

РАССЕЯНИЕ ПЛОСКИХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН НА ПОЛОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБОКЕ

В.И. Каневский¹, В.М. Розенбаум¹, Д.И. Побокин¹, Л.И. Трахтенберг²

¹Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, vikanev@ukr.net

²Институт химической физики, Российская академия наук, Москва

Представлена процедура расчета рассеяния плоских электромагнитных волн на полой многослойной углеродной нанотрубке (МСУНТ) в оптическом диапазоне, использующая модель Друде-Лоренца для получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ и конечно-элементный подход. Приведены результаты расчетов рассеяния плоских волн на одной полой МСУНТ (угловые зависимости дифференциальных сечений в дальней зоне и распределения электрических полей в ближней зоне) для параллельно и нормально поляризованных векторов электрических полей падающих волн относительно ее оси с вектором Пойнтинга, перпендикулярным к этой оси.

Введение

Открытие углеродных нанотрубок (УНТ) [1, 2] положило начало их применению в различных областях науки и техники благодаря своим уникальным механическим, электрическим, тепловым, магнитным и оптическим свойствам. Это высокопрочные материалы [3], источники эмиссии электронов [4], полевые транзисторы [5], электрические контакты [6], антенны в оптическом диапазоне [7], многофункциональные устройства [8]. Область применения УНТ охватывает молекулярную электронику, многофункциональные композитные материалы, высокопрочные сверхлегкие материалы, нанометрологию, технологию плоских дисплеев и многое другое.

Оптические свойства углеродных нанотрубок характеризуются высокой абсорбционной способностью по отношению к электромагнитным волнам, которая используется в лазерах [9] и болометрах [10]. Использование этого свойства позволяет существенно улучшить чувствительность астрофизических оптических приборов. Много интересных приложений в оптическом диапазоне основано на конструировании фотонных кристаллов [11] на основе нанотрубок. К ним относятся локализация света [12], оптические волноводы [13], суперлинзы [14] и метаматериалы [15]. Ионное легирование тонких пленок на основе УНТ позволяет изменять их оптические свойства [16]. Наличие кластеров кобальта внутри УНТ существенно трансформирует зонную структуру нанотрубок [17], наделяет их ферромагнитными свойствами [18].

Благодаря своим уникальным свойствам, форме и весу УНТ (в качестве примесной добавки) позволяют существенно улучшить свойства различных материалов. Особенно это касается оптических свойств многослойных углеродных нанотрубок (МСУНТ), в частности их высокой абсорбционной способности: суммарное отражение от массива нанотрубок в несколько раз меньше, чем когда-либо заявленное от любого материала ($\leq 0.045\%$) [19], что выдвигает композитные материалы на основе МСУНТ на первое место, как наиболее поглощающие в оптическом диапазоне.

Рассеяние плоских электромагнитных волн на ансамбле МСУНТ зависит от их распределения в исследуемом образце и предполагает учет интерференции данных волн, рассеянных на каждой из них. В качестве первого шага описания такого сложного явления было рассмотрено рассеяние на одной МСУНТ [20], причем, так как

углеродные нанотрубки имеют большие диэлектрические потери, предполагалось, что электромагнитная волна не достигает ее оси и нанотрубка может моделироваться сплошным цилиндром. Однако полученные в [20] результаты показали, что диэлектрические потери не препятствуют проникновению электромагнитных полей внутрь цилиндра, а значит, для описания рассеяния на МСУНТ необходимо учитывать реальную толщину ее стенки.

Целью данной работы является описание результатов расчета рассеяния плоских электромагнитных волн на одной полой немагнитной МСУНТ, а именно, угловых зависимостей дифференциальных сечений в дальней зоне и распределения электрических полей оптического диапазона в ближней зоне. Рассматривались параллельная и перпендикулярная поляризации векторов электрических полей падающих волн относительно оси МСУНТ с вектором Пойнтинга, перпендикулярным к этой оси (рис.1).

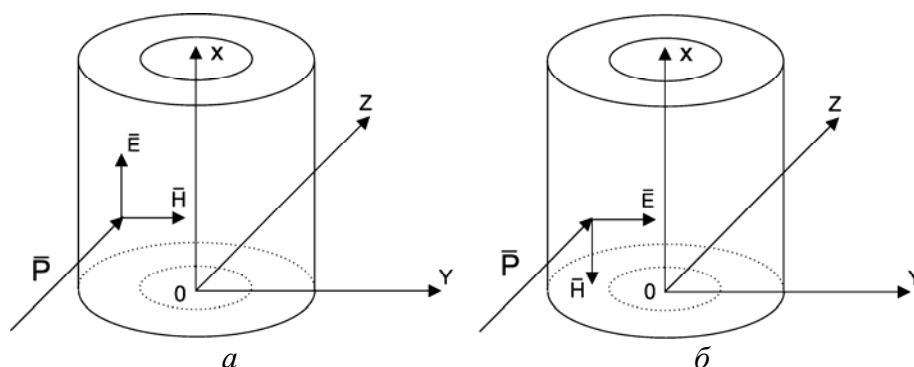


Рис. 1. Направление падения плоских электромагнитных волн (вектор Пойнтинга P) с ориентациями вектора напряженности электрического поля E параллельно (а) и перпендикулярно (б) оси нанотрубки.

Дальнейшее изложение материала структурировано в трех разделах, первый из которых кратко описывает используемый метод расчета тензора диэлектрической проницаемости полой МСУНТ, второй очерчивает вычислительную схему расчета рассеяния плоских волн на данной трубке, а третий описывает результаты расчета в дальней и ближней зонах МСУНТ, а именно, дифференциального сечения рассеяния и распределения электрических полей, соответственно.

Получение тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ: модель Дрude–Лоренца

В работе [21] дан обзор трех подходов получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ: модель Друде–Лоренца, методы гомогенизации и *ab initio* расчеты. В данной работе использован первый из подходов. Кратко опишем основные его положения.

МСУНТ рассматривается как классический объект: тонкая структура электромагнитных колебаний в нанотрубке «спрятана» в частотной зависимости диэлектрической проницаемости, а сама МСУНТ рассматривается как сплошная среда.

МСУНТ имеет цилиндрическую форму и проявляет анизотропные свойства в оптическом диапазоне [22]. Наличие больше чем десяти графеновых слоев в МСУНТ позволяет использовать тензор диэлектрической проницаемости графита для описания макроскопических свойств МСУНТ [23].

Оптические анизотропные свойства графита можно описать с помощью тензора диэлектрической проницаемости

$$\hat{\varepsilon}(\omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp}^g(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp}^g(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel}^g(\omega) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\varepsilon_{\perp}^g(\omega)$, $\varepsilon_{\parallel}^g(\omega)$ – диэлектрические проницаемости графита, которые соответствуют двум направлениям напряженности электрического поля \vec{E} . Более точно, $\vec{E} \perp C$ соответствует обыкновенному лучу, $\vec{E} \parallel C$ – необыкновенному лучу, где C – нормаль к основным (графеновым) плоскостям графита.

Элементы тензора диэлектрической проницаемости графита $\varepsilon_{\perp}^g(\omega)$, $\varepsilon_{\parallel}^g(\omega)$ могут быть представлены с помощью модифицированной феноменологической модели Друде–Лоренца [24,25]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{r,\infty} - \frac{f_0 \omega_p^2}{\omega(\omega + j\Gamma_0)} + \sum_{m=1}^M \frac{f_m \omega_p^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - j\omega\Gamma_m}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{r,\infty}$ – относительная диэлектрическая проницаемость графита на частотах значительно больших, чем ω_m , ω_p – плазменная частота, Γ_0, f_0 – постоянная затухания и интенсивность осциллятора в модели Друде, j – мнимая единица. В модели Лоренца каждый осциллятор описывается интенсивностью f_m , постоянной затухания Γ_m и частотой ω_m . Количество осцилляторов равно M .

