

7. Дистанов, А. А. Технология по переработке радиоэлектронного лома [Электронный ресурс] : А. А. Дистанов, В.В. Воскобойников / Режим доступа : [http://www.lamel777.ru/pererabotka\\_loma/](http://www.lamel777.ru/pererabotka_loma/) 05.05.2013.
8. Чернюк, А. О. Извлечение драгоценных металлов из отходов радиоэлектронной аппаратуры [Текст] / А. О. Чернюк, В. П. Грицай, О. В. Чернюк, И. Ф. Червоный // Теория и практика металлургии, 2011. – №1-2. – С. 90-93. – Библиогр.: с. 93.
9. Чернюк, А. О. Обогащение отходов радиоэлектронной аппаратуры на концентрационном столе [Текст] / А. О. Чернюк, В. П. Грицай, О. В. Чернюк, И. Ф. Червоный // Металлургия. Збірник наукових праць / Запоріжжя: ЗДІА, 2011. Вип. 24. – С. 83-87. – Библиогр.: с. 87.
10. Чернюк, А.О. Современное состояние извлечения металлов из лома радиоэлектронных плат и продуктов их разделки [Электронный ресурс] / Режим доступа : [http://archive.nbuv.gov.ua/portal/natural/Metalurg/2011\\_23/pdf/METALURG\\_23\\_12.pdf](http://archive.nbuv.gov.ua/portal/natural/Metalurg/2011_23/pdf/METALURG_23_12.pdf). 05.05.2013.

*Представлено огляд методів отримання тензора діелектричної проникності багатосарової вуглецевої нанотрубки (БШВНТ) і використання скінченно-елементного підходу для розрахунку розсіяння плоских електромагнітних хвиль на БШВНТ в оптичному діапазоні. Приведено результати розрахунку розсіяння плоских електромагнітних хвиль на одній БШВНТ для паралельно і нормально поляризованих векторів електричних полів падаючої хвилі відносно осі БШВНТ*

*Ключові слова: переріз розсіяння, вуглецеві нанотрубки, тензор діелектричної проникності, оптичний діапазон*

*Представлен обзор методов получения тензора диэлектрической проницаемости многослойной углеродной нанотрубки (МСУНТ) и использования конечно-элементного подхода для расчета рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ в оптическом диапазоне. Приведены результаты расчетов рассеяния плоских электромагнитных волн на одной МСУНТ для параллельно и нормально поляризованных векторов электрических полей падающей волны относительно оси МСУНТ*

*Ключевые слова: сечение рассеяния, углеродные нанотрубки, тензор диэлектрической проницаемости, оптический диапазон*

УДК 539.2:546.26

## РАССЕЯНИЕ ПЛОСКИХ ЭЛЕКТРО- МАГНИТНЫХ ВОЛН НА УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ

**В. И. Каневский**

Кандидат технических наук\*

E-mail: vikanev@hotmail.com

**В. М. Розенбаум**

Доктор физико-математических наук\*

E-mail: vik-roz@mail.ru

**Н. Г. Шкода**

Кандидат физико-математических наук\*

E-mail: n\_shkoda@ukr.net

\*Институт химии поверхности

им. А.А. Чуйко НАН Украины

ул. Генерала Наумова, 17,

г. Киев, Украина, 03164

### 1. Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) были открыты в 1991 году [1]. С тех пор они нашли применение в различных областях науки и техники благодаря своим уникальным механическим, электрическим, тепловым, магнитным и оптическим свойствам. Это высокопрочные материалы [2], источники эмиссии электронов [3], полевые транзисторы [4], электрические контакты [5], антенны в оптическом диапазоне [6], многофункциональные устройства [7]. 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 электромагнитных волн, которая используется в лазерах [8], в болометрах [9]. Использование этого свой-

ства, например, в астрофизике позволяет существенно улучшить чувствительность оптических приборов. Много интересных приложений в этом диапазоне проявляют фотонные кристаллы [10] на основе нанотрубок. Это локализация света [11], оптические волноводы [12], суперлинзы [13], метаматериалы [14]. Ионное легирование тонких пленок на основе УНТ позволяет изменять их оптические свойства [15].

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 ( $\leq 0.045\%$ ) [16], 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 электромагнитных волн, рассеянных на каждой из них. Поэтому в качестве первого шага описания такого сложного рассеяния целесообразно рассмотреть рассеяние на одной МСУНТ.

Целью данной работы является: а) обзор методов получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ, б) описание конечно-элементного подхода для расчета рассеяния плоской электромагнитной волны на МСУНТ в оптическом диапазоне, в) описание результатов расчета рассеяния плоских электромагнитных волн на одной МСУНТ (угловых зависимостей дифференциальных сечений в дальней зоне и распределения электрического и магнитного полей в ближней зоне в оптическом диапазоне) для параллельно и нормально поляризованных векторов электрических полей падающей волны относительно оси МСУНТ с вектором Пойтинга перпендикулярным к этой оси (рис.1а и рис.1б).

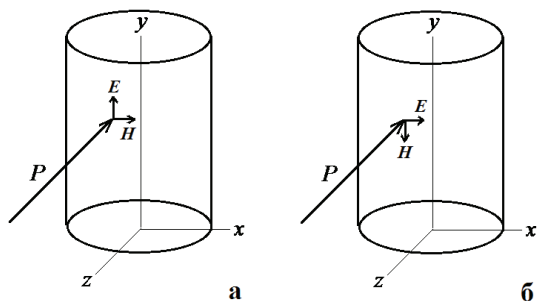


Рис. 1. Направление падения плоской электромагнитной волны (вектор Пойтинга P) с ориентациями вектора напряженности электрического поля E параллельно (а) и перпендикулярно (б) оси нанотрубки

Дальнейшее изложение материала структурировано в трех основных разделах, первый из которых описывает методы расчета тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ, второй использует данный тензор как внешний параметр для построения вычислительной схемы расчета рассеяния плоской волны на данных углеродных трубках, а третий описывает результаты расчета в дальней и ближней зонах МСУНТ, а именно: дифференциальные сечения рассеяния и распределения электрических, магнитных полей соответственно. Заключение содержится в разделе «Выводы».

