

**ГОСУДАРСТВЕННОЕ НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМЕНИ Б.И. СТЕПАНОВА
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»**

УДК 537.8;537.9

**ШУБА
Михаил Владимирович**

**ЭФФЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И КОМПОЗИТНЫМИ СРЕДАМИ
НА ИХ ОСНОВЕ**

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 01.04.05 – оптика

Минск, 2020

Работа выполнена в Научно-исследовательском учреждении «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета

Научный консультант: **Максименко Сергей Афанасьевич**, доктор физико-математических наук, профессор, директор Научно-исследовательского учреждения «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета

Официальные оппоненты:

Гапоненко Сергей Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН Беларуси, директор Исполнительной дирекции Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований

Борисенко Виктор Евгеньевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой микро- и нанoeлектроники, научный руководитель Центра нанoeлектроники и новых материалов учреждения образования “Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники”

Новицкий Андрей Викторович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета Белорусского государственного университета

Оппонирующая организация: Учреждение образования “**Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины**”

Защита состоится «24» ноября 2020 г. в 14-30 на заседании совета по защите диссертаций Д 01.05.01 при ИНСТИТУТЕ ФИЗИКИ НАН Беларуси по адресу: 220072, Республика Беларусь, г. Минск, пр. Независимости, 68-2; тел. ученого секретаря: 270-87-98, e-mail: m.parkhots@ifanbel.bas-net.by.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси.

Автореферат разослан “23” октября 2020 г.

Ученый секретарь совета
по защите диссертаций,
кандидат физико-математических наук

М. В. Пархоц

ВВЕДЕНИЕ

С момента открытия углеродные нанотрубки (УНТ) привлекают к себе большое внимание и последние три десятилетия остаются популярным объектом исследования. Уникальные электронные свойства и сильно вытянутая форма обуславливают их эффективное взаимодействие с электромагнитным излучением. Тонкие пленки из углеродных нанотрубок находят применение в качестве элементов для гибких прозрачных электродов, поляризаторов, модуляторов и детекторов излучения видимого и инфракрасного диапазонов. Высокое аспектное отношение обуславливает возможность создания проводящего композитного материала с низким содержанием УНТ для эффективной экранировки электромагнитных полей микроволнового диапазона. Углеродные нанотрубки рассматриваются как наноразмерный высококонтрастный тепловой агент, эффективно преобразующий энергию излучения в тепло, что предполагает их использование в медицине для осуществления термолиза раковых клеток.

Вышеперечисленные применения задают необходимость построения теоретических основ для описания взаимодействия УНТ с электромагнитным излучением различных частотных диапазонов. Углеродные нанотрубки существуют в различных модификациях, среди которых однослойные металлические и полупроводниковые УНТ, многослойные УНТ, легированные УНТ, а также УНТ, заполненные или покрытые различными веществами. Характер их взаимодействия с излучением зависит от спектрального диапазона и имеет свои особенности для различных модификаций УНТ.

Электромагнитный отклик от одиночных нанотрубок слишком слаб для регистрации современным оборудованием, поэтому объектами экспериментальных исследований являются в основном пленки и композитные материалы на основе УНТ. Установить соответствие между эффективными параметрами макроскопических образцов и отдельными нанотрубками сложно без дополнительного теоретического рассмотрения. Это связано с тем, что экспериментальные образцы состоят из смеси УНТ с различными электронными свойствами и геометрическими размерами, причем зачастую невозможно установить точный состав и все параметры смеси. Поэтому теоретические исследования являются актуальными, так как позволяют установить и проанализировать электромагнитные свойства отдельных нанотрубок, а затем найти возможность регистрации этих свойств посредством измерения параметров макроскопических образцов.

Для углеродной нанотрубки характерен одномерный электронный транспорт, обуславливающий азимутальную симметрию возбуждаемого в ней

аксиального тока. Эффективная поверхностная проводимость нанотрубки не настолько высока, чтобы ее можно было рассматривать как идеально проводящую проволоку. Туннелирование электронов между слоями многослойной нанотрубки не настолько велико, чтобы к ней можно было применить модель толстостенного цилиндра, изготовленного из однородного материала. Все вышеперечисленное указывает на то, что методы электродинамики, развитые для макроскопических тел, напрямую не применимы к углеродным нанотрубкам и требуют определенных модификаций.

Фундаментальный задел в развитии электродинамики углеродных нанотрубок был сделан сотрудниками НИУ «Институт ядерных проблем, БГУ» С.А. Максименко и Г.Я. Слепяном. Однослойную углеродную нанотрубку предложено моделировать как тонкостенный полый цилиндр, на поверхности которого выполняются эффективные граничные условия для микроскопических полей усредненных по физически бесконечно малому элементу цилиндрической поверхности. Граничные условия учитывают одномерный характер электронного транспорта и включают в себя эффективную аксиальную поверхностную проводимость, которая рассчитывается на основе квантово-механической теории, учитывающей размерные эффекты движения носителей тока. Такой подход открыл возможность применения методов классической электродинамики к описанию электромагнитного отклика углеродных нанотрубок с учетом квантово-механического транспорта в них. Настоящая работа лежит в русле нового направления – электродинамики наноструктур, созданного Г.Я. Слепяном и С.А. Максименко и развиваемого в лаборатории «Наноэлектромагнетизма» НИУ «Институт ядерных проблем, БГУ».

Одним из ключевых аспектов теоретического рассмотрения является учет конечных размеров УНТ. Размерные эффекты могут обуславливать резонансный характер взаимодействия нанотрубки и поля, а также вести к подавлению электромагнитного отклика наночастицы за счет возникновения деполяризующего поля. Малые поперечные размеры УНТ при ее поляризации ведут к большой плотности поверхностного электрического заряда и, как следствие, к локализации энергии рассеянного электромагнитного излучения вблизи ее поверхности. Все эти особенности взаимодействия поля с углеродными нанотрубками дают возможность варьировать их электромагнитный отклик в широком диапазоне.

Таким образом, разработка теоретических подходов и анализ на их основе электромагнитных параметров углеродных нанотрубок являются актуальными задачами, направленными на дальнейшее развитие представлений о взаимодействии электромагнитного излучения с веществом.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с крупными научными программами (проектами), темами. Исследования, результаты которых вошли в диссертацию, проводились в НИУ “Институт ядерных проблем” Белорусского государственного университета в рамках следующих НИР: “Процессы взаимодействия света с углеродными наноструктурами и композитными материалами на их основе. Исследование электромагнитных характеристик наноуглеродных композитных материалов” (Гос. рег. 20062601, 2006-2010, ГКПНИ “Наноматериалы и нанотехнологии”); “Создание и использование на базе нового научного направления «Прикладной наноэлектромагнетизм» национальной междисциплинарной платформы по моделированию, исследованию и прикладным применениям электромагнитных свойств и процессов в наноструктурированных объектах и системах” (гос. рег. 20112081, 2011-2015, ГПНИ «Конвергенция»); “Создание и использование на базе научного направления «наноэлектромагнетизм» национальной междисциплинарной платформы по моделированию, экспериментальному исследованию и прикладным аспектам электромагнитных свойств наноструктурированных объектов и систем” (Гос. рег. № 20162325, 2015-2020, ГПНИ «Конвергенция-2020»).

Тема диссертационной работы соответствует пунктам «6. Электроника и фотоника» и «8. Многофункциональные материалы и технологии» перечня приоритетных направлений, определенных постановлением Совета Министров Республики Беларусь № 190 от 12.03.2015 «О приоритетных направлениях научных исследований Республики Беларусь на 2016 – 2020 годы».

Цель и задачи исследования. Целью диссертационной работы является разработка теоретических методов описания взаимодействия электромагнитного излучения с различными модификациями углеродных нанотрубок и композитных сред на их основе, а также выявление особенностей этого взаимодействия.

Для достижения поставленной цели необходимо решить ряд задач:

- Построить теоретические самосогласованные модели рассеяния электромагнитного излучения на различных модификациях углеродных нанотрубок.
- Провести теоретический анализ волноводных мод и характеристик рассеяния многослойных УНТ и пучков из однослойных УНТ.
- Исследовать особенности взаимодействия излучения с пленками и композитными материалами на основе углеродных нанотрубок в различных частотных диапазонах при различных температурах и степенях легирования УНТ.

Объектом исследования являются однослойные и многослойные углеродные нанотрубки, а также композитные среды на их основе. *Предметом* исследования выступают процессы взаимодействия углеродных нанотрубок и композитных сред на их основе с электромагнитным излучением в широком диапазоне частот от радиоволнового до видимого.

Научная новизна. В настоящей диссертации автором впервые

- получено интегро-дифференциальное уравнение для тока на поверхности тонкого полого импедансного цилиндра конечной длины, находящегося во внешнем электромагнитном поле;
- обосновано, что пик проводимости тонкой пленки однослойных углеродных нанотрубок в дальнем инфракрасном диапазоне обусловлен локализованным плазмонным резонансом. Показано, что одновременное влияние двух различных эффектов (локализованного плазмонного резонанса и межзонного перехода через узкую энергетическую щель) приводит к появлению только одного пика в спектре проводимости;
- развита теоретическая модель эквивалентного многослойного цилиндра, описывающая взаимодействие электромагнитного излучения с многослойной УНТ и круглым пучком из металлических однослойных УНТ как бесконечной, так и конечной длины;
- предсказан эффект усиления поля вблизи углеродных нанотрубок и предложен метод его регистрации через спектроскопические измерения диэлектрической проницаемости суспензии однослойных УНТ в микроволновом диапазоне;
- развита теория рассеяния электромагнитного излучения на однослойных УНТ с диэлектрическим покрытием.

Положения, выносимые на защиту:

1. Модель рассеяния электромагнитного излучения однослойной углеродной нанотрубкой конечной длины, основанная на сведении краевой задачи электродинамики к решению интегро-дифференциального уравнения для аксиального тока на поверхности нанотрубки. Уравнение описывает размерные эффекты при взаимодействии электромагнитного поля с нанотрубкой.

2. Метод решения задачи взаимодействия электромагнитного излучения с почти круглым пучком из металлических однослойных углеродных нанотрубок как бесконечной, так и конечной длины, учитывающий аксиальный характер токов в нем. Предсказание распространения в таком пучке сильно замедленных азимутально симметричных волноводных мод в среднем и дальнем инфракрасном диапазонах.

3. Теоретическое предсказание геометрических (антенных) резонансов поверхностных волн в электромагнитном отклике металлических однослойных углеродных нанотрубок конечной длины в среднем и дальнем инфракрасном диапазонах. Доказательство того, что первый геометрический резонанс обуславливает возникновение пика в спектре проводимости пленки из однослойных углеродных нанотрубок в дальнем инфракрасном диапазоне.