В работе [25] с использованием экспериментальных частотных зависимостей диэлектрической проницаемости графита и специально разработанной оптимизационной процедуры получены величины оптимизируемых параметров $\varepsilon_{r,\infty}, f_0, f_m, \omega_p, \Gamma_0, M, \Gamma_m$ (параметр Γ_m зависит от частоты ω) модифицированной модели Друде–Лоренца, значения которых позволяют на основе соотношения (2) рассчитать зависимости $\varepsilon_{\perp}^g, \varepsilon_{\parallel}^g$ в следующем виде:

$$\varepsilon_{\perp}^g = \varepsilon_{1\perp}^g + j\varepsilon_{2\perp}^g, \quad \varepsilon_{\parallel}^g = \varepsilon_{1\parallel}^g + j\varepsilon_{2\parallel}^g. \quad (3)$$

Определив тензор диэлектрической проницаемости графита, можно получить элементы аналогичного тензора для МСУНТ. Согласно подходу, описанному в работе [26], если МСУНТ рассматривать как пустотелый цилиндр, то компоненты тензора диэлектрической проницаемости хорошо описываются соотношениями

$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\perp}^g, \quad \varepsilon_{\perp} = \sqrt{\varepsilon_{\perp}^g \varepsilon_{\parallel}^g} \quad (4)$$

где $\varepsilon_{\parallel}, \varepsilon_{\perp}$ – компоненты тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ, параллельные и перпендикулярные оси нанотрубки. На рис.2 показана частотная зависимость данных компонент в оптическом диапазоне.

Таким образом, приведенный выше подход получения элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ (модель Друде–Лоренца) позволяет представить рассматриваемую нанотрубку, которая по своей природе является квантовым объектом, как классический. Это, в свою очередь, позволяет осуществить расчет рассеяния плоских электромагнитных волн на одной поллой МСУНТ.

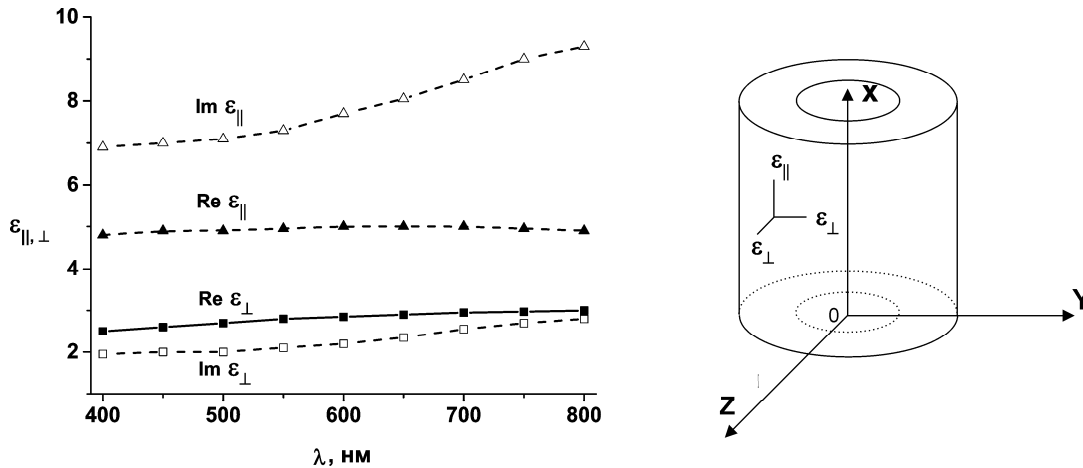


Рис. 2. Частотная зависимость элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ в оптическом диапазоне.

Рассеяние плоских волн на одной полой МСУНТ: конечно-элементный подход

В работе [21] дан обзор различных вариантов конечно-элементного подхода. Кратко опишем один из них, используемый в данной работе.

Будем считать, что МСУНТ расположена в свободном пространстве, причем источник энергии находится вне нанотрубки. В качестве источника выберем плоские электромагнитные волны, рассеивающиеся на МСУНТ.

Распределение электрического поля \vec{E} в МСУНТ и в окружающем пространстве в заданном диапазоне частот находится путем решения неоднородного векторного уравнения Гельмгольца [27, 28]

$$\vec{\nabla} \times [\mu^{-1} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E})] - \vec{k}_0^2 \epsilon \cdot \vec{E} = -j \vec{k}_0 Z_0 \vec{J}_s, \quad (5)$$

где \vec{J}_s – плотности внешних источников электрического тока, Z_0 – волновое сопротивление окружающего пространства, \vec{k}_0 – волновой вектор в данном пространстве, ϵ, μ – тензоры второго порядка диэлектрической и магнитной проницаемостей. Считаем, что МСУНТ не обладает магнитными свойствами.

В качестве граничных условий для поля \vec{E} в окружающем пространстве используем условие излучения Зоммерфельда [28]

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left(\frac{\partial \vec{E}}{\partial r} + j \vec{k}_0 \vec{E} \right) = 0, \quad (6)$$

где j – мнимая единица, r – расстояние между точкой рассеяния и точкой наблюдения, расположенной в дальней зоне. Уравнению (6) удовлетворяют бегущие волны, уходящие на бесконечность.

Для решения уравнения Гельмгольца использовался конечно-элементный подход, а именно, метод Галеркина и метод конечных элементов [28, 29]. В качестве векторных конечных элементов использовались тетраэдры. Численная реализация условий излучения Зоммерфельда осуществлялась путем применения локального приближения, в рамках которого был выбран метод абсолютно поглощающих (АП) слоев [30,31].

Расчетная область имеет форму куба, сечение которой представлено на рис.3 (сечение в плоскости YOZ, рис.1), включает в себя МСУНТ (1) и внешний источник (плоские волны, направление движения которых показано с помощью вектора

Пойнтинга \mathbf{P} , направленного по нормали к оси \mathbf{X}). Все стороны куба покрыты АП-слоями (2). Расстояние между МСУНТ и АП-слоями выбрано приблизительно равным длине падающей волны. Для расчета дифференциальных сечений рассеяния использовался следующий прием [29]: на замкнутой поверхности, окружающей МСУНТ и расположенной в расчетной области, были рассчитаны электрические и магнитные поля, на основе которых в дальней зоне были получены значения искомым дифференциальных сечений рассеяния. Отметим, что дифференциальное сечение рассеяния в представленных ниже зависимостях определялось следующим образом:

$$RCS = 10 \lg(\delta / S) , \quad (7)$$

где $\delta = \lim_{R \rightarrow \infty} 4\pi R^2 |E^{sc}(\varphi, \theta) / E^{in}(\varphi, \theta)|^2$ — собственно дифференциальное сечение рассеяния; $E^{sc}(\varphi, \theta)$, $E^{in}(\varphi, \theta)$ — электрическая составляющая соответственно рассеянного и падающего на МСУНТ поля в дальней зоне, φ, θ — азимутальный угол и угол рассеяния в сферической системе координат, $S = 1m^2$ — площадь, на которую нормировалось дифференциальное сечение рассеяния δ .