## 2. Методы получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ

Непосредственный расчет рассеяния плоской электромагнитной волны на МСУНТ (или на ансамбле из МСУНТ) невозможен, так как плоская волна является классическим объектом, а нанотрубка – квантовым. Чтобы рассчитать коэффициенты отражения/прохождения и поглощения средствами макроэлектродинамики с помощью классических уравнений Максвелла, необходимо МСУНТ представить как классический объект, т.е. описать ее материал в терминах диэлек-

трической проницаемости (магнитные свойства мы не рассматриваем). Тогда тонкая структура электромагнитных колебаний будет определяться частотной зависимостью диэлектрической проницаемости, обусловленной внутризонными и межзонными переходами, а сама МСУНТ будет рассматриваться как классический объект, в котором происходят вынужденные электромагнитные колебания (как в сплошной среде) и который переизлучает данные колебания во внешнее пространство в виде переотраженных волн.

Такой подход справедлив в том случае, когда толщина стенки МСУНТ гораздо больше межатомных расстояний, а пространственный период изменения электрических полей внутри нанотрубки гораздо больше пространственного периода внутриатомных процессов.

Оптические свойства многослойной углеродной нанотрубки, как макрообъекта, зависят, прежде всего, от ее диэлектрической проницаемости и геометрии. Известно, что МСУНТ имеет цилиндрическую форму и проявляет анизотропные свойства в оптическом диапазоне [17]. Установлено, что наличие больше чем десяти графеновых слоев в МСУНТ позволяет использовать тензор диэлектрической проницаемости графита для описания ее оптических свойств [18].

Графит, являясь кристаллической аллотропной формой углерода, проявляет свойства полуметалла. Атомы углерода располагаются в почти параллельных слоях, причем расстояние между данными слоями и ближайшими атомами внутри слоя различаются приблизительно в 2,7 раза, что является основной причиной анизотропии графита в механических, электрических и оптических свойствах. Оптические анизотропные свойства графита можно описать с помощью тензора диэлектрической проницаемости

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

где  $\epsilon_{\perp}^g(\omega)$ ,  $\epsilon_{\parallel}^g(\omega)$  – частотные зависимости собственных значений тензора диэлектрической проницаемости графита, которые соответствуют двум направлениям напряженности электрического поля E. Более точно,  $E \perp C$  соответствует обыкновенному лучу,  $E \parallel C$  – необыкновенному лучу, где C – нормаль к основным (графеновым) плоскостям графита.

Элементы тензора диэлектрической проницаемости графита  $\epsilon_{\perp}^g(\omega)$ ,  $\epsilon_{\parallel}^g(\omega)$ , могут быть представлены с помощью феноменологической модели Друде–Лоренца [19]

$$\epsilon(\omega) = \epsilon^{(f)}(\omega) + \epsilon^{(b)}(\omega), \quad (2)$$

где  $\epsilon^{(f)}(\omega)$  – диэлектрическая проницаемость, соответствующая внутризонным переходам (обычно связана с движением свободных электронов),  $\epsilon^{(b)}(\omega)$  – соответствует межзонным переходам (движению связанных электронов).

Диэлектрическая проницаемость  $\epsilon^{(f)}(\omega)$  описывается с помощью модели Друде [20]

$$\epsilon^{(f)}(\omega) = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega(\omega + j\Gamma_0)}, \quad (3)$$

где  $\Omega_p = \sqrt{f_0} \omega_p$  – плазменная частота внутризонных переходов с интенсивностью осциллятора  $f_0$ ,  $\Gamma_0$  – постоянная затухания,  $j$  – мнимая единица.

Межзонные переходы, которым соответствует диэлектрическая функция  $\epsilon^{(b)}(\omega)$ , описывается с помощью модели Лоренца [21]

$$\epsilon^{(b)}(\omega) = \sum_{m=1}^M \frac{f_m \omega_p^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - j\omega\Gamma_m}. \quad (4)$$

Эта модель приписывает осцилляторы к главным критическим точкам плотности состояний графита, которые соответствуют межзонным переходам с энергиями  $\hbar\omega_m$  между критическими точками. Каждый осциллятор описывается интенсивностью  $f_m$ , постоянной затухания  $\Gamma_m$  и частотой  $\omega_m$ . Количество осцилляторов равно  $M$ . Чтобы точнее описать процессы поглощения, в [22] была предложена небольшая модификация, предполагающая замену ширины линий Лоренца  $\Gamma_m$  в соотношении (4) на  $\Gamma_m^*$ :

$$\Gamma_m^* = \Gamma_m \exp\left[-\alpha_m \left(\frac{\omega - \omega_m}{\Gamma_m}\right)^2\right], \quad (5)$$

где  $\alpha_m$  – параметр формы.

Модифицированная феноменологическая модель Друде–Лоренца для описания элементов тензора диэлектрической проницаемости (1) с учетом (2) – (5), имеет вид [23]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{r,\infty} - \frac{f_0 \omega_p^2}{\omega(\omega + j\Gamma_0)} + \sum_{m=1}^M \frac{f_m \omega_p^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - j\omega\Gamma_m^*}, \quad (6)$$

где  $\epsilon_{r,\infty}$  – относительная диэлектрическая проницаемость графита на частотах значительно больших, чем  $\omega_m$ ,  $\omega_p$  – плазменная частота.