4. Предсказание эффекта усиления электромагнитного поля вблизи проводящих однослойных углеродных нанотрубок конечной длины в широком диапазоне частот от радиоволнового до инфракрасного.

5. Межзонные оптические переходы в слоях многослойной углеродной нанотрубки ведут к подавлению распространения в ней волноводных мод, определяя монотонную частотную зависимость рассеянной ею мощности излучения в инфракрасном и видимом диапазонах. Легирование многослойной углеродной нанотрубки может вести к исчезновению межзонных и появлению внутризонных оптических переходов, что обуславливает возможность возникновения в ней локализованного плазмонного резонанса в среднем и дальнем инфракрасном диапазонах.

6. Теория взаимодействия мегатерцового излучения с однослойной углеродной нанотрубкой конечной длины, покрытой слоем диэлектрика и помещенной в проводящую среду. Сечение поглощения такой нанотрубки обусловлено увеличением диссипации энергии в окружающей среде за счет усиления поля в ее ближней зоне и диссипацией энергии в самой нанотрубке и ее диэлектрическом покрытии.

Личный вклад соискателя ученой степени. Представленные в диссертации положения и результаты получены лично соискателем при научном консультировании доктором физико-математических наук, профессором С.А. Максименко. Постановка задачи, построение теоретической модели, численные расчеты и получение основных теоретических результатов проводились автором самостоятельно в работах [4,5,7-9,11,12,15-18,20,21,23-25,27,28,31]. Соавторы этих работ выполняли экспериментальные исследования, участвовали в обсуждении результатов и подготовке рукописей статей. Г.Я. Слепян осуществил постановку задачи в публикации [4], а также участвовал в обсуждении и написании работ [4-13]. Соискатель сформулировал научную задачу и участвовал в обсуждении результатов и написании работ [26,29,30]. Также им разработана модель и написана программа, примененная в работах [14,19,21], для расчета поляризуемости многослойных УНТ и пучков однослойных УНТ в микроволновом и терагерцовом диапазонах. В работе [32] соискателем дана физическая интерпретация экспериментальных результатов.

Результаты работ [6,10,13], полученные по электромагнитным свойствам пучков УНТ, одиночным УНТ и средам на их основе получены соискателем; результаты по тепловому излучению УНТ, описанные в этих же работах, принадлежат А.М. Немиленцеву. В работе [21] соискателем получены результаты по электромагнитному отклику одиночных многослойных УНТ, в то время как А.В. Мельниковым получены результаты, касающиеся композитных материалов на основе нанотрубок.

Физическая интерпретация и достоверность полученных результатов обсуждались совместно с С.А. Максименко, П.П. Кужир, А.В. Мельниковым, О.Г. Поддубской (НИУ «Институт ядерных проблем», БГУ, Минск), Г.Я. Слепяном (Университет Тель-Авива, Израиль), А. Лакхтакия (Университет Пенсильвании, США) и Ф. Ламбином (Университет Намюра, Бельгия).

Апробация диссертации и информация об использовании ее результатов. Основные результаты докладывались на следующих конференциях: the 1-st European conference on novel photonic, optoelectronic and electronic materials (Санкт-Петербург, 2019); Int. conference “Advanced properties and processes in optoelectronic materials and systems” (Вильнюс, 2018); Int. workshop on electromagnetic properties of novel materials (Москва, 2018); IEEE Int. conference on microwaves, antennas, communications and electronic systems (Тель-Авив, 2017); IEEE-APS Topical conference on antennas and propagation in wireless communications (Италия, 2017); Int. workshop on nanocarbon photonics and optoelectronics (Финляндия, 2016); Int. conference on lasers, applications and technologies 2016 (Минск, 2016); Int. conference «Functional materials and nanotechnologies» (Эстония, 2013); Int. conference «Electromagnetics in advanced applications» (Турин, 2013); Int. workshop «Nanocarbon photonics and optoelectronics» (Финляндия 2012); Int. conference «Fundamental and applied nanoelectromagnetics» (Минск, 2012); NATO Advanced research workshop «Nanodevices and nanomaterials for ecological security» (Рига, 2011); Int. conference on electromagnetics in advanced applications (Турин, 2011); Int. workshop «Nanoscience and nanotechnology» (Италия, 2011); Int. workshop on nanocarbon photonics and optoelectronics (Финляндия, 2010); Int. symposium on electromagnetic theory (Берлин, 2010); Ukrainian-Germany symposium on physics and chemistry of nanostructures and on nano-biotechnology (Крым, 2010); Int. workshop «Nanoscience and nanotechnology» (Италия, 2010); German-Ukrainian symposium on nanoscience and nanotechnology (Германия, 2008).

Опубликование результатов диссертации. Результаты диссертации опубликованы в 43 научных работах, в числе которых: 3 главы в книгах, 29 статей в рецензируемых научных журналах, которые соответствуют п.18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий в Республике

Беларусь, утвержденного Указом Президента Республики Беларусь № 560 от 17.11.2004, а также 11 статей в сборниках материалов научных конференций. Общий объем работ составил 29.5 авторских листов.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, общей характеристики работы, восьми глав, заключения и библиографического списка. Полный объем диссертации составляет 236 страниц. Текст диссертации иллюстрирован 80 рисунками. На 24 страницах списка использованных источников приведены библиографические описания 310 научных работ, в том числе на 5 страницах 43 работы, опубликованные соискателем ученой степени.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ

В главе 1 дается начальное представление об электронных и электромагнитных свойствах углеродных нанотрубок, рассматриваются потенциальные возможности их применения в наноэлектронике, радиофизике, оптике, биомедицине. Сделан обзор литературы по теоретическому моделированию электромагнитных параметров однослойных УНТ (ОУНТ) и многослойных УНТ (МУНТ), а также периодических структур на их основе. Приводится аналитическая формула для расчета аксиальной поверхностной проводимости ОУНТ. Эта формула в приближении сильной связи учитывает эффекты квантово-механического движения π -электронов, позволяет учесть как внутризонные, так и межзонные переходы носителей зарядов и является справедливой в широком диапазоне от радиочастотного до ультрафиолетового. Она позволяет найти проводимость легированных ОУНТ, а также учесть появление узкой запрещенной зоны в металлических ОУНТ за счет кривизны поверхности нанотрубки в поперечном направлении. Поверхностная проводимость ОУНТ считается заданной величиной при решении задачи взаимодействия нанотрубки с электромагнитным (ЭМ) излучением. Приводится дисперсионное уравнение, и анализируются параметры собственной электрической волны ОУНТ. Формулируется краевая задача электродинамики для дифракции ЭМ поля на ОУНТ конечной длины. Показывается, как эта задача сводится к решению интегрального уравнения Халлена для аксиального тока, возбуждаемого на поверхности ОУНТ.

Подчеркивается актуальность нерешенных задач по взаимодействию электромагнитного излучения с различными модификациями УНТ: МУНТ, пучками из ОУНТ, нанотрубок с диэлектрическим покрытием и трубок, находящихся в проводящей среде.

В главе 2 представлена самосогласованная теория дифракции электромагнитного поля на ОУНТ конечной длины. Углеродная нанотрубка моделируется тонкостенным полым цилиндром с эффективной аксиальной поверхностной проводимостью σ . Вследствие одномерного характера электронного транспорта в трубке возбуждается аксиальный азимутально-симметричный ток $j(z)$, который полагается равным нулю на концах нанотрубки. Формулируются импедансные граничные условия для ЭМ поля на поверхности ОУНТ. Поле описывается электрическим потенциалом Герца, который записывается в виде потенциала простого слоя. Краевая задача сводится к

интегро-дифференциальному уравнению относительно поверхностной плотности возбуждаемого тока $j(z)$:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(k^2 - \frac{2i\omega\varepsilon\varepsilon_0}{\sigma R X} \right) \right\} j(z) = -\frac{2i\omega\varepsilon\varepsilon_0}{R X} E_{0z}(z) + \frac{1}{X} \left\{ \frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right\} V(z, j(z)), \quad (1)$$

где $X = -2K_0(\sqrt{h^2 - k^2}R)I_0(\sqrt{h^2 - k^2}R)$; $K_0(\square)$, $I_0(\square)$ – модифицированные функции Бесселя; R – радиус ОУНТ; k – волновое число для электромагнитной волны в свободном пространстве, h – волновое число собственной поверхностной электрической волны ОУНТ. Падающее поле колеблется с угловой частотой ω и имеет аксиальную компоненту $E_{0z}(z)$, которая полагается одинаковой в поперечном сечении ОУНТ; ε – относительная диэлектрическая проницаемость окружающей среды.

Уравнение (1) можно рассматривать как неоднородное волновое уравнение для тока в трубке, в котором первое слагаемое в правой части описывает действие сторонней ЭДС, а второе – учитывает влияние распределения тока по трубке (собственная ЭДС) и включает в себя члены, определяемые запаздыванием взаимодействия. Уравнение (1) справедливо от радиочастотного диапазона до ультрафиолетовой области частот, и при $\sigma \rightarrow \infty$ оно сводится к уравнению, записанному Леонтовичем и Левиным для идеально проводящей вибраторной антенны.

Предложен численный алгоритм решения уравнения (1) методом итераций при разложении тока по малому параметру $1/X$. В нулевом приближении по параметру $1/X$ уравнение (1) имеет аналитическое решение в виде

$$j(z) = D_1 e^{ihz} + D_2 e^{-ihz} + \frac{\sigma(h^2 - k^2)}{2ih} \int_{-L/2}^{L/2} E(z') e^{ih|z-z'|} dz', \quad (2)$$

где константы D_1 и D_2 находятся из условия равенства тока на концах УНТ; L – длина нанотрубки. Решение (2) позволяет продемонстрировать механизм взаимодействия поля с нанотрубкой: ток на поверхности ОУНТ может быть представлен в виде суммы двух слагаемых, обусловленных двумя бегущими навстречу поверхностными волнами (аналог собственных колебаний), и третьего слагаемого, обусловленного взаимодействием с внешним полем (аналог внешней возбуждающей силы). Причем концы нанотрубок являются источниками возбуждения поверхностных волн. Показано качественное и количественное

согласие результатов расчетов поляризуемости ОУНТ, полученных из приближенного аналитического решения (2) и строгого численного решения уравнения Халлена для ОУНТ (рисунок 1).