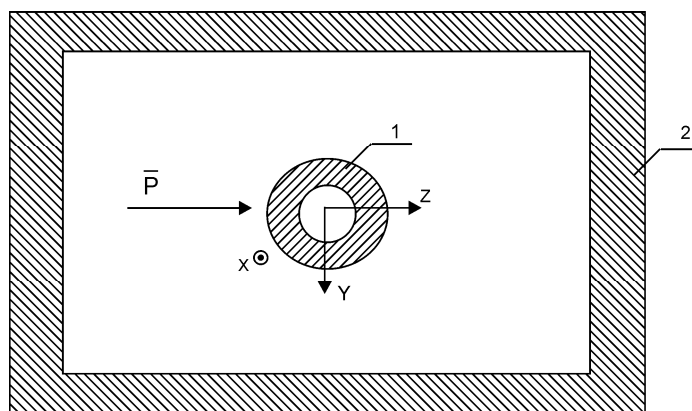


Рис. 3. Сечение расчетной области: 1 – МСУНТ, 2 – АП-слои; вектор Пойнтинга \vec{P} нормален к оси нанотрубки.

Таким образом, очерченная вычислительная схема расчета рассеяния плоских волн на одной полый МСУНТ позволяет осуществить расчет электромагнитных полей в ближней зоне и дифференциальных сечений рассеяния в дальней зоне. Указанная схема не является оптимальной с точки зрения эффективности вычислительного процесса, но построена по принципу разумной достаточности, что подтверждают проведенные и описанные ниже расчеты.

Результаты расчетов

Представленная методика расчета рассеяния плоской волны на МСУНТ тестировалась дважды. В первом случае (согласно изложенному выше алгоритму) – путем численного расчета дифференциальных сечений рассеяния металлического стержня (дальняя зона) и распределения электрических, магнитных полей, вектора Пойнтинга и токов проводимости на поверхности стержня (ближняя зона). Во втором случае рассматривалось приближение Релея–Ганса [32], на основе которого были получены аналитические выражения дифференциальных сечений рассеяния на полем диэлектрическом цилиндре в случае, когда $|m-1| \ll 1$ и $kd|m-1| \ll 1$, где m – комплексный показатель преломления стенок цилиндра по отношению к окружающей среде, k – волновой вектор волны в окружающей среде, d – характерный

линейный размер цилиндра. Заметим, оба подхода дополняют друг друга: в первом случае использовалось сравнение результатов точного электродинамического расчета с известными результатами (в ближней и дальней зонах), а во втором – сравнение результатов независимого аналитического подхода (дальняя зона) и описанного численного алгоритма.

В первом случае использовались следующие параметры металлического стержня: длина падающей волны $\lambda = 100$ см, диаметр стержня $D = 20$ см, высота стержня $H = \lambda, 1.5\lambda$. В дальней зоне, в случае, когда электрическая составляющая падающей волны направлена параллельно оси цилиндра и $H = \lambda$, а сканирование рассеянного поля осуществлялось вдоль плоскости X0Z (рис.1,а), дифференциальное сечение рассеяния имеет один минимум при угле сканирования $\theta \approx 90^\circ$, причем рассеяние падающей волны вперед оказывается большим, чем назад. В полярной системе координат, но при сканировании рассеянного поля вдоль плоскости Y0Z (рис.1,а) диаграмма рассеяния достаточно точно описывается окружностью. При длине стержня $H = 1.5\lambda$ и при сканировании рассеянного поля вдоль плоскости X0Z (рис.1,а) появляются характерные максимумы при углах сканирования $\theta_1 \approx 70^\circ$ и $\theta_2 \approx 125^\circ$, минимумы – при углах $\theta_3 \approx 30^\circ$, $\theta_4 \approx 90^\circ$ и $\theta_5 \approx 150^\circ$, причем в этом случае дифференциальное сечение рассеяния вперед также больше чем, сечение назад.

В ближней зоне в случае, когда высота металлического стержня $H = \lambda$, плотность распределения электрической составляющей рассеянного поля гораздо больше с теневой стороны (по отношению к направлению вектора Пойнтинга \vec{P} , рис.1), чем с освещенной. Распределение рассеянного поля вблизи вдоль стержня повторяет форму падающей волны. Модуль вектора Пойнтинга \vec{P} имеет гораздо большее значение с теневой стороны, причем его максимум расположен посередине стержня. Магнитная составляющая рассеянного поля имеет характерный кольцеобразный характер, причем ее максимум расположен с освещенной стороны стержня и достигает наибольшего значения в поперечном сечении, проведенном через середину нанотрбки. Все эти рассчитанные закономерности согласуются с известными данными.

Во втором случае параметры полого диэлектрического цилиндра имели следующие значения: длина падающей волны $\lambda = 600$ нм (вектор Пойнтинга \vec{P} нормален к оси цилиндра), внешний радиус цилиндра $a = 75$ нм, внутренний – $a_0 = 25$ нм, полувысота $L = H/2 = 150$ нм, действительная часть диэлектрической проницаемости $\epsilon_r' = 1.05$. В дальней зоне, в случае, когда электрическая составляющая падающей волны направлена параллельно оси цилиндра, а сканирование рассеянного поля осуществляется вдоль плоскостей X0Z и Y0Z (рис.1а), сечения рассеяния рассчитывались по формуле

$$RCS = 10 \lg \left[\frac{4\pi k^4 L^2 (a - a_0)^2}{S} \left| \sqrt{\epsilon_r'} - 1 \right| \left(\frac{f_{X0Z}^2(\theta)}{f_{Y0Z}^2(\theta)} \right) \cos^2(\theta) \right], \quad (8)$$

в которой

$$f_{X0Z}(\theta) = \frac{\sin(kL \sin \theta) a J_1[2ka \sin^2(\theta/2)] - a_0 J_1[2ka_0 \sin^2(\theta/2)]}{kL \sin \theta}, \quad (9)$$

$$f_{Y0Z}(\theta) = \frac{a J_1[2ka \sin(\theta/2)] - a_0 J_1[2ka_0 \sin(\theta/2)]}{k(a^2 - a_0^2) \sin(\theta/2)}, \quad (10)$$

– форм-факторы, определяющие угловую зависимость сечений рассеяния на цилиндре в плоскостях XOZ и YOZ соответственно, $J_1(x)$ – функция Бесселя. Соотношения (8) – (10) были получены для конечного пустотелого цилиндра в приближении Релея–Ганса с учетом форм-фактора, описанного в [32]. Сравнение результатов расчета, полученных согласно соотношениям (5), (6) и (8) – (10), для значения диэлектрической проницаемости $\varepsilon_r' = 1.05$ показало их соответствие с точностью до третьего знака после запятой.

Описание рассеяния плоской волны на полой МСУНТ (как и в случаях с металлическим стержнем и диэлектрическим цилиндром) было проведено в дальней зоне путем расчета дифференциальных сечений рассеяния и распределения электромагнитных полей, а также вектора Пойнтинга в ближней зоне. Для расчета использовались следующие значения параметров: длина падающей волны $\lambda = 600$ нм (выбрана как срединная точка оптического диапазона длин волн), вектор Пойнтинга \vec{P} нормален к оси МСУНТ, напряженность электрической составляющей, падающего на МСУНТ электромагнитного поля, $\vec{E} = 1$ В/м, внешний радиус нанотрубки $a = 75$ нм, внутренний – 25 нм, для высоты МСУНТ брались три значения: $H = 1.5\lambda$, 1.0λ и 0.5λ .

