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 دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره بدست آمده است. بدین منظور یک نانو لوله کربنی تک دیواره بصورت یک لایه استوانه ای بی‌نهایت 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

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

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. به‌علاوه، 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 دی‌الکتریک کامپوزیتی از این نانو لوله‌های کربنی تک دیواره بدست آمده است [۳]. در کار حاضر برای محاسبه تابع دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره، با توجه به ابعاد بسیار کوچک آنها، از تقریب شبه استاتیک [۴] استفاده می‌شود. مزیب استفاده از روش حاضر نسبت به بررسی قبلی در مرجع [۳]، سادگی روش حل مسأله، نمایش مناسب‌تر نتیجه و همچنین تعمیم ساده‌تر روش حل برای سیستم‌های پیچیده‌تر است.

تئوری و محاسبات

در ابتدا یک نانو لوله کربنی تک دیواره بصورت یک لایه استوانه‌ای بی‌نهایت نازک، بلند و پوشیده شده از یک پلاسمای الکترونی حاوی الکترون‌های نوع π و σ (به‌ترتیب با چگالی‌های سطحی بار غیر اختلالی $n_{\circ\pi} = ۳۸nm^{-۲}$ و $n_{\circ\sigma} = ۳\times ۳۸nm^{-۲}$) در دستگاه مختصات استوانه‌ای $\mathrm{r}=(\rho,\phi,z)$ در نظر گرفته می‌شود و فرض می‌شود که محور نانو لوله در راستای محور z ها باشد. همچنین، ثابت دی‌الکتریک درون نانو لوله $\varepsilon_۱$ فرض می‌شود. حال، کامپوزیتی متشکل از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره با شعاع‌های یکسان a به‌عنوان محیط ۱ (با کسر حجمی f) را در محیط ۲ با ثابت دی‌الکتریک $\varepsilon_۲$، در نظر می‌گیریم. بر اساس تئوری ماکسول-گارنت برای محاسبه تابع دی-الکتریک مؤثر ε_{eff} کامپوزیت حاضر، فرض می‌شود 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 می‌توان از تقریب شبه استاتیک استفاده نمود. در این تقریب، در عمل نوسانات مکانی میدان خارجی توسط نانو لوله‌ها دیده نمی‌شود و در نتیجه می‌توان فرض نمود که سیستم در یک میدان الکتروستاتیکی وابسته به زمان هارمونیک با دامنه $E_\circ$ 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 استوانه‌ای شکل به شعاع b با تابع دی‌الکتریک مؤثر ε_{eff} احاطه شده است، جایگزین می-شود. توجه می‌شود که حجم بین نانو لوله کربنی به شعاع a و کاواک به شعاع b (با ثابت دی الکتریک $\varepsilon_۲$) بیانگر متوسط فضای پوششی برای هر نانو لوله با فاکتور پرشدگی $f = a^۲/b^۲$ است. در نهایت، تابع دی‌الکتریک مؤثر سیستم ε_{eff} تحت شرایطی محاسبه می‌شود 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 می‌شود که یک نانو لوله تک دیواره منفرد پوشیده شده با یک لایه با ثابت دی‌الکتریک $\varepsilon_۲$ تحت تأثیر یک میدان شبه استاتیک در راستای محور x قرار گرفته باشد.

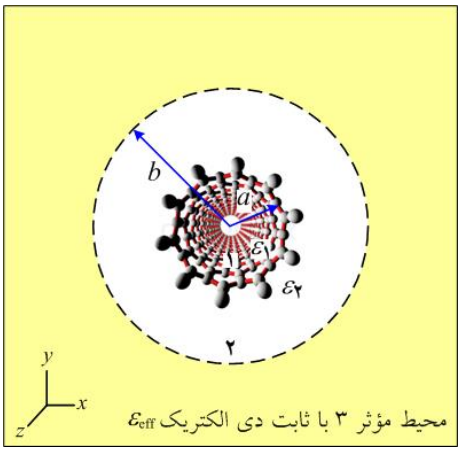
با توجه به آرایش مسأله، پتانسیل الکتریکی در نواحی $\rho < a$، $a < \rho < b$ و $\rho > b$ در معادله لاپلاس $\nabla^۲\Phi = \circ$ صدق می‌کنند؛ افزون بر آن با توجه به تقارن محوری سیستم، این پتانسیل‌ها به ρ و ϕ بستگی دارند و در نتیجه برای جواب پتانسیل در نواحی مختلف می‌توان نوشت:

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

$$\Phi(\rho,\phi)=Cos\phi\begin{cases}A_1\rho, & \rho\le a,\\ A_2\rho+A_3\rho^{-1}, & a\le\rho\le b,\\ -E_0\rho+A_4\rho^{-1}, & \rho\ge b,\end{cases} \qquad (۱)$$

که در آن ضرایب A_1 تا A_4 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 دی‌الکتریک ε_2، در یک محیط با تابع دی‌الکتریک مؤثر ε_{eff}.

$$\Phi_1\big|_{\rho=a}=\Phi_2\big|_{\rho=a}, \qquad (۲)$$

$$\Phi_2\big|_{\rho=b}=\Phi_3\big|_{\rho=b}, \qquad (۳)$$

$$\varepsilon_2\frac{\partial\Phi_2}{\partial\rho}\bigg|_{\rho=b}=\varepsilon_{eff}\frac{\partial\Phi_3}{\partial\rho}\bigg|_{\rho=b}, \qquad (۴)$$

$$\varepsilon_2\frac{\partial\Phi_2}{\partial\rho}\bigg|_{\rho=a}-\varepsilon_1\frac{\partial\Phi_1}{\partial\rho}\bigg|_{\rho=a}=\frac{e}{\varepsilon_0}\sum_{\nu=\pi,\sigma}n_\nu, \qquad (۵)$$