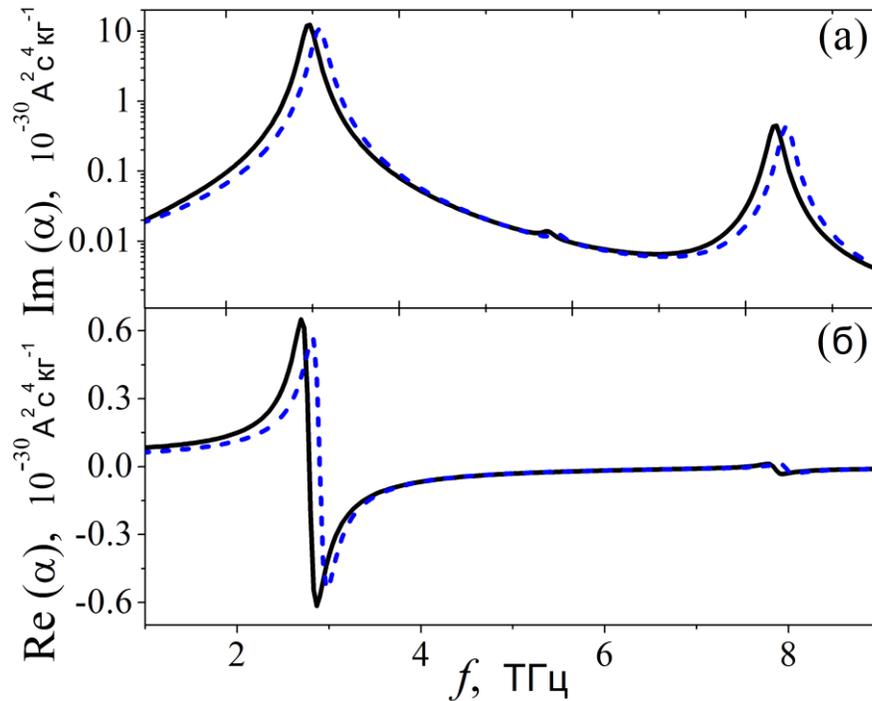


Рисунок 1. – График частотной зависимости мнимой (а) и действительной (б) части поляризуемости металлической ОУНТ (9,0) длиной 1 мкм. Сплошная кривая – точное численное решение уравнения Халлена; пунктирная кривая получена из приближенного аналитического решения (2). Время релаксации при расчете проводимости ОУНТ полагалось равным 3 пс

Приведен анализ антенных параметров ОУНТ. В частности, рассчитана диаграмма направленности нанотрубки. Показано, что в области межзонных переходов ОУНТ ведет себя как высоко импедансный антенный вибратор. Ниже области межзонных переходов в спектре поляризуемости ОУНТ имеют место геометрические (антенные) резонансы сильно замедленных поверхностных волн (рисунок 1).

В качестве еще одного способа решения задачи рассеяния на нанотрубке, предложено рассматривать ОУНТ как вытянутый однородный эллипсоид из сильно анизотропного материала. Показано качественное и количественное согласие расчетов, полученных из строгого решения уравнения Халлена для тонкого импедансного цилиндра и модели эллипсоида. Представленная в главе 2 теория является основой для проведения расчетов в инженерных разработках вибраторных антенн на основе ОУНТ различных частотных диапазонов.

В главе 3 предложена модель эквивалентного многослойного цилиндра для анализа аксиально-симметричных волноводных мод пучка из ОУНТ. Такой подход позволяет заменить пучок, содержащий большое количество трубок (вплоть до 1000), на эквивалентный многослойный цилиндр, содержащий до 30 слоев. На основании модели показано, что в пучках одинаковых металлических ОУНТ в дальнем инфракрасном диапазоне частот распространяются азимутально-симметричные волноводные моды с высокой степенью замедления и сильной локализацией энергии. На рисунке 2 показано радиальное распределение аксиальной компоненты вектора Пойнтинга для трех мод. Такие же моды имеют место и для диэлектрического волновода из одноосного материала с единичной диэлектрической проницаемостью в поперечном направлении и большой по величине отрицательной компонентой диэлектрической проницаемости в осевом направлении.

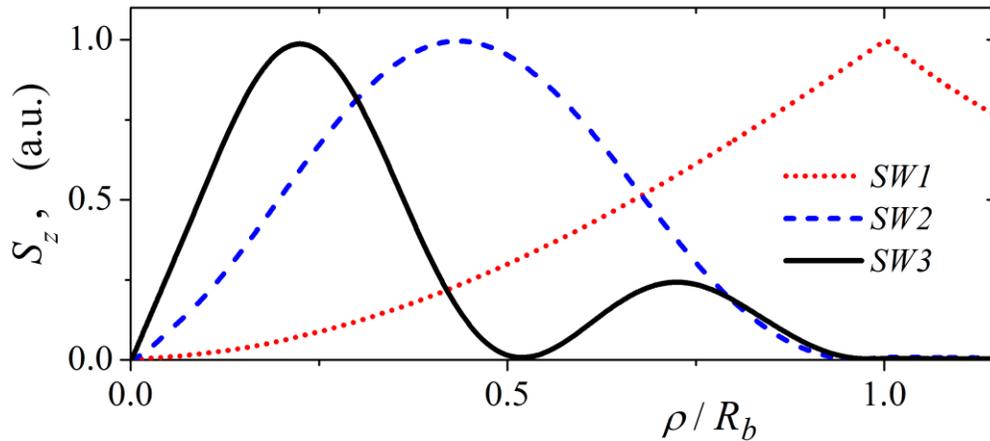


Рисунок 2. – Радиальное распределение усредненной по времени аксиальной компоненты вектора Пойнтинга для азимутально-симметричных мод пучка SW1, SW2 и SW3. R_b - радиус пучка.

Показано, что действительная часть коэффициента замедления $\beta = k/h$ азимутально-симметричных волноводных мод возрастает с ростом числа трубок в пучке, и для пучков больших поперечных размеров стремится к единице, что характерно для макроскопических металлических проводов. Установлено, что в отличие от одиночных ОУНТ в пучках из большого числа трубок могут распространяться азимутально-несимметричные волноводные моды.

Разработаны два способа решения задачи рассеяния электромагнитного излучения на пучке из ОУНТ конечной длины. Первый основан на применении теории рассеяния многих тел, где учитываются рассеянные поля от каждой

трубки пучка. Второй способ использует модель эквивалентного многослойного цилиндра, применимый к круглым пучкам, диаметр которых много меньше длины волны падающего излучения. Сформулированы системы интегральных уравнений для обоих способов решения. Аналитически показано, что антенная эффективность пучка из ОУНТ превышает таковую для одиночной ОУНТ.

На основании модели эквивалентного многослойного цилиндра рассчитаны поляризуемость и антенная эффективность пучка в широком частотном диапазоне от терагерцового до среднего инфракрасного. Под действием падающей плоской волны, в отличие от одиночных ОУНТ, в пучке возбуждаются несколько волноводных мод и, как результат, в спектрах поляризуемости пучка возникает большое количество геометрических резонансов этих мод. Показано, что антенная эффективность пучка на первом антенном резонансе может значительно превышать таковую для одиночной ОУНТ.

В главе 4 для расчета эффективной диэлектрической проницаемости композитной среды из ОУНТ предложено использовать приближение не взаимодействующих друг с другом включений. Диэлектрическая проницаемость среды при этом определяется как сумма поляризуемостей всех включений в единице объема с учетом усреднения по всем их возможным ориентациям:

$$\varepsilon_{eff}(\omega) = \varepsilon_h + \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_j \int_0^\infty \alpha_j(\omega, L) \tilde{n}_j(L) dL, \quad (3)$$

где индекс j используется для идентификации типа ОУНТ по хиральным индексам либо по другим характеристикам, если включениями являются пучки из ОУНТ или многослойные УНТ; ε_h - диэлектрическая проницаемость среды, заполняющей пространство между УНТ. Функция $\tilde{n}_j(L)$ описывает распределение концентрации УНТ типа j по длине L . Коэффициент $1/3$ в выражении (3) возникает из-за случайной ориентации УНТ. Поляризуемость $\alpha_j(\omega, L)$ отдельных включений длиной L необходимо рассчитывать с учетом размерных эффектов. Когда этими эффектами можно пренебречь, эффективная диэлектрическая проницаемость композитной среды на основе ОУНТ определяется через аксиальные проводимости σ_j нанотрубок:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_h + i \frac{2\pi}{3\omega\varepsilon_0} \sum_j \sigma_j R_j \int L \tilde{n}_j(L) dL \quad (4)$$

Эффективная проводимость среды из УНТ может быть найдена по формуле $\sigma_{eff} = -i\varepsilon_0\omega(\varepsilon_{eff} - 1)$.

Под пленкой из УНТ понимается плоскопараллельный слой, образованный плотно расположенными друг к другу углеродными нанотрубками. Объемный коэффициент заполнения ОУНТ может достигать 20%. Пространство между УНТ в пленках заполнено воздухом. На основе приближенной модели (формула (3)) рассчитан спектр эффективной проводимости пленки из одинаковых ОУНТ. В спектре выделены три области: 1) режим межзонных оптических переходов, 2) область геометрических (иными словами, антенных или локализованных-плазмонных) резонансов ОУНТ и 3) область квазистатического взаимодействия ОУНТ с падающим полем. Предложен и обоснован метод определения частоты электронной релаксации в ОУНТ по частоте пересечения спектров действительной части эффективной проводимости пленок из нанотрубок, измеренных при разных температурах.

Измеренные спектры проводимости тонких пленок ОУНТ, были описаны качественно и количественно, используя модель композитного материала из не взаимодействующих ОУНТ, где поляризуемость трубок учитывает эффект конечной длины (рисунок 3).