В дальней зоне, когда электрическая составляющая падающей волны параллельна оси МСУНТ, а сканирование рассеянного поля проводится вдоль плоскости XOZ (рис.4а), при значениях параметров $H = 0.5\lambda$, $\varepsilon_r' = 5$, $\varepsilon_r'' = 0$ (отсутствие потерь) кривая дифференциального сечения рассеяния (3, рис.4а) имеет один минимум, причем рассеяние падающей волны вперед оказывается большим, чем назад. При учете потерь (а именно, при тангенсе угла диэлектрических потерь $tg(\delta) = \varepsilon_r'' / \varepsilon_r' = 1.54$) указанная кривая незначительно смещается вниз (рис.4б). При увеличении высоты H появляются характерные максимумы (рис.4а, кривая 1), причем при учете потерь эти максимумы становятся более отчетливыми (рис.4б, кривая 1). Таким образом, потери не только смещают вниз по вертикальной оси кривые 1–3 (см. рис.4а и 4б), но и изменяют их форму. Кривые 4, 5 и 6 на рис.4а, рассчитанные в приближении Релея–Ганса по соотношениям (8) –(10) соответствуют кривым 1, 2 и 3, полученным точным расчетом. Попарное сопоставление кривых 4 и 1, 5 и 2, 6 и 3 показывает, что невыполнение условий применения приближения Релея–Ганса дает существенное различие в результатах. Однако на качественном уровне кривые 4, 5 и 6 повторяют особенности поведения кривых 1, 2 и 3.

При сканировании рассеянного электрического поля вдоль плоскости YOZ (рис.5а и 5б) дифференциальные сечения рассеяния электрической составляющей рассеянного поля изменяются более плавно, причем при учете потерь немного опускаются по вертикальной оси и изменяются более круче по сравнению с аналогичными кривыми, не учитывающими потерь.

В дальней зоне, когда электрическая составляющая падающей волны перпендикулярна оси МСУНТ, а сканирование рассеянного поля проводится вдоль плоскости XOZ (рис.6а), при значениях параметров $H = 0.5\lambda$, $\varepsilon_r' = 2.85$, $\varepsilon_r'' = 0$ (отсутствие потерь) дифференциальное сечение рассеяния имеет небольшой прогиб (кривая 3), причем рассеяние вперед также оказывается большим, чем рассеяние назад. При учете потерь ($tg(\delta) = \varepsilon_r'' / \varepsilon_r' = 0.772$) указанная кривая 3 незначительно смещена вверх по вертикальной оси (рис.6б). Заметим, что поворот электрической составляющей падающего поля приводит к изменению формы кривых сечения рассеяния (рис.4б и рис.6б), причем при рассеянии вперед и назад сечения рассеяния соответствующих кривых уменьшаются. При увеличении длины МСУНТ форма кривых сечения рассеяния существенно изменяется: появляются два динамично

изменяющихся минимума как в случае без учета потерь (рис.6а), так и в случае с учетом потерь (рис.6б) (в случае без потерь они растут, а в случае с потерями – уменьшаются), причем учет потерь приводит к незначительному сдвигу вверх рассматриваемых кривых, преимущественно, при рассеянии вперед и назад. Учет потерь влечет, прежде всего, деформацию полного сечения рассеяния и в данном случае в плоскости X0Z оно немного увеличилось, особенно при рассеянии вперед и назад.

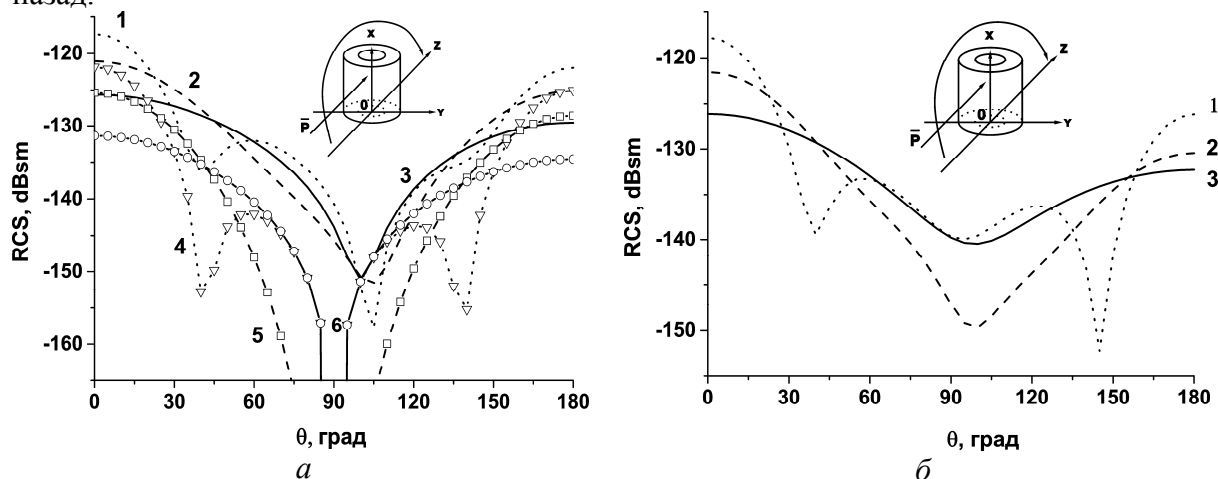


Рис. 4. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\varepsilon''=0$ (а) и при их учете с $tg(\delta)=1.54$ (б). Кривые 1, 2, 3 соответствуют высотам МСУНТ $H=1.5\lambda$, 1.0λ , 0.5λ . Кривые 4, 5, 6 соответствуют кривым 1, 2, 3, но рассчитаны в приближении Рэлея–Ганса по формулам (8) – (10). Электрическая составляющая падающего поля бралась параллельной оси нанотрубки, плоскость сканирования X0Z рассеянного поля изображена на вставках.

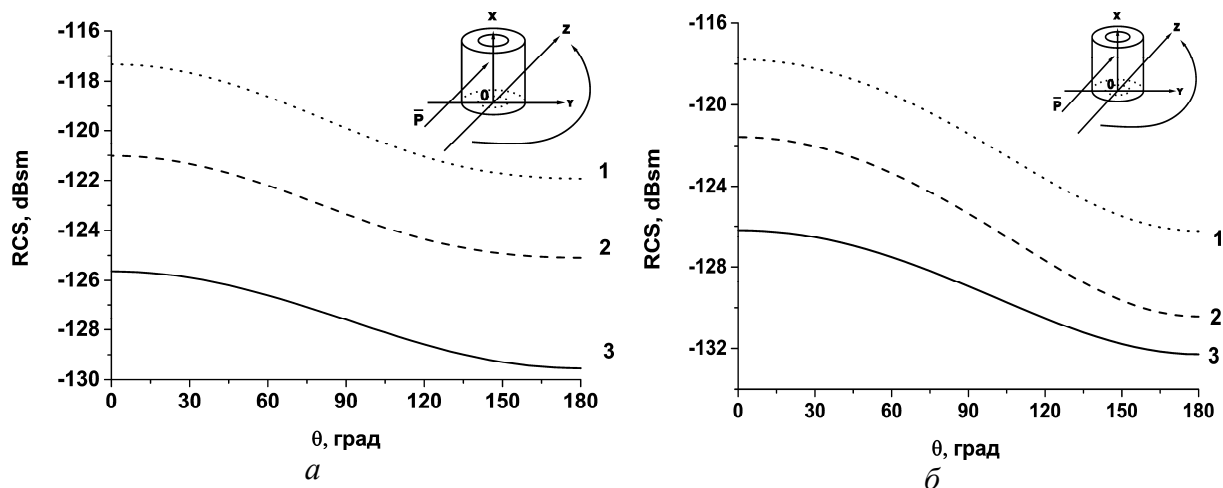


Рис. 5. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\varepsilon''=0$ (а) и при их учете с $tg(\delta)=1.54$ (б). Кривые 1, 2, 3 соответствуют высотам МСУНТ $H=1.5\lambda$, 1.0λ , 0.5λ . Электрическая составляющая падающего поля бралась параллельной оси нанотрубки, плоскость сканирования Y0Z рассеянного поля изображена на вставках.