В работах [24, 25], используя частотные зависимости графита в оптическом диапазоне, полученные из эксперимента (электронная спектроскопия спектров поглощения, EELS) и специально разработанную оптимизационную процедуру, были получены величины оптимизируемых параметров  $\epsilon_{r,\infty}, f_0, f_m, \omega_p, \Gamma_0, M, \Gamma_m, \alpha$  модифицированной модели Друде–Лоренца, значения которых позволяют на основе соотношения (6) рассчитать зависимости  $\epsilon_{\perp}^g, \epsilon_{\parallel}^g$  в следующем виде:

$$\epsilon_{\perp}^g = \epsilon_{1\perp}^g + j\epsilon_{2\perp}^g, \quad \epsilon_{\parallel}^g = \epsilon_{\parallel}^g + j\epsilon_{2\parallel}^g. \quad (7)$$

Заметим, что значения  $\epsilon_{\perp}^g, \epsilon_{\parallel}^g$  для графита можно получить не только с помощью феноменологической модели Друде–Лоренца, но и используя точные расчеты. В работе [26] на основе разработанной трехмерной модели зонной структуры графита показано, что основной вклад в оптические свойства графита дают области вблизи H–K–M–L точек на краю зоны

Бриллюэна. На основе данной модели рассчитаны элементы тензора диэлектрической проницаемости графита  $\epsilon_{\perp}^g, \epsilon_{\parallel}^g$ . В оптическом диапазоне указанные элементы совпадают с соотношениями (7), полученными на основе параметров, рассчитанных в [24]. В работе [27] на основе трехмерной модели зонной структуры графита и используя матричные элементы, входящие в выражения для  $\epsilon_{\perp}^g, \epsilon_{\parallel}^g$ , было показано, что в оптическом диапазоне работают в основном  $\pi$ – $\pi^*$ -переходы, причем анизотропия диэлектрической проницаемости графита является следствием того, что внутрисло-скостные связи гораздо сильнее, чем межплоскостные. Как следствие, в случае, когда  $E \perp C$ , разрешены  $\pi$ – $\pi^*$ -переходы, а когда  $E \parallel C$ , разрешены  $\pi$ – $\sigma^*$ -переходы. Аналогичные результаты представлены в работах [17, 28, 29]. Именно эти факты объясняют анизотропию диэлектрической проницаемости графита и являются доминирующими при объяснении анизотропии спектров поглощения композитов на основе ансамбля из МСУНТ. В работе [27] рассчитаны элементы тензора диэлектрической проницаемости графита  $\epsilon_{\perp}^g, \epsilon_{\parallel}^g$ , причем в оптическом диапазоне получено хорошее совпадение с результатами работы [26]. В работе [30] на основе трехмерной модели зонной структуры графита (вариационный метод [31]) рассчитана плотность состояний носителей, распределение которой объясняет работу феноменологической модели Друде–Лоренца (6). В работе [32] показано, что с некоторыми ограничениями рассеяние электромагнитной волны на МСУНТ можно рассматривать как рассеяние на трубке с графитовой стенкой, характеризующейся определенными внутренним и внешним диаметрами.

Определив тензор диэлектрической проницаемости графита, можно получить элементы аналогичного тензора для МСУНТ. В работе [33] показано, что тензор диэлектрической проницаемости МСУНТ в цилиндрической системе координат имеет вид:

$$\epsilon(\hat{r}, \hat{\phi}, \hat{z}) = \epsilon_{\parallel}^g \hat{r}\hat{r} + \epsilon_{\perp}^g (\hat{z}\hat{z} + \hat{\phi}\hat{\phi}), \quad (8)$$

где  $\hat{r}, \hat{\phi}, \hat{z}$  – базовые векторы цилиндрической системы координат,  $\epsilon_{\perp}^g, \epsilon_{\parallel}^g$  – компоненты тензора диэлектрической проницаемости графита. В декартовой системе координат с осью Z, совпадающей с осью Z цилиндрической системы, данный тензор можно представить в виде [33]:

$$\hat{\epsilon}(x, y, z) = \begin{pmatrix} \frac{x^2}{r^2} \epsilon_{\parallel}^g + \frac{y^2}{r^2} \epsilon_{\perp}^g & \frac{xy}{r^2} (\epsilon_{\parallel}^g - \epsilon_{\perp}^g) & 0 \\ \frac{xy}{r^2} (\epsilon_{\parallel}^g - \epsilon_{\perp}^g) & \frac{x^2}{r^2} \epsilon_{\parallel}^g + \frac{y^2}{r^2} \epsilon_{\perp}^g & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\perp}^g \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Использование соотношения (9) для расчета оптических свойств МСУНТ с помощью метода конечных элементов довольно трудоемко. Поэтому целесообразно воспользоваться ВМ-теорией, описанной в работе [34]. Согласно подходу, если МСУНТ рассматривать как сплошной цилиндр, то компоненты МСУНТ имеют вид

$$\epsilon_{\parallel} = \epsilon_{\perp}^g, \quad \epsilon_{\perp} = \sqrt{\epsilon_{\perp}^g \epsilon_{\parallel}^g}, \quad (10)$$

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

Прямым способом получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ являются различные методы гомогенизации. Указанные подходы (справедливые как для МСУНТ, так и для однослойных УНТ) предполагают измерение эффективных компонент тензора композитного материала, содержащего ансамбль из нанотрубок, выбора модели гомогенизации и, в конечном итоге, получения искоемых компонент  $\epsilon_{\parallel}, \epsilon_{\perp}$ . В качестве двух из них рассмотрим модель Максвелла-Гарнетта (МГ) и модель Бруггемана (БМ) [35].

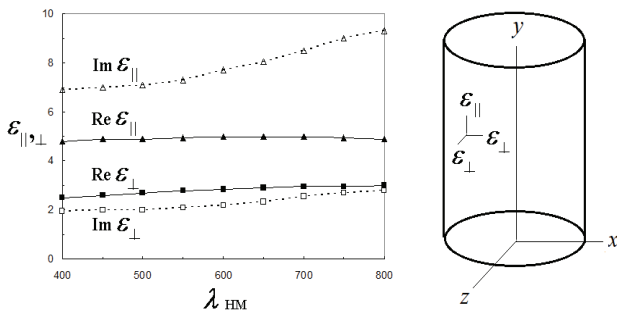


Рис. 2. Частотная зависимость элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ в оптическом диапазоне

Согласно МГ-модели эффективная диэлектрическая проницаемость композитного материала, содержащего в качестве включений УНТ, имеет вид

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_i \frac{\{N + f(1-N)\} \epsilon_m + (1-N)(1-f) \epsilon_i}{N(1-N) \epsilon_m + (fN + 1 - N) \epsilon_i}, \quad (11)$$

где  $N$  – геометрический фактор, значение которого равно 0,5 в случае, если электрическое поле перпендикулярно оси УНТ, и равно нулю, в случае, если поле параллельно оси УНТ (предполагается, что нанотрубки расположены в выбранном направлении до измерения  $\epsilon_{\text{eff}}$ );  $f$  – параметр наполнения;  $\epsilon_m$  – диэлектрическая проницаемость основы композитного материала. Когда  $f \geq 0.9$ , справедлива БМ-модель. В этом случае осуществляется учет взаимодействия не только между УНТ и основой, но и между самими УНТ.

