



بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۵-۱۶ بهمن ۱۳۹۸



تئوری محیط مؤثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره: تقریب شبه استاتیک

افشین مرادی

گروه فیزیک مهندسی، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه

a.moradi@kut.ac.ir

چکیده - در این مقاله، با تو سعه تئوری ماکسول-گارنت برای تقریب محیط مؤثر مواد کامپوزیتی، تابع دی الکتریک مؤثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره بدست آمده است. بدین منظور یک نانو لوله کربنی تک دیواره بصورت یک لایه استوانه ای بی نهایت نازک از الکترون‌های π و σ مدل شده است و تحریکات الکترونی بر روی سطح این لایه بوسیله تئوری هیدرودینامیک دو شارهای دو بعدی توصیف شده است.

کلید واژه- تقریب شبه استاتیک، تئوری ماکسول-گارنت، نانو لوله کربنی تک دیواره، تئوری هیدرودینامیک

Effective medium theory of a composite of single-walled carbon nanotubes: Quasi-static approximation

Afshin Moradi

Department of Engineering Physics, Kermanshah University of Technology, Kermanshah

a.moradi@kut.ac.ir

Abstract- In this paper, Maxwell-Garnett theory for the effective medium approximation of composite materials is developed to obtain the effective dielectric function of a composite of single-walled carbon nanotubes. To do this, a single-walled carbon nanotube is modeled by an infinitesimally thin cylindrical shell of the π and σ electrons and electronic excitations of this shell are described by means of the two-dimensional two-fluid hydrodynamic theory.

Keywords: Quasi-static approximation, Maxwell-Garnett theory, Single-walled carbon nanotube, Hydrodynamic theory

مقدمه

با استفاده از تئوری هیدرودینامیک خطی و معادلات ماکسول در ترکیب با شرایط مرزی مناسب، انتشار امواج پلاسمون پلاریتونی سطحی مربوط به یک نانو لوله کربنی تک دیواره توسط نویسنده حاضر در [۱] مطالعه شده است. و در نتیجه آن رابطه پاشندگی سیستم بدست آمده است. به علاوه، با استفاده از تئوری مای، مدل هیدرودینامیک خطی دو شارهای و شرایط مرزی حاکم بر مسأله، پاسخ الکترومغناطیسی یک نانو لوله کربنی تک دیواره به امواج الکترومغناطیسی در مرجع [۲] بررسی و خصوصیات ضریب خاموشی سیستم محاسبه شده است. سپس با توجه به نتایج کسب شده، تابع دی الکتریک کامپوزیتی از این نانو لوله های کربنی تک دیواره بدست آمده است [۳]. در کار حاضر برای محاسبه تابع دی الکتریک مؤثر کامپوزیتی از نانو لوله های کربنی تک دیواره، با توجه به ابعاد بسیار کوچک آنها، از تقریب شبه استاتیک [۴] استفاده می شود. مزیت استفاده از روش حاضر نسبت به بررسی قبلی در مرجع [۳]، سادگی روش حل مسأله، نمایش مناسب تر نتیجه و همچنین تعمیم ساده تر روش حل برای سیستم های پیچیده تر است.

تئوری و محاسبات

در ابتدا یک نانو لوله کربنی تک دیواره بصورت یک لایه استوانه ای بی نهایت نازک، بلند و پوشیده شده از یک پلاسمای الکترونی حاوی الکترون های نوع π و σ (به ترتیب با چگالی های سطحی بار غیر اختلالی $n_{\sigma\pi} = 2.8 \times 10^{14} \text{ nm}^{-2}$ و $n_{\sigma\sigma} = 3 \times 2.8 \times 10^{14} \text{ nm}^{-2}$) در دستگاه مختصات استوانه ای $r = (\rho, \phi, z)$ در نظر گرفته می شود و فرض می شود که محور نانو لوله در راستای محور z ها باشد. همچنین، ثابت دی الکتریک درون نانو لوله ϵ_r فرض می شود. حال، کامپوزیتی متشکل از نانو لوله های کربنی تک دیواره با شعاع های یکسان a به عنوان محیط ۱ (با کسر حجمی f)

را در محیط ۲ با ثابت دی الکتریک ϵ_r ، در نظر می گیریم. بر اساس تئوری ماکسول-گارنت برای محاسبه تابع دی الکتریک مؤثر ϵ_{eff} کامپوزیت حاضر، فرض می شود که این سیستم تحت تأثیر یک میدان الکترومغناطیسی قرار گرفته است. با توجه به کوچکی یک نانو لوله کربنی در مقابل با طول موج میدان الکترومغناطیسی احاطه کننده آن می توان از تقریب شبه استاتیک استفاده نمود. در این تقریب، در عمل نوسانات مکانی میدان خارجی توسط نانو لوله ها دیده نمی شود و در نتیجه می توان فرض نمود که سیستم در یک میدان الکتروستاتیکی وابسته به زمان هارمونیک با دامنه E_0 قرار گرفته است.