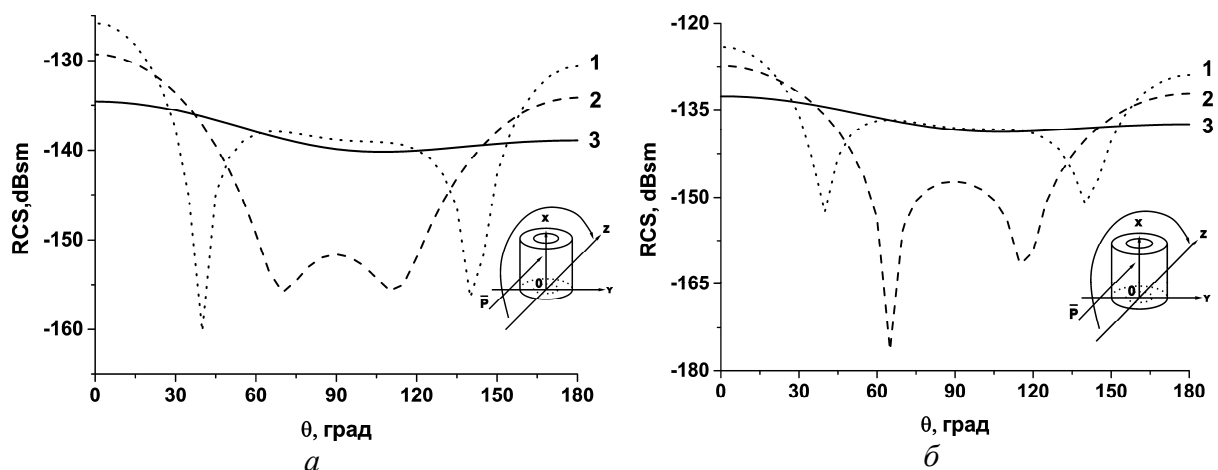


Рис. 6. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\varepsilon''=0$ (а) и при их учете с $tg(\delta)=0.772$ (б). Кривые 1, 2, 3 соответствуют высотам МСУНТ $H=1.5\lambda$, 1.0λ , 0.5λ . Электрическая составляющая падающего поля бралась перпендикулярной оси нанотрубки, плоскость сканирования XOZ рассеянного поля изображена на вставках.

При сканировании рассеянного электрического поля вдоль плоскости YOZ (рис.7а и 7б) кривые дифференциальных сечений рассеяния имеют один минимум, положение которого незначительно изменяется при учете потерь. Увеличение длины МСУНТ увеличивает сечение рассеяния, делая кривые более острыми (в случае без учета потерь) и более пологими в случае с учетом потерь. Учет потерь приводит к незначительному сдвигу рассматриваемых кривых вверх, прежде всего, при рассеянии вперед и назад. Заметим, что в данном случае, как и в случае сканирования в плоскости XOZ , поворот электрической составляющей падающего поля также приводит к изменению формы кривых сечения рассеяния (рис.5б и рис.7б).

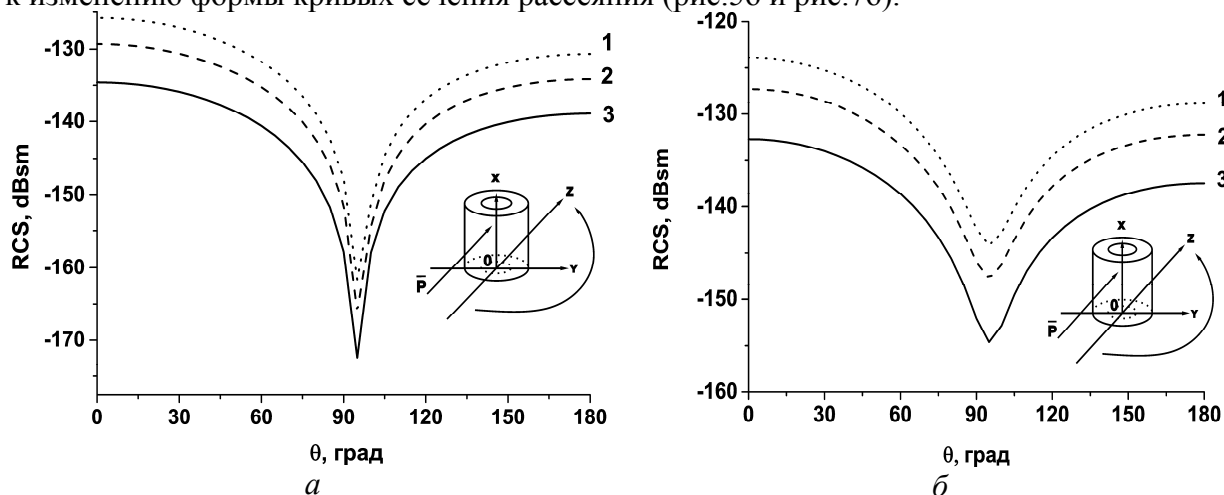


Рис. 7. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\varepsilon''=0$ (а) и при их учете с $tg(\delta)=0.772$ (б). Кривые 1, 2, 3 соответствуют высотам МСУНТ $H=1.5\lambda$, 1.0λ , 0.5λ . Электрическая составляющая падающего поля бралась перпендикулярной оси нанотрубки, плоскость сканирования YOZ рассеянного поля изображена на вставках.

Расчет распределения модуля электрической (рассеянной) составляющей падающего на МСУНТ электромагнитного поля (ближняя зона) осуществлялся в

плоскости XOZ (рис.8) вдоль горизонтальных прямых h_1, h_2, h_3 и вертикальных – v_1, v_2, v_3 . Горизонтальные прямые пересекают ось OX в точках 300 нм, 450 нм и 550 нм, а вертикальные пересекают ось OZ в точках 0 нм, –50 нм и 50 нм. Для расчета использовались следующие параметры: длина падающей волны $\lambda = 600$ нм, высота нанотрубки $H = 600$ нм, внешний радиус $a = 75$ нм, внутренний – 25 нм.

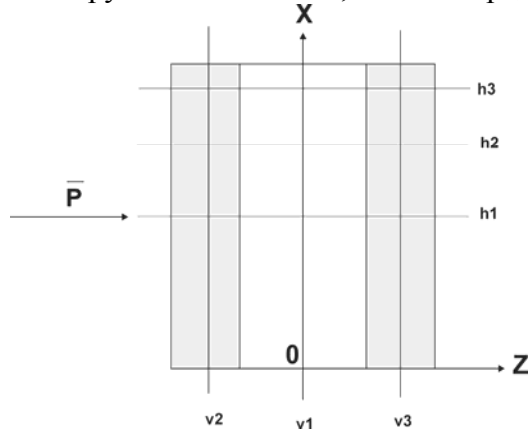


Рис. 8. Вертикальное сечение МСУНТ вдоль диаметра. Горизонтальные и вертикальные линии (h_1, h_2, h_3 ; v_1, v_2, v_3) пересекают оси OX и OZ в точках 300 нм, 450 нм, 550 нм и 0 нм, –50 нм, 50 нм, соответственно. Высота нанотрубки $H = 600$ нм, внешний радиус $a = 75$ нм, внутренний – 25 нм,

В ближней зоне, когда электрическая составляющая падающей волны параллельна оси МСУНТ, результаты расчетов при $\epsilon_r' = 5$, $\epsilon_r'' = 0$ (отсутствие потерь) показывают, что максимум рассеянного электрического поля сосредоточен на теневой стороне посредине нанотрубки. Этот вывод подтверждают кривая 1 (рис.9а), которая рассчитана вдоль прямой h_1 (рис.8), и кривая 3 (рис.10а), которая вычислена вдоль прямой v_3 (рис.8). Кривые 1,2 и 3 (рис.9а) в области МСУНТ имеют почти монотонный характер, причем без резких изменений. Максимум вектора Пойнтинга расположен аналогично, но немного смещен вперед по оси Z .