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

برای محاسبه n_ν، با توجه به مدل هیدرودینامیک خطی دو شاره‌ای می‌توان نوشت:

$$\frac{\partial^2\delta\phi_\nu}{\partial t^2}=\frac{e}{m_\nu}\frac{1}{a}\frac{\partial\Phi}{\partial\phi}\bigg|_{\rho=a}-\frac{\alpha_\nu^2}{n_{0\nu}}\frac{1}{a}\frac{\partial n_\nu}{\partial\phi}-\gamma_\nu\frac{\partial\delta\phi_\nu}{\partial t}, \qquad (۶)$$

$$n_\nu+n_{0\nu}\frac{1}{a}\frac{\partial\delta\phi_\nu}{\partial\phi}=0, \qquad (۷)$$

$$\nabla^2\Phi(\mathrm{r})=\begin{cases}0, & \rho\ne a,\\ \sum_{\nu=\pi,\sigma}\frac{en_\nu}{\varepsilon_0}, & \rho=a,\end{cases} \qquad (۸)$$

به‌طوری که در روابط اخیر $\delta\phi_\nu$ معرف جابجایی زاویه‌ای اختلالی مرتبه اول شاره الکترونی ν در سطح نانو لوله $\rho=a$، m_ν معرف جرم مؤثر الکترون نوع ν است. جمله اول سمت راست رابطه (۶) نشان‌دهنده نیروی الکتریکی وارد بر شاره الکترونی ν در سطح سیستم است. جمله دوم بیانگر فشار الکترونی ناشی از برهمکنش داخلی شاره الکترونی با ضریب $\alpha_\nu=\frac{v_{F\nu}}{\sqrt{2}}$ است که در آن $v_{F\nu}=\frac{\hbar k_{F\nu}}{m_\nu}$ نشان‌دهنده سرعت فرمی الکترون نوع ν ($\hbar$ برابر با ثابت پلانک h تقسیم بر 2π است) و $k_{F\nu}=(2\pi n_{0\nu})^{1/2}$ معرف عدد موج فرمی الکترون ν است. جمله آخر بیانگر میرایی الکترون نوع ν (با ضریب میرایی γ_ν) 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 $\delta\phi_\nu$ می‌توان نوشت:

$$n_\nu=-\frac{\varepsilon_0}{ea}\frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}\Phi\big|_{\rho=a}, \qquad (۹)$$

که در آن $\Omega_\nu=\omega(\omega+i\gamma)-\frac{\alpha_\nu^2}{a^2}$ و $\omega_{p\nu}=\left(\frac{e^2n_{0\nu}}{\varepsilon_0 m_\nu a}\right)^{1/2}$ است.

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

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]

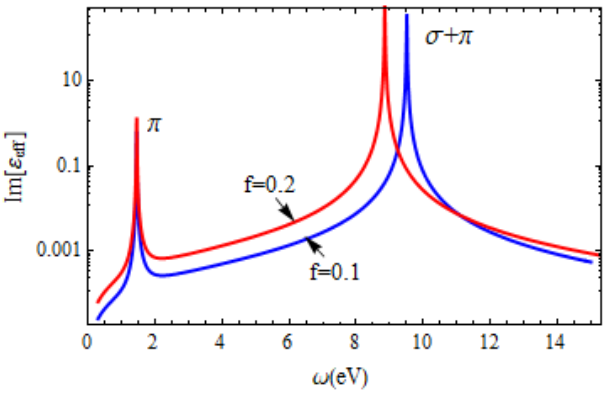
$$\begin{pmatrix} E_0 \\ A_4 \end{pmatrix} = \frac{b^2}{2\varepsilon_{eff}} \begin{pmatrix} -\frac{\varepsilon_2+\varepsilon_{eff}}{b^2} & \frac{\varepsilon_2-\varepsilon_{eff}}{b^4} \\ -\varepsilon_2+\varepsilon_{eff} & \frac{\varepsilon_2+\varepsilon_{eff}}{b^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}, \qquad (10)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & a^{-3} \\ \varepsilon_2 & -\varepsilon_2 a^{-3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \varepsilon_1 - \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu} \end{pmatrix}. \qquad (11)$$

حال برای آنکه یک نانو لوله هیچ اختلالی در میدان الکتروستاتیکی محیط اطراف خود ایجاد نکند، می‌بایست $A_4 = 0$ در نظر گرفته شود [۵,۶] که نتیجه می‌دهد:

$$\frac{\varepsilon_{eff}-\varepsilon_2}{\varepsilon_{eff}+\varepsilon_2} = f\,\frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2-\sum_{\nu=\pi,\sigma}\frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2-\sum_{\nu=\pi,\sigma}\frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}}. \qquad (12)$$

از رابطه (۱۲) تابع دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیتی از نانو لوله-های 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 حالی‌که نتیجه کاملاً یکسانی را نیز بدست می‌دهد (در نتیجه عددی شکل ۱ بررسی شده است). علاوه بر آن نقش ثابت‌های دی‌الکتریک ε_1 و ε_2 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، وقتی‌که $\varepsilon_1 = 1$، $\varepsilon_2 = 2$، $\gamma_\nu = 0/001\omega_{p\nu}$ و همچنین $a = 7\,\mathring{A}$ و $m_\pi = m_e = m_\sigma$.

در شکل۲، 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 به‌سمت 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 مؤثر کامپوزیتی از نانو لوله‌های کربنی تک دیواره بدست آمده است. شکل جدید این تابع در مقایسه با رابطه ارائه شده در مرجع [۳] به‌مراتب 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 “، *مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران* (۱۳۹۸) پذیرفته شده.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-13]