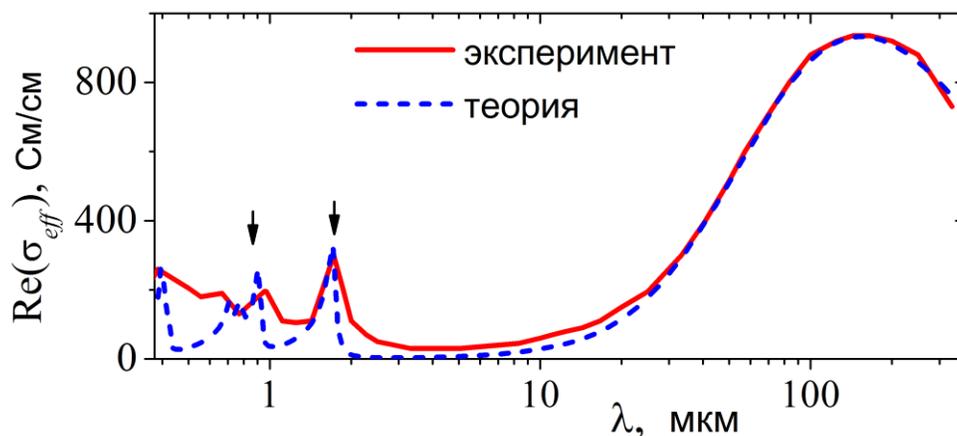


Рисунок 3. – Спектры проводимости пленки из ОУНТ. Сплошная кривая – экспериментальные данные, пунктирная кривая – результат расчетов. Стрелки указывают на резонансы межзонных переходов

Теоретически обосновано, что основным физическим механизмом терагерцового пика проводимости ($\lambda = 160$ мкм на рисунке 3) является локализованный плазмонный резонанс (ЛПР) в ОУНТ. Альтернативная интерпретация терагерцового пика – межзонный переход через узкую запрещенную щель – не может быть принята, поскольку вклад в проводимость

ОУНТ от межзонного перехода при комнатной температуре оказывается меньше, чем от внутризонных переходов. Показано, что в общем случае два механизма (межзонный переход и ЛПР) приводят к возникновению только одного пика. Межзонный переход ведет к формированию терагерцового пика для длинных ($>5\text{мкм}$) нанотрубок при низких температурах. ЛПР обуславливает возникновение терагерцового пика при комнатной температуре, а также при любой температуре для коротких ($>0.5\text{мкм}$) ОУНТ. Для нанотрубок средней длины ($0.5\text{ мкм} - 2\text{ мкм}$) при низкой температуре ($<50\text{К}$) два эффекта вносят сравнимый вклад в формирование одного терагерцового пика проводимости.

В спектре поглощения пленок из ОУНТ могут иметь место пики, связанные с первым и вторым геометрическими резонансами поверхностных волн ОУНТ. Подобные пики наблюдались в спектре фотопроводимости пленок ОУНТ, облучаемых терагерцовым излучением [11,17].

Проведены теоретические расчеты, дающие обоснование экспериментальным данным [16] и подтверждающие наблюдение явления ЛПР в ОУНТ. Показано, что терагерцовый пик проводимости, обусловленный ЛПР, зависит от длины пучков из ОУНТ и от количества металлических трубок в них. Результаты экспериментальных исследований работы [20] и сопутствующие им теоретические расчеты, представленные в диссертации, демонстрируют, что ОУНТ и пучки из ОУНТ являются волноводами сильно замедленных волн в среднем и дальнем инфракрасном диапазонах. Наличие ЛПР в ОУНТ открывает возможности для развития плазмоники среднего и дальнего инфракрасного диапазонов на основе углеродных нанотрубок.

Показано, что легирование пленок из ОУНТ ведет к увеличению их проводимости в дальнем инфракрасном диапазоне за счет «металлизации» полупроводниковых ОУНТ. Предсказано смещение терагерцового пика проводимости в область больших частот при легировании пленок, содержащих пучки из ОУНТ. Для пленок, содержащих только индивидуальные ОУНТ, такого смещения нет. Экспериментальные данные работы [20] демонстрируют небольшой сдвиг пика в сторону больших частот для пленок, содержащих пучки коротких ОУНТ.

Теоретически показано, что длина ОУНТ определяет температурную зависимость эффективной проводимости пленок из ОУНТ $\sigma_{eff}(\omega, T)$ в терагерцовом диапазоне, в частности, от длины трубок будет зависеть знак величины $\partial \text{Re}(\sigma_{eff}) / \partial T$. Для коротких ($<0.4\text{ мкм}$) ОУНТ следует ожидать $\partial \text{Re}(\sigma_{eff}) / \partial T > 0$, а для длинных ($>5\text{ мкм}$) нанотрубок – $\partial \text{Re}(\sigma_{eff}) / \partial T < 0$ в диапазоне $0.1\text{ ТГц} - 1\text{ ТГц}$. Именно такое поведение проводимости пленок из

ОУНТ было зарегистрировано и объяснено в работе [27]. В [32] выяснено, что этот же механизм ответственен за разный знак фотопроводимости пленок из ОУНТ в терагерцовом диапазоне при оптической накачке, поскольку основное действие накачки сводится к нагреву электронного газа в ОУНТ.

Дано объяснение модификации спектров оптической плотности пленок из ОУНТ при их нагревании в среднем инфракрасном диапазоне. Для объяснения было сделано предположение, что полупроводниковые трубки частично легированы, что обуславливает наличие акцепторных уровней вблизи потолка валентной зоны. Нагрев ведет к переходу дырок с акцепторных уровней на потолок валентной зоны. В результате потолок валентной зоны обедняется носителями зарядов, приводя к уменьшению количества межзонных переходов и к увеличению количества внутризонных переходов. Этим объясняется экспериментально обнаруженное в работе [23] уменьшение проводимости пленки в области первого межзонного перехода при ее нагревании.

На основе квантово-механической теории проводимости ОУНТ продемонстрировано, что наблюдаемые в эксперименте [23] температурные изменения спектров оптической плотности пленок ОУНТ в среднем инфракрасном диапазоне можно объяснить двумя факторами: 1) сильной температурной зависимостью проводимости полупроводниковых ОУНТ р-типа и 2) температурной зависимостью времени релаксации для внутризонных переходов в ОУНТ. Теоретически предсказано, что в области первого межзонного перехода действительная часть проводимости легированных полупроводниковых нанотрубок $\text{Re}(\sigma)$ при нагревании увеличивается (уменьшается), если уровень Ферми лежит ниже (выше) потолка валентной зоны. Знаки вкладов от внутризонных и межзонных переходов в величину $\partial \text{Re}(\sigma) / \partial T$ всегда противоположны при любом расположении уровня Ферми.

Предложен способ приближенного разделения вкладов межзонных и внутризонных переходов в спектр оптической плотности пленок из ОУНТ. Он основывается на изменении концентрации носителей заряда, ответственных за поглощение. Это изменение может быть осуществлено либо варьированием степени легирования трубок либо изменением их температуры. Простому разделению вкладов способствует то, что когда число межзонных переходов возрастает (убывает), число внутризонных переходов уменьшается (увеличивается). Причем относительные изменения вкладов от межзонных и внутризонных переходов не зависят от частоты.

В главе 5 проведен расчет рассеянного поля вблизи ОУНТ и пучка из ОУНТ в среднем и дальнем инфракрасных диапазонах частот. Расчеты

предсказывают, что радиальная компонента напряженности рассеянного поля в десятки раз превышает аксиальную составляющую напряженности падающего поля, из чего сделан вывод об эффекте усиления поля вблизи поверхности ОУНТ. Расчет проводился для коэффициента усиления $\xi(\rho, z) = |E(\rho, z)|^2 / |E_0|^2$, где E_0 - напряженность падающего поля, направленного вдоль оси нанотрубки; $E(\rho, z)$ - напряженность полного поля в точке с координатами (ρ, z) ; полное поле находилось как сумма падающего и рассеянного полей. Коэффициент усиления максимален на частоте ЛПР, но также остается велик ниже резонансной частоты в квазистатическом режиме взаимодействия ОУНТ с излучением (рисунок 4(а)).

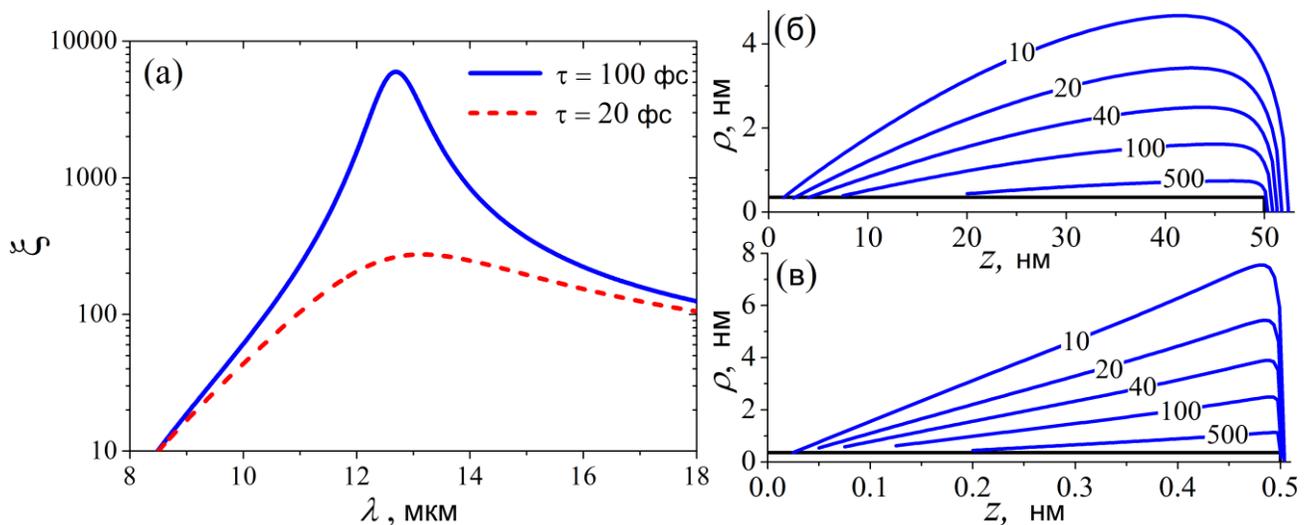


Рисунок 4. – (а) Спектр коэффициента усиления ξ на расстоянии 1 нм от поверхности ОУНТ длиной 0.1 мкм в области ЛПР при различных временах электронной релаксации 20 фс (пунктирная кривая) и 100 фс (сплошная кривая); (б,в) Пространственное распределение коэффициента усиления $\xi(\rho, z)$ вблизи правой половины ОУНТ с длинами 0.1 мкм (б) и 1 мкм (в) на длинах волн ЛПР 12.7 мкм и 57 мкм, соответственно; время электронной релаксации 20 фс.

Наибольшее усиление может быть получено для пучка, в котором все трубки имеют металлическую проводимость. Объем пространства, в котором имеется усиление поля, более чем в 100 раз превышает объем, занимаемый самой нанотрубкой или пучком (рисунок 4(б,в)). Эффект усиления поля может быть использован для увеличения поглощения молекул, адсорбированных на поверхности ОУНТ, а также для усиления поглощения в окружающей среде.

