

# ПЛОТНОСТЬ ФОТОННЫХ СОСТОЯНИЙ ВБЛИЗИ ОДНОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

А. М. Немиленцев

Плотность фотонных состояний – фундаментальная физическая величина, которая определяет такие физические эффекты, как силы Казимира [1], эффект Парселла [2], тепловое излучение [3, 4] и др. Структура плотности состояний определяется геометрией и свойствами материала рассматриваемой системы. В настоящее время наиболее эффективными средами для управления плотностью состояний являются микрополости, фотонные кристаллы и системы, поддерживающие распространение поверхностных волн [2, 3]. Однослойная углеродная нанотрубка (УНТ) является очень перспективной системой для этих целей, так как она поддерживает распространение сильно замедленных поверхностных плазмонов [5]. Более того, сильное увеличение скорости спонтанного распада возбужденного атома, помещенного в окрестности бесконечно длинной УНТ, по сравнению со скоростью спонтанного распада атома в свободном пространстве, предсказанное в [2], позволяют сделать вывод о сильном влиянии УНТ на структуру плотности состояний в ее окрестности. Однако модель бесконечно длинной УНТ не позволяет исследовать влияние краев УНТ на распределение плотности состояний. Целью данной статьи является построение модели тензора Грина УНТ конечной длины и исследование влияния краев УНТ на распределение плотности фотонных состояний.

Рассмотрим УНТ конечной длины  $L$  и радиуса  $R_{cn}$ , геометрический центр УНТ расположен в начале декартовой системы координат, а ее ось ориентирована вдоль оси  $z$ . При рассмотрении мы будем учитывать только осевую компоненту тензора проводимости УНТ  $\sigma_{zz}$ , предполагая, что все остальные компоненты тензора проводимости пренебрежимо малы [5].

Согласно флуктуационно-диссипативной теореме, плотность фотонных состояний  $\rho(\mathbf{r}, \omega)$  вблизи немагнитной УНТ может быть выражена через электрический тензор Грина  $\underline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)$  следующим образом [3, 6]:

$$\rho(\mathbf{r}_1, \omega) = \frac{\omega}{4\pi^2 c^2} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[ \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + \frac{c^2}{\omega^2} \nabla_{\mathbf{r}_1} \times \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \cdot \nabla_{\mathbf{r}_2} \times \right]_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2} \right\}. \quad (1)$$

Тензор Грина является решением волнового уравнения с дельта-источником тока в правой части:

$$(\nabla_{\mathbf{r}_1} \times \nabla_{\mathbf{r}_1} \times - k^2) \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = 4\pi \underline{I} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (2)$$

где  $\underline{I}$  – единичный тензор. Его решение в общем случае может быть представлено в виде суммы двух компонент:

$$\underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \underline{G}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + \underline{G}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega), \quad (3)$$

где  $\underline{G}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = (\underline{I} + k^{-2} \nabla_{\mathbf{r}_1} \otimes \nabla_{\mathbf{r}_1}) G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$  – тензор Грина свободного пространства,  $G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \exp(ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ,  $\underline{G}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$  – модификация тензора Грина свободного пространства вследствие его рассеяния на УНТ. Модифицированный тензор Грина удовлетворяет однородному волновому уравнению

$$(\nabla_{\mathbf{r}_1} \times \nabla_{\mathbf{r}_1} \times - k^2) \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = 0 \quad (4)$$

и эффективным граничным условиям на поверхности УНТ [5].

В декартовой системе координат уравнение (2) может быть разделено на три независимых уравнения, каждое из которых описывают эволюцию одного из столбцов тензора Грина. Следовательно, любой столбец  $\beta$  тензора Грина можно формально рассматривать как векторное поле, индуцированное в точке  $\mathbf{r}_1$  дельта-источником тока, расположенным в точке  $\mathbf{r}_2$  и поляризованным вдоль базисного вектора  $\mathbf{e}_\beta$  декартовой системы координат. Таким образом, задача о нахождении тензора Грина  $G_{\alpha\beta}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$  сводится к задаче рассеяния векторного поля  $G_{z\beta}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$  на УНТ для трех различных поляризаций дельта-источника тока  $\mathbf{e}_\beta$ ,  $\beta = x, y, z$ . Для решения уравнения (4) мы сводим его к интегральному уравнению для плотности тока, индуцированной на поверхности УНТ падающим полем  $G_{z\beta}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ , используя теорему Грина и граничные условия на поверхности УНТ [5]. Интегральное уравнение имеет следующий вид:

$$\int_{-L/2}^{L/2} j_z^{(\alpha)}(z', \mathbf{r}_2) \mathbf{K}(z - z') dz' + C_1 e^{-ikz} + C_2 e^{ikz} = \frac{1}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{ik|z-z'|}}{2ik} \int_0^{2\pi} G_{z\alpha}^{(0)}(\mathbf{R}', \mathbf{r}_2, \omega) dz' d\varphi', \quad (5)$$

где константы  $C_1, C_2$  определяются из краевых условий  $j_z^{(m)}(\pm L/2; \mathbf{r}_2) = 0$ ,

$$\mathbf{K}(z) = \frac{e^{ik|z|}}{2ik\sigma_{zz}(\omega)} - \frac{2iR_{cn}}{\omega} \int_0^\pi \frac{e^{ikr}}{r} d\varphi, \quad (6)$$

$r = \sqrt{z^2 + 4R_{cn}^2 \sin^2(\varphi/2)}$ . Зная индуцированную плотность тока, можно легко вычислить рассеянную часть тензора Грина:

$$G_{\alpha\beta}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \frac{i\omega R_{cn}}{c^2} \int_{-L/2}^{L/2} j_z^{(\alpha)}(z; \mathbf{r}_2) \int_0^{2\pi} G_{\beta z}^{(0)}(\mathbf{r}_1, R, \omega) dz d\varphi. \quad (7)$$

Уравнения (5) – (7) играют роль уравнения Дайсона для тензора Грина однослойной углеродной нанотрубки конечной длины. Следует отметить, что в данном случае рассеяние не сводится к незначительным поправкам к тензору Грина свободного пространства и поэтому уравнение Дайсона нельзя решить в борновском приближении. Для преодоления этих трудностей численный метод решения данного уравнения был развит. Он основывается на аппроксимации интегралов квадратурными формулами с последующим сведением интегрального уравнения к системе матричных уравнений.

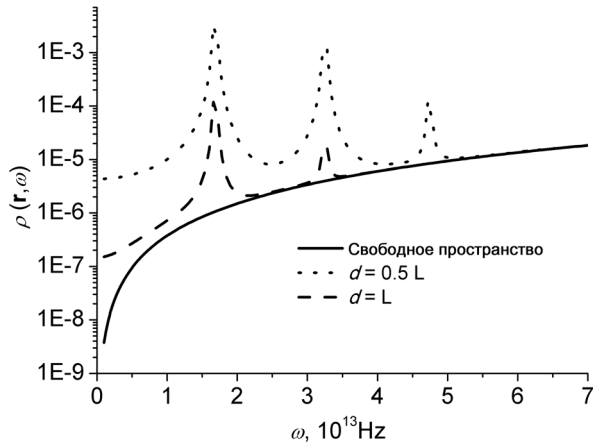


Рис. 1. Плотность фотонных состояний в свободном пространстве и в окрестности однослойной металлической (15, 0) УНТ длины  $L = 1$  мкм. Вычисления проводились для точек, расположенных в плоскости  $z = 0$  на расстоянии  $d$  от оси нанотрубки

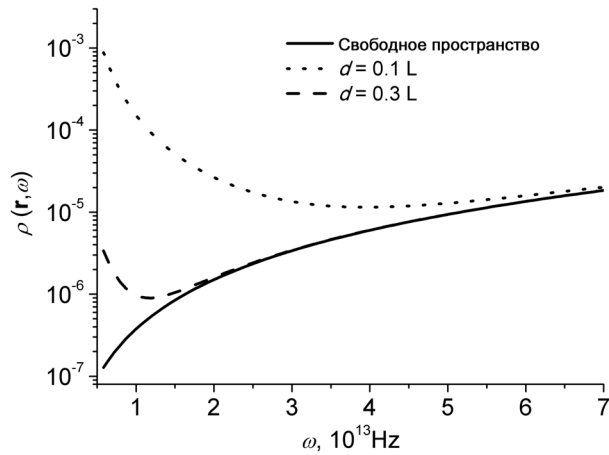


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для полупроводниковой (23,0) УНТ