Таким образом, приведенные выше не прямые и прямые способы получения элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ (модель Друде-Лоренца, ab initio расчеты и методы гомогенизации) позволяют представить углеродную нанотрубку, которая по своей природе является квантовым объектом, как классический. Это, в свою очередь, позволяет осуществить расчет рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ.

### 3. Рассеяние плоских волн на МСУНТ: конечно-элементный подход

Будем считать, что МСУНТ расположены в свободном пространстве, причем источник энергии находится вне МСУНТ. В частном случае в качестве такого источника может быть плоская падающая волна.

Заметим, что при расчете элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ предпочтение отдается частотному подходу (а не временному), т.к. прежде всего представляет интерес пространственное изменение полей на заданной частоте; хотя оба способа описания эквивалентны, но не взаимозаменяемы.

Распределение электрического поля  $\vec{E}$  в МСУНТ и в окружающем пространстве в заданном диапазоне частот находится путем решения неоднородного векторного уравнения Гельмгольца [36].

$$\vec{\nabla} \times [\mu^{-1} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E})] - \vec{k}_0^2 \epsilon \cdot \vec{E} = -j \vec{k}_0 Z_0 \vec{J}_s, \quad (12)$$

где  $\vec{J}_s$  – плотности внешних источников электрического тока,  $Z_0$  – волновое сопротивление свободного пространства,  $\vec{k}_0$  – волновой вектор в вакууме,  $\epsilon, \mu$  – тензоры второго порядка диэлектрической и магнитной проницаемостей.

Уравнение (12) справедливо, когда напряженность падающей плоской волны вызывает линейную реакцию вектора поляризации обыкновенного и необыкновенного лучей МСУНТ [37].

В качестве граничных условий для поля  $\vec{E}$  в открытом пространстве используется условие излучения Зоммерфельда [38]

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left( \frac{\partial \vec{E}}{\partial r} + j \vec{k}_0 \vec{E} \right) = 0, \quad (13)$$

где  $j$  – мнимая единица,  $r$  – расстояние между точкой излучения и точкой наблюдения, расположенной в дальней зоне. Уравнению (13) удовлетворяют бегущие волны, уходящие на бесконечность.

Для решения уравнения Гельмгольца использовался конечно-элементный подход, а именно: метод Галеркина и метод конечных элементов [38, 39]. С практической точки зрения метод конечных элементов на основе метода Галеркина более удобен, чем метод конечных элементов на основе вариационного подхода, ибо он не требует знания функционала исследуемой задачи, причем оператор исходного уравнения может быть несамосопряженным.

Важной особенностью обоих вариантов метода конечных элементов является тот факт, что их вычислительные процедуры не зависят от типа конкретного конечного элемента. Это позволяет рассматривать различные сложные структуры, не изменяя существенно самой процедуры расчета.

Указанные подходы могут быть успешно реализованы только при наличии эффективной реализации граничных условий (13). С формальной точки зрения, возможен расчет параметров МСУНТ в неограниченном пространстве с помощью решения уравнения Гельмгольца и граничных условий излучения на бесконечности. Однако, с точки зрения вычислительной электродинамики, возникает необходимость транс-



формировать условия излучения, обеспечив конечные размеры расчетной области, причем в волновой зоне должна существовать только уходящая волна, амплитуда которой убывает обратно пропорционально расстоянию до МСУНТ.

Существует два подхода при трансформации условий излучения: локальный [38] и нелокальный [36]. Отличительной особенностью локального подхода является тот факт, что каждая точка границы, на которой реализуются условия излучения, связана только со своими ближайшими соседями. Представителем локального подхода является метод абсолютно поглощающих слоев (АП-слоев) [40, 41].

К достоинствам применения метода АП-слоев стоит отнести следующее: сохранение свойства разреженности матрицы жесткости всей системы; возможность применения в широком диапазоне частот; слабая зависимость коэффициента отражения от угла падения. Однако данный подход может быть реализован эффективно при условии, когда минимальное расстояние между исследуемым объектом и поглощающей границей будет более половины длины волны.

Расчетная область имеет форму куба, включает в себя МСУНТ и внешний источник (например, плоская волна). Передняя и задняя части куба, а также боковые стороны покрыты АП-слоями. Заметим, что расстояние между МСУНТ и АП-слоями приблизительно равно длине падающей волны. Поэтому расчет дифференциальных сечений рассеяния внутри расчетной области не представлялся возможным. При выполнении расчетов использовался следующий прием [39]: МСУНТ была окружена замкнутой поверхностью, расположенной в расчетной области. На данной поверхности были рассчитаны электрические и магнитные поля, на основе которых в дальней зоне были получены значения искомого дифференциального сечения рассеяния.

#### 4. Результаты расчетов

Представленная выше методика расчета рассеянной плоской волны на МСУНТ тестировалась путем расчета дифференциальных сечений рассеяния металлического стержня в дальней зоне и распределения электрических, магнитных полей, вектора Пойтинга и токов проводимости на поверхности стержня в ближней зоне. При тестировании использовались следующие параметры: длина падающей волны  $\lambda = 100$  см, диаметр стержня  $D = 20$  см, высота стержня  $H_1 = \lambda$  и  $H_2 = 1.5\lambda$ .

