оценка излучательного вклада в затухание волны, распространяющейся вдоль нанотрубки. Рассмотрены аксиально симметричные плазменные колебания в нанотрубке, имеющей форму кругового цилиндра. Как и в предшествующих работах, для проводимости нанотрубки используется простая модель свободных электронов. Неидеальность нанотрубки моделируется зависимостью электронной проводимости нанотрубки от расстояния вдоль ее оси.

# Постановка задачи и основные соотношения.

 В данной работе рассматривается нанотрубка в виде кругового цилиндра, толщина стенок которого много меньше его радиуса *R*. Длина цилиндра *L* полагается настолько большой, чтобы можно было пренебречь краевыми эффектами. Нанотрубка помещена в однородную и изотропную по свойствам непроводящую среду с постоянной диэлектрической проницаемостью *ε*. Магнитными свойствами среды в данной работе пренебрегается. Задачей является исследование спектра плазменных возбуждений в такой системе. Так же, как и в предшествующих работах, межэлектронное взаимодействие учитывается в приближении самосогласованного поля. При этом мы не ограничиваемся, однако, описанием области длин волн, где справедливо предположение о потенциальном характере поля собственных колебаний.

 Система уравнений Максвелла применительно к рассматриваемой системе может быть записана в следующем виде

 ,

 ,

 ,

  ,

где под  и *ρ* понимаются плотность электрического тока и плотность заряда электронов проводимости на поверхности нанотрубки.

 В силу предполагаемой изотропности свойств диэлектрической среды связь между индукцией  и напряженностью  электрического поля представима в виде

  .

Вводя скалярный  и векторный  потенциалы электромагнитного поля соотношениями

  ,

  ,

а также используя калибровку Лоренца

  ,

из уравнений Максвелла можно получить следующие волновые уравнения

  ,

  .

В силу соответствующей симметрии рассматриваемой системы, удобно использовать цилиндрическую систему координат, в которой ось цилиндра совпадает с осью *z*. Тогда, интересуясь лишь возмущениями с аксиальной симметрией, решения волновых уравнений и будем искать в виде . В этом случае плотность тока имеет единственную ненулевую компоненту . С учётом сказанного, а также того, что рассматриваемая нанотрубка имеет бесконечно тонкие стенки, плотности заряда и тока, входящие в правые части волновых уравнений, можно представить через поверхностные величины, а именно

 

 

 С учетом (1.11) и (1.12) волновые уравнения для потенциалов приобретают следующий вид

 ,

  .

Уравнение представляет собой, очевидно, z-компоненту векторного волнового уравнения . Две другие компоненты векторного потенциала в рассматриваемой ситуации отсутствуют.

Определим преобразование Фурье по координате z и обратное к нему соотношениями

 

  ,

где , . Тогда применяя преобразование Фурье к уравнениям и , можно получить

 

  ,

где через  обозначена радиальная часть двумерного оператора Лапласа:.

 Уравнение неразрывности, которое следует из уравнений и , а именно,

  ,

в фурье-представлении принимает вид

  .

В силу калибровки Лоренца (1.8) фурье-образы скалярного и векторного потенциалов связаны между собой соотношением

  .

С использованием соотношений и нетрудно убедиться в эквивалентности уравнений и . Поэтому далее будем рассматривать только волновое уравнение для векторного потенциал, имея в виду, что скалярный потенциал выражается при этом с помощью .

 Уравнение следует рассматривать совместно с материальным уравнением, устанавливающим связь между поверхностной плотностью тока  векторным потенциалом . Чтобы конкретизировать эту связь, воспользуемся линейной формой закона Ома в пренебрежении эффектами пространственной нелокальности проводимости:

 .

При этом предполагается , что неидеальность нанотрубки моделируется слабой случайной неоднородностью ее локальной проводимости в направлении вдоль оси трубки:

  .

В свою очередь, для проводимости  воспользуемся выражением, получаемым в простейшей модели проводимости электронного газа (модель Друде):

  ,

где  - эффективная масса электронов, а  - их поверхностная концентрация в нанотрубке.

С учетом соотношений и выражение для поверхностной плотности тока может быть записано как

  .

Чтобы полученное выражение записать в фурье-представлении, воспользуемся тем, что фурье-образ произведения функций имеет вид свертки их фурье-образов

.

Учитывая, кроме того, связь фурье-образов скалярного и векторного потенциалов , для  после некоторых преобразований получим

  .