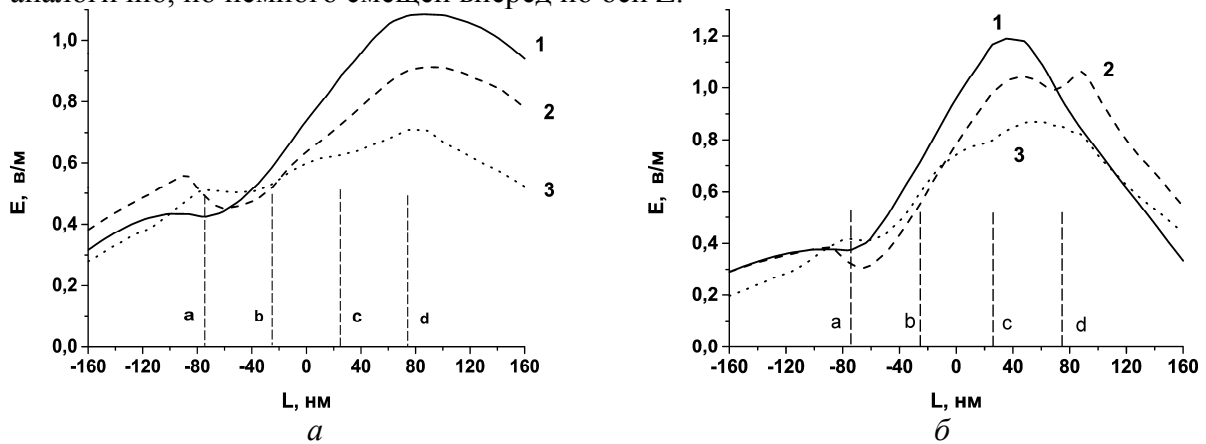


Рис. 9. Напряженности электрических полей в ближней зоне МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\epsilon_r'' = 0$ (а) и при их учете $tg(\delta) = 1.54$ (б). Электрическая составляющая падающего поля параллельна к оси нанотрубки. Кривые 1,2,3 вычислены вдоль горизонтальных прямых h_1, h_2, h_3 (рис.8). Вертикальные пунктирные линии а–д соответствуют границам стенок МСУНТ, где линии а,д соответствуют внешним границам, б,с – внутренним.

При учете потерь ($\epsilon_r' = 5$, $tg(\delta) = \epsilon_r'' / \epsilon_r' = 1.54$) указанные максимумы незначительно смещаются немного назад в область нанотрубки (рис.9б), причем они становятся более острыми. Это видно на примере кривой 1 (рис.9б), которая рассчитана вдоль прямой h_1 (рис.8) и кривой 3 (рис.10,б), которая вычислена вдоль прямой v_3 (рис.8). Отличительной особенностью (в случае учета потерь) является наличие токов

проводимости в объеме МСУНТ, особенно это ярко выражено на теневой стороне нанотрубки (кривая 1, рис.9, 10,б), где напряженность электрического поля немного больше, чем напряженность падающей волны. Сравнение распределений вектора Пойнтинга в теневой области нанотрубки (в случае с учетом потерь и без учета) показывает, что интенсивность данного вектора в первом случае меньше, причем его максимум меньше почти в два раза.

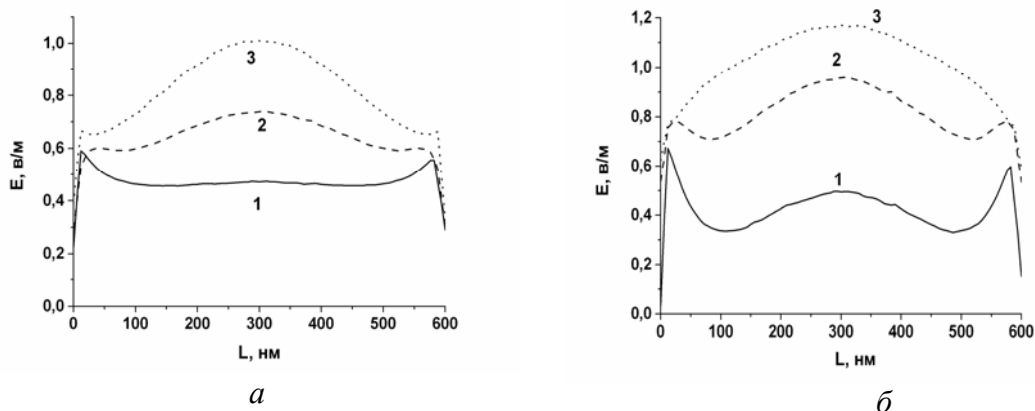


Рис. 10. Напряженности электрических полей в ближней зоне МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\varepsilon'' = 0$ (а) и при их учете $tg(\delta) = 1.54$ (б). Электрическая составляющая падающего поля параллельна к оси нанотрубки. Кривые 1,2,3 вычислены вдоль вертикальных прямых v_1, v_2, v_3 (рис.8).

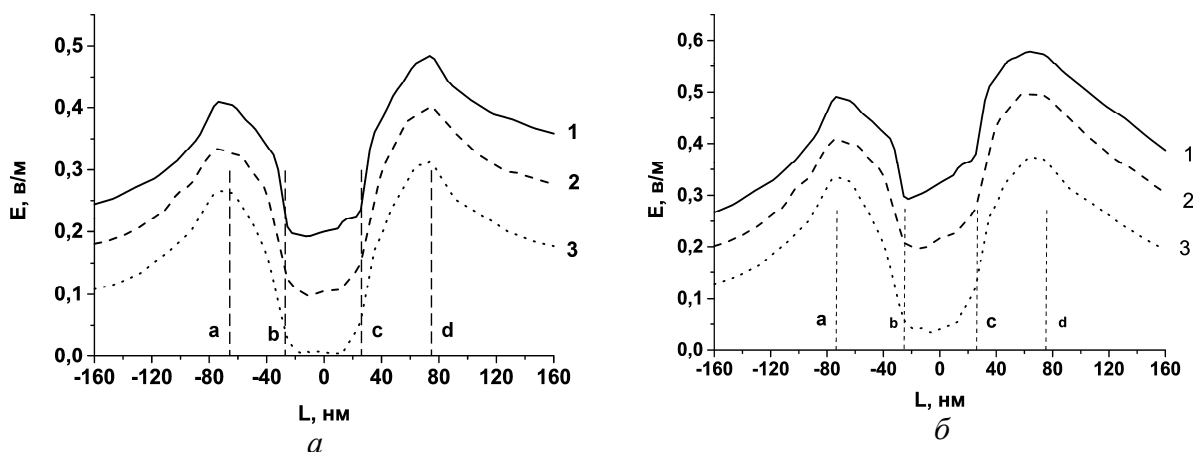


Рис. 11. Напряженности электрических полей в ближней зоне МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\varepsilon'' = 0$ (а) и при их учете $tg(\delta) = 0.772$ (б). Электрическая составляющая падающего поля перпендикулярна к оси нанотрубки. Кривые 1,2,3 вычислены вдоль горизонтальных прямых h_1, h_2, h_3 (рис.8). Вертикальные пунктирные линии а–d соответствуют границам стенок МСУНТ, где линии а,d соответствуют внешним границам, b,c – внутренним.