Продемонстрировано, что сильное различие между электромагнитным откликом металлической ОУНТ и полупроводниковой ОУНТ в микроволновом диапазоне обусловлено различными механизмами взаимодействия нанотрубок с

падающим полем: низкопроводящая полупроводниковая ОУНТ слабо поляризуется, но сама сильно поглощает падающее излучение, в то время как высокопроводящая металлическая ОУНТ сильно поляризуется и индуцирует сильное поле в ближней зоне, которое ведет к дополнительному поглощению в окружающей среде.

Проанализированы вклады низко- и высокопроводящих ОУНТ в эффективную диэлектрическую проницаемость суспензий. Показано, что вклады от металлических и полупроводниковых ОУНТ отличаются по абсолютному значению и имеют разную частотную зависимость в микроволновом диапазоне, и поэтому они могут быть разделены экспериментально.

Вследствие того, что диэлектрическая проницаемость агломератов из ОУНТ составляет несколько тысяч единиц в микроволновом диапазоне, электромагнитное поле слабо проникает внутрь агломерата. Из-за сильного эффекта экранирования электромагнитный отклик от агломератов ОУНТ намного меньше отклика от такого же количества однородно распределенных индивидуальных нанотрубок.

На основе теории эффективной среды получено соотношение между диэлектрическими проницаемостями диэлектрической среды в отсутствие (ϵ_h) и при наличии (ϵ_{eff}) включений из металлических ОУНТ, не взаимодействующих друг с другом:

$$\frac{\text{Im}(\epsilon_{eff})}{\text{Im}(\epsilon_h)} = \frac{\text{Re}(\epsilon_{eff})}{\text{Re}(\epsilon_h)}. \quad (5)$$

Такое же соотношение справедливо для случая, когда нанотрубки являются идеально проводящими. Идеально проводящие включения не поглощают ЭМ энергию, но при этом могут усиливать диссипацию энергии в окружающей среде за счет усиления поля вблизи своей поверхности. На основании соотношения (5) предложен метод регистрации эффекта усиления поглощения за счет усиления поля в суспензии из углеродных нанотрубок в микроволновой области частот. Предложенный метод применен в работе [25].

Проведен теоретический анализ результатов эксперимента [25] по измерению диэлектрической проницаемости суспензии из ОУНТ в микроволновом диапазоне (от 2 ГГц до 20 ГГц). Экспериментальные данные указывают на увеличение диэлектрической проницаемости среды при помещении в нее ОУНТ. Характер изменения диэлектрической проницаемости удовлетворяет соотношению (5), что свидетельствует о наличии в среде увеличения диссипации

энергии за счет усиления поля в ближней зоне ОУНТ. Это подтверждает теоретически предсказанный эффект усиления ближнего поля углеродной нанотрубкой.

В главе 6 проведены расчеты параметров волноводных мод бесконечно длинных МУНТ и рассеивающих характеристик МУНТ конечной длины. Многослойная углеродная нанотрубка моделировалась системой коаксиальных импедансных цилиндров. Полагалось отсутствие токов между стенками этих цилиндров. Расчеты проводились с использованием теоретических подходов, разработанных в главе 3.

Показано, что в многослойной углеродной нанотрубке могут распространяться замедленные азимутально-симметричные электрические волны. Частотный диапазон слабого затухания таких волн ограничен снизу частотой электронной релаксации, а сверху – частотой первого межзонного перехода во внешнем слое МУНТ.

Заполнение золотом внутреннего пространства МУНТ обуславливает возможность распространения в ней поверхностной волны в видимом диапазоне. При этом золотой стержень является волноводом поверхностной волны, тогда как углеродные слои МУНТ вокруг стержня представляют собой оболочку, в которой происходит значительная диссипация световой энергии.

Дано теоретическое обоснование возможности возникновения геометрических резонансов в спектре поляризуемости МУНТ конечной длины в дальней и средней инфракрасной областях частот. Такие резонансы расположены ниже области межзонных переходов и возможны для трубок малого внешнего радиуса (<3.5 нм) и относительно небольшой длины (<1 мкм).

Продемонстрировано, что эффективная проводимость МУНТ в отличие от ОУНТ не имеет резонансного поведения в ближнем инфракрасном и видимом частотных диапазонах. Поверхностные волны в МУНТ сильно затухают, и геометрический (антенный) резонанс для них в оптическом диапазоне не возможен. Как показано на рисунке 5, спектр рассеянной мощности МУНТ в видимом диапазоне не может иметь антенных резонансов.

Антенные свойства МУНТ в области межзонных переходов весьма слабо зависят от частоты. Это дает основание рассматривать ее как перспективную широкополосную наноантенну с достаточно большим КПД ($\eta \approx 0.1$) в оптическом диапазоне.

Теоретически показана возможность возникновения ЛПР в коротких (<0.6 мкм) легированных МУНТ в среднем инфракрасном диапазоне. Частота

ЛПР может варьироваться от 20 ТГц до 120 ТГц посредством изменения длины и диаметра МУНТ, а также химического потенциала ее слоев.

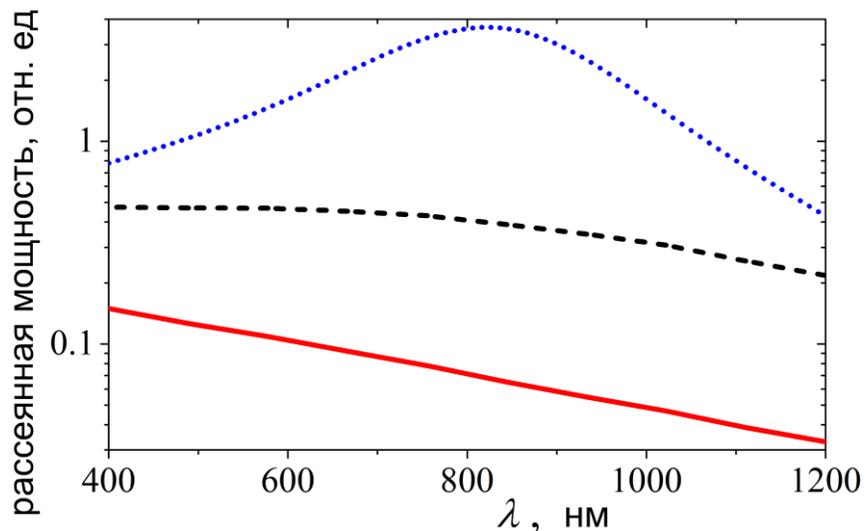


Рисунок 5. – Рассеянная мощность в зависимости от длины волны в свободном пространстве для МУНТ, состоящей из 70 (радиус 25 нм, сплошная линия) и 140 (радиус 50 нм, штриховая линия) слоев, длиной 350 нм. Время электронной релаксации 20 фс. Для сравнения кривая из точек показывает рассеянную мощность идеально проводящего стержня с радиусом 25 нм и длиной 350 нм

В главе 7 продемонстрирован эффект экранирования для ОУНТ в режиме ее квазистатического взаимодействия с падающим полем. Экранирование заключается в частичной компенсации аксиальной компоненты падающего поля как на самой ОУНТ, так и вблизи ее поверхности, посредством деполаризующего поля нанотрубки. В результате возбуждаемый ток на поверхности ОУНТ является малым, обуславливая ее слабый электромагнитный отклик.

В многослойных углеродных нанотрубках имеет место экранирование внутренних слоев вследствие поляризации внешних слоев. Показано, что эффект экранирования значительно выражен на более низких частотах, для более коротких нанотрубок и при большей величине времени электронной релаксации.

Эффект экранирования приводит к тому, что в микроволновом диапазоне эффективная проводимость нанотрубки во много раз меньше ее собственной проводимости. Под эффективной проводимостью подразумевается усредненное по длине нанотрубки отношение возбуждаемого тока на поверхности УНТ к величине аксиальной компоненты напряженности падающего поля. В терагерцовом диапазоне (0.1 ТГц – 1 ТГц), где эффект экранирования слаб, эффективная и собственная проводимости практически совпадают для

нанотрубок длиной более 1 мкм. Введен параметр g_c , равный отношению действительной части эффективной проводимости композитного материала в микроволновом диапазоне к такой же величине в терагерцовом диапазоне:

$$g_c(f, f_0) \equiv \frac{\operatorname{Re}[\sigma_{\text{eff}}(f)]}{\operatorname{Re}[\sigma_{\text{eff}}(f_0)]}, \quad (6)$$

где f_0 – частота в терагерцовом диапазоне, на которой эффектом экранирования в трубках можно пренебречь; причем должно выполняться неравенство $f_0 < \nu/2\pi$, где ν – частота электронной релаксации. Это неравенство гарантирует одинаковую действительную часть собственной проводимости нанотрубок на частотах f_0 и f .

Обосновано использование параметра g_c для количественной оценки эффективности взаимодействия включений из УНТ, входящих в композитный материал, с падающим электромагнитным излучением. Эффективность взаимодействия определяется величиной силы тока, возбуждаемого падающим полем. Чем больше сила тока, тем сильнее наночастица поглощает и рассеивает излучение, т.е. тем больше ее реакция на падающее поле. Предложено рассматривать пленки из УНТ как композитный материал, в котором эффективность взаимодействия включений с падающим полем является максимально возможной, поскольку в пленках трубки создают проводящую сеть, обеспечивая наилучшие условия для протекания тока. Отношение параметра g_c для произвольного композитного материала к таковому для пленки g_{film} позволяет оценить, насколько слабее в этом композитном материале включения из УНТ взаимодействуют с ЭМ полем по сравнению с максимально возможным взаимодействием, реализуемым в пленках из УНТ:

$$g_{c0}(f, f_0) \equiv \frac{g_c(f, f_0)}{g_{\text{film}}(f, f_0)}. \quad (7)$$

Теоретические расчеты показывают, что у изолированной УНТ длиной в сотни нанометров действительная часть поляризуемости достаточно высока в терагерцовом диапазоне (0.1 ТГц – 1 ТГц). Из таких частиц возможно образовать среду с высокой действительной частью диэлектрической проницаемости. При этом эффект экранирования обуславливает низкую диссипацию энергии в УНТ, что характеризуется малой величиной мнимой части ее поляризуемости. Дана

оценка диэлектрической проницаемости разориентированного композитного материала, состоящего из различных модификаций изолированных друг от друга УНТ: ОУНТ, МУНТ, пучков легированных и нелегированных ОУНТ. Показано, что легированные индивидуальные ОУНТ являются наиболее предпочтительными наночастицами для получения композиционных материалов с высокой действительной частью диэлектрической проницаемости и низким тангенсом диэлектрических потерь в терагерцовом диапазоне. Приведенные выше выводы подтверждены экспериментально в работе [24].