В дальней зоне, в случае, когда электрическая составляющая падающей волны направлена параллельно оси цилиндра и  $H_1 = \lambda$ , а сканирование рассеянного поля осуществлялось вдоль оси стержня, 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 поперек стержня диаграмма рассеяния достаточно точно описывается окружностью. При длине стержня  $H_2 = 1.5\lambda$  и при сканировании рассеянного поля вдоль стержня 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 данном случае дифференциальное сечение рассеяния вперед также больше чем, сечение назад.

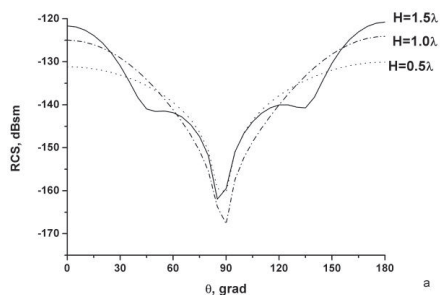
В ближней зоне в случае, когда высота стержня  $H = \lambda$ , плотность распределения электрической составляющей рассеянного поля гораздо больше впереди стержня, чем сзади. Распределение плотности данного поля вдоль стержня, повторяет форму одного периода падающей волны. Модуль вектора Пойтинга имеет гораздо большее значение впереди стержня, чем сзади, причем его максимум расположен посередине стержня. Магнитная составляющая рассеянного поля имеет характерный кольцеобразный характер, причем ее максимум расположен сзади стержня и достигает наибольшего значения в сечении, проведенном через середину нанотрубки. Все эти рассчитанные закономерности согласуются с известными данными, что доказывает адекватность используемого подхода.

Характерной особенностью частотных зависимостей элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ (рис. 2) является наличие больших значений их мнимых составляющих, которые, вообще говоря, могут приводить к сильному затуханию электромагнитной волны внутри трубки. Поэтому, в качестве упрощающего допущения нанотрубка рассматривалась как сплошной стержень.

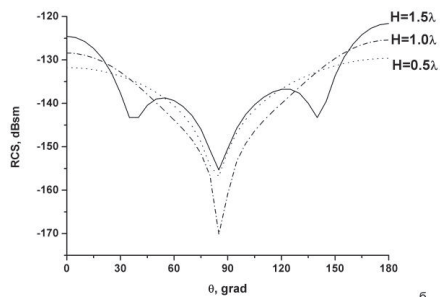
Описание рассеяния плоской волны на МСУНТ, как и в случае с металлическим стержнем, было проведено в дальней зоне путем расчета дифференциальных сечений рассеяния и распределения электрических, магнитных полей, вектора Пойтинга в ближней зоне. Для расчета использовались следующие значения параметров: длина падающей волны  $\lambda = 600$  нм, диаметр МСУНТ  $D = 100$  нм, для высоты нанотрубки брались три значения:  $H_1 = 0.5\lambda$ ,  $H_2 = 1.0\lambda$  и  $H_3 = 1.5\lambda$ .

В дальней зоне, когда электрическая составляющая падающей волны параллельна оси МСУНТ, а сканирование рассеянного поля проводится вдоль оси МСУНТ, при значениях параметров  $H_1 = 0.5\lambda$ ,  $\epsilon_r = 5$ ,  $\epsilon_r'' = 0$  (отсутствие потерь) кривая дифференциального сечения рассеяния имеет один минимум, причем рассеяние падающей волны вперед оказывается большим, чем назад (рис. 3а). При учете потерь (а именно, при тангенсе угла диэлектрических потерь  $\text{tg}(\delta) = \epsilon_r'' / \epsilon_r' = 1.54$ ) указанная кривая незначительно смещается вниз (рис. 3б). Отметим, что дифференциальное сечение рассеяния в представленных зависимостях определяется следующим образом:  $\text{RCS} = 1 - |\text{g}(\delta/1\text{m}^2)|$  где  $\delta = \lim_{R \rightarrow \infty} 4\pi R^2 |E^{\text{sc}}(\varphi, \theta) / E^{\text{in}}(\varphi, \theta)|^2$ ,  $E^{\text{sc}}(\varphi, \theta)$ ,  $E^{\text{in}}(\varphi, \theta)$  — электрическая составляющая соответственно рассеянного и падающего на МСУНТ поля в дальней зоне. При увеличении высоты  $H$  появляются характерные максимумы (рис. 3а), причем при учете потерь эти максимумы становятся более отчетливыми (рис. 3б). Таким образом, потери не только масштабируют сечения рассеяния, но и изменяют их форму.

При сканировании рассеянного электрического поля поперек стержня (рис. 4а и рис. 4б) 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.

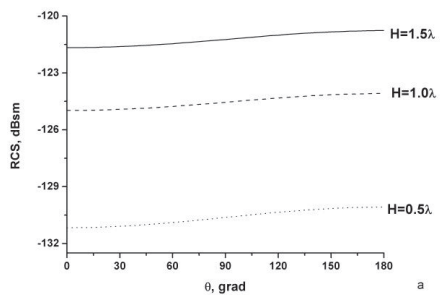


а

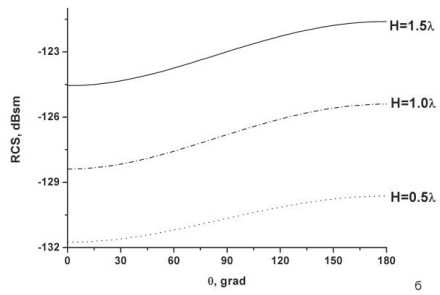


б

Рис. 3. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь  $\epsilon'' = 0$  (а) и при их учете  $\text{tg}(\delta) = 1.54$  (б). Электрическая составляющая падающего поля параллельна оси нанотрубки, сканирование рассеянного поля вдоль ее оси