В ближней зоне, когда электрическая составляющая падающей волны перпендикулярна оси МСУНТ, результаты расчетов при $\varepsilon'_r = 5$, $\varepsilon''_r = 0$ (отсутствие потерь) показывают, что максимум рассеянного электрического поля сосредоточен, как и в случае, когда электрическая составляющая падающей волны параллельна к оси МСУНТ, на теневой стороне посередине нанотрубки. Это подтверждают данные, которые представлены кривой 1 (рис.11а), которая рассчитана вдоль прямой h_1 (рис.8), и кривой 3 (рис.12а), которая вычислена вдоль прямой v_3 (рис.8). Однако в данном случае поле в области отверстия гораздо меньше, чем в стенках МСУНТ (рис.11а). С

другой стороны, распределение поля вдоль оси нанотрубки имеет более отчетливый максимум, чем в случае, когда электрическая составляющая падающей волны параллельна к оси МСУНТ (см. рис.10а и рис.12а). Максимум вектора Пойнтинга также расположен в области максимума кривой поля \vec{E} , но его значение гораздо меньше, чем это наблюдалось в случае, когда электрическая составляющая падающего поля была параллельна оси МСУНТ.

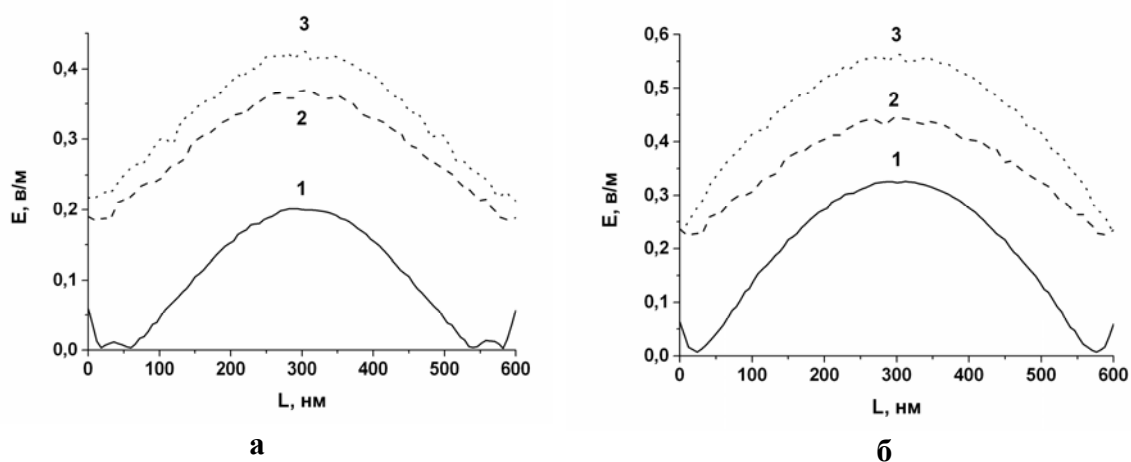


Рис. 12. Напряженности электрических полей в ближней зоне МСУНТ без учета диэлектрических потерь $\varepsilon'' = 0$ (а) и при их учете $tg(\delta) = 0.772$ (б). Электрическая составляющая падающего поля перпендикулярна к оси нанотрубки. Кривые 1,2,3 вычислены вдоль вертикальных прямых v_1, v_2, v_3 (рис.8).

При учете потерь ($\varepsilon_r' = 5$, $tg(\delta) = \varepsilon_r'' / \varepsilon_r' = 0.772$) указанные максимумы практически не смещаются (рис.11б). Это подтверждают кривая 1 (рис.11б), которая рассчитана вдоль прямой h_1 (рис.8) и кривая 3 (рис.12,б), которая вычислена вдоль прямой v_3 (рис.8). Отличительной особенностью (в случае учета потерь) является наличие токов проводимости в объеме МСУНТ, особенно это ярко выражено на тыльной стороне нанотрубки. Однако в данном случае (по сравнению со случаем, когда электрическая составляющая поля \vec{E} была параллельна к оси МСУНТ) плотность токов проводимости имеет гораздо меньшие значения (при учете потерь форма кривой распределения поля практически не изменилась по сравнению со случаем, когда потери не учитывались (рис.12а,б)).

Заключение

Сформулирована процедура расчета рассеяния плоских электромагнитных волн на одной полый МСУНТ в оптическом диапазоне для параллельно и нормально поляризованных векторов электрических полей падающей волны относительно ее оси. Представленная методика расчета рассеянных плоских волн на МСУНТ тестировалась дважды. В первом случае путем численного расчета дифференциальных сечений рассеяния металлического стержня (дальняя зона) и распределения электрических, магнитных полей, вектора Пойнтинга и токов проводимости на поверхности стержня (ближняя зона). Во втором случае рассматривалось приближение Релея–Ганса, на основе которого получены аналитические выражения дифференциальных сечений рассеяния на полем диэлектрическом цилиндре. Оба подхода дополняют друг друга: в первом случае использовалось сравнение результатов точного электродинамического расчета с известными результатами (в ближней и дальней зонах), а во втором –

сравнение результатов независимого аналитического подхода (дальняя зона) и описанного численного алгоритма. В каждом случае получено хорошее совпадение результатов.

Проведенные расчеты показали, что в дальней зоне увеличение длины МСУНТ приводит к формированию анизотропного углового распределения дифференциальных сечений рассеяния, а наличие диэлектрических потерь вызывает как количественное, так и качественное изменение характера углового распределения дифференциальных сечений рассеяния: потери не только масштабируют сечения рассеяния, но и изменяют их форму. Изменение направления электрической составляющей падающего поля с параллельного на нормальное (по отношению к оси МСУНТ) качественно изменяет распределение дифференциальных сечений: формируются «лепестки» диаграммы направленности в направлении, нормальном к направлению падения волны.

Изучение распределения электромагнитных полей внутри полой МСУНТ показало, что диэлектрические потери не препятствуют проникновению этих полей внутрь нанотрубки. Максимум электрической составляющей поля \vec{E} располагается с теневой стороны посередине МСУНТ: наличие потерь незначительно увеличивает рассеянное поле в максимуме, однако максимум вектора Пойнтинга в этой области (в случае, когда электрическая составляющая поля параллельна оси МСУНТ) уменьшается почти в два раза. Изменение направления электрической составляющей падающего поля с параллельного на нормальное (по отношению к оси МСУНТ) качественно изменяет распределение поля \vec{E} : практически однородное поле вдоль оси нанотрубки изменяется на резко неоднородное поле с максимумом посередине МСУНТ.

Полученные результаты выполнены в предположении, что вектор Пойнтинга \vec{P} падающей волны нормален к оси МСУНТ. Однако данный случай не учитывает анизотропный характер диэлектрической проницаемости нанотрубки (некий аналог нелинейности) в рамках одного расчета. Это обстоятельство принципиально не позволяет использовать метод наложения (нельзя, например, описать явление двойного лучепреломления). Поэтому возникает необходимость исследования взаимодействия МСУНТ с электродинамической волной при произвольном угле падения вектора Пойнтинга.

Одним из существенных недостатков точных электродинамических расчетов является тот факт, что, как правило, они не позволяют оперативно объяснить полученные результаты. Необходимость использования полуаналитических моделей, которые устраняют этот пробел, очевидным образом вытекает из данной работы: приближение Релея–Ганса (альтернативным вариантом может быть использование теории Ми) использовалось не только для тестирования точной модели, но и для объяснения на качественном уровне поведения дифференциальных сечений рассеяния в дальней зоне МСУНТ. Возникает необходимость использовать аналогичную методологию также и в ближней зоне нанотрубки.