В главе 8 сформулирована задача рассеяния электромагнитного излучения на расположенной в проводящей среде ОУНТ с диэлектрическим покрытием. Задача сведена к решению интегрального уравнения относительно плотности аксиального поверхностного тока на поверхности ОУНТ. Получены приближенные выражения для расчета напряженности электрического поля вблизи поверхности ОУНТ и внутри ее диэлектрического покрытия. При этом использовалось приближение пренебрежимо малого аксиального деполаризующего поля, вызванного поляризацией диэлектрического покрытия ОУНТ. Установлено, что сечение поглощения нанотрубки обусловлено увеличением поглощения в окружающей среде за счет усиления поля в ее ближней зоне и диссипацией энергии в самой нанотрубке и ее диэлектрическом покрытии.

В радиоволновом диапазоне (10 МГц – 200 МГц) проведен численный анализ поглощения различными модификациями углеродных нанотрубок: ОУНТ, пучков из ОУНТ, МУНТ и ОУНТ с диэлектрическим покрытием. Показано, что наибольшим значением сечения поглощения, нормированного на общую площадь графеновых слоев УНТ, обладают однослойные углеродные нанотрубки по сравнению с многослойными УНТ и пучками из ОУНТ. Для МУНТ характерно экранирование внешним металлическим слоем всех остальных слоев, как внутренних, так и внешних. В пучках происходит экранирование полупроводниковых нанотрубок вследствие поляризации металлических ОУНТ. Наличие диэлектрического слоя, покрывающего нанотрубку, позволяет многократно увеличить сечение поглощения ОУНТ за счет дополнительного поглощения в этом слое.

Дано теоретическое описание частотной зависимости диэлектрической проницаемости солевого водного раствора при добавлении в него ОУНТ. Показано, что величина диссипации энергии в суспензии с нанотрубками увеличивается с ростом их длины. Использование одиночных нанотрубок для усиления поглощения в среде более эффективно по сравнению с использованием пучков ОУНТ при одной и той же массовой доле наночастиц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. Разработана теория дифракции электромагнитного излучения на металлической однослойной углеродной нанотрубке конечной длины. Краевая задача электродинамики сводилась к решению интегро-дифференциального уравнения для аксиального тока на поверхности нанотрубки, находящейся в поле падающей волны. Решение этого уравнения позволяет учесть размерные эффекты при взаимодействии поля с нанотрубкой. Проведен анализ антенных параметров нанотрубок. Предсказаны геометрические резонансы поверхностных волн в спектре поляризуемости металлической углеродной нанотрубки в дальнем инфракрасном диапазоне [1,2,4,29].

2. Разработана теоретическая модель, описывающая взаимодействие электромагнитного излучения с круглыми пучками из металлических однослойных углеродных нанотрубок как бесконечной, так и конечной длины. На основании модели показано, что в таких пучках в дальнем и среднем инфракрасных диапазонах частот распространяются азимутально-симметричные волноводные моды с высокой степенью замедления. Коэффициент замедления мод возрастает с ростом числа трубок в пучке, и для пучков больших поперечных размеров стремится к единице. Показано, что в спектре поляризуемости пучка имеется большое количество пиков, обусловленных геометрическими резонансами различных волноводных мод [5,6,10,13].

3. Обосновано, что пик в дальнем инфракрасном спектре проводимости тонкой пленки однослойных углеродных нанотрубок обусловлен локализованным плазмонным резонансом [4,9,16]. Частота пика зависит от длины и диаметра пучков нанотрубок [13,17,11,16,20]. Показано, что одновременное влияние двух различных эффектов (локализованного плазмонного резонанса и межзонного перехода через узкую энергетическую щель) приводят к появлению только одного терагерцового пика проводимости в спектре тонкой пленки из нанотрубок [9]. Предложен и обоснован метод определения частоты электронной релаксации в однослойных углеродных нанотрубках по частоте пересечения терагерцовых спектров проводимости пленок из нанотрубок, измеренных при разных температурах [9].

4. Показано, что изменение терагерцового спектра проводимости тонкой пленки из однослойных углеродных нанотрубок при ее нагревании является результатом уширения пика проводимости, обусловленного локализованным плазмонным резонансом, вследствие уменьшения времени электронной

релаксации. Зависимость частоты пика от длины нанотрубок ведет к разному температурному поведению проводимости пленок в диапазоне 0.1 ТГц - 1 ТГц, а именно: при нагревании действительная часть проводимости пленки из коротких (<0.4 мкм) нанотрубок возрастает, а из длинных (>5 мкм) – уменьшается [27,32].

5. Экспериментально полученное при нагревании пленки из легированных однослойных углеродных нанотрубок уменьшение действительной части ее проводимости в области первого межзонного перехода объяснено температурной зависимостью равновесной функции распределения Ферми для носителей зарядов в легированных полупроводниковых нанотрубках [23]. Предложен метод разделения вкладов в инфракрасный спектр оптической плотности пленок из однослойных углеродных нанотрубок от внутризонных и межзонных электронных переходов, основанный на измерениях спектров оптической плотности при различных температурах или различных степенях легирования нанотрубок [23].

6. Установлен эффект усиления интенсивности электромагнитного поля вблизи однослойных углеродных нанотрубок конечной длины, реализуемый в широком диапазоне частот от радиоволнового до инфракрасного [7,13]. Предложен метод обнаружения этого эффекта в микроволновом диапазоне частот [25].

7. Модель многослойного цилиндра применена для описания взаимодействия электромагнитного излучения с многослойной углеродной нанотрубкой как бесконечной, так и конечной длины [14,18,19,22]. Исследованы антенные и волноводные параметры многослойных нанотрубок в дальнем и среднем инфракрасном диапазоне. Описаны и объяснены спектральные особенности их поглощения и рассеяния в частотном диапазоне от терагерцового до ультрафиолетового [8]. Теоретически показана возможность возникновения локализованного плазмонного резонанса в легированной многослойной углеродной нанотрубке. Частота резонанса может варьироваться в диапазоне от 20 ТГц до 120 ТГц посредством изменения длины и диаметра нанотрубки, а также химического потенциала ее слоев [31].

8. Для различных модификаций углеродных нанотрубок конечной длины показано, что вследствие эффекта деполяризации экранирование аксиальной компоненты падающего поля на поверхности нанотрубки ведет к ослаблению ее электромагнитного отклика в радио- и микроволновом частотных диапазонах [12,21,26,28,30]. Обосновано, что критерием эффективности взаимодействия поля с углеродными нанотрубками в композитном материале на данной частоте может служить отношение действительной части эффективной проводимости композитного материала на этой частоте к таковой величине в терагерцовом

диапазоне, где эффект экранирования мал [3,28]. Теоретически продемонстрировано, что короткие углеродные нанотрубки (200 нм - 400 нм) могут выступать структурными элементами материалов с высокой действительной частью диэлектрической проницаемости (>100) и низким тангенсом потерь (<0.1) в области частот от 0.1 ТГц до 1 ТГц [24].

9. Разработана теория взаимодействия меггерцового излучения с различными модификациями углеродных нанотрубок (однослойных и многослойных нанотрубок, а также трубок, покрытых слоем диэлектрика), помещенных в проводящую среду. Рассчитаны и проанализированы сечения поглощения этих трубок, а также описаны механизмы диссипации энергии излучения в проводящей суспензии из однослойных углеродных нанотрубок [12,15]. Показано, что сечение поглощения нанотрубки обусловлено увеличением поглощения в окружающей среде за счет усиления поля в ее ближней зоне и диссипацией энергии в самой нанотрубке и ее диэлектрическом покрытии.

Рекомендации по практическому использованию результатов

Разработанные модели рассеяния электромагнитного излучения на отдельных углеродных нанотрубках позволяют проводить анализ электромагнитных характеристик композитных сред на основе УНТ, начиная с их микроскопического рассмотрения. Такие среды могут найти применение в качестве поляризаторов, экранов, модуляторов и детекторов излучения видимого, инфракрасного и терагерцового диапазонов.

Анализ эффекта экранирования в УНТ демонстрирует механизм ослабления ее электромагнитного отклика, что необходимо учитывать при разработке композитных материалов для различных электромагнитных приложений.

Предложенный критерий количественной оценки эффективности взаимодействия включений из УНТ с электромагнитным полем дает возможность определять, насколько отличается проводимость композитного материала от максимально возможной проводимости, которую можно получить для данного типа включений.

Предсказанная возможность реализации на основе УНТ материалов с высокой диэлектрической проницаемостью и низкими потерями в терагерцовом диапазоне может быть применена при конструировании высококонтрастных метаматериалов, эффективно взаимодействующих с терагерцовым излучением.

Анализ антенных и волноводных свойств многослойных УНТ и пучков однослойных УНТ открывает перспективы использования этих наночастиц в качестве наноантенн и нановолноводов, а также других элементов плазмоники терагерцового и инфракрасного областей частот. Установленная зависимость резонансного отклика углеродных нанотрубок от их геометрических размеров позволяет использовать нанотрубки для создания функциональных материалов с перестраиваемыми свойствами в инфракрасном и терагерцовом диапазонах.

Предсказанная способность углеродных нанотрубок усиливать поле вблизи своей поверхности в широком частотном диапазоне от радиоволнового до среднего инфракрасного позволяет использовать УНТ для концентрации электромагнитной энергии в области с характерными размерами в сотни раз меньшими длины волны падающего излучения. Это свойство принципиально важно (i) для создания нано-детекторов электромагнитного излучения, (ii) при учете электромагнитной совместимости в высокочастотных нанопежах, (iii) для управления электромагнитным излучением в наноразмерных масштабах.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

Главы в книгах

1. Maksimenko, S. A. Electromagnetic waves in carbon nanostructures / S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan, K. G. Batrakov, A.A. Khrushchinsky, P.P. Kuzhir, A. M. Nemilentsau, M. V. Shuba // Carbon Nanotubes and Related Structures / Editors: V. Blank and B. Kulnitskiy, Research Signpost Publisher. – 2008. – P. 147–187.
2. Maksimenko, S.A. Electrodynamics of carbon nanotubes / S.A. Maksimenko, M.V. Shuba, G. Y. Slepyan // Carbon-Based Nanoelectromagnetics / Editors: A. Maffucci, S. Maksimenko, Y. Svirko, Elsevier. – 2019. – P. 1–29.
3. Shuba, M.V. Electromagnetic response of carbon nanotube-based composites / Fundamental and Applied Nano-Electromagnetics II. NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics / Ed. by Maffucci A., Maksimenko S., Springer, Dordrecht. – 2019 – P. 1–19.