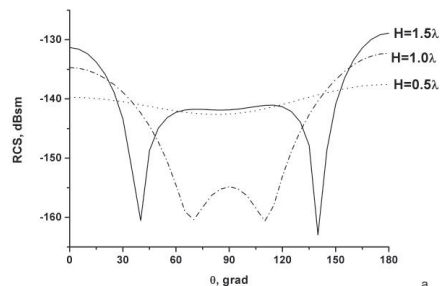
а



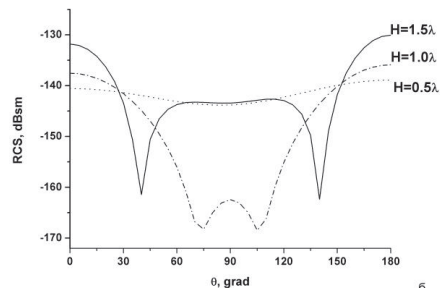
б

Рис. 4. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь  $\epsilon'' = 0$  (а) и при их учете  $\text{tg}(\delta) = 1.54$  (б). Электрическая составляющая падающего поля параллельна оси нанотрубки, сканирование рассеянного поля поперек ее оси

В дальней зоне, когда электрическая составляющая падающей волны перпендикулярна оси МСУНТ, а сканирование рассеянного поля проводится вдоль оси МСУНТ, при значениях параметров  $H_1 = 0.5\lambda$ ,  $\epsilon_r = 2.85$ ,  $\epsilon_r'' = 0$  (отсутствие потерь), дифференциальное сечение рассеяния имеет небольшой прогиб кривой, причем рассеяние вперед также оказывается большим, чем рассеяние назад (рис. 5а). При учете потерь ( $\text{tg}(\delta) = \epsilon_r'' / \epsilon_r' = 0.772$ ) указанная кривая незначительно смещена вниз по вертикальной оси (рис. 5в). Заметим, что поворот электрической составляющей падающего поля приводит к изменению формы кривых сечения рассеяния (рис. 3а и рис. 3б). При увеличении длины МСУНТ форма кривых сечения рассеяния существенно изменяется: появляются два глубоких минимума как в случае без учета потерь (рис. 5а), так и в случае с учетом потерь (рис. 5б), причем учет потерь приводит к незначительному сдвигу вниз рассматриваемых кривых.



а



б

Рис. 5. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь  $\epsilon'' = 0$  (а) и при их учете  $\text{tg}(\delta) = 1.54$  (б). Электрическая составляющая падающего поля перпендикулярна оси нанотрубки, сканирование рассеянного поля вдоль ее оси

При сканировании рассеянного электрического поля поперек оси МСУНТ (рис. 6а и рис. 6б) кривые дифференциальных сечений рассеяния имеют один минимум, положение которого незначительно изменяется при учете потерь. Увеличение длины МСУНТ увеличивает сечение рассеяния, делая кривые более острыми. Учет потерь приводит к незначительному сдвигу рассматриваемых кривых вниз.

В ближней зоне, когда высота МСУНТ равна  $\lambda = 600$  нм, а электрическая составляющая падающей волны параллельна оси нанотрубки, результаты расчетов при  $D = 100$  нм,  $\epsilon_r = 5$ ,  $\text{tg}(\delta) = \epsilon_r'' / \epsilon_r' = 1.54$  по-

казывают, что учитываемые диэлектрические потери не препятствуют проникновению электрической составляющей рассеянного поля внутрь МСУНТ. Данный факт указывает на необходимость проведения более детальных расчетов, в которых МСУНТ должна моделироваться не сплошным цилиндром, а толстостенной трубкой. Отметим, что модуль вектора Пойтинга, рассчитанный без учета потерь, имеет гораздо большее значение впереди стержня, чем сзади, причем его максимум расположен посередине стержня. Учет потерь влечет появление двух максимумов впереди стержня, указывая на образование «двухдипольной» структуры. Магнитная составляющая рассеянного поля имеет кольцеобразный характер, причем учет потерь сдвигает распределение данного поля также во внутрь МСУНТ.

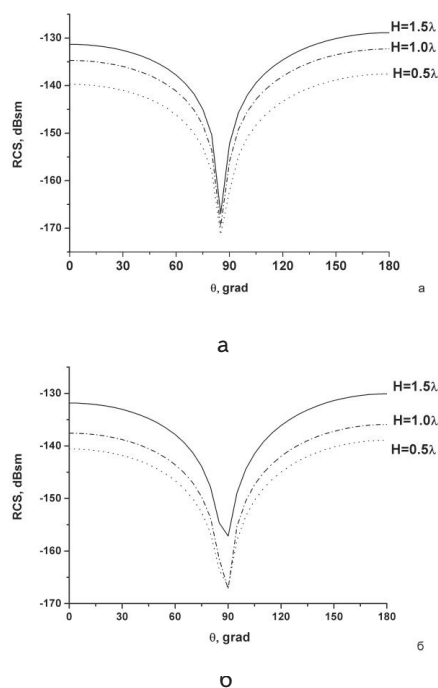


Рис. 6. Дифференциальные сечения рассеяния плоских электромагнитных волн на МСУНТ без учета диэлектрических потерь  $\varepsilon'' = 0$  (а) и при их учете  $\operatorname{tg}(\delta) = 1.54$  (б). Электрическая составляющая падающего поля перпендикулярна оси нанотрубки, сканирование рассеянного поля поперек ее оси

## 5. Выводы

В данной работе представлен обзор методов получения тензора диэлектрической проницаемости многослойной углеродной нанотрубки и конечно-элементного подхода, который позволил сформулировать процедуру расчета рассеяния плоской электромагнитной волны на МСУНТ в оптическом диапазоне для параллельно и нормально поляризованных векторов электрических полей падающей волны относительно ее оси. В качестве теста используемого подхода проводился расчет дифференциальных сечений рассеяния металлического стержня в дальней зоне и распределения электрических, магнитных полей, вектора Пойтинга и токов проводимости на поверхности стержня в ближней зоне.

В результате проведенных расчетов показано, что в дальней зоне увеличение длины МСУНТ приводит к формированию анизотропного углового распределения дифференциальных сечений рассеяния, а наличие анизотропных 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 сплошного диэлектрического цилиндра показало, что диэлектрические потери не препятствуют проникновению этих полей внутрь цилиндра, а значит, для описания рассеяния на МСУНТ необходимо учитывать толщину ее стенки. Обнаружена «двухдипольная» структура распределения вектора Пойтинга в ближней зоне МСУНТ, возникающая только при наличии диэлектрических потерь.