در دنباله، با توجه به روش ارائه شده در مرجع [۵]، این کامپوزیت با سیستمی متشکل از یک نانو لوله کربنی تک دیواره که توسط یک کاواک استوانه ای شکل به شعاع b با تابع دی الکتریک مؤثر ϵ_{eff} احاطه شده است، جایگزین می شود. توجه می شود که حجم بین نانو لوله کربنی به شعاع a و کاواک به شعاع b (با ثابت دی الکتریک ϵ_r) بیانگر متوسط فضای پوششی برای هر نانو لوله با فاکتور پرشدگی $f = a^2/b^2$ است. در نهایت، تابع دی الکتریک مؤثر سیستم ϵ_{eff} تحت شرایطی محاسبه می شود که این نانو لوله منفرد هیچگونه اختلالی در میدان الکتروستاتیکی محیط اطراف خود ایجاد نکند [۵،۶]. با توجه به آرایش نشان داده شده در شکل ۱، فرض می شود که یک نانو لوله تک دیواره منفرد پوشیده شده با یک لایه با ثابت دی الکتریک ϵ_r تحت تأثیر یک میدان شبه استاتیک در راستای محور x قرار گرفته باشد.

با توجه به آرایش مسأله، پتانسیل الکتریکی در نواحی $\rho < a$ ، $a < \rho < b$ و $\rho > b$ در معادله لاپلاس $\nabla^2 \Phi = 0$ صدق می کنند؛ افزون بر آن با توجه به تقارن محوری سیستم، این پتانسیل ها به ρ و ϕ بستگی دارند و در نتیجه برای جواب پتانسیل در نواحی مختلف می توان نوشت:

$$\frac{\partial^2 \delta \phi_v}{\partial t^2} = \frac{e}{m_v} \frac{1}{a} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \bigg|_{\rho=a} - \frac{\alpha_v}{n_{ov}} \frac{1}{a} \frac{\partial n_v}{\partial \phi} - \gamma_v \frac{\partial \delta \phi_v}{\partial t}, \quad (6)$$

$$n_v + n_{ov} \frac{1}{a} \frac{\partial \delta \phi_v}{\partial \phi} = 0, \quad (7)$$

$$\nabla^2 \Phi(r) = \begin{cases} 0, & \rho \neq a, \\ \sum_{v=\pi, \sigma} \frac{en_v}{\epsilon_0}, & \rho = a, \end{cases} \quad (8)$$

به طوری که در روابط اخیر $\delta \phi_v$ معرف جابجایی زاویه‌ای اختلالی مرتبه اول شارح الکترونی v در سطح نانو لوله $m_v, \rho = a$ معرف جرم مؤثر الکترون نوع v است. جمله اول سمت راست رابطه (۶) نشان‌دهنده نیروی الکتریکی وارد بر شارح الکترونی v در سطح سیستم است. جمله دوم بیانگر فشار الکترونی ناشی از برهمکنش داخلی شارح الکترونی با ضریب $\alpha_v = \frac{v_{Fv}}{\sqrt{2}}$ است که در آن $v_{Fv} = \frac{\hbar k_{Fv}}{m_v}$ نشان‌دهنده سرعت فرمی الکترون نوع v ($\hbar$ برابر با ثابت پلانک h تقسیم بر 2π است) و $k_{Fv} = (2\pi m_{ov})^{1/2}$ معرف عدد موج فرمی الکترون v است. جمله آخر بیانگر میرایی الکترون نوع v (با ضریب میرایی γ_v) ناشی از پراکندگی آن با یون‌های زمینه است. در این مرحله، با فرض یک وابستگی وابسته به زمان هارمونیک برای همه کمیت‌ها بصورت $e^{-i\omega t}$ (که در آن ω نشان‌دهنده فرکانس نوسان است)، با استفاده از روابط (۱) و (۶)-(۸)، بعد از حذف جابجایی زاویه‌ای اختلالی $\delta \phi_v$ می‌توان نوشت:

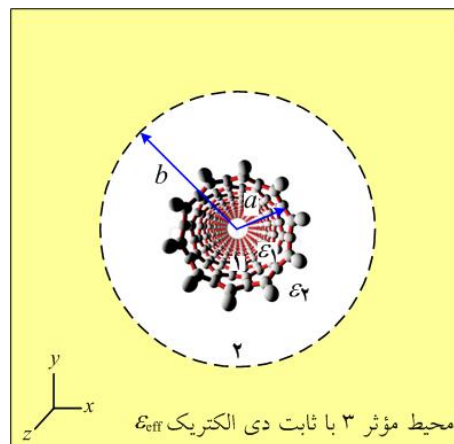
$$n_v = -\frac{\epsilon_0 \omega_{pv}^2}{ea \Omega_v} \Phi \bigg|_{\rho=a}, \quad (9)$$

$$\omega_{pv} = \left(\frac{e^2 n_{ov}}{\epsilon_0 m_v a} \right)^{1/2} \text{ و } \Omega_v = \omega(\omega + i\gamma) - \frac{\alpha_v}{a^2} \text{ که در آن}$$

با جایگذاری رابطه (۱) در روابط (۲)-(۵) و استفاده از رابطه (۹) می‌توان نوشت:

$$\Phi(\rho, \phi) = \text{Cos} \phi \begin{cases} A \rho, & \rho \leq a, \\ A \rho + A_1 \rho^{-1}, & a \leq \rho \leq b, \\ -E_0 \rho + A_1 \rho^{-1}, & \rho \geq b, \end{cases} \quad (1)$$

که در آن ضرایب A تا A_1 با اعمال شرایط مرزی حاکم بر مسأله تعیین شوند. برای سیستم حاضر برای شرایط مرزی می‌توان نوشت:



شکل ۱: یک نانو لوله کربنی تک دیواره به شعاع a ، پوشیده شده با یک لایه به شعاع خارجی b و ثابت دی الکتریک ϵ_r ، در یک محیط با تابع دی الکتریک مؤثر ϵ_{eff} .

$$\Phi_1 \big|_{\rho=a} = \Phi_r \big|_{\rho=a}, \quad (2)$$

$$\Phi_r \big|_{\rho=b} = \Phi_r \big|_{\rho=b}, \quad (3)$$

$$\epsilon_r \frac{\partial \Phi_r}{\partial \rho} \bigg|_{\rho=b} = \epsilon_{eff} \frac{\partial \Phi_r}{\partial \rho} \bigg|_{\rho=b}, \quad (4)$$

$$\epsilon_r \frac{\partial \Phi_r}{\partial \rho} \bigg|_{\rho=a} - \epsilon_1 \frac{\partial \Phi_1}{\partial \rho} \bigg|_{\rho=a} = \frac{e}{\epsilon_0} \sum_{v=\pi, \sigma} n_v, \quad (5)$$

بطوریکه اندیس‌های ۱ تا ۳ به ترتیب معرف نواحی $\rho < a$ ، $a < \rho < b$ و $\rho > b$ هستند. همچنین، e نشان‌دهنده بار الکتریکی الکترون، ϵ_0 ضریب گذردهی خلاء و n_v نمایش دهنده چگالی اختلالی مرتبه اول پلاسمای الکترونی نوع v یعنی الکترون‌های π و σ است.

برای محاسبه n_v ، با توجه به مدل هیدرودینامیک خطی دو شارح‌های می‌توان نوشت:

در شکل ۲، تغییرات بخش موهومی تابع دی‌الکتریک موثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی با شعاع ۷ آنگستروم به ازای دو مقدار مختلف f ، بر حسب فرکانس رسم شده است. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش f قله‌های بخش موهومی تابع دی‌الکتریک سیستم به سمت فرکانس‌های با انرژی کمتر جابجا می‌شود، اگرچه این انتقال برای قله حاصل از تشدید پلاسمون‌های π خیلی کوچک است.

نتیجه‌گیری

برای اولین بار، با استفاده از تقریب شبه استاتیک در ترکیب با تئوری هیدرودینامیک دو شارهای خطی و شرایط مرزی حاکم بر مسأله، تابع دی‌الکتریک موثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره بدست آمده است. شکل جدید این تابع در مقایسه با رابطه ارائه شده در مرجع [۳] به مراتب از کلیت و سادگی بیشتری برخوردار است و با توجه به کوچکی نانو لوله‌ها نتایج کاملاً یکسانی را نیز بدست می‌دهد.