 Подставляя найденное выражение для плотности поверхностного тока в , получаем замкнутое интегро-дифференциальное уравнение для векторного потенциала , отвечающего электромагнитному полю собственных колебаний в исследуемой системе:

 

где

 

Наличие неоднородности проводимости нанотрубки приводит к связыванию компонент поля с различными волновыми векторами, что обеспечивает, в частности, возможность связи потенциальных колебаний в нанотрубке (коротковолновых плазмонов) с полем излучения. Уравнение составляет основу дальнейшего рассмотрения.

#

# Плазменные волны в идеальной нанотрубке.

Рассмотрим вначале ситуацию, когда исследуемая нанотрубка идеальна (однородна по структуре), то есть в отсутствие неоднородной добавки к проводимости. В этом случае уравнение сводится к

  .

Данное уравнение имеет вид одномерного неоднородного дифференциального уравнения второго порядка. Так как вся неоднородность этого уравнения сосредоточена на границе трубки (*r=R*), то решение данного уравнения можно найти стандартным образом, произведя на границе сшивку решений соответствующего однородного уравнения для областей внутри трубки (*r<R*) и снаружи (*r>R*).

 Однородное дифференциальное уравнение

  ,

после перехода к безразмерной переменной , принимает вид уравнения Бесселя нулевого порядка. Интересуясь теми решениями, которые отвечают распространению плазменных волн, локализованных на трубке (поле таких волн монотонно стремится к нулю при ), замечаем, что такие решения возможны только в области, где фазовая скорость волны меньше скорости света в среде, то есть при . При выполнении этого условия уравнение можно привести к виду модифицированного уравнения Бесселя нулевого порядка (уравнение Бесселя мнимого аргумента). Решениями такого уравнения могут выступать функции Инфельда и Макдональда.

 

 

Учитывая, что векторный потенциал поля волны не имеет разрыва на поверхности трубки, а также из требования его конечности на оси цилиндра и стремления к нулю при бесконечном удалении от оси, получаем решение уравнения (2.2) в следующем виде:

  ,

где - произвольная постоянная. Далее, интегрируя уравнение по бесконечно малой окрестности точки *R*, можно получить условие сшивки производных векторного потенциала на поверхности трубки в следующем виде

  .

Подставляя выражения для векторного потенциала в ,учитывая, что для функций Бесселя справедливы тождества

 

и

  ,

 после некоторых преобразований получаем

  .

При этом использовано также явное выражение для проводимости . Уравнение и является искомым дисперсионным уравнением - при заданном значении волнового вектора оно определяет соответствующую частоту плазменной волны. Область его применимости не ограничивается условием малости фазовой скорости волны.

В пределе малых фазовых скоростей, когда , уравнение сводится к раннее полученному в работах [18,19] выражению для частоты плазменных волн на поверхности нанотрубки в потенциальном приближении.

В длинноволновой области, при , для функций Инфельда и Макдональда в можно использовать следующие приближенные выражения

 

 

 

  ,

где  – константа Эйлера. В этой области дисперсионное уравнение принимает вид

  .

Следует отметить, что в случае, когда выполнено двойное неравенство , уравнение приводит к известному закону дисперсии плазмонов в одномерном проводнике, например, в квантовой проволоке.

# Учёт неоднородности проводимости.

В случае , но , решение уравнения , учитывающее зацепление мод с различными длинами волн, можно строить по теории возмущений. Считаем, что изначально в нанотрубке был возбуждён плазмон с некоторым волновым вектором  таким, что . Тогда фурье-компоненты поля при всех  возникают только в результате рассеяния исходной волны на неоднородностях структуры трубки. Как следствие, в линейном по степени неоднородности проводимости приближении из находим, что уравнение для величин  при  имеет следующий вид:

 .

Полагая, что добавка к проводимости носит случайный характер (*α(z)* есть случайная функция, среднее значение которой по достаточно большой длине нанотрубки равно нулю), имеем в фурье-представлении равенство

 .

В силу условия исходное уравнение при  будет содержать под знаком суммы в правой части только слагаемые с волновыми векторами :

 

Чтобы найти поправку к дисперсионному уравнению , прежде всего необходимо, решая уравнение , выразить  через и подставить полученное выражение в уравнение . Уравнение , как и рассмотренное в предыдущей части уравнение для векторного потенциала в случае идеальной трубки, представляет собой одномерное дифференциальное уравнение с неоднородностью сосредоточенной лишь на поверхности цилиндра (*r=R*); поэтому для вкладов с волновыми векторами *k*’ такими, что фазовая скорость соответствующей волны не превышает скорости света в среде  решение уравнения будет иметь тот же вид, что и для идеального случая :

  .