*Авторы выражают благодарность профессору А. А. Трубину за полезные обсуждения работы.*

## Литература

1. Iijima, S. Helical microtubules of graphitic carbon [Текст] // Nature. – 1991. – V. 354. – P. 56-58.
2. Treacy, M. Experimentally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes [Текст] / M. Treacy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson // Nature. – 1996. – V. 381. – P. 678-680.
3. Zhang, J. Stationary scanning X-ray source based on carbon nanotube field emitters [Текст] / J. Zhang, G. Yang, Y. Cheng // Appl. Phys. Lett. – 2005. – V. 86. – P. 376-379.
4. LeMieux, M. C. Self-Sorted, Aligned Nanotube Networks for Thin-Film Transistors [Текст] / M.C. LeMieux, M. Roberts, S. Barman, Y.W. Jin, J.M. Kim, Z. Bao // Science. – 2008. – V. 321. – P. 101-104.

5. Nikolic, B.K. First-principles quantum transport modeling of thermoelectricity in single-molecule nanojunctions with graphene nanoribbon electrodes [Текст] / B.K. Nikolic, K.K. Saha, T. Markussen // J. Comput. Electron. – 2012. – V. 11. – P. 78–92.
6. Ying, L. Properties of carbon nanotube optical antennae [Текст] / L. Ying, Z. Baoqing // International Journal of Infrared and millimeter Waves. – 2008. – V. 29. – P. 990-996.
7. Murmu, T. Vibration response of double-walled carbon nanotubes subjected to an externally applied longitudinal magnetic field: A nonlocal elasticity approach [Текст] / T. Murmu, M.A. McCarth, S. Adhikari // J. Sound and Vibration. – 2012. – V. 331. – P. 5069-5086.
8. Sun, Z., L – Band Ultrafast Fiber Laser Mode Locked by Carbon Nanotubes [Текст] / Z. Sun, A.G. Rozhin, F. Wang, A.C. Ferrari // Appl. Phys. Lett. – 2008. – V. 93. – P. 061114-061115.
9. Itkis, M.E. Bolometric Infrared Photo-response of Suspended Single-Wall Carbon Nanotube Films [Текст] / M.E. Itkis, F. Borondics, A. Yu, R.C. Haddon // Science. – 2006. – V. 312. – P. 413-416.
10. Lopez, C. Materials Aspects of Photonic Crystals [Текст] / C. Lopez // Adv. Mater. – 2003. – V. 15. – P. 1679-1704.
11. John, S. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices [Текст] / S. John // Phys. Rev. Lett. – 1987. – V. 58. – P. 2486-2489.
12. Johnson, G.S. Modeling the Flow of Light [Текст] / G.S. Johnson, A. Mekis, S.H. Fan, J.D. Joannopoulos // Comput. Sci. Eng. – 2001. – V. 3. – P. 38-47.
13. Luo, C., All-angle Negative Refraction without Negative Effective Index [Текст] / C. Luo, S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos, J.B. Pendry // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 65. – P. 201104-201114.
14. Soukoulis, C.M. Negative Refractive Index at Optical Wavelengths [Текст] / C.M. Soukoulis, S. Linden, M. Wegener // Science. – 2007. – V. 315. – P. 47-49.
15. Ishau, A. Tuning the optical properties of multiwall carbon nanotube thin films by  $N^+$  ion beams irradiation [Текст] / A. Ishau, L. Yan, G. Husnain, Lu Bo, A. Khalid // ACS Nano. – 2011. – V. 6. – P. 357-365.
16. Vang, Zu-Po. Experimental Observation of an Extremely Dark Material Made By a Low-Density Nanotube Array [Текст] / Vang Zu-Po, L. Ci, J. Bur, Lin Shawn-Yu, P.M. Ajaean // Nano Lett. – 2008. – V. 8. – P. 446-451.
17. Guo, G. Linear and Nonlinear Optical Properties of Carbon Nanotubes from First-Principals Calculations [Текст] / G. Guo, K. Chu, D.S. Wang, S.G. Duan // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 69. – P. 205416-205429.
18. Partoens, B. From Graphene to Graphite: Electronic Structure around the K Point [Текст] / B. Partoens, F.M. Peeters // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 74. – P. 205416-205429.
19. Wooten, F. Optical properties of solids [Текст] / F. Wooten. – New York: Academic Press, 1972. – 260 p.
20. Markovic, M.I. Determination of the reflections of laser light of wavelengths  $\lambda \in (0.22\mu\text{m}, 200\mu\text{m})$  from the surface of aluminum using the Drude-Lorentz model [Текст] / M.I. Markovic, D. Rackis // Appl. Opt. – 1990. – V.29. – P. 3479-3483.
21. Markovic, M.I. Determination of optical properties of aluminum including electron reradiation in the Lorentz-Drude Model [Текст] / M.I. Markovic, D. Rackis // Opt. Laser Technol. – 1990. – V.22. – P. 394-398.
22. Kim, C.C. Modeling the optical dielectric function of semiconductors: Extension of the critical-point parabolic-band approximation [Текст] / C.C. Kim, J.W. Garland, H. Abad, P.M. Raccah // Phys Rev. B. – 1992. – V.45. – P.11749-11767.
23. Lidorakis, E. Photonics with multiwall carbon nanotube arrays [Текст] / E. Lidorakis, A.C. Ferrari // ACS Nano. – 2009. – V. 3. – P. 1238-1248.
24. Djurisic, A.B. Optical properties of graphite [Текст] / A.B. Djurisic, E.H. Li // J. Appl. Phys. – 1999. – V.85. – P. 7404-7410.
25. Djurisic, A.B. Modeling the optical constants of solids using acceptance-probability-controlled simulated annealing with an adaptive move generation procedure [Текст] / A.B. Djurisic, A.D. Rakic, J.M. Elazar // Phys. Rev. E. – 1997. – V. 55. – P. 4797-4803.
26. Johnson, L.G. Optical properties of Graphite [Текст] / L.G. Johnson, G. Dresselhaus // Phys. Rev. B. – 1973. – V. 7. – P. 2275-2285.
27. Ahuja, R. Optical properties of graphite from first-principles calculations [Текст] / R. Ahuja, S. Auluck, J.M. Wills, M. Alouani, B. Johansson // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55. – P. 4999-5005.
28. Painter, G.S. Electronic band Structure and optical properties of graphite from a variational approach [Текст] / G.S. Painter, D.E. Ellis // Phys. Rev. B. – 1970. – V. 1. – P. 4747-4752.
29. Greenaway, D.L. Anisotropy of optical constants and the band structure graphite [Текст] / D.L. Greenaway, G. Harbeke // Phys. Rev. – 1969. – V. 178. – P. 1340-1348.
30. Willis, R.F. Secondary-electron emission spectroscopy and observation of high-energy excited states in graphite: theory and experiment [Текст] / R.F. Willis, B. Fitton // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 9. – P. 1926-1937.
31. Ellis, D.E. Discrete variational method for the energy-band problem with general crystal potentials [Текст] / D.E. Ellis G.S. Painter // Phys. Rev. B. – 1970. – V. 2. – P. 2887-2898.
32. Stephan, O. Discretic response of isolated carbon nanotubes investigated by spatially resolved electron energy-loss spectroscopy: From multi-walled to single-walled nanotubes [Текст] / O. Stephan, D. Taverna, M. Kociak, K. Suenaga, L. Henrard, C. Colliex // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 66. – P. 155422-155433.
33. Garcia-Vidal, F.J. Effective medium theory of the optical properties of aligned carbon nanotubes [Текст] / F.J. Garcia-Vidal, J.M. Pitarke, J.B. Pendry // Phys. Rev. Lett. – 1997. – V. 78. – P. 4289-4292.