Статьи в научных изданиях, соответствующих п. 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий в Республике Беларусь

4. Theory of optical scattering by achiral carbon nanotubes and their potential as optical nanoantennas / G. Ya. Slepyan, M. V. Shuba, S. A. Maksimenko, A. Lakhtakia // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 73. – P. 195416-1–P. 195416-11.
5. Shuba, M.V. Electromagnetic wave propagation in an almost circular bundle of closely packed, metallic, carbon nanotubes / M.V. Shuba, S.A. Maksimenko, A. Lakhtakia // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 76. – P. 155407-1–P. 155407-7.
6. Carbon nanotube antenna: Far-field, near-field and thermal-noise properties / S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan, A. M. Nemilentsau, M. V. Shuba // Physica E. – 2008. – Vol. 40, N. 7. – P. 2360–2364.
7. Shuba, M. V. Absorption cross-section and near-field enhancement in finite-length carbon nanotubes in the terahertz-to-optical range / M. V. Shuba, S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan // J. Comput. Theor. Nanoscience. – 2009. – Vol. 6, N. 9. – P. 2016–2023.
8. Theory of multiwall carbon nanotubes as waveguides and antennas in the infrared and the visible regimes / M.V. Shuba, G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko, C. Thomsen, A. Lakhtakia // Phys. Rev. B. – 2009. – Vol. 79. – P. 155403-1–155403-16.

9. Terahertz conductivity peak in composite materials containing carbon nanotubes: Theory and interpretation of experiment / G.Ya. Slepyan, M. V. Shuba, S. A. Maksimenko, C. Thomsen, A. Lakhtakia // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 81. – P. 205423-1–205423-6.
10. Electromagnetic response of the composites containing chemically modified carbon nanotubes / A. M. Nemilentsau, M. V. Shuba, P. N. D'yachkov, G. Ya. Slepyan, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2010. – Vol. 248. – P. 012003-1–012003-4.
11. Terahertz sensing with carbon nanotube layers coated on silica fibers: Carrier transport versus nanoantenna effects / D. Seliuta, I. Kašalynas, J. Macutkevic, G. Valušis, M.V. Shuba, P.P. Kuzhir, G.Y. Slepyan, S.A. Maksimenko, V. Ksenevich, V. Samuilov, Q. Lu // *Appl. Phys. Lett.* – 2010. – Vol. 97. – P. 073116-1–073116-3.
12. Radiofrequency field absorption by carbon nanotubes embedded in a conductive host / M. V. Shuba, G. Y. Slepyan, S. A. Maksimenko, and G.W. Hanson // *J. Appl. Phys.* – 2010. – Vol. 108. – N. 11. – P. 114302-1–114302-10.
13. Substitutional doping of carbon nanotubes to control their electromagnetic characteristics / A. M. Nemilentsau, M. V. Shuba, G. Ya. Slepyan, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, P. N. D'yachkov, A. Lakhtakia // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 82. – P. 235424-1–235424-10.
14. Анизотропия электромагнитных свойств полимерных композитов на основе многослойных углеродных нанотрубок в гигагерцовом диапазоне частот / Д.С. Быченко, М.А. Каныгин, А.В. Окотруб, М.В. Шуба, О.Г. Поддубская, А.О. Плющ, П.П. Кужир, С.А. Максименко // *Письма в ЖЭТФ.* – 2011. – Т. 93, № 10. – С. 607–611.
15. RF and microwave electrical response of carbon nanotube saline solutions for potential biomedical applications / M. V. Shuba, G. Ya. Slepyan, S. A. Maksimenko, G. W. Hanson // *Nanosci. Nanotechnol. Lett.* – 2011. – Vol. 3, N. 6. – P. 885–888.
16. Experimental evidence of localized plasmon resonance in composite materials containing single-wall carbon nanotubes / M. V. Shuba, A. G. Paddubskaya, P. P. Kuzhir, G. Ya. Slepyan, S. A. Maksimenko, V. K. Ksenevich, P. Buka, D. Seliuta, I. Kasalynas, J. Macutkevic, G. Valusis, C. Thomsen, A. Lakhtakia // *Phys. Rev. B.* – 2012. – Vol. 85. – P. 165435-1–165435-6.
17. Antenna resonances in terahertz photoconductivity of single wall carbon nanotube fibers / M. V. Shuba, D. Seliuta, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, V. K. Ksenevich, I. Kašalynas, J. Macutkevič, G. Valušis // *Diamond & Related Materials.* – 2012. – Vol. 27–28. – P. 36–39.
18. J. Terahertz time domain spectroscopy of epoxy resin composite with various carbon inclusions / J. Macutkevic, D. Seliuta, G. Valusis, R. Adomavicius, P. Kuzhir, A.

- Paddubskaya, M. Shuba, S. Maksimenko, L. Coderoni, F. Micciulla, I. Sacco, S. Bellucci // *Chem. Phys.* – 2012. – Vol. 404. – P. 129–135.
19. Electromagnetic shielding efficiency in Ka-band: carbon foam versus epoxy/carbon nanotube composites / P. P. Kuzhir, A. G. Paddubskaya, M. V. Shuba, S. A. Maksimenko, A. Celzard, V. Fierro, G. Amaral-Labat, A. Pizzi, G. Valušis, J. Macutkevic, M. Ivanov, J. Banys, S. Bistarelli, A. Cataldo // *J. Nanophoton.* – 2012. – Vol. 6. – P. 061715-1–061715-18.
 20. Effects of inclusion dimensions and p-type doping in the terahertz spectra of composite materials containing bundles of single-wall carbon nanotubes / M. V. Shuba, A. G. Paddubskaya, P. P. Kuzhir, G. Ya. Slepyan, D. Seliuta, I. Kašalynas, G. Valušis, A. Lakhtakia // *J. Nanophoton.* – 2012. – Vol. 6. – P. 061707-1–061707-11.
 21. Role of finite size effects in the microwave and sub-terahertz electromagnetic response of multiwall carbon nanotube based composite: theory and interpretation of experiment / M. V. Shuba, A. V. Melnikov, A. V. Paddubskaya, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, C. Thomsen // *Phys. Rev. B.* – 2013. – Vol. 88. – P. 045436-1–045436-8.
 22. Anisotropic electromagnetic properties of polymer composites containing oriented multiwall carbon nanotubes in respect to terahertz polarizer applications / D. Bychanok, M. Shuba, P. Kuzhir, S. Maksimenko, V. Kubarev, M. Kanygin, O. Sedelnikova, L. Bulusheva, A. Okotrub // *J. Appl. Phys.* – 2013. – Vol. 114. – P. 114304-1–114304-7.
 23. Temperature induced modification of the mid-infrared response of single-walled carbon nanotubes / M. V. Shuba, A. G. Paddubskaya, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, G. Valušis, N. A. Poklonski, S. Bellucci, G. Kenanakis, M. Kafesaki // *J. Appl. Phys.* – 2016. – Vol. 119. – P. 104303-1–104303-8.
 24. Short-length carbon nanotubes as building blocks for high dielectric constant materials in the terahertz range / M. V. Shuba, A. Paddubskaya, P. P. Kuzhir, S. M. Maksimenko, E. Flahaut, V. Fierro, A. Celzard, G. Valušis // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2017. – Vol. 50. – P. 08LT01-1–08LT01-6.
 25. Observation of the microwave near-field enhancement effect in suspensions comprising single-walled carbon nanotubes / M. V. Shuba, A. G. Paddubskaya, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, G. Valušis, M. Ivanov, J. Banys, V. Ksenevich, G. W. Hanson // *Materials Research Express.* – 2017. – Vol. 4. – P. 075033-1–075033-11.
 26. Integral equation technique for scatterers with mesoscopic insertions: application to a carbon nanotube / M. V. Shuba, A. V. Melnikov, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, G. Y. Slepyan, A. Boag, A. Mosca Conte, O. Pulci, S. Bellucci // *Phys. Rev. B.* – 2017. – Vol. 96. – P. 205414-1–205414-13.

27. Influence of nanotube length and density on the plasmonic terahertz response of single-walled carbon nanotubes / P. Karlsen, M. V. Shuba, C. Beckerleg, D. I. Yuko, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, V. Ksenevich, Ho Viet, A. G. Nasibulin, R. Tenne, E. Hendry // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2018. – Vol. 51. – P. 014003-1–014003-9.
28. How effectively do carbon nanotube inclusions contribute to the electromagnetic performance of a composite material? Estimation criteria from microwave and terahertz measurements / M. V. Shuba, D. I. Yuko, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, M. A. Kanygin, A.V. Okotrub, R. Tenne, Ph. Lambin // *Carbon.* – 2018. – Vol. 129. – P. 688–694.
29. Мельников, А. В. Аналитическое решение задачи рассеяния электромагнитной волны на металлической одностенной углеродной нанотрубке с низкопроводящим включением / А. В. Мельников, М. В. Шуба // *Журнал БГУ, Физика.* – 2018. – Vol. 3. – С. 58–66.
30. Влияние эффекта экранирования на частотную зависимость электропроводности композитного материала на основе углеродных нанотрубок / М. В. Шуба, Д. И. Юко, Д. Н. Мейсак, О. В. Седелникова, М. А. Каныгин, А. В. Окотруб // *Журнал БГУ. Физика.* – 2018. – Т. 1. – С. 80–87.
31. Localized plasmon resonance in boron doped multi-walled carbon nanotubes / M. V. Shuba, D. I. Yuko, P. P. Kuzhir, S. A. Maksimenko, G.G. Chigir, A.N. Pyatlitski, O. Sedelnikova, A.V. Okotrub, Ph. Lambin // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 97. – P. 205427-1–205427-6.
32. Sign inversion in the terahertz photoconductivity of single-walled carbon nanotube / P. Karlsen, M. V. Shuba, P. P. Kuzhir, A. G. Nasibulin, P. Lamberti, E. Hendry // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 98. – P. 241404(R)-1–241404(R)-6.