На рисунках 1, 2 представлены результаты вычислений плотности фотонных состояний для металлической (15, 0) и полупроводниковой (23, 0) УНТ. Из рисунков видно, что спектральная структура плотности фотонных состояний вблизи УНТ сильно меняется по сравнению со случаем свободного пространства. Причины данных изменений состоят в том, что наряду со свободными фотонами появляются фотонные состояния, связанные с сильно замедленными плазмонами на поверхности УНТ. Наиболее существенные изменения наблюдаются в спектре металлической УНТ: спектр плотности состояний имеет резонансный характер. Эти резонансы возникают вследствие геометрических резонансов поверхностных плазмонов на краях УНТ. Следует отметить, что эти резонансы

сильно сдвинуты в терагерцовую область по сравнению с резонансами, которые можно было бы ожидать для случая идеально проводящего цилиндра. Причина данного сдвига – сильное замедление поверхностных плазмонов в УНТ (коэффициент замедления  $\sim 200$ ). Вблизи полупроводниковых УНТ поведение плотности фотонных состояний также качественно отличается от случая свободного пространства: в то время как плотность фотонных состояний свободного пространства уменьшается с уменьшением частоты, плотность фотонных состояний вблизи УНТ возрастает.

Отсутствие ярко выраженных резонансов в спектрах фотонной плотности состояний вблизи полупроводниковых УНТ можно объяснить более сильным затуханием поверхностных плазмонов в полупроводниковых УНТ по сравнению с металлическими УНТ. Следует отметить, что влияние нанотрубки на плотность фотонных состояний быстро уменьшается с удалением от поверхности УНТ, что подтверждает тезис о существенном влиянии поверхностных возмущений на перераспределение плотности фотонных состояний.

Таким образом, в данной работе было исследовано влияние УНТ на плотность фотонных состояний. Для этого была разработана методика вычисления тензора Грина однослойной УНТ конечной длины. Результаты вычислений показали, что плотность фотонных состояний вблизи УНТ существенно отличается от плотности фотонных состояний в свободном пространстве. В частности, резонансы в спектре плотности фотонных состояний вблизи металлической УНТ были обнаружены. Природа данных резонансов – резонансы поверхностных плазмонов на краях УНТ, что отражает существенную роль краевых эффектов в данном случае. Результаты, представленные в данной работе, позволяют сделать вывод о том, что эффекты, связанные с плотностью фотонных состояний (эффект Казимира, эффект Парсела и др.), вблизи УНТ будут иметь нетривиальный характер.

#### Литература

1. *Bordag M., Mohideen U., Mostepanenko V. M.* // Phys. Rep. 2001. Vol. 353. P. 1.
2. *Bondarev I. V., Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A.* // Phys. Rev. Let. 2002. Vol. 89. P. 115504
3. *Joulain K., Mulet J.-P. et al.* // Surf. Sci. Rep. 2005. Vol. 57. P. 59.
4. *Nemilentsau A. M., Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A.* // Phys. Rev. Let. 2007. Vol. 99. P. 147403
5. *Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al.* // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136.
6. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Статистическая физика: теория конденсированного состояния. 1978.

### PHOTONIC DENSITY OF STATES IN THE VICINITY OF THE SINGLE-WALL FINITE-LENGTH CNT

A. M. Nemilentsau

In this article the modification of the photonic density of states in vicinity of the single-wall finite-length carbon nanotube is investigated. The method of the finite-length nanotube Green tensor calculation is elaborated to calculate the photonic density of states. The strong influence of the CNT on the photonic density of states in the near-field zone is demonstrated. In particular, the resonance structure of the photonic density of states spectrum in the vicinity of the metallic CNT is demonstrated thus revealing the strong influence of the edge effects on the photonic density of states redistribution.