Для тех же вкладов в поле плазменной волны, у которых волновой вектор отвечает фазовой скорости, превышающей скорость света , соответствующее однородное уравнение

  ,

после введения безразмерной переменной , сводится к уравнению Бесселя нулевого порядка вещественного аргумента (в отличие от ранее рассмотренного случая, когда однородное уравнение приводилось к *модифицированному* уравнению Бесселя). Решениями такого уравнения в рассматриваемом случае могут выступать функции Бесселя и Ханкеля

  ,

  .

Известно, что данные функции обладают следующими рекуррентными свойствами:

 ,

 .

Непрерывное решение, конечное на оси трубки и имеющее вид уходящей волны вне цилиндра записывается в виде

  .

Условие сшивки производных на поверхности трубки получаем, интегрируя уравнение по переменной *r* от *R-0* до *R+0*

.

Используя явный вид решений и , из условия при учете соотношений и , а также и можно найти связь между  и . Так, при выполнении неравенства  имеет место следующее выражение

 ,

а при **** получаем

 

 Подставляя найденные выражения и в уравнение и интегрируя получившиеся выражение по бесконечно малой окрестности точки , можно получить дисперсионное уравнение для плазменной волны с учетом поправки, порождаемой слабой неоднородностью трубки:

  .

Для компактности записи в введены обозначения

 

и

 

 Вклад в , содержащий , учитывает процессы рассеяния исходной волны в состояния поля, локализованные в окрестности нанотрубки. В свою очередь, слагаемое с  учитывает эффекты рассеяния исходной волны на неоднородностях проводимости нанотрубки, сопровождающегося излучением электромагнитных волн. Интересуясь эффектом именно радиационного распада плазмонов, в следующем разделе мы рассмотрим вклад с  более подробно.

# Радиационное затухание плазменных волн.

Как уже указывалось, эффекты рассеяния исходной волны на неоднородностях проводимости нанотрубки, сопровождающегося излучением электромагнитных волн, в том числе – излучательное затухание плазменной волны, распространяющейся вдоль нанотрубки, учитываются вкладом в дисперсионном уравнении , содержащим . Это объясняется тем, что только при  выражение для векторного потенциала поля имеет вид уходящей волны при , как это следует из асимптотического поведения функции Ханкеля. В качестве примера для оценки радиационного вклада в затухание плазмонов рассмотрим случай, когда исходное возбуждение лежит в коротковолновой области, так что выполнено условие . Очевидно, что основное поле такой волны является почти потенциальным.

Суммирование в выражении идет по области значений , определяемой условием . При выполнении условия  имеем , что позволяет в случае достаточной гладкости функции  воспользоваться приближенным равенством . В этих условиях выражение для можно представить в виде

  ,

где введено обозначение , а параметр определен равенством

  .

Рассматривая длинноволновый предел , функции Бесселя и Ханкеля в можно заменить соответствующими приближенными выражениями:

  ,

  ,

  ,

  ,

где  – константа Эйлера. С использованием соотношений – получаем для  после несложных преобразований, пренебрегая малыми членами, следующее выражение:

  .

Для мнимой части величины , которая и отвечает интересующему нас радиационному затуханию исследуемых волн, из полученного выражения имеем

 .

Переходя в от суммирования по волновому вектору  к интегрированию путем замены

  ,

Получим

 

Используя ,из дисперсионного уравнения получаем следующую оценку для затухания плазменной волны в результате ее трансформации в излучение при рассеянии на неоднородностях проводимости нанотрубки:

 

Очевидно, что в силу малости поправки к частоте, обусловленной излучением, в качестве величины  в правой части соотношения следует использовать решение дисперсионного уравнения для частоты плазменной волны с волновым вектором в идеальной нанотрубке.