مرجع‌ها

- [1] A. Moradi, "Surface plasmon-polariton modes of metallic single-walled carbon nanotubes", *Photonics Nanostruct. Fundam. Appl.*, Vol. 11, No. 1, pp. 85-88, 2013.
- [2] A. Moradi, "Extinction properties of single-walled carbon nanotubes: two-fluid model", *Phys. Plasmas*, Vol. 21, No. 3, pp. 032106, 2014.
- [3] A. Moradi, H. R. Zangeneh, F. Karimi Moghadam, "Effective permittivity of single-walled carbon nanotube composites: two-fluid model", *Phys. Plasmas*, Vol. 22, No. 12, pp. 122104, 2015.
- [4] N. Daneshfar, K. Bazyari, "Optical and spectral tunability of multilayer spherical and cylindrical nanoshells", *Appl. Phys. A*, Vol. 116, No. 2, pp. 611-620, 2014.
- [5] G. B. Smith, "Dielectric constants for mixed media", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 10, No. 4, pp. L39-L42, 1977.

[۶] ا. مرادی، "خواص اپتیکی مولکول‌های C_{60} : تقریب شبه استاتیک"، *مجله پژوهش فیزیک/ایران* (۱۳۹۸) پذیرفته شده.

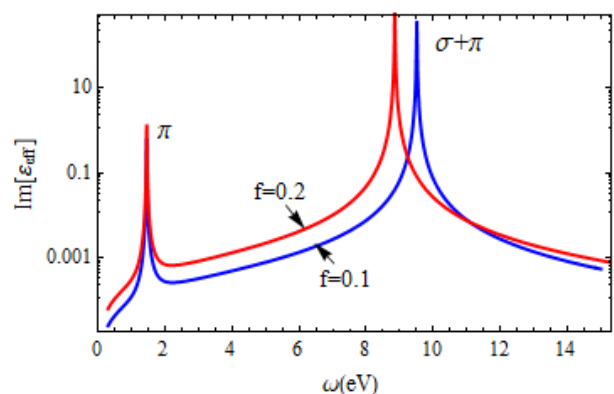
$$\begin{pmatrix} E_0 \\ A_r \end{pmatrix} = \frac{b^r}{\epsilon_{eff}} \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_r + \epsilon_{eff}}{b^r} & \frac{\epsilon_r - \epsilon_{eff}}{b^r} \\ -\epsilon_r + \epsilon_{eff} & \frac{\epsilon_r + \epsilon_{eff}}{b^r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_r \\ A_r \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & a^{-r} \\ \epsilon_r & -\epsilon_r a^{-r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_r \\ A_r \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} 1 \\ \epsilon_r - \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^r}{\Omega_\nu} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

حال برای آنکه یک نانو لوله هیچ اختلالی در میدان الکتروستاتیکی محیط اطراف خود ایجاد نکند، می‌بایست $A_r = 0$ در نظر گرفته شود [۵،۶] که نتیجه می‌دهد:

$$\frac{\epsilon_{eff} - \epsilon_r}{\epsilon_{eff} + \epsilon_r} = f \frac{\epsilon_r - \epsilon_r - \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^r}{\Omega_\nu}}{\epsilon_r + \epsilon_r - \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^r}{\Omega_\nu}}. \quad (12)$$

از رابطه (۱۲) تابع دی‌الکتریک موثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره بدست می‌آید که در مقایسه با رابطه (۷) متناظر با آن در مرجع [۳] به مراتب از سادگی بیشتری برخوردار است، در حالی که نتیجه کاملاً یکسانی را نیز بدست می‌دهد (در نتیجه عددی شکل ۱ بررسی شده است). علاوه بر آن نقش ثابت‌های دی‌الکتریک ϵ_r و ϵ_r نیز در رابطه (۱۲)، شکل کامل‌تری از جواب مسأله را ارائه می‌دهد.



شکل ۲: تغییرات بخش موهومی تابع دی‌الکتریک موثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره نسبت به فرکانس به ازای دو مقدار مختلف f ، وقتی که $\epsilon_r = 1$ ، $\epsilon_r = 2$ ، $\omega_{p\nu} = 0.01 \omega_{p\nu}$ و همچنین $a = \sqrt{A}$ و $m_\pi = m_e = m_\sigma$.