34. Lu, W. Optical properties of aligned carbon nanotube systems studied by effective-medium approximation method [Текст] / W. Lu, J. Dong, Li Zhen-Ya // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 63. – P.033401-033404.
35. Tanaka, K. The Science and Technology of Carbon Nanotubes [Текст] / K. Tanaka, T. Yamabe, K. Fukui. – New York: Elsevier, 1999. – 199 p.
36. Baylis, A. Boundary Conditions for the Numerical Solutions of Elliptic Equations in Exterior regions [Текст] / A. Baylis, M. Gunzburger, M. Turkel // SIAM J. Appl. Math. – 1980. – V. 1. – P. 371-385.
37. Матвеев, А.Н. Оптика [Текст] / А.Н. Матвеев. – Москва: Высш. шк., 1985. – 342 с.
38. Volakis, J.L. Finite Element Method for Electromagnetics [Текст] / J.L. Volakis, A. Cbatterjee, L.C. Kempel. – IEEE Press, 1998. – 344 p.
39. Jin, J. The Finite Element Method in Electromagnetics. Second Edition [Текст] / J. Jin. – New York: Willey, 2002. – 753 p.
40. Chew, W.C. A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates [Текст] / W.C. Chew, W.C. Weedon // Microwave Opt. Tech. Lett. – 1994. – V. 7. – P. 599-604.
41. Sacks, Z.S. A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition [Текст] / Z.S. Sacks, D.M. Kingsland, R. Lee, J.F. Lee // IEEE Trans. Antennas Propagat. – 1995. – V. 43. – P. 1460-1463.

**В результаті проведених теоретичних та експериментальних робіт встановлені склад шихти і хімічний склад синтезованих термітних теплостійких і жароміцних сталей, їх фізико-механічні і службові властивості. Виявлено вплив температури на коефіцієнт лінійного розширення, коефіцієнт теплопровідності, питомий електричний опір, критичні точки у термітних сталях**

**Ключові слова: металотермія, терміт, синтез, властивості, критичні точки, мікроструктура, теплостійкі і жароміцні сталі**

**В результате проведенных теоретических и экспериментальных работ установлены состав шихты и химический состав синтезированных термитных теплостойких и жаропрочных сталей, их физико-механические и служебные свойства. Выявлено влияние температуры на коэффициент линейного расширения, коэффициент теплопроводности, удельное электрическое сопротивление, критические точки в термитных сталях**

**Ключевые слова: металлотермия, термит, синтез, свойства, критические точки, микроструктура, теплостойкие и жаропрочные стали**

УДК 620.22; 669.017

# СИНТЕЗ ТЕРМИТНЫХ ТЕПЛОСТОЙКИХ И ЖАРОМИЦНЫХ СТАЛЕЙ

**Ю. Ю. Жигуц**

Доктор технічних наук, професор  
Кафедра технології машинобудування  
Ужгородський  
національний університет  
вул. Підгірна, 46, м. Ужгород,  
Україна, 88000  
E-mail: yuzhiguts@gmail.com

## 1. Вступ

Теплостійкі і жароміцні сталі використовуються для виготовлення труб паронагрівачів, паротрубопроводів, колекторів енергетичних пристроїв, арматури парових котлів та паротрубопроводів, труб гідрогенізаційних пристроїв та деталей нафотехнічної апаратури.

У практиці термінового виготовлення виливків широко застосовуються відомі ще з минулого століття металотермічні методи отримання сталей, які засновані на алюмініотермічному відновленні заліза при горінні термітної суміші, у склад якої додають легуючі елементи. Ці методи стають економічно виправданими тоді, коли використовуються їх головні переваги – висока продуктивність, повна автономність технології і незалежність від потужних джерел електроенергії, складного ливарного промислового обладнання, можливість син-

тезувати литі сталі практично любого класу, малий час на підготовку і організацію виробництва та простота технічного обслуговування технологічного процесу металотермічного синтезу. Все вищенаведене призводить до необхідності поєднання переваг металотермічного способу синтезу матеріалу і унікальних властивостей середньолегованих теплостійких і жароміцних сталей.

## 2. Мета роботи

Встановити можливість отримання середньолегованих термітних теплостійких і жароміцних сталей, дослідити їх мікроструктуру, фізико-механічні, технологічні і службові властивості та запропонувати галузі найбільш доцільного їх застосування.