# Заключение.

Проведенное рассмотрение иллюстрирует, каким образом учет запаздывания в межэлектронном взаимодействии меняет результаты расчета спектра плазменных волн в электронной системе нанотрубок, полученные с использованием потенциального приближении. Одним из следствий учета такого запаздывания является модификация дисперсионных зависимостей плазменных волн. Явный вид соответствующего дисперсионного уравнения для случая аксиально-симметричных плазменных возбуждений в цилиндрической нанотрубке дается формулой . Поправки к закону дисперсии весьма существенны в длиноволной области, где фазовая скорость волны не может считаться пренебрежимо малой по сравнению со скоростью света. Другое следствие непотенциальности поля заключается в возможности трансформации плазменной волны в электромагнитное излучение в случае, когда, к примеру, нарушена однородность свойств электронной системы нанотрубки. Формула дает оценку обусловленного такой трансформацией затухания плазмона в нанотрубке, неоднородность свойств которой моделируется наличием малой случайной добавки к локальной проводимости. Следует отметить, что только на основе полной системы уравнений Максвелла возможно описание как указанной трансформации, так и обратного процесса, в котором плазменные колебания в нанотрубке возбуждаются внешним электромагнитным излучением.

В данной работе мы ограничились рассмотрением сравнительно простых ситуаций с использованием моделей и приближений, когда интересующие нас результаты оказывается возможным получить в явном аналитическом виде. Дальнейшее исследование роли непотенциальности, в том числе - при описании коллективных возбуждений более сложной симметрии в электронной плазме нанотрубок с возможностью детального учета реальных особенностей их электронного спектра и других характеристик, потребует проведения соответствующих численных расчетов.

# Литература

1. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки// УФН -1997 -V.167. -N.9. -P.945-972.

2. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. // М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. -293с.

3. Kroto H.W et al. C60:Buckminsterfullerene. // Nature -1985. –V.318 –P.162-163

4. Kraetschmer W. et al. C60: a new form of carbon. // Nature -1990. –V.347 –P.354-358

5. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. // Nature –1991. –V.354. –P.56-58

6. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. et al. Reports electric field effect in atomically thin carbon films. // Science. – 2004. – V. 306. P. 666–669.

7. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V.et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. // Nature. – 2005. – V. 438. – P. 197–200.

8. Kosiak M. et al. Superconductivity in ropes of single-walled carbon nanotubes.// Phys. Rev. Lett. –2001. –V.86. –P. 2416–2419

9. Tang Z.K. et al. Ultra-small single walled carbon nanotubes and their superconductivity properties. // Synthetic Met. –2003. –V.133-134. –P.689-693

10. Chopra N.G., Willaime F., Demoncy N. et al. Boron nitride nanotubes. // Science.–1995.–V.269. –N.5226. –P.966-967

11. Cheetham A.K. Terrones H., Terrones M. et al. Metal particle catalyzed production of nanoscale BN structures.//Chem. Phys. Lett. –1996. –V.259. –N.5-6. –P.568-573

12. Харламов А.И., Лойченко С.В., Кириллова Н.В., Фоменко В.В. Гетерогенный процесс синтеза волокон карбида кремния. //Теор. эксп. Химия. –2002. –V.38. –N.1 –P.49-53

13. Харламов А.И., Кириллова Н.В. Газофазные реакции образования нанонитевидного карбида кремния из порошкообразных кремния и углерода. //Теор. Эксп. Химия. –2002. –V.38. –N.1 –P.54-58

14. Jensen H.,Koppe H. //Ann. Phys. –1971 –V. 63. –P. 586

15. Ермолаев А.М., Рашба Г.И., Соляник М.А. Электронные спиновые волны на поверхности нанотрубки. // ФТТ –2011. – V.53 –N.8 –P.1518- 1522

16. Ермолаев А.М., Рашба Г.И., Соляник М.А. Коллективные возбуждения электронного газа на поверхности нанотрубки в магнитном поле.//Физ.низ.темп. –2011, -V.37. –N.11. –P.1156-1162

17. Витлина Р.З., Магарилл Л.И., Чаплик А.В. Коротковолновые плазмоны в низкоразмерных системах.//ЖЭТФ. –2008. –V.133. –N.4. –P.906-913

18. Ведерников А.И., Говоров А.О., Чаплик А.В. Плазменные колебания в нанотрубках и эффект Ааронова-Бома для плазмонов.// ЖЭТФ -2001. -V.120. -N.4(10). -P.979-985.

19. Lin and Kenneth M.F., Shung W.K. Elementary excitations in cylindrical tubules. //Phys.Rev.B. –1993 –V.47. –P.6617-6624