Литература

1. Радужкевич Л.В., Лукьянович В.М. О структуре углерода, образующегося при термическом разложении окиси углерода на железном контакте // Журн. физ. химии.–1952. – Т.26. – №1. – С. 88–95.
2. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // Nature.– 1991. – V.354.– P. 56 – 58.
3. Treacy, M., Ebbesen, T.W., Gibson, J.M. Experimentally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes // Nature. – 1996. – V.381. – P. 678 – 680.
4. Zhang J., Yang G., Cheng Y. Stationary scanning X-ray source based on carbon nanotube field emitters // Appl. Phys. Lett. – 2005. – V. 86. – P. 376 – 379.
5. LeMieux M. C., Roberts M., Barman S., Jin Y.W., Kim J.M., Bao Z. Self-Sorted, Aligned Nanotube Networks for Thin-Film Transistors // Science. – 2008. – V. 321. – P. 101 – 104.

6. Nikolic B.K., Saha K.K., Markussen T., First-principles quantum transport modeling of thermoelectricity in single-molecule nanojunctions with graphene nanoribbon electrodes // *J. Comput. Electron.* – 2012. – V. 11. – P. 78–92.
7. Ying L., Baoqing Z., Properties of carbon nanotube optical antennae // *Inter. J. Infrared and millimeter Waves.* – 2008. – V. 29. – P. 990–996.
8. Murmu T., McCarthy M.A., Adhikari S., Vibration response of double-walled carbon nanotubes subjected to an externally applied longitudinal magnetic field: A nonlocal elasticity approach // *J. Sound and Vibration.* – 2012. – V. 331. – P. 5069–5086.
9. Sun Z., Rozhin A.G., Wang F., Ferrari A.C. L-Band Ultrafast Fiber Laser Mode Locked by Carbon Nanotubes // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – V. 93. – P. 061114-061115.
10. Itkis M.E., Borondics F., Yu A., Haddon R.C. Bolometric Infrared Photo-response of Suspended Single-Wall Carbon Nanotube Films // *Science.* – 2006. – V. 312. – P. 413–416.
11. Lopez C. Materials Aspects of Photonic Crystals // *Adv. Mater.* – 2003. – V. 15. – P. 1679–1704.
12. John S. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – V. 58. – P. 2486–2489.
13. Johnson G.S., Mekis A., Fan S.H., Joannopoulos J.D. Modeling the Flow of Light // *Comput. Sci. Eng.* – 2001. – V. 3. – P. 38–47.
14. Luo C., Johnson S.G., Joannopoulos J.D., Pendry J.B. All-angle Negative Refraction without Negative Effective Index // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 65. – P. 201104–201114.
15. Soukoulis C.M., Linden S., Wegener M. Negative Refractive Index at Optical Wavelengths // *Science.* – 2007. – V. 315. – P. 47–49.
16. Ishau A., Yan L., Husnain G., Lu Bo, Khalid A. Tuning the optical properties of multiwall carbon nanotube thin films by N^+ ion beams irradiation // *ACS Nano.* – 2011. – V. 6. – P. 357–365.
17. Soldano K., Rossella F., Bellani V., Gludicatti S., Kar S. Cobalt nanocluster filled carbon nanotube arrays: engineering photonic bandgap and optical reflectivity // *ACS Nano.* – 2010. – V. 4. – P. 6573–6578.
18. Bandaru P.R. Electrical properties and applications of carbon nanotube structures // *Nanosci. Nanotechnol.* – 2007. – V. 7. – P. 1–29.
19. Vang Zu-Po, Ci L., Bur J., A., Lin Shawn-Yu, Ajaean P.M. Experimental Observation of an Extremely Dark Material Made By a Low-Density Nanotube Array // *Nano Lett.* – 2008. – V. 8. – P. 446–451.
20. Каневский В.И., Розенбаум В.М., Шкода Н.Г. Рассеяние плоских электромагнитных волн на углеродной нанотрубке // *Восточно-европейский журнал передовых технологий. Прикладная физика и материаловедение.* – 2013. – №3/5 (63). – С. 38–46.
21. Каневский В.И., Розенбаум В.М. Методы расчета оптических свойств материалов на основе многослойных углеродных нанотрубок // *Поверхность.* – 2012. – №4(19). – С. 61–81.
22. Guo G., Chu K., Wang D.S., Duan S.G. Linear and Nonlinear Optical Properties of Carbon Nanotubes from First-Principals Calculations *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 69. – P. 205416–205429.
23. Partoens B., Peeters F.M. From Graphene to Graphite: Electronic Structure around the Point // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 74. – P. 205416–205429.
24. Lidorakis E., Ferrari A.C. Photonics with multiwall carbon nanotube arrays // *ACS Nano.* – 2009. – V. 3. – P. 1238–1248.
25. Djuricic A.B., Li E.H. Optical properties of graphite // *J. Appl. Phys.* – 1999. – V. 85. – P. 7404–7410.
26. Lu W., Dong J., Li Zhen-Ya Optical properties of aligned carbon nanotube systems studied by effective-medium approximation method // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 63. – P. 033401–033404.

27. Baylis A., Gunzburger M., Turkel M. Boundary Conditions for the Numerical Solutions of Elliptic Equations in Exterior regions // SIAM J. Appl. Math. – 1980. – V. 1. – P. 371–385.
28. Volakis J.L., Chatterjee A., Kempel L.C. Finite Element Method for Electromagnetics. – IEEE Press, 1998. – 344 p.
29. Jin J. The Finite Element Method in Electromagnetics. Second Edition. – New York: Wiley, 2002. – 753 p.
30. Chew W.C., Weedon W.C. A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates // Microwave Opt. Tech. Lett. – 1994. – V.7. – P. 599–604.
31. Sacks Z.S., Kingsland D.M., Lee R., Lee J.F. A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition // IEEE Trans. Antennas Propagat. – 1995. – V. 43. – P. 1460–1463.
32. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. – Москва: Мир, 1986. – 664 с.

РОЗСІЯННЯ ПЛОСКИХ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ ПОРОЖНИСТОЮ БАГАТОШАРОВОЮ ВУГЛЕЦЕВОЮ НАНОТРУБКОЮ

В.І. Канєвський¹, В.М. Розенбаум¹, Д.І. Побокін¹, Л.І. Трахтенберг²

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна*

²*Інститут хімічної фізики, Російська академія наук, Москва*

Представлена процедура розрахунку розсіяння плоских електромагнітних хвиль на порожнистій багатошаровій вуглецевій нанотрубці (БШВНТ) в оптичному діапазоні, що використовує модель Друде–Лоренца для отримання тензора діелектричної проникності МСУНТ і кінцево-елементний підхід. Приведені результати розрахунків розсіяння плоских хвиль однією порожнистою БШВНТ (кутові залежності диференціальних перерізів в далекій зоні і розподілу електричних полів в ближній зоні) для паралельно і нормально поляризованих векторів електричних полів падаючих хвиль щодо її осі з вектором Поінтинга, перпендикулярним до цієї осі.

SCATTERING OF PLANE ELECTROMAGNETIC WAVES ON A HOLLOW MULTIWALL CARBON NANOTUBE

V.I. Kanyevskyy¹, V.M. Rozenbaum¹, D.I. Pobokin¹, L.I. Trakhtenberg²

¹*Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine,
Generala Naumova Street, 17, Kiev, 03164, Ukraine, vikaney@ukr.net*

²*Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow*

Calculation procedure of scattering of plane electromagnetic waves on a hollow multiwall carbon nanotube (MWCNT) is presented in optical range using the Drude-Lorentz model for dielectric permittivity tensor of MWCNT and the finite element method. Results of calculations of scattering of plane electromagnetic waves on a hollow MWCNT (angular dependences of the differential cross sections in the far-zone and the distribution of electric fields in the near-zone) are obtained for parallel and perpendicular polarized vectors of electric fields of incident waves relatively its axis, with the Poynting vector perpendicular to this one.