Статьи в трудах конференций и школ

33. Optical scattering by achiral carbon nanotubes and application as nanoantennas and composite mediums / S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan, M. V. Shuba, and A. Lakhtakia // *Proc. SPIE.* – 2006. – Vol. 6328. – P. 632807-1–632807-11.
34. Shuba, M.V. Low frequency surface plasmon in finite carbon nanotube bundles / M.V. Shuba // *Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures: Reviews and Short Notes to Nanomeeting 2007*, V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko and V.S. Gurin (Eds.). – World Scientific, Singapore, 2007. – P. 47–50,
35. Electromagnetic theory of nanodimensional antennas for terahertz, infrared and optical regimes / G. Ya. Slepyan, M. V. Shuba, A. M. Nemilentsau, S. A. Maksimenko // *12-th International Conference on Mathematical Methods in*

- Electromagnetic Theory MMET 2008, Odessa, Ukraine, June 29 – July 2, 2008, Conference Proceedings. – P: 118–123.
36. Electromagnetic properties of composite materials containing carbon nanotubes / G. Ya. Slepyan, M. V. Shuba, S. A. Maksimenko, C. Thomsen, A. Lakhtakia // 2010 EMTS International Symposium on Electromagnetic Theory, Berlin, Germany, 16-19 August 2010, Conference Proceedings. – P. 664–667.
37. Terahertz and sub-terahertz responses of finite-length multiwall carbon nanotubes / S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan, M. V. Shuba, A. Lakhtakia // The IEEE Electrical Design of Advanced Packaging & Systems (EDAPS) Symposium, Hangzhou, China, 12-14 December, 2011, Conference Proceedings. – P. 1–4.
38. Potential of carbon nanotubes for cancer cells thermolysis in an RF exposing field / M. V. Shuba, S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan, G. W. Hanson // NATO Science for peace and security series B: Physics and Biophysics, / Ed. By Y. N. Shunin A.E. Kiv, Springer Science + Business Media, Dordrecht, 2012, Nanodevices and nanomaterials for ecological security, Part 1, – P. 37–48.
39. Shuba, M. V. Electromagnetic response of finite-length multiwall carbon nanotubes in sub-terahertz range / M. V. Shuba, A.V. Melnikov // Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures: Reviews and Short Notes to Nanomeeting, May 28-31, 2013, V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko, V.S. Gurin & C. H. Kam (Eds.), World Scientific, Singapore, 2013 – P. 214–217.
40. Finite-size effects in the optical properties of single walled carbon nanotube films / M.V. Shuba, A.G. Paddubskaya, H. Nelstrop, P.P. Kuzhir, G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko, D. Seliuta, I. Kasalynas, G. Valusis // Proceeding of international conference on electromagnetics in advanced applications (ICEAA), Torino, Italy, 9-13 Sept. 2013 – P. 707–709.
41. Antenna resonances in carbon nanotubes: Theoretical model and experimental verification / S.A. Maksimenko, M.V. Shuba, P.P. Kuzhir, G.Y. Slepyan //, IEEE 15th International Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO), Rome, Italy, 27-30 July 2015, Conference Proceedings – P. 172–175.
42. Challenges and Perspectives of Nanoelectromagnetics in the THz Range / S.A. Maksimenko, M.V. Shuba, P.P. Kuzhir, K.G. Batrakov, G.Y. Slepyan // IEEE Computer society annual symposium on VLSI (ISVLSI), France, 8-10 July 2015, Conference Proceedings – P. 447–449.
43. Batrakov K. G. Enhanced electromagnetic response of ultrathin carbon films in THz frequency range / K. G. Batrakov, S. A. Maksimenko, M. V. Shuba // IEEE-APS Topical conference on antennas and propagation in wireless communications (APWC 2017). – Italy, 9-13 September 2017, Conference Proceedings – P. 818–821.

РЕЗЮМЕ

Шуба Михаил Владимирович

**ЭФФЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И
КОМПОЗИТНЫМИ СРЕДАМИ НА ИХ ОСНОВЕ**

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, электромагнитные свойства, поляризуемость, размерные эффекты, композитная среда, эффективная проводимость, инфракрасный диапазон.

Целью диссертационной работы является разработка теоретических методов описания взаимодействия электромагнитного излучения с различными модификациями углеродных нанотрубок и композитных сред на их основе, а также выявление особенностей этого взаимодействия.

Методы исследования основаны на решении краевой задачи электродинамики посредством интегральных или интегро-дифференциальных уравнений.

Полученные результаты и их новизна: Разработана теория рассеяния электромагнитного излучения различными модификациями углеродных нанотрубок (УНТ): однослойной и многослойной УНТ, пучком из УНТ, а также нанотрубкой с диэлектрическим покрытием. Исследованы параметры собственных мод многослойных УНТ и круглых пучков из однослойных УНТ в терагерцовом и инфракрасном диапазонах. Предсказаны геометрические резонансы собственных мод в спектре поляризуемости нанотрубок конечной длины. Дано теоретическое обоснование того, что пик в дальнем инфракрасном спектре проводимости тонких пленок однослойных УНТ обусловлен локализованным плазмонным резонансом. Предсказан эффект усиления ближнего поля вблизи УНТ в резонансном и квазистатическом режимах взаимодействия с падающим полем. Предложен критерий для количественной оценки эффективности взаимодействия микроволнового излучения с включениями из углеродных нанотрубок в композитном материале на их основе. Установлено влияние размерных эффектов на температурную зависимость терагерцовой проводимости пленок из однослойных УНТ.

Рекомендации по использованию и область применения: Разработанные модели позволяют проводить анализ электромагнитных параметров сред на основе УНТ, начиная с их микроскопического рассмотрения. УНТ могут найти применение в наноплазмонике терагерцового и инфракрасного диапазонов.

РЭЗІЮМЭ

Шуба Міхаіл Уладзіміравіч

**ЭФЕКТЫ УЗАЕМАДЗЕЙННЯ ЭЛЕКТРАМАГНІТНАГА
ВЫПРАМЕНЬВАННЯ З ВУГЛЯРОДНЫМІ НАНАТРУБКАМІ І
КАМПАЗІТНЫМІ АСЯРОДДЗЯМІ НА ІХ АСНОВЕ**

Ключавыя словы: вугляродныя нанатрубкі, электрамагнітныя ўласцівасці, палярызуемасць, размерныя эфекты, кампазітнае асяроддзе, эфектыўная праводнасць, інфрачырвоны дыяпазон.

Мэтай дысертацыйнай працы з'яўляецца распрацоўка тэарэтычных метадаў апісання ўзаемадзеяння электрамагнітнага выпраменьвання з рознымі мадыфікацыямі вугляродных нанатрубак і кампазітных асяроддзяў на іх аснове, а таксама выяўленне асаблівасцяў гэтага ўзаемадзеяння.

Метады даследавання заснаваныя на рашэнні краёвай задачы электрадынамікі з дапамогай інтэгральных або інтэгра-дыферэнцыяльных ураўненняў.

Атрыманыя вынікі і іх навізна. Распрацавана тэорыя рассявання электрамагнітнага выпраменьвання розных мадыфікацый вугляродных нанатрубак (ВНТ): аднаслаёвай ВНТ, шматслаёвай ВНТ, пучком з аднаслаёвых ВНТ і нанатрубкай з дыэлектрычным пакрыццём. Даследаваны параметры ўласных мод шматслойных ВНТ і круглых пучкоў з аднаслаёвых ВНТ у тэрагерцовым і інфрачырвоным дыяпазонах. Прадказаны геаметрычныя рэзанансы ўласных мод у спектры палярызуемасці нанатрубак канчатковай даўжыні. Дадзена тэарэтычнае абгрунтаванне таго, што пік у далекім інфрачырвоным спектры праводнасці тонкіх плёнак аднаслаёвых ВНТ абумоўлены лакалізаваным плазмонным рэзанансам. Прадказаны эфект узмацнення блізкага поля паблізу ВНТ у рэзанансным і квазістатычным рэжымах узаемадзеяння з падальным полем. Прапанаваны крытэрыі для колькаснай ацэнкі эфектыўнасці ўзаемадзеяння мікрахвалевага выпраменьвання з уключэннямі з вугляродных нанатрубак у кампазітным матэрыяле на іх аснове. Выяўлены ўплыў размерных эфектаў на тэмпературную залежнасць тэрагерцовай праводнасці плёнак з аднаслаёвых ВНТ.

Рэкамендацыі па выкарыстанні і вобласць прымянення. Распрацаваныя мадэлі дазваляюць праводзіць аналіз электрамагнітных параметраў асяроддзяў на аснове ВНТ, пачынаючы з іх мікраскапічнага разгляду. ВНТ могуць быць ужытыя ў нанаплазмоніке тэрагерцовага і інфрачырвонага дыяпазонаў.

SUMMARY

Shuba Mikhail Vladimirovich

EFFECTS OF THE INTERACTION OF THE ELECTROMAGNETIC RADIATION WITH CARBON NANOTUBES AND CARBON NANOTUBE BASED COMPOSITES

Keywords: carbon nanotube, electromagnetic properties, polarizability, size effects, composite material, effective conductivity, infrared range.

The aim of this work. The main goal of the dissertation is the development of theoretical methods for the description of the interaction of various types of carbon nanotubes (CNTs) and CNT based composite materials with radiation, as well as establishing the peculiarities of this interaction.

Methods of the research. The theoretical research is based on the solution of the electrodynamic boundary-value problem using the methods of integral or integrodifferential equations.

Obtained results and their novelty. Theory of electromagnetic wave scattering by carbon nanotubes of various types (a single-walled CNT, a multi-walled CNT, a bundle of single-walled CNTs, and CNT with dielectric-coating) has been developed. The parameters of the waveguide modes in multi-walled CNTs and almost circular bundles of single-walled CNTs are studied in the terahertz and infrared ranges. The geometric resonances of waveguide modes in the polarizability spectrum of finite-length nanotubes have been predicted. The mechanism of the conductivity peak in the far infrared spectrum of thin film comprising single-walled CNT has been established as localized plasmon resonance. The effect of near-field enhancement is predicted for CNTs in the regime of resonant and quasi-static interactions with the electromagnetic field. A criterion is proposed to estimate how effectively carbon nanotube inclusions contribute to the electromagnetic performance of composite materials in the microwave range. The influence of the finite-size effect on the temperature dependence of the terahertz conductivity of a single-walled CNT film is established.

Recommendation for future use and application fields. The developed models allow the analysis of the electromagnetic parameters of CNT based media starting from their microscopic examination. CNTs are shown to have a potential for application in nanoplasmonics of the terahertz and infrared ranges.

Шуба Михаил Владимирович

**ЭФФЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И
КОМПОЗИТНЫМИ СРЕДАМИ НА ИХ ОСНОВЕ**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 01.04.05 – оптика

Подписано в печать “ ” октября 2020 г. Формат 60x90/16.

Бумага офсетная. Гарнитура «Times». Печать

Объем: усл. печ. л.; уч. изд. л.

Тираж 60 экз. заказ №

Государственное научное учреждение «ИНСТИТУТ ФИЗИКИ
имени Б.И. СТЕПАНОВА НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

220072, Минск, пр. Независимости, 68-2.

Отпечатано на ризографе ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси