

Универзитет у Београду
Електротехнички факултет

Лазар Б. Карбунар

Утицај динамичке поларизације на
интеракцију наелектрисаних честица са
угљеничним наноцевима у двофлуидном
хидродинамичком моделу

докторска дисертација

Београд, 2015

University of Belgrade
School of electrical engineering

Lazar B. Karbunar

The influence of dynamic polarization on
charged particles interaction with carbon
nanotubes in two - fluid hydrodynamic model

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2015

Комисија за преглед и оцену тезе

Ментор:

др Милан Тадић, редовни професор,
Универзитет у Београду, Електротехнички факултет

Чланови Комисије:

др Душко Борка, виши научни сарадник,
Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне науке
„Винча“

др Владимир Арсоски, доцент,
Универзитет у Београду, Електротехнички факултет

др Иван Радовић, виши научни сарадник,
Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне науке
„Винча“

др Милан Поњавић, доцент,
Универзитет у Београду, Електротехнички факултет

Датум одбране:

Захвалница

Захваљујем се ментору, проф. др Милану Тадићу, редовном професору Електротехничког факултета Универзитета у Београду, на многобројним корисним саветима, сугестијама, помоћи и подршци у свим фазама израде ове дисертације. Посебно бих истакао људске квалитете професора Тадића који ми је и поред многих факултетских обавеза, наставних и административних као продекан за науку, изашао у сусрет и прихватио менторство на овако захтевном послу препознавши будући научни и академски допринос који је касније произашао из заједничког рада.

Ова докторска дисертација урађена је под руководством др Душка Борке, вишег научног сарадника Института за нуклеарне науке „Винча“. Значајну помоћ у руковођењу израдом ове докторске дисертације пружио је др Иван Радовић, виши научни сарадник Института за нуклеарне науке „Винча“. Њима дугујем велику захвалност за резултате које смо заједничким напорима остварили у претходном времену. Посебно бих истакао њихову посвећеност и педагошки приступ током израде ове докторске дисертације где су показали максималну бригу за сваки детаљ и утицали да научноистраживачки рад из интересне области представља право задовољство а не оптерећење. Истраживачки процес протекао је у обостраном допуњавању и изродио новим квалитетом са обе стране, са моје као профилисаним и усмереним научним истраживачем и са њихове као одговорним и зрелим руководиоцима истраживачког процеса способним да пренесу своје огромно знање и научно искуство на млађе кандидате.

Посебно се захваљујем проф. др Зорану Мишковићу, редовном професору на одсеку за примењену математику Универзитета Вотерлоу (*Department of Applied Mathematics, University of Waterloo*) у Канади, на бројним корисним саветима.

Београд, октобар 2015

Лазар Карбунар

Утицај динамичке поларизације на интеракцију наелектрисаних честица са угљеничним наноцевима у двофлуидном хидродинамичком моделу

Сажетак

У овој дисертацији се разматра утицај ефеката динамичке поларизације на каналисање наелектрисаних честица кроз различите типове једнослојних угљеничних наноцеви (SWNT). На почетку анализе разматра се интеракција наелектрисаних честица са четири различита типа наноцеви у оквиру линеаризованог дводимензионог једнофлуидног и двофлуидног хидродинамичког модела. Типови наноцеви који се разматрају су SWNT(6, 4), SWNT(8, 6), SWNT(11, 9) и SWNT(15, 10). Поменути хидродинамички модели се користе за рачунање потенцијала lika где се на тај начин разматра утицај на кретање наелектрисаних честица дуж путање паралелне са осом наноцеви. Брзине кретања протона се узимају у опсегу од 1 до 10 а.у.. Протон средње кинетичке енергије (реда MeV) изазива појаву снажне динамичке поларизације валентних електрона на омотачу наноцеви што као ефекат има индуковање значајне силе lika на протон, односно појаву губитака енергије услед ексцитације поменутих електрона. Показано је да динамичка сила lika изазива снажан утицај на угаону расподелу каналисаних протона кроз кратке наноцеви. Установљено је да су ове нове појаве посебно изражене када се брзина каналисаних честица поклапа са фазном брзином квазиакустичног π плазмона. Анализа је укључила генерисање нумеричких резултата којима је приказан утицај фактора пригушења, радијуса наноцеви и почетне позиције каналисане честице на потенцијал lika унутар наноцеви. Извршено је поређење добијених резултата за потенцијал lika за случај једнофлуидног и двофлуидног модела за различите типове наноцеви. Такође је извршена рачунарска симулација каналисања честица као и поређење просторне и угаоне расподеле каналисаних честица у случају поменутих хидродинамичких модела.

У наставку се анализира интеракција протона са SWNT(6, 4) где се узимају у обзир ефекти динамичке поларизације у оквиру дводимензионог проширеног хидродинамичког модела. Овај модел се користи за аналитичко и нумеричко рачунање потенцијала lika и зауставне силе на протон који се креће паралелно са осом наноцеви у случајевима када је трајекторија његовог кретања унутар и ван наноцеви. Опсег брзина који се разматра је од 0.5 до 15 а.у.. Разматра се утицај ефеката различитих угаоних модела на зависност потенцијала lika од брзине протона за различите типове наноцеви. Такође се рачуна

просторна и угаона дистрибуција протона у случају проширеног двофлуидног модела и пореди са случајем обичног двофлуидног модела са нултим фактором пригушења.

На крају се анализира интеракција наелектрисаних честица са правим и закривљеним једнослојним наноцевима при условима каналисања када је урачуната динамичка поларизација валентних електрона угљеника. Поларизација је описана линеаризованим двофлуидним хидродинамичким моделом са параметрима одређеним из неколико независних експеримената у вези са спектроскопијом губитака енергије у угљеничним наноструктурама. Хидродинамички модел се користи за израчунавање потенцијала lika индукованог кретањем протона кроз четири поменута типа наноцеви при брзини од 3 атомске јединице. Потенцијал lika се потом додаје на Дојл-Тарнеов атомски потенцијал у циљу добијања укупног потенцијала у правим и закривљеним наноцевима. На основу ових прорачуна симулира се процес каналисања протонског снопа и одређује просторна и угаона расподела каналисаних протона кроз закривљене наноцеви и пореде добијени резултати са случајем када се не узима у обзир динамичка поларизација и потенцијал lika.

Кључне речи:

Динамичка поларизација, каналисање протона,
потенцијал lika, угљеничне наноцеви,
закривљене наноцеви

Научна област:

Електротехника и рачунарство

Ужа научна област:

Наноелектроника и фотоника

УДК број:

621.3

The influence of dynamic polarization on charged particles interaction with carbon nanotubes in two – fluid hydrodynamic model

Abstract

In this dissertation the effects of dynamic polarization on charged particles channeling through various types of single – walled carbon nanotubes (SWNTs) are studied. At the very beginning of the analyze the interactions of charged particles with 4 different types of SWNTs by means of linearized two dimensional one and two fluid hydrodynamic models are studied. Types of SWNTs are (6, 4), (8, 6), (11, 9) and (15, 10). The models are used to calculate the image potential for a charged particle moving parallel to the axis of the SWNTs. Proton speeds between 1 and 10 a.u. are chosen. A proton that moves with average energy (MeV) will induce a strong dynamic polarization of valence electrons in the nanotubes which in turn will give rise to a sizeable image force on the proton, as well as a considerable energy loss due to the collective, or plasma, excitations of those electrons. The dynamic image force was shown to exert large influence in the angular distributions of protons channelled through short SWNTs. It is found that these quantities exhibit novel features when the particle speed matches the phase velocity of the quasicoustic π plasmon. Numerical results are obtained to show the influence of the damping factor, the nanotube radius, and the particle position on the image potential inside the nanotube. Results for image potential in the one and two fluid hydrodynamic models are compared for different types of nanotubes. The spatial and angular distributions of protons are also computed and compared for the two models.

After that, we study the interaction of charged particles with a SWNT(6, 4) under channelling conditions by means of the linearized, two dimensional (2D), two-fluid extended hydrodynamic model. We use the model to calculate analytically and numerically the image potential and the stopping force for a proton moving parallel to the axis of the SWNT, both inside and outside the nanotube at the speeds from 0.5 a.u. to 15 a.u.. The effects of different angular modes on the velocity dependence of the image potential are compared for a proton moving in different types of SWNTs. We also compute the spatial and angular distributions of protons in the 2D two-fluid extended hydrodynamic model and compare them with the 2D two-fluid hydrodynamic model with zero damping.

At the end we investigate the interaction of charged particles with straight and bent single-walled carbon nanotubes under channelling conditions in the presence of dynamic polarization of the valence electrons in carbon nanotube wall. This polarization is described by a

linearized, two-fluid hydrodynamic model with the parameters taken from recent modelling of several independent experiments on electron energy loss spectroscopy of carbon nanostructures. We use the hydrodynamic model to calculate the image potential for protons moving through four types of SWNTs at the speed of 3 atomic units. The image potential is then combined with the Doyle-Turner atomic potential to obtain the total potential in the bent carbon nanotubes. Based on that potential, we also compute the spatial and angular distributions of protons channeled through the bent carbon nanotubes, and compare the results with the distributions obtained without taking into account the image potential.

Key words:

Dynamic polarization, Proton channeling, Image potential, Carbon Nanotubes, Bent Nanotubes

Scientific area:

Electrical engineering and computer science

Specific scientific area:

Nanoelectronics and photonics

UDK number:

621.3

Садржај

Глава 1	1
Увод.....	1
Глава 2.....	4
Наноцеви и њихове особине	4
2.1 Опште карактеристике	4
2.2 Геометрија наноцеви	7
2.3 Хемијска структура и физичке особине наноцеви	10
2.4 Методе добијања угљеничних наноцеви	13
Глава 3.....	15
Каналисање честица	15
3.1 Основе каналисања наелектрисаних честица.....	15
3.2 Теорије каналисања јона	16
3.3 Дојл-Тарнерова апроксимација	20
Глава 4.....	22
Динамичка поларизација.....	22
4.1 Интеракција са електронима - хидродинамички модел	22
4.2 Једнофлуидни хидродинамички модел (аналитички резултати)	24
4.3 Двофлуидни хидродинамички модел (аналитички резултати)	29
4.4 Проширени двофлуидни хидродинамички модел (аналитички резултати).....	36
4.5 Физичке величине од значаја за каналисање јона	38
4.6 Закривљене наноцеви	45
Глава 5.....	47
Нумерички резултати и дискусија.....	47
5.1 Опште поставке и преглед досадашњих резултата из области	47

5.2 Једнофлуидни и двофлуидни модел: физичке величине, поређење, интеракција јона са наноцеви	50
5.3 Двофлуидни и проширени двофлуидни модел: физичке величине, поређење, интеракција јона са наноцеви	62
5.4 Каналисање јона кроз праве и закривљене наноцеви у двофлуидном и проширеном двофлуидном моделу	77
Глава 6	97
Закључак	97
Библиографија	101
Биографија аутора	107

Глава 1

Увод

Након открића наноцеви [1] јавља се све већи интерес за изучавање интеракције наелектрисаних честица са наноцевима. Наноцеви имају изузетне физичке особине [2-7] те се очекује њихова бројна примена у наноелектроници и производњи полупроводничких компоненти. Демонстрирано је да је једна од могућих примена наноцеви каналисање и усмеравање снопова наелектрисаних честица на начин веома сличан каналисању у кристалима [8-13].

Кретање наелектрисаних честица кроз наноцев доводи до пертурбације наелектрисања на омотачу наноцеви што има за последицу измену електричних карактеристика простора у ком се честице крећу. Оваква пертурбација стања електронског гаса на омотачу наноцеви се назива динамичка поларизација [14-19] и утиче на измену потенцијала електричног поља унутар наноцеви. При каналисању јона (протона) у угљеничним наноцевима ниских ($< 100 \text{ keV}$) и високих ($> 10 \text{ MeV}$) енергија, ефекти динамичке поларизације валентних електрона на омотачу наноцеви се могу занемарити. Са друге стране енергија јона у опсегу $100 \text{ keV} - 10 \text{ MeV}$ ће индуковати јаку динамичку поларизацију валентних електрона што ће као последицу имати појаву индукованог потенцијала значајне вредности у простору кретања каналисаних честица, односно појаву силе лика као и значајних губитака енергије каналисаних честица због екситације валентних електрона. Динамичка поларизација је квалитативно и квантитативно описана дводимензионим линеаризованим хидродинамичким моделима који су показали добре резултате у експериментима са графеном, те се примењују и у случају наноцеви како би се помоћу њих теоријски анализирали услови каналисања наелектрисаних честица кроз наноцеви. У овој дисертацији се обрађују три таква хидродинамичка модела: једнофлуидни, двофлуидни и проширени двофлуидни модел. Показано је да сила лика, која утиче на трансверзално кретање снопова наелектрисаних честица у случају једнофлуидног хидродинамичког модела, у знатној мери утиче на угаону дистрибуцију протона каналисаних кроз кратке (11,9) једнослојне угљеничне наноцеви у вакуму [14]. У оквиру једнофлуидног модела се сматра да је структура електронског облака на зидовима

наноцеви униформна. У оквиру двофлуидног хидродинамичког модела одвојено се третирају σ и π електрони у оквиру угљеничних веза наноцеви и укупна ексцитација плазмона (електронског гаса) се посматра у склопу ексцитације $\sigma + \pi$ плазмона високе енергије и ексцитације π плазмона ниске енергије. Као последица постојања ова два ексцитациона мода, јавља се и разлика у зауставној сили (утиче на лонгитудинално кретање каналисаних протона) и потенцијалу лика у односу на једнофлуидни модел. Ова разлика се детаљно анализира у овом раду и то за случај четири различита типа угљеничних наноцеви. Надградња двофлуидног хидродинамичког модела је проширени двофлуидни хидродинамички модел, где се за разлику од претходна два модела где је стање електронског гаса анализирано класичним физичким приступом, у овом случају користи квантномеханички приступ, где се резултати ове анализе уз извесне физичке интерпретације своде на класични приступ. Наиме уводе се коначне (ненултне) повратне фреквенце [19] као и коначни фактори пригушења σ и π електрона чије су вредности емпиријски одређене EEL (engl: electron energy loss) спектроскопијом. У склопу ових модификација двофлуидног модела, обичан двофлуидни модел можемо посматрати као варијанту проширеног двофлуидног модела где повратне фреквенце и факторе пригушења узимамо са нултом вредности. У овом раду се такође анализира разлика у условима каналисања (потенцијал лика, зауставна сила) за двофлуидни и проширени двофлуидни модел за више врста угљеничних наноцеви.

У експерименталним условима каналисања наелектрисаних честица, поставља се питање колико је тачна претпоставка о идеално правим наноцевима. У пракси (након добијања) наноцеви готово никад нису праве, то јест једино изванштан проценат добијених наноцеви се може сматрати идеалним у смислу геометријских карактеристика. Тако да је оправдано спровести теоријску анализу за случајеве разних деформитета наноцеви и предвидети ефекте на каналисање наелектрисаних честица. Постоји неколико анализа каналисања честица кроз закривљене наноцеви, међутим у овим анализама се не узима у обзир динамичка поларизација и не урачунавају ефекти које изазива потенцијал лика на кретање каналисаних честица. У овом раду се врши управо таква анализа, где се осим интеракције каналисаних честица са језгрима атома угљеника урачунава и интеракција са електронима на омотачу наноцеви. Потенцијал лика у простору наноцеви се рачуна на основу проширеног двофлуидног хидродинамичког модела, где се σ и π електрони третирају као посебни флуиди са одговарајућим повратним фреквенцама и факторима пригушења. Каналисање протона се анализира програмским симулацијама у оквиру Монте Карло методе где се кретање честица у оквиру протонских снопова анализира математичким апаратом класичне механике. Усвојена је брзина кретања честица од $v=3$ а.у. док се процес каналисања спроводи кроз четири типа закривљених наноцеви SWNT (6, 4), SWNT(8, 6), SWNT(11, 9) и SWNT(15, 10). Испитује се утицај динамичке поларизације на каналисање наелектрисаних честица анализом просторне и угаоне расподеле честица на излазу наноцеви.

За све поменуте хидродинамичке моделе којима се моделује динамичка поларизација у раду се спроводи аналитичко извођење, а касније и нумеричко израчунавање физичких величина које су од значаја за каналисање честица.

Глава 2

Наноцеви и њихове особине

У овој глави се износе елементарне информације у вези угљеничних наноцеви. Описује се структура наноцеви са геометријског аспекта и разматрају хемијски аспекти који одређују формирање угљеничних веза. Разматрају се типови наноцеви као и основне физичке и електричне особине наведених типова, као и услови под којима се ове особине манифестују. На крају се анализирају методи добијања наноцеви у пракси.

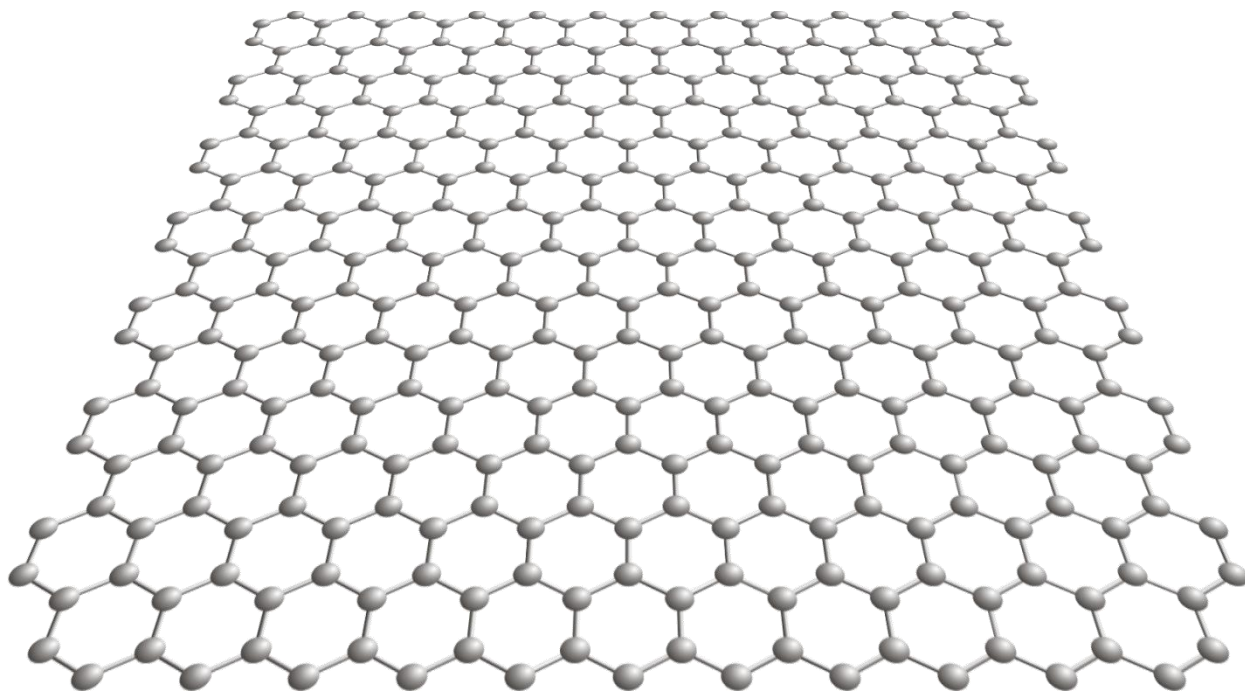
2.1 Опште карактеристике

Почетак изучавања угљеничних наноцеви везује се за 1991. годину. Открио их је јапански научник Сумио Ијима (Sumio Iijima) [1]. Угљеничне наноцеви су цилиндричне структуре састављене само од угљеникових атома који су на одговарајући начин увезани у карактеристичну структуру. Пречник цилиндара наноцеви је реда величине нанометра (одакле и потиче назив), док дужина може бити различита, од десетог дела микрометра до неколико стотина микрометара.

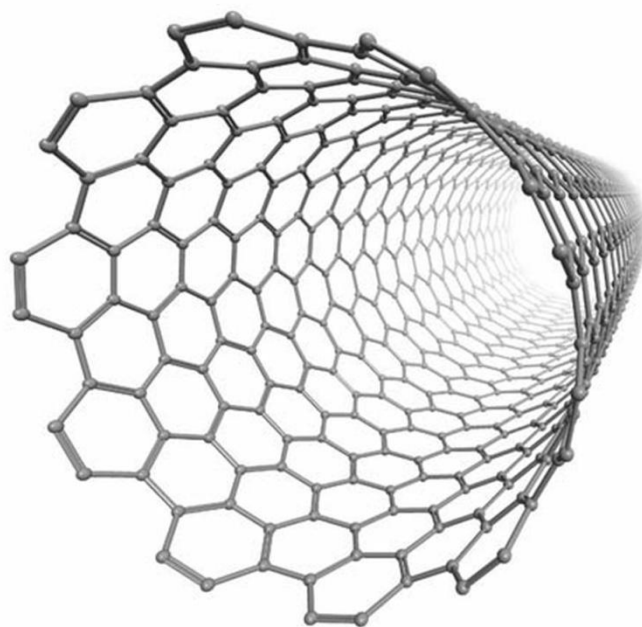
За разумевање геометријске структуре наноцеви може се поћи од структуре графена. Графен је планарна структура састављена од угљеникових атома повезаних на одговарајући начин у оквиру равни. Приказ графена је дат на **слици 2.1**. У основи графенске равни се налази правилна хексагонална структура састављена од угљеникових атома у теменима. Димензије хексагона, односно дужина странице, су одређене дужином везе између угљеникових атома. Дебљина графена износи тачно један угљеников атом.

Умотавањем графенске равни дуж одговарајућег правца у правилну цилиндричну структуру (попречни пресек цилиндра је круг) добија се наноцев. Овакве наноцеви, добијене од једнослојних графенских равни називају се једнослојне угљеничне наноцеви, скраћено ЈСНЦ или SWCNT (engl. single wall carbon nanotube), односно како се овде

подразумева да се ради о угљеничним наноцевима користиће се и скраћеница SWNT (engl. single wall nanotube).



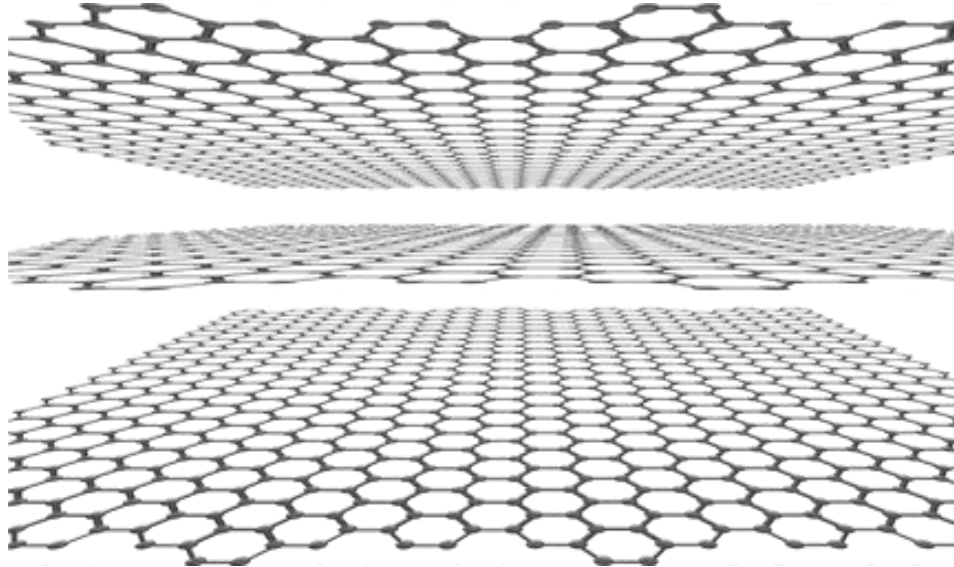
Слика 2.1. Графенска равна, састављена из правилних хексагона у чијим теменима се налазе угљеникови атоми.



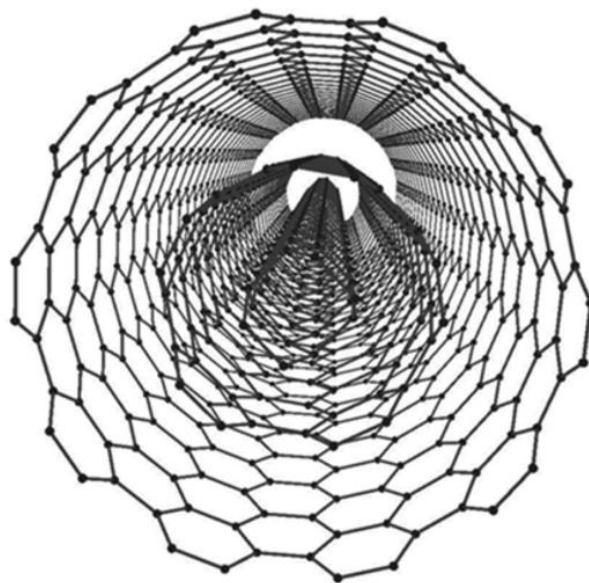
Слика 2.2. Једнослојна угљенична наноцев добијена „умотавањем“ графенске равни.

Термин „умотавање“ овде треба схватити фигуративно јер се односи само на илустрацију геометрије наноцеви а не и на начин њиховог добијања, који у основи нема везе са структуром графена. Приказ једнослојне угљеничне наноцеви је дат на **слици 2.2**.

Поред једнослојних наноцеви постоје и вишеслојне наноцеви које се могу посматрати као цилиндричне структуре чије попречне пресеке чине концентрични кругови. У геометријском смислу овакве структуре се могу добити умотавањем мултипланарних графенских равни (**слика 2.3**).



Слика 2.3. Мултипланарна графенска структура.



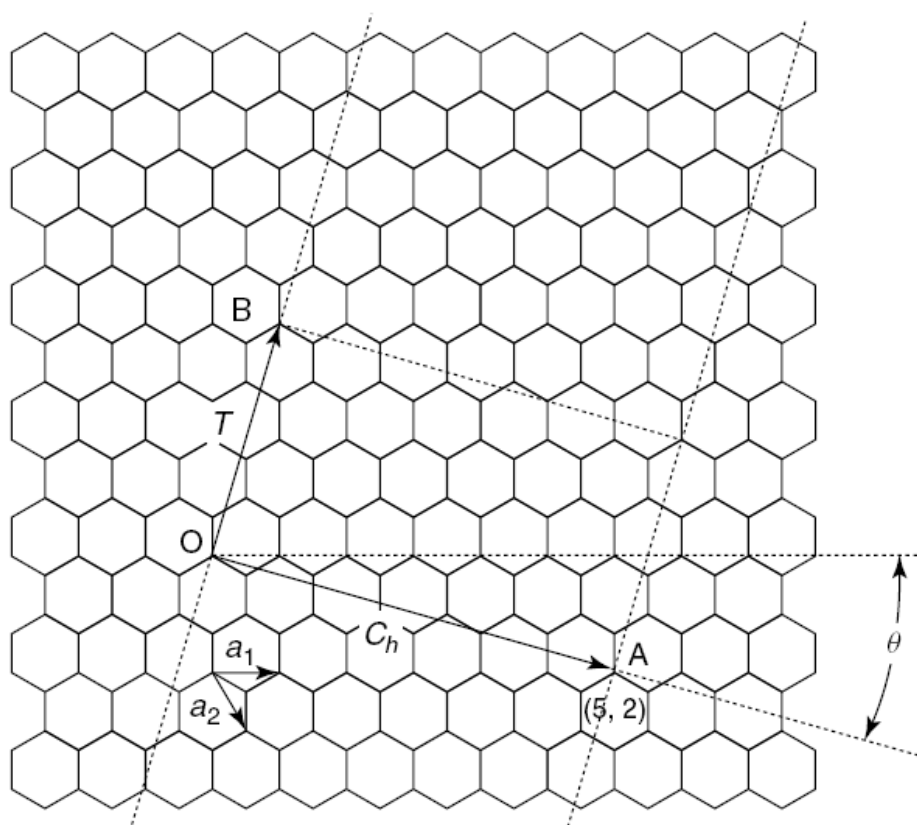
Слика 2.4. Вишеслојна угљенична наноцев (MWCNT).

Један пример вишеслојних цилиндричних угљеничних наноцеви је приказан на **слици 2.4**. У питању је трослојна цилиндрична наноцев, скраћено MWCNT (engl. multi wall carbon nanotube) или MWNT (engl. multi wall nanotube). У овом раду се анализирају искључиво једнослојне наноцеви.

2.2 Геометрија наноцеви

Правац умотавања графенске равни одређује геометрију наноцеви, односно оријентацију хексагоналних јединица што у највећој мери даље утиче на физичке особине наноцеви.

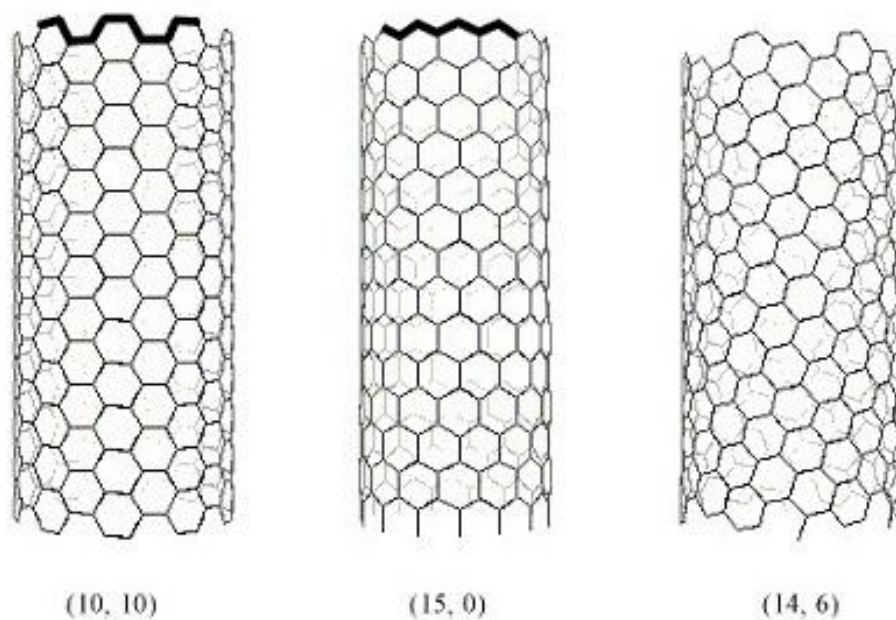
На **слици 2.5** су приказани елементи који одређују геометријску структуру наноцеви. Вектори \vec{a}_1 и \vec{a}_2 примитивне ћелије дефинишу базу где се линеарном комбинацијом ова два вектора добија хирални (engl: chiral) вектор \vec{C}_h у чијем правцу се врши „умотавање“ наноцеви. Хирални вектор је дефинисан као $\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$.



Слика 2.5. Дефинисање хиралног вектора помоћу вектора базиса примитивне ћелије хексагоналне решетке [3].

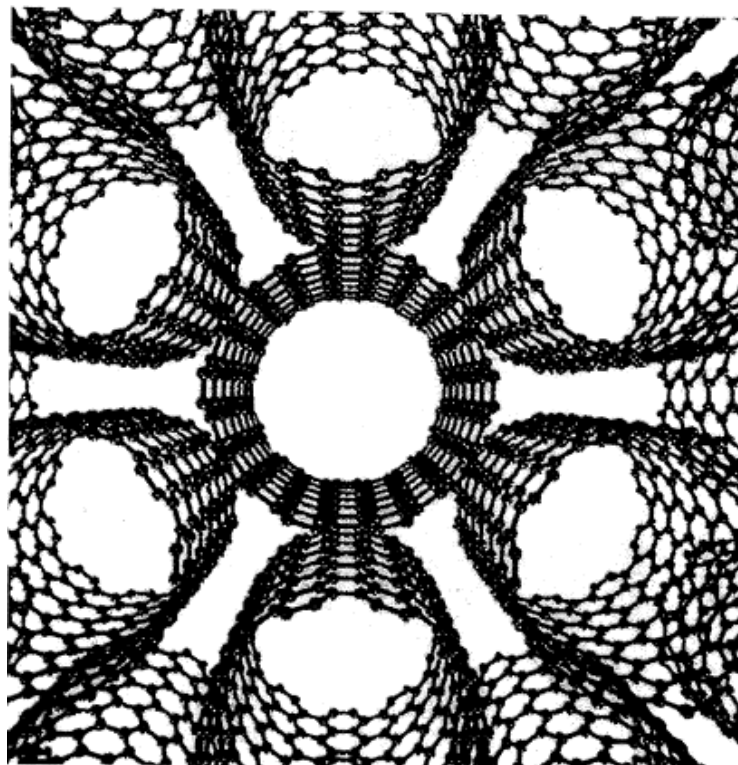
Пар целих бројева (n, m) карактерише наноцев. Сви типови наноцеви анализирани у наставку биће означени искључиво преко ова два броја (рецимо наноцев типа SWNT (6, 4), код које је $\vec{C}_h = 6\vec{a}_1 + 4\vec{a}_2$). Интензитет хиралног вектора одређује обим наноцеви и дат је као $|\vec{C}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + mn}$, где је a дужина странице елементарне хексагоналне ћелије и представља у суштини дужину C-C везе.

За бројеве n, m важи следећа зависност, $0 \leq |m| \leq n$. У односу на вредности ова два броја наноцеви могу бити хиралне и ахиралне. Код хиралних наноцеви атомски низови од којих је састављена наноцев су спирале око осе наноцеви, код ахиралних наноцеви атомски низови су паралелни међусобно у односу на осу наноцеви. Рецимо наноцеви (n, n) и $(n, 0)$ су ахиралне. Примери ахиралних и хиралних наноцеви су приказани на **слици 2.6**. Прве две наноцеви су ахиралне типа $(10, 10)$ (тзв. фотелџаст, engl. armchair) и $(15, 0)$ (тзв. цик-цак, engl. zigzag), док је последња хирална типа $(14, 6)$.

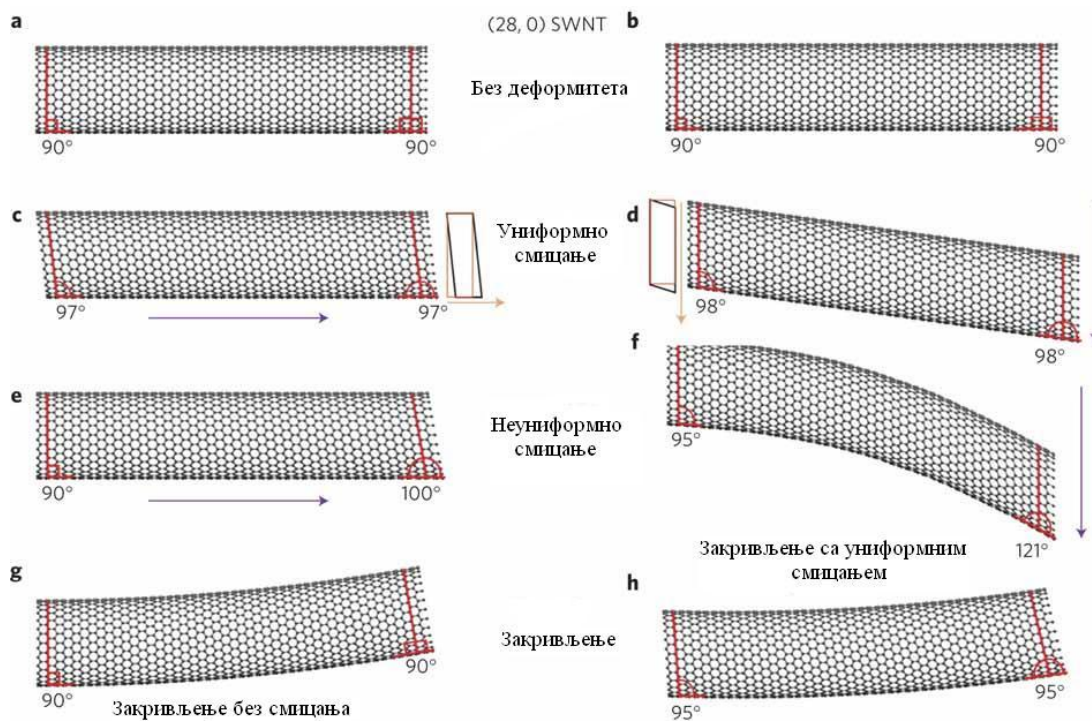


Слика 2.6. Примери ахиралних и хиралних наноцеви. Наноцеви $(10, 10)$ и $(15, 0)$ су хиралне, наноцев $(14, 6)$ је ахирална.

Наноцеви могу бити груписане у снопове (више паралелних наноцеви) које се међусобно држе Ван Дер Валсовим силама. Приказ једног таквог снопа $(10, 10)$ цеви је приказан на **слици 2.7**. У пракси паралелност између појединачних наноцеви у снопу није идеална, већ постоје незнатна одступања. У овом раду се анализирају искључиво појединачне наноцеви.

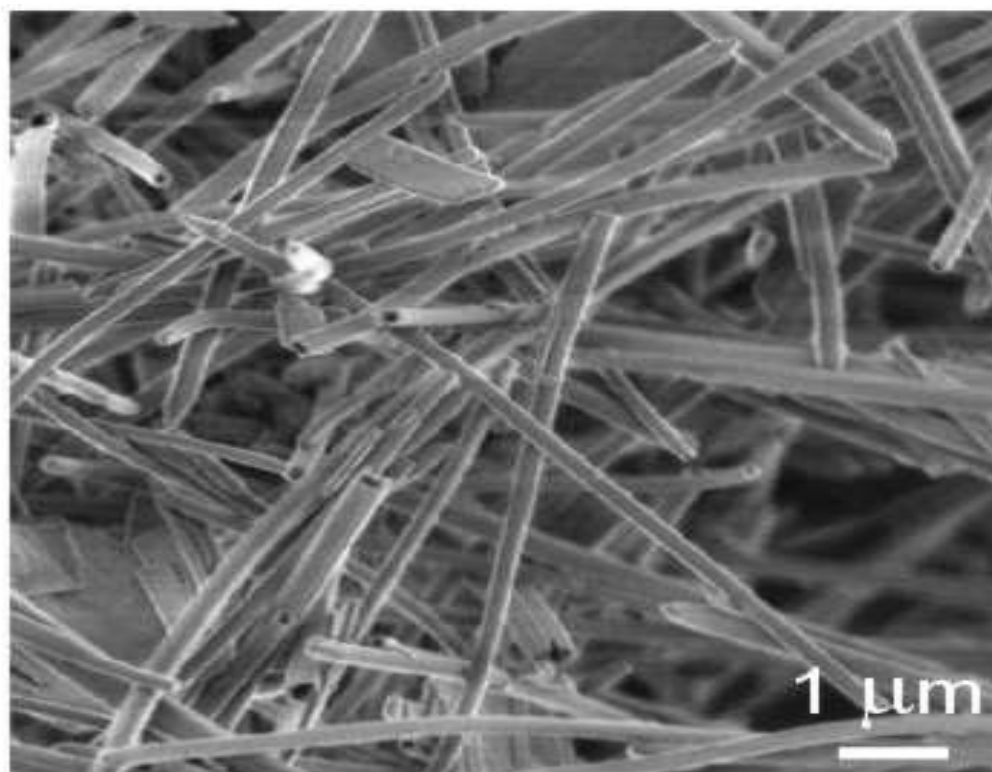


Слика 2.7. Сноп (10, 10) наноцеви [2].



Слика 2.8. Неки од могућих типова деформитета наноцеви за тип ахиралне (28, 0) наноцеви.

Наноцеви које се добијају у пракси могу у извесној мери одступати од правилног облика (правилан цилиндар). На **слици 2.8** су приказани неки од могућих деформитета наноцеви. У овом раду се анализирају праве и благо закривљене наноцеви, при чему се анализира само један тип закривљења, тип „g“ на **слици 2.8**. Центар кривине овог типа наноцеви се налази далеко ван наноцеви, при чему су углови закривљења реда $m\text{rad}$. На **слици 2.9** су приказане наноцеви у реалности, снимљене електронским микроскопом, где се могу уочити извесна одступања у односу на усвојени модел правих структура.

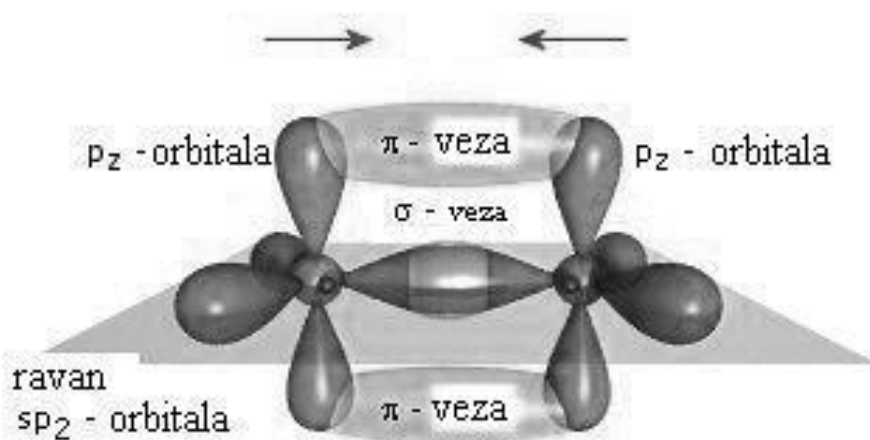


Слика 2.9. Снимак наноцеви добијен електронским микроскопом [3].

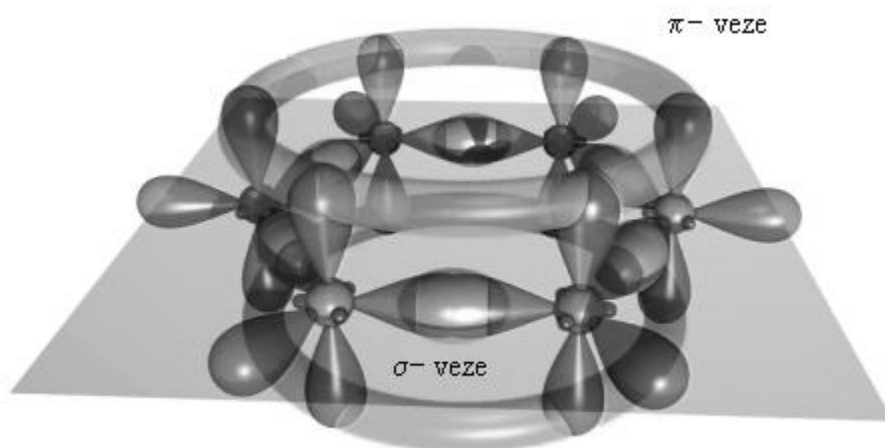
2.3 Хемијска структура и физичке особине наноцеви

Наноцеви које се анализирају у овом раду се састоје искључиво од угљеникових атома увезаних помоћу одговарајућих хемијских веза. Суседни атоми угљеника у оквиру индивидуалних и суседних хексагоналних елементарних ћелија се међусобно повезују јаким ковалентним везама (атоми деле парове електрона). Атоми угљеника имају четири валентна електрона (један $2s$ електрон прелази у побуђено p стање што даје четири неспарена електрона). Један $2s$ електрон заједно са $2p$ електронима (из x и y равни) гради

три хибридне sp^2 орбитале у равни под међусобним угловима од 120° , четврти валентни електрон остаје у p_z орбитали како је то приказано на **слици 2.10**. Електрони у оквиру sp^2 орбитала суседних угљеникових атома у оквиру хексагоналне решетке формирају јаке ковалентне σ везе, док електрони нормалних p_z орбитала формирају слабе π везе које су одговорне и за слабу Ван Дер Валсову интеракцију између суседних наноцеви у сноповима наноцеви [2]. Формирање поменутих веза је илустровано на **слици 2.11**.



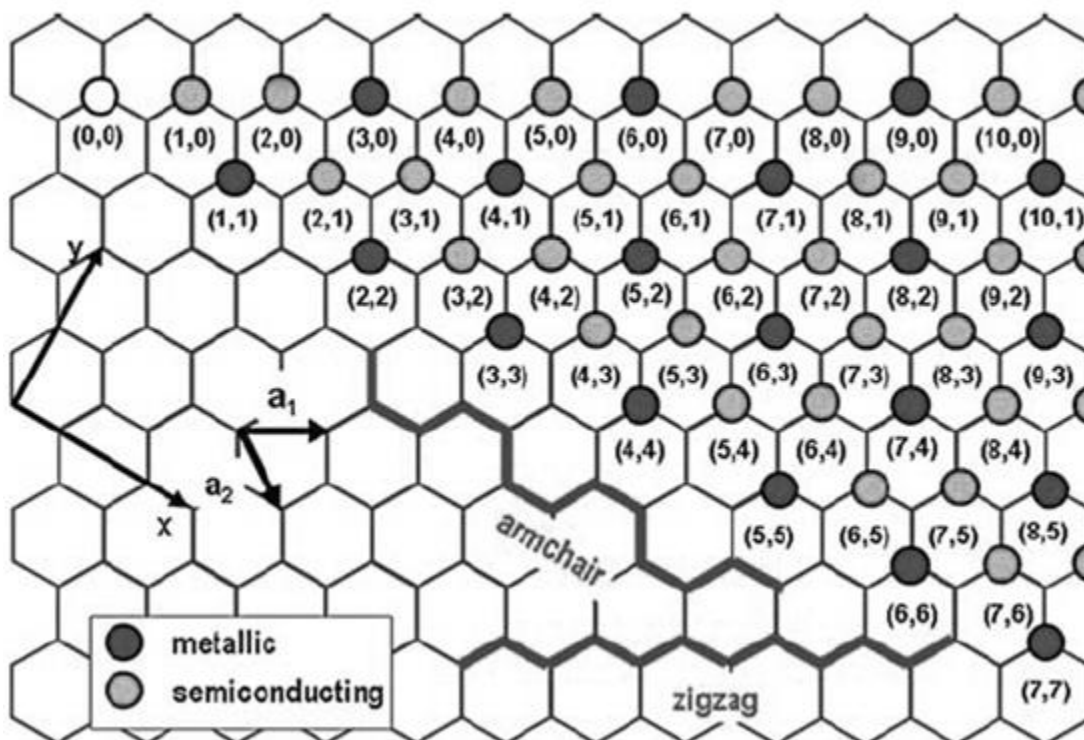
Слика 2.10. sp^2 хибридизација у оквиру угљениковог атома.



Слика 2.11. Повезивање угљеникових атома у оквиру хексагоналне ћелије σ и π везама.

Обзиром на јаке σ везе хибридних sp^2 орбитала, нанотрубице имају изузетне механичке особине. Њихова чврстоћа је око сто пута већа него код челика, (Јунгов модул еластичности је реда 1 ТПа [3]). Дијамант и графит као материјали базирани на угљенику имају највећу термалну проводљивост, што је такође последица јаких С-С веза као и мале масе угљеникових атома. С тим у вези очекује се да и угљеничне нанотрубице имају добру термалну проводљивост, мада је она доста повезана са конкретном структуром нанотрубице (оријентација атомских низова и величина нанотрубице). У експериментима са снопом MWNT дијаметра 14 nm и укупног дијаметра снопа 80 и 200 nm, термална проводност изолованог снопа је износила преко 3000 W(mK)^{-1} на собној температури [3].

У погледу електропроводљивости нанотрубице се могу понашати и као проводници и као полупроводници [4]. Испољавање одређене кондукционе особине зависи од геометрије нанотрубице и одређено је бројевима n, m који карактеришу нанотрубицу. Ако је $n - m$ дељиво са 3, то јест важи $n - m = 3 \cdot k$ ($k \in \mathbb{Z}$) тада се нанотрубица понаша као метал, у супротном се понаша као полупроводник. На слици 2.12 су приказане могуће варијанте у погледу проводљивости за разне типове нанотрубице. Тамнијом нијансом су означени случајеви проводних нанотрубица, светлијом непроводних.

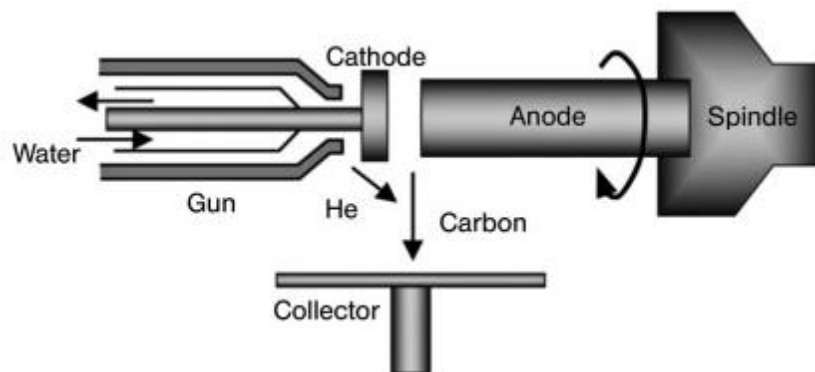


Слика 2.12. Зависност проводљивости нанотрубице од геометрије [4].

2.4 Методе добијања угљеничних наноцеви

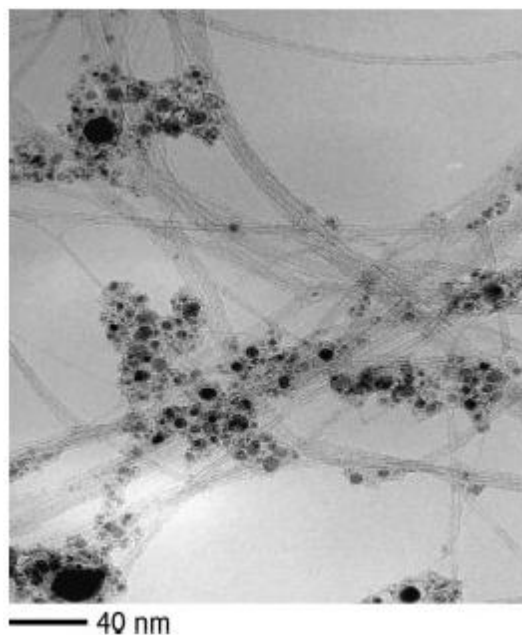
Наноцеви се у пракси добијају на неколико различитих начина. Најзаступљеније су методе помоћу електричног лука, ласерске аблације и хемијске депозиције из паре [5].

У оквиру методе уз помоћ електричног лука, превођење угљеника из чврстог стања графита у гасовито се постиже електричним пражњењем. Ова метода је најједноставнија и најјефтинија. Електрично пражњење између две угљеничне електроде у окружењу инертног гаса (хелијума или аргона) се изазива електричним (d.c.) луком. Висока температура пражњења изазива превођење атома угљеника са аноде у стање плазме. Угљенична пара се затим кондензује и депонује на катоди у форми наноцеви и наночестица. Конвенционално електрично пражњење генерално формира нестабилну плазму због нехомогеног електричног поља и прекида струје, па се користи техника ротирајуће графитне аноде како је приказано на **слици 2.13** [5].



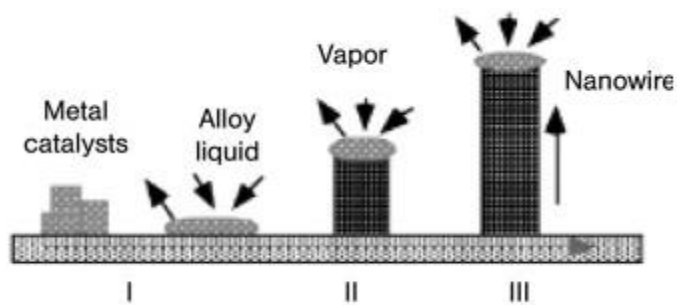
Слика 2.13. Добијање наноцеви методом електролучног пражњења у атмосфери инертног гаса [5].

Приликом ласерске аблације угљенична пара се формира уз помоћ ласера високе енергије. Предност ове методе је у већој могућности контроле процеса генерисања наноцеви, једноставности извођења процеса као и већем квалитету производа. Недостатак је висока цена и низак принос генерисаних наноцеви. У оквиру овог процеса графитна мета се лоцира унутар кварцне цеви која се налази у пећи на температури 1200°C . Окружење је као у претходном случају неки инертни гас. Графитна мета се излаже ласеру неко време, што доводи до формирања угљеничне паре високе температуре која се затим помоћу тока гаса усмерава на конусни бакарни колектор лоциран на крају пећи. На **слици 2.14** су приказани производи у процесу депозиције угљеничне паре.



Слика 2.14. Наноцеви добијене ласерском аблацијом, снимљене трансмисионим електронским микроскопом [5].

Метода хемијске депозиције се заснива на хемијској реакцији испарљивих гасовитих реактанта на загрејаној површини што резултује депозицијом чврстог продукта (наноцеви) на супстрату. Постоји неколико врста хемијске депозиције у зависности од начина на који се врши стимулација хемијских реакција на супстрату. Принцип овог метода је приказан на **слици 2.15**. На местима катализатора на супстрату долази до формирања наноцеви.



Слика 2.15. Метод хемијске депозиције у процесу добијања наноцеви [5].

Глава 3

Каналисање честица

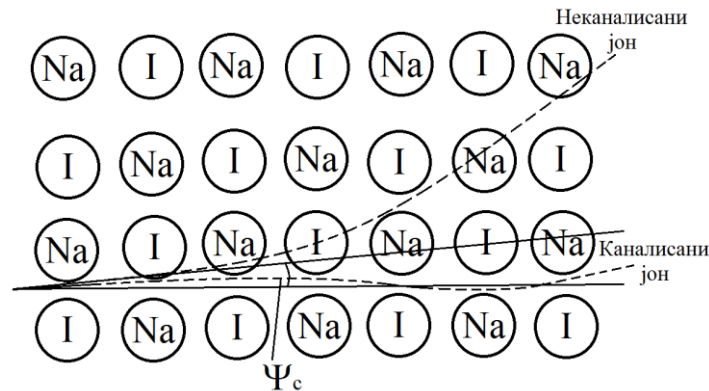
У овој глави су изложене елементарне ставке везане за кретање наелектрисаних честица у области кристала. Разматране су постојеће теорије о каналисању јона помоћу механизма класичне механике, обзиром да је брзина јона који се у овом раду анализирају у процесу каналисања довољно велика да квантни ефекти не долазе до изражаја. Примењена је континуална апроксимација за потенцијал који потиче од језгара атома угљеника и усвојен Дојл-Тарнеров потенцијал за нумеричко израчунавање у даљој математичкој анализи каналисања јона у угљеничним наноцевима.

3.1 Основе каналисања наелектрисаних честица

Каналисање честица представља њихово кретање у простору кристала. Посматрају се позитивно наелектрисане честице, односно јони. Правац кретања јона се може окарактерисати као лонгитудиналан, док је правац нормалан кретању јона трансверзалан. Правац кретања јона се може поклапати са главним кристалографским правцима, у том случају је корисно приметити да постоје низови атома који имају исте позиције у трансверзалној равни. Простор између два суседна низа атома у којима се налази јон приликом кретања се назива каналом. Канал који се може дефинисати у равни коју чине два паралелна атомска низа се назива аксијални канал, док канал који се дефинише у простору између паралелних равни којима припадају суседни атомски низови између којих се креће јон, се назива планарни канал.

Приликом усмеравања јона на област кристала, сматра се да је упадни угао (угао вектора брзине јона и главне осе кристала) мали, те да се јон практично креће у аксијалном каналу. Сматра се да јони имају значајне енергије, и да приликом кретања кроз област кристала долази до интеракције са атомима решетке, односно судара. Приликом

ових интеракција долази до размене електрона између јона и атома решетке, односно ексцитације и јона и атома. Обзиром на начин кретања јона кроз кристал, може се узети да је интеракција јона са атомима кристала сведена на интеракцију са атомским низовима који су у правцу одговарајуће кристалографске осе. Обзиром на корелисан распоред атома у атомским низовима са којима јон интерагује, може се узети да се интеракција јона са атомским низом своди на низ корелисаних судара са појединачним атомима низа. Овде под сударом подразумевамо интеракцију јона са атомом, при чему обзиром на правац кретања јона (практично паралелан са атомским низом), не долази до значајне промене начина (правца) кретања јона, то јест расејање јона на атомима у низу није велико. Оваквом интеракцијом јона са атомима суседних низова у чијем простору се јон креће, долази до наизменичне промене смера кретања у трансверзалном правцу, док се јон и даље задржава у простору аксијалног канала. Овакво кретање јона се назива још и аксијано каналисање [6]. Слика 3.1 приказује кретање аксијално каналисаног јона и неканалисаног јона у NaI кристалу.



Слика 3.1. Аксијално каналисање јона.

Осим овог начина кретања јона, постоји и могућност осцилаторног кретања у простору између равни нормалних на равански канал, што се дешава када постоји компонента брзине јона у том правцу. Овакво каналисање се назива планарно каналисање [7].

3.2 Теорије каналисања јона

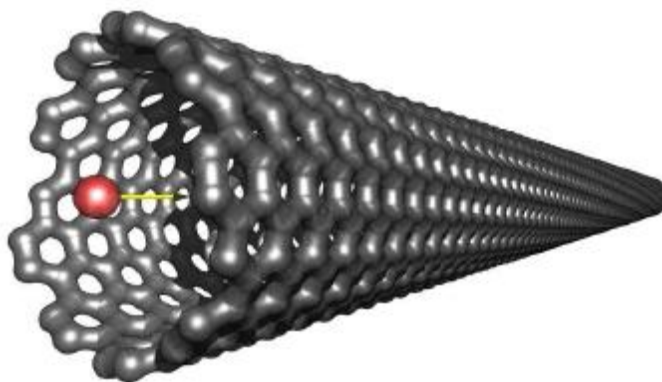
Постоје бројне теорије каналисања јона у кристалима. Једну од првих је поставио Линдхард 1965 [8]. У оквиру своје теорије, Линдхард је увео тзв. аксијалне и планарне континуалне моделе на чему се базирају сва каснија теоријска разматрања каналисања јона. Ови модели се заснивају на континуалној апроксимацији потенцијала добијеног усредњавањем потенцијала у оквиру простора атомских низова (аксијално каналисање)

или атомских равни (планарно каналисање). У овој теорији користи се аналитички приступ уз помоћ метода статистичке механике. Да би континуална апроксимација довољно добро описала кретање каналисаног јона, потребно је да упадни угао јона у односу на правац атомског низа буде мањи од критичног угла Ψ_c који је дат изразом [8]:

$$\Psi < \Psi_c = \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{Ed} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.1)$$

где су Z_1 и Z_2 атомски бројеви јона односно атома кристала, e је наелектрисање електрона, E је енергија јона, а d је растојање између атома атомског низа.

У овом раду разматрамо кретање јона у простору наноцеви како је то шематски приказано на **слици 3.2**.



Слика 3.2. Кретање јона у простору наноцеви (каналисање кроз наноцев) [14].

Обзиром на раније објашњену структуру наноцеви, можемо закључити да ће се интеракција јона са атомима наноцеви манифестовати на сличан начин као и приликом каналисања јона кроз кристал, обзиром да у овом случају такође имамо атомске низове који су сада распоређени по кругу. Модел интеракције који ће овде бити примењен заснован је управо на горе поменутих моделима каналисања јона кроз кристал. Полази се од бинарног модела јон-атом интеракције, при чему се сматра да је упадни угао јона у односу на атомске низове наноцеви довољно мали тако да се може применити континуална апроксимација за потенцијал који потиче од атома угљеника који чине наноцев.

Приликом одређивања потенцијала за интеракцију јон-атом постоји неколико фактора који утичу на сложеност израчунавања. Термалне вибрације атома угљеника у

решеткама утичу на то да су положаји атома практично неодређени, што знатно отежава приступ, такође кретање електрона у оквиру атома угљеника утиче на екранирање језгра. У превазилажењу поменутих тешкоћа усвајају се оправдане апроксимације које знатно олакшавају израчунавање потенцијала интеракције јон-атом. Обзиром на много већу брзину орбитирања електрона у атому угљеника од брзине кретања јона и времена интеракције са појединачним атомима, усваја се константа екранирања која добро одсликава утицај електрона на интеракцију језгро-јон. Обзиром на релативно споре термалне вибрације у односу на брзину кретања јона, као и време интеракције јон-атом, занемарује се померање атома у току интеракције, и приликом рачунања континуалног потенцијала врши се усредњавање положаја атома угљеника тако да јон атоме угљеника види као непокретне.

Функција континуалног потенцијала која потиче од атомског низа на основу свих претходних разматрања се може написати у форми:

$$V_R(\rho) = (1/d_R) \int_{-\infty}^{+\infty} u(\sqrt{\rho^2 + z^2}) dz, \quad (3.2)$$

где је $u(r_a)$ атомски потенцијал (потенцијал који потиче од појединачног атома угљеника), r_a је удаљеност од атомског језгра, ρ је растојање од центра круга на попречном пресеку наноцеви (радијална координата), z је координата дуж осе наноцеви (аксијална координата), а d_R је растојање суседних атома у оквиру атомског низа [9]. Дакле, усвојен је цилиндрични координатни систем, где се основно кретање јона дешава паралелно са z осом, док такође може постојати кретање дуж радијалне осе. Такође се сматра да је наноцев много дужа у односу на полупречник, тако да се интеграција у **изразу 3.2** врши у границама од $-\infty$ до $+\infty$. Ова функција потенцијала у односу на претходна разматрања би била аксијалног типа.

Било која наноцев типа (n, m) се може представити као колекција $2N$ атомских низова паралелних са осом наноцеви лоцираних по кругу на еквилистантним угловним растојањима. На основу овог разматрања укупни континуални потенцијал у светлу структуре наноцеви као уролане графенске равни се може окарактерисати као аксијални и представити у форми:

$$U(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{d_R}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{i=1}^{2N} u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, z - z_i) dz, \quad (3.3)$$

где је $u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, z - z_i)$ потенцијал i -тог угљениковог атома са координатама (\mathbf{r}_i, z_i) .

У **изразу 3.3**, N се може израчунати као:

$$N = (2/q)(n^2 + m^2 + mn), \quad (3.4)$$

где је $q = NZD(2m + n, 2n + m)$ цео број и представља највећи заједнички делилац наведених аргумената. Као што је већ напоменуто d_R је растојање суседних атома у оквиру атомског низа и за случај наноцеви важи:

$$d_R = (3l/q)\sqrt{(n^2 + m^2 + mn)}. \quad (3.5)$$

У претходном изразу l представља дужину везе С-С атома у хексагоналној решетци, и износи 0.14 nm. У усвојеном цилиндричном координатном систему уводимо и азимутну координату φ . Положаји парова атомских низова који леже у равни, дијаметрално супротно један од другог су дати као:

$$\varphi_k = k\delta\varphi, \delta\varphi = (\pi q)/(n^2 + m^2 + mn), (k=0, 1, 2, \dots, N-1). \quad (3.6)$$

Обзиром на еквидистантно азимутно растојање између парова атомских низова, може се закључити да ће функција континуалног потенцијала бити периодична у односу на азимутну координату φ са периодом $\varphi_p = 2\pi/N$. Да би се лакше извршило сумирање у **изразу 3.3**, функцију континуалног потенцијала од индивидуалних атомских низова можемо написати у форми Фуријеовог реда по азимутној координати φ

$$V_R = \sum_{v=-\infty}^{\infty} V_v(r)e^{iv\varphi}. \quad (3.7)$$

У претходном изразу r је растојање од осе наноцеви а φ азимутна координата рачуната у односу на један (почетни) атомски низ. У наставку се израз за укупни континуални потенцијал може написати у форми **[10]**:

$$U(r, \varphi) = 2N \left\{ V_0(r) + 2 \sum_{s=1}^{\infty} V_{sN}(r) \cos[\pi s(n+m)/q] \cos[sN\varphi - \pi s(n+m)/q] \right\}. \quad (3.8)$$

У овом изразу фигуришу коефицијенти $V_{sN}(r)$ који су функције радијалне координате r и који у крајњем случају одређују конкретну форму функције континуалног потенцијала. У зависности од избора ових коефицијената разликују се разне апроксимације за интеракцију језгро-јон. Највише коришћене апроксимације у овом моделу интеракције су Молијерова (Moliere) апроксимација **[11]** и Дојл-Гарнерова апроксимација **[12]**.

3.3 Дојл-Тарнерова апроксимација

У раду ће се у свим израчунавањима за интеракцију језгро-јон користити искључиво Дојл-Тарнерова апроксимација, тако да ће она бити детаљно описана. Ова апроксимација полази од израза за представу трансформисаног потенцијала Фуријеовом трансформацијом $f(\mathbf{k})$:

$$f(\mathbf{k}) = 4\pi Z e \sum_{j=1}^4 a_j e^{-\mathbf{k}^2/(4b_j^2)}. \quad (3.9)$$

Овде су a_j и b_j димензиони параметри одабрани тако да се остваре најбоља слагања са табличним вредностима у [13]. Вредности ових параметара износе:

$$a_j = \{3.222, 5.270, 2.012, 0.5499\} \times 10^{-4} \text{ nm}^2,$$

$$b_j = \{10.330, 18.694, 37.456, 106.88\} \text{ nm}^{-1}.$$

Користећи се **изразом 3.9** вредности коефицијената у Фуријеовој суми у **изразу 3.8** постају [9]:

$$V_s(r) = \left(\frac{4Ze^2}{d_R} \right) \sum_{j=1}^4 a_j b_j^2 e^{-b_j^2(r^2+R^2)} I_s(2b_j^2 Rr). \quad (3.10)$$

Овде је I_s је модификована Беселова функција прве врсте реда s , Z је атомски број угљеника, а e вредност елементарног наелектрисања, R је радијус наноцеви (полупречник круга попречног пресека). Нулти азимутни хармоник у **изразу 3.8** одговара усредњеном континуалном потенцијалу по азимутном углу φ . Преостали хармоници представљају азимутну модулацију функције потенцијала. Како број атомских нивоа расте, учестаност модулације се повећава, а истовремено амплитуда тих компонената опада. Порастом броја атомских нивоа растојање између њих се смањује, па и варијација потенцијала у азимутном простору између два суседна атомска низа опада. Већ за $s \geq 1$ вредности азимутних хармоника (амплитуде) су занемарљиве у односу на нулти хармоник, тако да се остали чланови у **изразу 3.8** практично могу изоставити без великог утицаја на тачност израчунавања функције континуалног потенцијала. Коначно израз за функцију континуалног потенцијала постаје [9]:

$$U(r, \varphi) = \left(\frac{32\pi Z e^2 R}{3^{3/2} l^2} \right) \sum_{j=1}^4 a_j b_j^2 e^{-b_j^2(r^2+R^2)} I_0(2b_j^2 Rr). \quad (3.11)$$

Како је функција потенцијала усредњена по азимутном углу φ , то она више не зависи од тог угла (што показује претходни израз), па се функција континуалног потенцијала може написати у коначној форми [9]:

$$U(r) = \left(\frac{32\pi Z e^2 R}{3^{3/2} l^2} \right) \sum_{j=1}^4 a_j b_j^2 e^{-b_j^2(r^2+R^2)} I_0(2b_j^2 Rr). \quad (3.12)$$

У свим израчунавањима у раду за интеракцију језгро-јон ће се користити **израз 3.12** за континуални потенцијал. Треба напоменути да је ово интеракција упадног јона искључиво са језгрима атома угљеника и да је овај потенцијал репулзивног типа. Електрично поље, које се може израчунати на основу овог потенцијала је радијално, усмерено дуж полупречника наноцеви и оријентисано ка координатном почетку. Сила која путем овог електричног поља, обзиром на наелектрисање јона, делује на њега је одбојног типа (усмерена од зидова наноцеви ка центру), тако да је њена тенденција сажимање (фокусирање) снопа каналисаних јона.

Глава 4

Динамичка поларизација

У претходном поглављу је разматран процес каналисања јона у простору наноцеви и описан механизам интеракције јона са језгрима непокретних атома угљеника у оквиру хексагоналних елементарних ћелија. Поменут је утицај електрона атома угљеника, али само у контексту екранирања језгра и ефективног слабљења јон-језгро интеракције. У овом поглављу се детаљно разматра утицај електрона на кретање јона, односно испитују се карактер и особине јон-електрон интеракције.

4.1 Интеракција са електронима - хидродинамички модел

Приликом разматрања интеракције валентних електрона у саставу атома угљеника са упадним јоном усваја се модел електронског гаса односно плазмона [14]. Сматра се да су електрони распоређени у простору непосредно на зиду наноцеви, у врло танком слоју, тако да се његова „дебљина“ може занемарити те облак електрона посматрамо као дводимензиону структуру (гас) у равни омотача (зида) наноцеви.

Електронски гас се анализира уз помоћ планарног дводимензионог хидродинамичког модела. Овај модел је први пут увео Фетер (Fetter) 1973 [15, 16]. Модел је коришћен за квалитативно разумевање ексцитације плазмона у различитим квази-дводимензионим електронским структурама, укључујући полупроводничке слојеве, квантне јаме и танке металне филмове. Модел подразумева да сви електрони припадају јединственом флуиду описаном са само два параметра, равнотежном површинском густином n_0 и ефективном масом електрона m . Обзиром на једноставност и практичност у превазилажењу компликованих геометријских ограничења, као и важења у присуству диелектричног окружења, једно-флуидна верзија 2Д хидродинамичког модела је нашла

значајну примену у описивању одређеног броја примена са наноцеви и молекула фулерена.

Присуство позитивно наелектрисаног јона у простору наноцеви доводи до пертурбације (ексцитације) стања електронског гаса (плазмона) на зиду наноцеви што као крајњи ефекат има динамичку поларизацију. Динамичком поларизацијом долази до измене електричног поља у простору наноцеви што се може протумачити као резултат формирања лика на омотачу наноцеви услед присуства позитивно наелектрисаног јона (слично као у случају присуства позитивног наелектрисуња изнад металне равни где долази до прерасподеле наелектрисуња равни тако да је резултујуће електрично поље еквивалентно пољу позитивног наелектрисуња и лика).

Дводимензиони хидродинамички модели који ће бити анализирани у наставку, којим се описује стање плазмона, добро описују енергијске губитке услед ексцитације електрона на омотачу и динамичку интеракцију лика са каналисаним јоном.

Основне полазне једначине у поменутиим хидродинамичким моделима су:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot (N\mathbf{V}) = 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V} = -(mN)^{-1}\nabla P - \left(\frac{e}{m}\right)(\mathbf{E} + c^{-1}\mathbf{V} \times \mathbf{B}). \quad (4.2)$$

Израз 4.1 представља једначину континуитета, где су N и \mathbf{V} концентрација и брзина (векторски). **Израз 4.2** представља једначину кретања на основу другог Њутновог закона (такозвана Ојлерова једначина [17, 18]). У **изразу 4.2**, P представља притисак, \mathbf{E} и \mathbf{B} су електрично и магнетно поље.

Третирање валентних електрона угљеника на исти начин у оквиру јединствене структуре електронског гаса занемарује разлике у везивању електрона у оквиру угљеничних веза што резултује мањом тачности модела [19]. У поглављу 2 је детаљно описана хемијска структура угљеничних наноцеви уз анализу механизма успостављања веза између угљеникових атома. Речено је да три валентна електрона учествују у формирању јаких σ веза у оквиру sp^2 хибридизације док један електрон учествује у формирању слабе π везе. У контексту ове анализе усвајамо три хидродинамичка модела којима описујемо електроне на омотачу наноцеви и помоћу тих модела и интеракцију каналисаног јона са електронима:

- Једнофлуидни хидродинамички модел
- Двофлуидни хидродинамички модел
- Проширени двофлуидни хидродинамички модел

За сваки од наведених модела у наставку ће бити изнесена теоријска анализа уз детаљна математичка извођења физичких величина које карактеришу јон-електрон интеракцију.

4.2 Једнофлуидни хидродинамички модел (аналитички резултати)

Једнофлуидни хидродинамички модел полази од претпоставке да сви валентни електрони зида наноцеви припадају хомогеној структури електронског гаса без обзира на тип везе у којем учествују. У овом моделу се дакле не прави разлика између σ и π електрона, већ се сви електрони посматрају на исти начин.

У свим изразима који следе користимо атомске јединице (*a.u.*) [20]. Ово је систем јединица у коме је Bohr-ов радијус, a_0 , јединица дужине, маса електрона, m_e , јединица масе, елементарно наелектрисање, e , јединица наелектрисања и редукована Planck-ова константа, \hbar , јединица ангуларног момента [21]. Такође, у атомским јединицама узима се да је константа Coulomb-овог закона једнака јединици, односно $1/4\pi\epsilon_0 = 1$, што значи да је $1/\epsilon_0 = 4\pi$.

Посматрамо једнослојну угљеничну наноцев као бесконачно танак цилиндар полупречника R [22]. Сматрамо да се валентни електрони могу описати као дводимензиони гас слободних електрона, равномерно распоређен дуж цилиндричне површине, површинске бројне густине $n_0 = 0.428$.

Користимо цилиндрични координатни систем, $\vec{r} = (\rho, \varphi, z)$, при чему наноцев усмеравамо дуж z -осе. Посматрамо јон наелектрисања Q који се креће брзином v унутар наноцеви, паралелно њеној оси на растојању $\rho = \rho_0$ од ње. Тренутни положај јона у било ком тренутку времена одређен је вектором положаја $\vec{r}_0(t) = (\rho = \rho_0, \varphi = 0, z = vt)$.

Присуство наелектрисаног јона доводи до пертурбације хомогеног електронског гаса који можемо посматрати као наелектрисани флуид са пољем брзине $\vec{u}(\vec{r}_s, t)$ и

индукованом површинском бројном густином $n(\vec{r}_s, t)$, при чему је $\vec{r}_s = (\varphi, z)$ координата било које тачке на цилиндричној површини наноцеви. Посматрамо кретање само једног јона унутар простора наноцеви.

Електронска побуђења у наноцеви описују се линеаризованим једначинама континуитета и кретања на основу линеаризованог хидродинамичког модела [23]:

$$\frac{\partial n(\varphi, z, t)}{\partial t} + n_0 \nabla_{\parallel} \cdot \vec{u}(\varphi, z, t) = 0, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial \vec{u}(\varphi, z, t)}{\partial t} = \nabla_{\parallel} \Phi(\rho, \varphi, z, t) \Big|_{\rho=R} - \frac{\alpha}{n_0} \nabla_{\parallel} n(\varphi, z, t) + \frac{\beta}{n_0} \nabla_{\parallel} [\nabla_{\parallel}^2 n(\varphi, z, t)] - \gamma \vec{u}(\varphi, z, t). \quad (4.4)$$

Оператор ∇_{\parallel} у једначинама 4.3 и 4.4 је дефинисан на следећи начин: $\nabla_{\parallel} = \frac{1}{R} \vec{e}_{\varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$. У изразу 4.4 величина $\Phi(\rho, \varphi, z, t) = \Phi_{ext}(\rho, \varphi, z, t) + \Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t)$ представља укупни скаларни потенцијал који потиче од спољашњег (потенцијал који ствара каналисани јон) и индукованог наелектрисања. Други и трећи члан на десној страни **израза 4.4** представљају површинске силе чији је узрок унутрашња интеракција у флуиду, при чему је $\alpha \equiv m_0$ квадрат брзине ширења поремећаја густине у флуиду, а члан са $\beta = 1/4$ описује једноелектронска побуђења у флуиду. Последњи члан на десној страни **израза 4.4** је површинска сила трења услед позитивно наелектрисане позадине, а γ је коефицијент трења.

Елиминисањем поља брзине $\vec{u}(\varphi, z, t)$ систем једначина 4.3-4.4 се своди на једну једначину по $n(\varphi, z, t)$:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial}{\partial t} - \alpha \nabla_{\parallel}^2 + \beta \nabla_{\parallel}^4 \right) n(\varphi, z, t) = -n_0 \nabla_{\parallel}^2 \Phi(\rho, \varphi, z, t) \Big|_{\rho=R}. \quad (4.5)$$

Како је у питању систем просторно временских диференцијалних једначина, ради лакшег решавања се може увести Fourier-Bessel-ова трансформација. За неку функцију $A(\rho, \varphi, z, t)$ трансформациони пар дефинишемо као:

$$A(\rho, \varphi, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A(\rho, m, k, \omega) e^{im\varphi + ikz - i\omega t} dk d\omega. \quad (4.6)$$

Израз 4.5 се применом трансформације 4.6 своди на:

$$n(m, k, \omega) = \chi_0(m, k, \omega) \Phi(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}. \quad (4.7)$$

При томе важе пресликавања диференцијала $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega$ и градијента $\nabla_{\parallel}^2 \rightarrow -\left(k^2 + \frac{m^2}{R^2}\right)$ из временско-просторног система у систем дефинисан Fourier-Bessel-овом трансформацијом.

У изразу 4.7 $\chi_0(m, k, \omega)$ се дефинише као:

$$\chi_0(m, k, \omega) = \frac{n_0 \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)}{\beta \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)^2 + \alpha \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) - \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (4.8)$$

Укупни трансформисани потенцијал је дат као:

$$\Phi(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} = \Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} + \Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}. \quad (4.9)$$

Спољашњи потенцијал се може израчунати помоћу:

$$\Phi_{ext}(\rho, \varphi, z, t) = \int \frac{\rho_{ext}(\vec{r}', t')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}', \quad (4.10)$$

где је густина спољашњег наелектрисања (јон наелектрисања Q) у цилиндричним координатама $\rho_{ext}(\vec{r}', t) = Q \frac{1}{\rho'} \delta(\rho' - \rho_0) \delta(\varphi' - 0) \delta(z' - vt)$, а елементарна запремина $d^3 \vec{r}' = \rho' d\rho' d\varphi' dz'$. Координате са прим ознаком се односе на референтни систем каналсаног јона.

Coulomb-ов потенцијал $\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$ се може написати у домену Fourier-Bessel-ове

трансформације на следећи начин:

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')+ik(z-z')} g_{mk}(\rho, \rho') dk, \quad (4.11)$$

при чему је $g_{mk}(\rho, \rho') = 4\pi I_m(|k|\rho_<)K_m(|k|\rho_>)$, где је $\rho_< \equiv \min\{\rho, \rho'\}$ и $\rho_> \equiv \max\{\rho, \rho'\}$, а I_m и K_m модификоване Bessel-ове функције прве и друге врсте, реда m .

Заменом израза 4.11 у израз 4.10, и сређивањем се може показати да се добија:

$$\Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) = 2\pi Q g_{mk}(\rho, \rho_0) \delta(\omega - kv). \quad (4.12)$$

На основу израза 4.12 важи:

$$\Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} = 2\pi Q g_{mk}(R, \rho_0) \delta(\omega - kv), \quad (4.13)$$

при чему је $g_{mk}(R, \rho_0) = 4\pi I_m(|k|\rho_0)K_m(|k|R)$.

Индуковани потенцијал има следећи облик:

$$\Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) = \int \frac{\rho_{ind}(\vec{r}', t)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}', \quad (4.14)$$

при чему је густина индукованог наелектрисања у цилиндричним координатама $\rho_{ind}(\vec{r}', t) = -n(\varphi', z', t) \delta(\rho' - R)$.

Сменом израза 4.11 у израз 4.14, слично као у случају спољашњег потенцијала, добија се веза између индукованог потенцијала и концентрације електрона на омотачу наноцеви:

$$\Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) = -R g_{mk}(\rho, R) n(m, k, \omega), \quad (4.15)$$

при чему је $g_{mk}(\rho, R) = 4\pi I_m(|k|\rho)K_m(|k|R)$, где важи $0 \leq \rho < R$.

На основу израза 4.15 јасно је да важи:

$$\Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} = -R g_{mk}(R, R) n(m, k, \omega), \quad (4.16)$$

где је $g_{mk}(R, R) = 4\pi I_m(|k| R) K_m(|k| R)$.

Заменом израза 4.16 у израз 4.7 добија се:

$$n(m, k, \omega) = \chi(m, k, \omega) \Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}, \quad (4.17)$$

где је $\chi(m, k, \omega)$ функција одзива индуковане површинске бројне густине на спољашњи потенцијал и дата је следећим изразом:

$$\chi(m, k, \omega) = \frac{\chi_0(m, k, \omega)}{1 + R g_{mk}(R, R) \chi_0(m, k, \omega)}. \quad (4.18)$$

Сменом израза 4.13 у израз 4.17 добија се:

$$n(m, k, \omega) = 2\pi Q \chi(m, k, \omega) g_{mk}(R, \rho_0) \delta(\omega - kv). \quad (4.19)$$

Сменом израза 4.19 у израз 4.15 добијамо:

$$\Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) = -2\pi R Q g_{mk}(\rho, R) g_{mk}(R, \rho_0) \chi(m, k, \omega) \delta(\omega - kv). \quad (4.20)$$

Применом инверзне Fourier-Bessel-ов трансформације (израз 4.6) претходни израз 4.20 се своди на:

$$\Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) = -4RQ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi + ik(z-vt)} I_m(|k| \rho) I_m(|k| \rho_0) K_m^2(|k| R) \chi(m, k, kv) dk, \quad (4.21)$$

при чему смо искористили да је $g_{mk}(\rho, R) = 4\pi I_m(|k| \rho) K_m(|k| R)$, као и да је $g_{mk}(R, \rho_0) = 4\pi I_m(|k| \rho_0) K_m(|k| R)$.

Израз 4.21 за индуковани потенцијал који потиче од пертурбације стања електронског гаса на зиду наноцеви услед присуства позитивно наелектрисаног јона у унутрашњем простору наноцеви представља главни резултат ове анализе и математичког извођења у усвојеном једнофлуидном моделу. На основу овог израза се одређују остале физичке величине које одређују утицај плазмона на каналисање јона у наноцеви. Као што се може запазити, у изразу фигурише брзина јона, тако да њена вредност утиче на интензитет пертурбације електронског гаса.

У изразу 4.8 фигурише равнотежна (када нема каналисаног јона унутар наноцеви) површинска густина електрона на омотачу наноцеви за коју је већ речено да износи $n_0 = 0.428$. Ова вредност је усвојена апроксимативно на основу густине електронског гаса на графитној равни [24].

4.3 Двофлуидни хидродинамички модел (аналитички резултати)

У претходном, једнофлуидном моделу, сви валентни електрони атома угљеника су посматрани на исти начин, без обзира у ком типу везе учествују у оквиру повезивања суседних атома угљеника. Дакле не прави се разлика између σ и π електрона. У оквиру овог модела је показано да се остварују резонантне учестаности за заједнички електронски систем (σ и π електрони), означен још као и $\sigma + \pi$ плазмон [25, 26], где су ниже фреквенце које одговарају π електронима у оквиру једнофлуидног модела изостављене [22]. Један од начина да се превазиђе ова ситуација је да се систем σ и π електрона третира као дводимензиони систем различитих флуида који међусобно интерагују (σ и π флуиди) и који се налазе непосредно на зиду наноцеви прожети један другим [27]. Први такав двофлуидни модел су развили Бартон (Barton) и Еберлајн (Eberlein) за потребе изучавања спектра плазмона у фулеренима [28]. Касније је овај модел био примењен и за наноцеви [29].

Двофлуидни хидродинамички модел који ће се користити у овом раду а који је предложен у [27], се базира на слободним параметрима где присуство унутрашње интеракције у сваком од флуида омогућава електростатичку везу између σ и π флуида како би се раздвојиле ексцитоване резонантне учестаности у две групе које одговарају експериментално идентификованим вредностима, високе учестаности за $\sigma + \pi$ плазмон и ниске за π плазмон.

Као и приликом извођења у претходном поглављу, користимо атомске јединице (*a.u.*) [20]. Ово је систем јединица у коме је Bohr-ов радијус, a_0 , јединица дужине, маса електрона, m_e , јединица масе, елементарно наелектрисање, e , јединица наелектрисања и редукована Planck-ова константа, \hbar , јединица ангуларног момента [21]. Такође, у атомским јединицама узима се да је константа Coulomb-овог закона једнака јединици, односно $1/4\pi\epsilon_0 = 1$, што значи да је $1/\epsilon_0 = 4\pi$.

Разматрамо два одвојена 2D флуида, σ флуид и π флуид, "слепљена" на истој површини наноцеви, који садрже три, односно један неспарени електрон по атому угљеника.

Као и у претходном случају једнофлуидног модела посматрамо једнослојну угљеничну наноцев као бесконачно танак цилиндар полупречника R . Претпоставићемо да се валентни електрони могу описати као гас слободних електрона, равномерно распоређен дуж цилиндричне површине, површинске бројне густине $n_0 = n_\sigma^0 + n_\pi^0$, где је $n_\sigma^0 = 0.321$, односно $n_\pi^0 = 0.107$, површинска бројна густина која се односи на три σ електрона, односно један π електрон, по атому угљеника, респективно. Ово су равнотежне површинске густине (када нема каналисаног јона).

Такође користимо цилиндрични координатни систем, $\vec{r} = (\rho, \varphi, z)$, при чему наноцев усмеравамо дуж z -осе. Посматрамо јон наелектрисања Q који се креће брзином v унутар наноцеви, паралелно њеној оси на растојању $\rho = \rho_0$ од ње. Тренутни положај јона, у било ком тренутку времена, одређен је вектором положаја $\vec{r}_0(t) = (\rho = \rho_0, \varphi = 0, z = vt)$.

Присуство наелектрисаног јона доводи до пертурбације хомогеног електронског гаса који можемо посматрати као наелектрисани флуид са пољем брзине $\vec{u}(\vec{r}_s, t)$ и индукованом површинском бројном густином $n(\vec{r}_s, t)$, при чему је $\vec{r}_s = (\varphi, z)$ координата било које тачке на цилиндричној површини наноцеви. Као и у случају једнофлуидног хидродинамичког модела и овде посматрамо кретање само једног јона унутар простора наноцеви.

Као и у претходном моделу, електронска побуђења електрона на зидовима наноцеви се описују линеаризованим једначинама континуитета и кретања на основу линеаризованог хидродинамичког модела [23]:

$$\frac{\partial n_i(\varphi, z, t)}{\partial t} + n_i^0 \nabla_{\parallel} \cdot \vec{u}_i(\varphi, z, t) = 0, \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial \vec{u}_i(\varphi, z, t)}{\partial t} = \nabla_{\parallel} \Phi(\rho, \varphi, z, t) \Big|_{\rho=R} - \frac{\alpha_i}{n_i^0} \nabla_{\parallel} n_i(\varphi, z, t) + \frac{\beta}{n_i^0} \nabla_{\parallel} [\nabla_{\parallel}^2 n_i(\varphi, z, t)] - \gamma_i \vec{u}_i(\varphi, z, t) \quad (4.23)$$

Оператор ∇_{\parallel} у једначинама 4.22 и 4.23 је дефинисан на следећи начин: $\nabla_{\parallel} = \frac{1}{R} \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$. У изразу 4.23 величина $\Phi(\rho, \varphi, z, t) = \Phi_{ext}(\rho, \varphi, z, t) + \Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t)$ представља укупни скаларни потенцијал који потиче од спољашњег (потенцијал који ствара каналисани јон) и индукованог наелектрисања. Други и трећи члан на десној страни израза 4.23 представљају површинске силе чији је узрок унутрашња интеракција у флуиду, при чему је $\alpha_i \equiv \pi_i^0$ квадрат брзине ширења поремећаја густине у флуиду, а члан

са $\beta = 1/4$ описује једноелектронска побуђења у флуиду. Последњи члан на десној страни **израза 4.23** је површинска сила трења услед позитивно наелектрисане позадине, а γ_i је коефицијент трења. За разлику од једнофлуидног модела, овде имамо парове једначина **4.22** и **4.23**, где за сваки флуид σ или π постоји по један пар ових једначина. У једном случају је $i=\sigma$, у другом $i=\pi$. Остали параметри са индексом i се односе на сваки од поменутих флуида појединачно и у општем случају се разликују.

Као и у једнофлуидном моделу из претходних једначина можемо елиминисати поље брзине $\vec{u}_i(\varphi, z, t)$. На тај начин систем једначина **4.22-4.23** се своди на једну једначину по $n_i(\varphi, z, t)$:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma_i \frac{\partial}{\partial t} - \alpha_i \nabla_{\parallel}^2 + \beta \nabla_{\parallel}^4 \right) n_i(\varphi, z, t) = -n_i^0 \nabla_{\parallel}^2 \Phi(\rho, \varphi, z, t) \Big|_{\rho=R}. \quad (4.24)$$

Ради лакшег решавања као и у претходном случају се може увести Fourier-Bessel-ова трансформација:

$$A(\rho, \varphi, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A(\rho, m, k, \omega) e^{im\varphi + ikz - i\omega t} dk d\omega. \quad (4.25)$$

Израз 4.24 се применом трансформације **4.25** своди на:

$$n_i(m, k, \omega) = \frac{n_i^0 \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)}{\beta \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)^2 + \alpha_i \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) - \omega^2 - i\gamma_i \omega} \Phi(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}, \quad (4.26)$$

при чему је $\Phi(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} = \Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} + \Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}$.

Израз 4.26 ћемо записати у облику:

$$n_i(m, k, \omega) = \chi_i^0(m, k, \omega) \Phi(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}, \quad (4.27)$$

где је неинтерагујућа функција одзива i -тог флуида ($i = \{\sigma, \pi\}$) дата следећим изразом:

$$\chi_i^0(m, k, \omega) = \frac{n_i^0 \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)}{\beta \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)^2 + \alpha_i \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) - \omega^2 - i\gamma_i \omega}. \quad (4.28)$$

Ако једначину **4.27** напишемо за $i = \sigma$ и $i = \pi$, сабирањем те две једначине добијамо:

$$n(m, k, \omega) = \chi_0(m, k, \omega) \Phi(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}, \quad (4.29)$$

где је $n(m, k, \omega) = n_\sigma(m, k, \omega) + n_\pi(m, k, \omega)$ и $\chi_0(m, k, \omega) = \chi_\sigma^0(m, k, \omega) + \chi_\pi^0(m, k, \omega)$.

Пошто смо усвојили да се као у претходном случају унутар наноцеви креће само једна позитивно наелектрисана честица (јон), израз за спољашњи потенцијал је исти као и у претходном случају.

$$\Phi_{ext}(\rho, \varphi, z, t) = \int \frac{\rho_{ext}(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}', \quad (4.30)$$

где је густина спољашњег наелектрисуња (јон наелектрисуња Q) у цилиндричним координатама $\rho_{ext}(\vec{r}', t) = Q \frac{1}{\rho'} \delta(\rho' - \rho_0) \delta(\varphi' - 0) \delta(z' - vt)$, а елементарна запремина $d^3 \vec{r}' = \rho' d\rho' d\varphi' dz'$. Координате са прим ознаком се односе на референтни систем каналисаног јона.

Coulomb-ов потенцијал $\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$ се може написати у домену Fourier-Bessel-ове

трансформације на следећи начин:

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi') + ik(z-z')} g_{mk}(\rho, \rho') dk, \quad (4.31)$$

при чему је $g_{mk}(\rho, \rho') = 4\pi I_m(|k|\rho_<)K_m(|k|\rho_>)$, где је $\rho_< \equiv \min\{\rho, \rho'\}$ и $\rho_> \equiv \max\{\rho, \rho'\}$, а I_m и K_m модификоване *Bessel*-ове функције прве и друге врсте, реда m .

Заменом израза 4.31 у израз 4.30 и сређивањем, добија се да је:

$$\Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) = 2\pi Q g_{mk}(\rho, \rho_0) \delta(\omega - kv). \quad (4.32)$$

На основу претходног израза важи:

$$\Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} = 2\pi Q g_{mk}(R, \rho_0) \delta(\omega - kv), \quad (4.33)$$

при чему је $g_{mk}(R, \rho_0) = 4\pi I_m(|k|\rho_0)K_m(|k|R)$. Индуковани потенцијал има следећи облик:

$$\Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) = \int \frac{\rho_{ind}(\vec{r}', t)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}', \quad (4.34)$$

где је густина индукованог наелектрисања у цилиндричним координатама $\rho_{ind}(\vec{r}', t) = -n(\varphi', z', t) \delta(\rho' - R)$.

Сменом израза 4.31 у израз 4.34, и сређивањем, добија се:

$$\Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) = -R g_{mk}(\rho, R) n(m, k, \omega), \quad (4.35)$$

при чему је $g_{mk}(\rho, R) = 4\pi I_m(|k|\rho)K_m(|k|R)$, где смо искористили да је $0 \leq \rho < R$. Односно сматрамо да се јон налази у наноцеви те све релевантне физичке величине рачунамо за простор унутар наноцеви.

На основу израза 4.35 може се написати:

$$\Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R} = -Rg_{mk}(R, R)n(m, k, \omega), \quad (4.36)$$

при чему је $g_{mk}(R, R) = 4\pi I_m(|k|R)K_m(|k|R)$. Заменом израза 4.36 у израз 4.29, и сређивањем, добијамо:

$$n(m, k, \omega) = \chi(m, k, \omega)\Phi_{ext}(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}, \quad (4.37)$$

где је функција одзива индуковане површинске бројне густине на спољашњи потенцијал као у једнофлуидном моделу дата следећим изразом:

$$\chi(m, k, \omega) = \frac{\chi_0(m, k, \omega)}{1 + Rg_{mk}(R, R)\chi_0(m, k, \omega)}. \quad (4.38)$$

Сменом израза 4.33 у израз 4.37 добија се:

$$n(m, k, \omega) = 2\pi Q\chi(m, k, \omega)g_{mk}(R, \rho_0)\delta(\omega - kv). \quad (4.39)$$

Заменом израза 4.39 у израз 4.35 добијамо да је:

$$\Phi_{ind}(\rho, m, k, \omega) = -2\pi RQg_{mk}(\rho, R)g_{mk}(R, \rho_0)\chi(m, k, \omega)\delta(\omega - kv). \quad (4.40)$$

Применом израза 4.25 (инверзне Фуријеове трансформације) израз 4.40 постаје:

$$\Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) = -4RQ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi + ik(z-vt)} I_m(|k|\rho)I_m(|k|\rho_0)K_m^2(|k|R)\chi(m, k, kv)dk, \quad (4.41)$$

при чему смо искористили да је $g_{mk}(\rho, R) = 4\pi I_m(|k|\rho)K_m(|k|R)$, као и да је $g_{mk}(R, \rho_0) = 4\pi I_m(|k|\rho_0)K_m(|k|R)$.

Израз 4.41 за индуковани потенцијал који потиче од пертурбације стања електронског гаса на зиду наноцеви услед присуства позитивно наелектрисаног јона у

унутрашњем простору наноцеви представља главни резултат ове анализе и математичког извођења у усвојеном двофлуидном моделу. На основу овог израза се одређују остале физичке величине које одређују утицај плазмона на каналисање јона у наноцеви. У случају двофлуидног хидродинамичког модела, који смо овде разматрали, анализирамо и додатни случај када се каналисани јон налази ван наноцеви. Дакле узећемо да је $R < \rho < \infty$.

У **изразу 4.31** за Фуријеову трансформацију Кулоновог потенцијала фигурише Гринова функција [30] у облику:

$$g_{mk}(\rho, \rho') = 4\pi I_m(|k| \rho_<) K_m(|k| \rho_>), \quad (4.42)$$

где је $\rho_< \equiv \min\{\rho, \rho'\}$ и $\rho_> \equiv \max\{\rho, \rho'\}$. Ова функција се даље појављује на свим местима где се изводи потенцијал (било индуковани, било екстерни). Како је главни резултат претходне анализе вредност за индуковани потенцијал, вратићемо се на **израз 4.40** у којем фигуришу две Гринове функције: $g_{mk}(\rho, R)$ и $g_{mk}(R, \rho_0)$. Обзиром на претходну дефиницију Гринове функције у **изразу 4.42** и за другачији однос вредности растојања јона од центра наноцеви и полупречника наноцеви, јасно је да ће се изрази за ове функције у овом случају разликовати. Имамо да важи:

$$g_{mk}(\rho, R) = 4\pi I_m(|k| \rho_<) K_m(|k| \rho_>), \quad (4.43)$$

где је $\rho_< \equiv \min\{\rho, R\}$ и $\rho_> \equiv \max\{\rho, R\}$. Како је $R < \rho < \infty$, важи да је $\rho_< \equiv R$ и $\rho_> \equiv \rho$, тако да претходни израз постаје:

$$g_{mk}(\rho, R) = 4\pi I_m(|k| R) K_m(|k| \rho). \quad (4.44)$$

Слично овој анализи и за другу Гринову функцију важи:

$$g_{mk}(R, \rho_0) = 4\pi I_m(|k| R) K_m(|k| \rho_0). \quad (4.45)$$

На основу ових разматрања закључујемо да ће израз за индуковани потенцијал који потиче од наелектрисања на зиду наноцеви у случају да се каналисани јона креће ван наноцеви бити:

$$\Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) = -4RQ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi + ik(z-vt)} K_m(|k|\rho) K_m(|k|\rho_0) I_m^2(|k|R) \chi(m, k, kv) dk. \quad (4.46)$$

4.4 Проширени двофлуидни хидродинамички модел (аналитички резултати)

У претходном двофлуидном хидродинамичком моделу, валентне електроне на површини зида наноцеви смо третирали као две независне групе електрона (σ и π флуиди). У оквиру овог модела су усвојене површинске густине наелектрисања које припадају поменутиим флуидима као $n_{\pi}^0 = n_{at}$ и $n_{\sigma}^0 = 3n_{at}$ (n_{at} је атомска густина графена) што је износило $n_{\pi}^0 = 0.107$, односно $n_{\sigma}^0 = 0.321$. Ове вредности су емпиријски усвојене на основу [31] и [32]. Увођењем емпиријске повратне фреквенце [33] за σ електрон флуид, двофлуидни дводимензиони хидродинамички модел Бартона и Еберлајна предвиђа две групе плазмона. Ово ново својство добро објашњава две доминантне апсорпције на учестаностима 5-10 и 15-30 eV у молекулима фулерена [32] и једнослојним угљеничним наноцевима [29].

Са друге стране је показано у [34] да се интеракција између σ и π флуида (која је у Бартон – Еберлајновом моделу занемаривана а њени ефекти урачунати фитовањем емпиријских параметара експерименталним резултатима на графену) може моделовати посебним анализирањем Томас-Фермијеве кинетичке енергије сваког електронског флуида. Овај приступ доводи до хибридације колективних осцилација у сваком од флуида, што за крајњи ефекат има π плазмон ниске енергије и $\sigma + \pi$ плазмон високе енергије што се добро слаже са експерименталним резултатима [25, 35]. У случају када је унутрашња интеракција занемарљива, утицај π плазмона постаје занемарљив и систем се своди на једнофлуидни $\sigma + \pi$ плазмон.

У оквиру проширеног двофлуидног модела се полази од квантномеханичке анализе интеракције између електронских система, то јест σ и π флуида. Крајњи ефекти међусобне интеракције флуида и њен утицај на потенцијал у или ван наноцеви се добијају другом квантизацијом двофлуидног дводимензионог хидродинамичког модела. Као резултат математичке анализе [19] овог модела, фигуришу повратне фреквенце за оба плазмона које се појављују као последица хармонијске апроксимације. Комбинујући резултате квантномеханичког приступа у анализи ексцитације флуида и класичног приступа који смо имали у опису два претходна модела добијамо полукласични модел који зовемо проширени двофлуидни модел уз помоћ којег изводимо утицај каналисаног јона на пертурбацију електронског система и индуковање потенцијала у простору наноцеви или ван наноцеви.

У двофлуидном моделу смо имали израз за површинску густину наелектрисања сваког флуида, која је била дата као

$$n_i(m, k, \omega) = \chi_i^0(m, k, \omega) \Phi(\rho, m, k, \omega) \Big|_{\rho=R}, \quad (4.47)$$

где смо функцију $\chi_i^0(m, k, \omega)$ означили као неинтерагујућу функцију одзива i -тог флуида ($i = \{\sigma, \pi\}$). Код проширеног двофлуидног модела, управо је ова функција другачија и дата је као:

$$\chi_0(m, k, \omega) = \sum_{i=\sigma, \pi} \frac{n_i^0 \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)}{\beta \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right)^2 + \alpha_i^{TFD} \left(k^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) + \omega_{ir}^2 - \omega^2 - i\gamma_i \omega}. \quad (4.48)$$

У овом изразу постоји додатни члан ω_{ir} , који представља управо поменути повратну фреквенцу из квантне анализе. Чланови у овом изразу имају вредности $n_\sigma^0 = 0.321$, $n_\pi^0 = 0.107$, $\alpha_i^{TFD} = \pi m_i^0 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} n_i^0$, $\omega_\sigma = 0.48$, $\omega_\pi = 0.15$, $\gamma_\sigma = 0.1$ и $\gamma_\pi = 0.09$ које су усвојене на основу експерименталних резултата.

Функција одзива индуковане површинске бројне густине на спољашњи потенцијал је дата следећим изразом:

$$\chi(m, k, \omega) = \frac{\chi_0(m, k, \omega)}{1 + Rg_{mk}(R, R)\chi_0(m, k, \omega)}. \quad (4.49)$$

Израз за индуковани потенцијал је као и у претходном моделу дат са:

$$\Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) = -4RQ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi + ik(z-vt)} I_m(|k|\rho) I_m(|k|\rho_0) K_m^2(|k|R) \chi(m, k, kv) dk, \quad (4.50)$$

када се јон налази у простору унутар наноцеви, то јест када важи $0 \leq \rho < R$. Када је јон ван наноцеви израз за индуковани потенцијал се своди на:

$$\Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) = -4RQ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi + ik(z-vt)} K_m(|k|\rho) K_m(|k|\rho_0) I_m^2(|k|R) \chi(m, k, kv) dk, \quad (4.51)$$

за $R < \rho < \infty$.

4.5 Физичке величине од значаја за каналисање јона

У претходним одељцима ове главе смо размотрили утицај каналисаног јона на стање електрона на омотачу наноцеви, развили математички апарат који квантитативно описује последице динамичке поларизације и извели на крају изразе за индуковани потенцијал као основну физичку величину која одређује утицај електронског гаса на даље кретање јона у простору наноцеви. Како бисмо квантитативно анализирали кретање јона у простору са индукованим потенцијалом дефинисаћемо још неколико физичких величина помоћу којих ћемо у склопу класичне механике и закона кретања у наставку одређивати каналисање јона.

Прва физичка величина коју дефинишемо је **зауоставна сила**. Зауоставну силу дефинишемо као силу усмерену дуж осе наноцеви која утиче на лонгитудинално кретање наелектрисане честице у простору наноцеви. Зауоставна сила на јон наелектрисања Q који се креће брзином v унутар наноцеви, паралелно њеној оси на растојању $\rho = \rho_0$ од ње, дуж трајекторије $\vec{r}_0(t) = (\rho = \rho_0, \varphi = 0, z = vt)$, дефинише се на следећи начин:

$$S = Q \frac{\partial \Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t)}{\partial z} \Big|_{\rho=\rho_0, \varphi=0, z=vt} . \quad (4.52)$$

Друга физичка величина коју дефинишемо је **потенцијал лика**. Потенцијал лика [36] за јон наелектрисања Q који се креће брзином v унутар наноцеви, паралелно њеној оси на растојању $\rho = \rho_0$ од ње, дуж трајекторије $\vec{r}_0(t) = (\rho = \rho_0, \varphi = 0, z = vt)$, дефинише се на следећи начин:

$$U_{in} = \frac{Q}{2} \Phi_{ind}(\rho, \varphi, z, t) \Big|_{\rho=\rho_0, \varphi=0, z=vt} . \quad (4.53)$$

Трећа физичка величина коју дефинишемо је **сила лика**. Сила лика [37] је дефинисана као радијална сила која делује на јон дуж полупречника наноцеви и утиче на радијално кретање јона ка или од зида наноцеви. За јон наелектрисања Q који се креће

брзином v унутар наноцеви, паралелно њеној оси на растојању $\rho = \rho_0$, дуж трајекторије $\vec{r}_0(t) = (\rho = \rho_0, \varphi = 0, z = vt)$, дефинише се на следећи начин:

$$F_{im\rho_0} = QE_{im\rho_0} = E_{im\rho_0} \quad (Q=1). \quad (4.54)$$

У претходном изразу $E_{im\rho_0}$ представља радијалну компоненту електричног поља која потиче од динамичке поларизације и дата је као:

$$E_{im\rho_0} = -\frac{\partial U_{im}}{\partial \rho_0}. \quad (4.55)$$

За сваки претходно анализиран хидродинамички модел, на основу израза за индуковани потенцијал, биће изведени конкретни изрази за ове три дефинисане физичке величине.

4.5.1 Једнофлуидни хидродинамички модел

Зауоставна сила је дата **изразом 4.52**. Заменом израза за индуковани потенцијал за једнофлуидни хидродинамички модел (**израз 4.21**) добијамо:

$$S = Q \frac{\partial \left(-4RQ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi + ik(z-vt)} I_m(|k|\rho) I_m(|k|\rho_0) K_m^2(|k|R) \chi(m, k, kv) dk \right)}{\partial z} \Big|_{\rho=\rho_0, \varphi=0, z=vt} \quad (4.56)$$

Сређивањем претходног израза се може показати да је коначан израз за зауоставну силу дат као:

$$S = 8Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \text{Im}[\chi(m, k, kv)] dk, \quad (4.57)$$

где је $\chi(m, k, kv)$ функција одзива индуковане површинске бројне густине на спољашњи потенцијал дата **изразом 4.18**.

Потенцијал lika је дат **изразом 4.53**. Заменом израза за индуковани потенцијал за једнофлуидни хидродинамички модел (**израз 4.21**) добијамо:

$$U_{im} = -4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk, \quad (4.58)$$

где је $\chi(m, k, kv)$ као и у претходном случају функција одзива индиковане површинске бројне густине на спољашњи потенцијал дата **изразом 4.18**.

Сила лика је дата **изразом 4.54**, што се може свести на:

$$F_{im\rho_0} = -\frac{\partial U_{im}}{\partial \rho_0}. \quad (4.59)$$

Даље сређивање претходног израза садржи следеће кораке:

$$E_{im\rho_0} = \frac{\partial \left(4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk \right)}{\partial \rho_0},$$

$$E_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{\partial I_m^2(k\rho_0)}{\partial \rho_0} K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

$$E_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} 2I_m(k\rho_0) \frac{\partial I_m(k\rho_0)}{\partial \rho_0} K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

а како овде имамо парцијални извод модификоване Беселове функције прве врсте на основу [38] важи:

$$E_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} 2I_m(k\rho_0) \left(\frac{1}{2} k (I_{m-1}(k\rho_0) + I_{m+1}(k\rho_0)) \right) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

$$E_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m(k\rho_0) (I_{m-1}(k\rho_0) + I_{m+1}(k\rho_0)) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

а како је $F_{im\rho_0} = QE_{im\rho_0} = E_{im\rho_0}$, коначан израз за силу лика је дат као:

$$F_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m(k\rho_0) (I_{m-1}(k\rho_0) + I_{m+1}(k\rho_0)) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.60)$$

Приликом извођења свих претходних величина сматрамо да се јон налази унутар наноцеви, дакле важи $0 \leq \rho_0 < R$.

4.5.2 Двофлуидни хидродинамички модел

За зауставну силу у двофлуидном хидродинамичком моделу добијамо:

$$S = 8Q^2R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \text{Im}[\chi(m, k, kv)] dk, \quad (4.61)$$

где сматрамо да је у овом случају јон унутар наноцеви $0 \leq \rho_0 < R$. У претходном изразу, функција $\chi(m, k, kv)$ је дата **изразом 4.38**. Када се јон налази ван наноцеви израз за зауставну силу је:

$$S = 8Q^2R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(kR) K_m^2(k\rho_0) \text{Im}[\chi(m, k, kv)] dk, \quad (4.62)$$

где важи $R < \rho_0 < \infty$.

За потенцијал лика добијамо:

$$U_{im} = -4Q^2R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \text{Re}[\chi(m, k, kv)] dk, \quad (4.63)$$

где сматрамо да је у овом случају јон унутар наноцеви $0 \leq \rho_0 < R$. У претходном изразу функција $\chi(m, k, kv)$ је дата **изразом 4.38**. Када се јон налази ван наноцеви израз за потенцијал лика је:

$$U_{im} = -4Q^2R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(kR) K_m^2(k\rho_0) \text{Re}[\chi(m, k, kv)] dk, \quad (4.64)$$

где важи $R < \rho_0 < \infty$.

Приликом одређивања силе лика као и у случају једнофлуидног модела полазимо од израза 4.54, што се своди на:

$$F_{im\rho_0} = -\frac{\partial U_{im}}{\partial \rho_0}. \quad (4.65)$$

Обзиром да у случају двофлуидног модела разматрамо ситуације када се каналисани јон налази унутар и ван наноцеви. И за силу лика анализирамо ова два случаја пошто је израз за потенцијал лика различит.

Случај 1° - Каналисани јон се налази у простору наноцеви $0 \leq \rho_0 < R$

Уврштавањем израза 4.63 у израз 4.65 добијамо:

$$E_{im\rho_0} = \frac{\partial \left(4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk \right)}{\partial \rho_0},$$

што се своди на ситуацију коју смо имали у једнофлуидном моделу, те је израз за силу лика идентичан као у том случају.

$$F_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m(k\rho_0) (I_{m-1}(k\rho_0) + I_{m+1}(k\rho_0)) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.66)$$

Случај 2° - Каналисани јон се налази ван наноцеви $R < \rho_0 < \infty$

Уврштавањем израза 4.64 у израз 4.65 добијамо:

$$E_{im\rho_0} = \frac{\partial \left(4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(kR) K_m^2(k\rho_0) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk \right)}{\partial \rho_0},$$

$$E_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(kR) \frac{\partial K_m^2(k\rho_0)}{\partial \rho_0} \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

$$E_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} 2I_m^2(kR) K_m(k\rho_0) \frac{\partial K_m(k\rho_0)}{\partial \rho_0} \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

а како овде имамо парцијални извод модификоване Беселове функције друге врсте на основу [39] важи:

$$E_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} 2I_m^2(kR) K_m(k\rho_0) \left(-\frac{1}{2} k (K_{m-1}(k\rho_0) + K_{m+1}(k\rho_0)) \right) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

$$E_{im\rho_0} = -4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(kR) K_m(k\rho_0) (K_{m-1}(k\rho_0) + K_{m+1}(k\rho_0)) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk,$$

а како је $F_{im\rho_0} = QE_{im\rho_0} = E_{im\rho_0}$, имамо да је коначан израз за силу lika дат као:

$$F_{im\rho_0} = -4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(kR) K_m(k\rho_0) (K_{m-1}(k\rho_0) + K_{m+1}(k\rho_0)) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.67)$$

4.5.3 Проширени двофлуидни хидродинамички модел

За проширени двофлуидни хидродинамички модел извођења физичких величина од интереса су потпуно идентична као у случају обичног двофлуидног модела, тако да ће овде бити написани само крајњи изрази. Разлика у односу на двофлуидни модел је у облику функције $\chi(m, k, kv)$ која је дата **изразом 4.49**.

Заушавна сила за јон унутар наноцеви $0 \leq \rho_0 < R$ је:

$$S = 8Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \operatorname{Im}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.68)$$

Заушавна сила за јон ван наноцеви $R < \rho_0 < \infty$ је:

$$S = 8Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(kR) K_m^2(k\rho_0) \operatorname{Im}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.69)$$

Потенцијал лика за јон унутар наноцеви $0 \leq \rho_0 < R$ је:

$$U_{im} = -4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(k\rho_0) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk, \quad (4.70)$$

а потенцијал лика за јон ван наноцеви $R < \rho_0 < \infty$ је дат изразом:

$$U_{im} = -4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} I_m^2(kR) K_m^2(k\rho_0) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.71)$$

Сила лика за јон унутар наноцеви $0 \leq \rho_0 < R$ је:

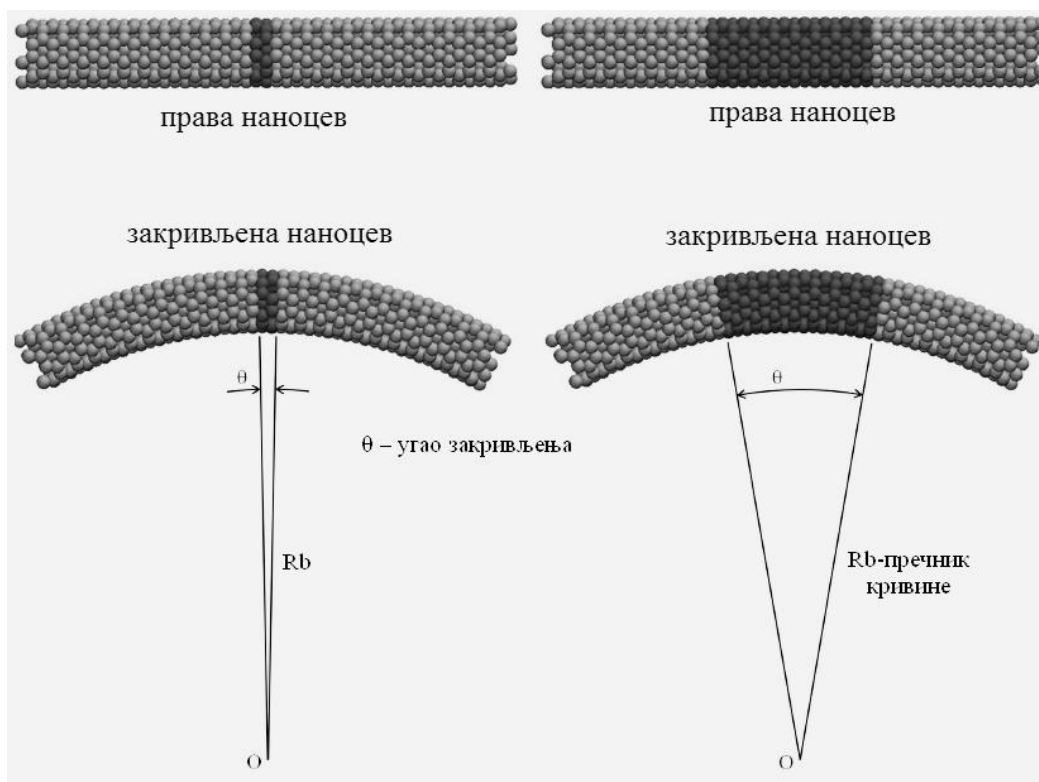
$$F_{im\rho_0} = 4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m(k\rho_0) (I_{m-1}(k\rho_0) + I_{m+1}(k\rho_0)) K_m^2(kR) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.72)$$

Сила лика за јон ван наноцеви $R < \rho_0 < \infty$ је:

$$F_{im\rho_0} = -4Q^2 R \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} k I_m^2(kR) K_m(k\rho_0) (K_{m-1}(k\rho_0) + K_{m+1}(k\rho_0)) \operatorname{Re}[\chi(m, k, kv)] dk. \quad (4.73)$$

4.6 Закривљене наноцеви

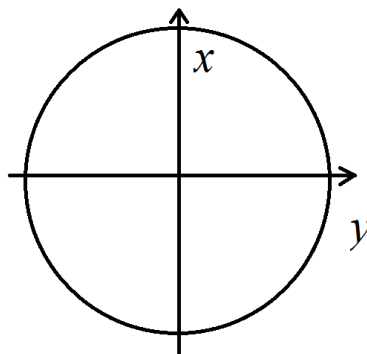
У поглављу 2, у ком су изнете елементарне теоријске основе у вези са наноцевима, поменуто је да у пракси наноцеви готово увек, због несавршености поступка добијања, имају изванредан степен деформитета. Као један од облика деформитета анализирамо благо закривљење наноцеви (слика 4.1). Од интереса је одредити како закривљење утиче на кретање каналисаног јона у простору наноцеви, односно на који начин се мењају већ анализирани механизми интеракције јон – наноцев.



Слика 4.1. Закривљене наноцеви.

Сматрамо да су наноцеви кратке (дужине неколико делова микрометра) и да је угао закривљења веома мали (реда $mrad$) [40]. Да бисмо анализирали утицај закривљења наноцеви на кретање јона у овом случају можемо усвојити покретни координатни систем који се креће брзином v_0 (почетна брзина јона на уласку у наноцев) по кругу закривљења наноцеви са пречником кривине R_b . Кретање јона посматрамо из овог координатног система који је неинерцијалан и анализирамо ефекте ове трансформације на кретање јона [41].

У [42] је показано да у оквиру неинерцијалног координатног система који се обрће око неке фиксне осе, ефективно долази до модификације потенцијала у простору који се поклапа са простором усвојеног референтног система.



Слика 4.2. Попречни пресек наноцеви са усвојеним референтним десним координатним системом (кретање јона је дуж z осе).

Ако је укупни потенцијал у простору наноцеви (пресек приказан на **слици 4.2**) дат као $U(x, y)$, онда ће услед закривљења наноцеви ефективни потенцијал $U_{eff}(x, y)$ бити:

$$U_{eff}(x, y) = U(x, y) + \frac{mv_0^2 y}{R_b}. \quad (4.74)$$

На основу ове анализе закључујемо да центрифугална сила која делује на каналисани јон услед његове закривљене путање по луку кружнице може да се моделује додатним потенцијалом који није цилиндрично симетричан (линеарна зависност од y). На овај начин благо закривљене наноцеви можемо посматрати на исти начин као и праве наноцеви, с тим што се у изразу за укупни потенцијал унутар наноцеви мора урачунати додатни члан.

За овакво кретање протона је утврђен максималан угао закривљења при којем је кретање јона стабилно. Тај угао се назива Tsugan-ов угао, Ψ_T и дат је са $\Psi_T = L/R_c$, где је $R_c = mv_0^2/(eE_c)$ а E_c је интензитет електричног поља при минималној удаљености протона од зида наноцеви на коме је кретање протона стабилно. Важи веза $\Psi_L^2 = (2R_r/L)\Psi_T$ [43,44] где је Ψ_L Линдхардов угао.

Глава 5

Нумерички резултати и дискусија

У овој глави се износе резултати математичке анализе претходно описаних хидродинамичких модела којима се предвиђа понашање наноцеви приликом каналисања јона (бирамо случај протона). Представљају се физичке величине усвојене у претходном поглављу, израчунате програмским путем, за неколико типова наноцеви у разним ситуацијама кретања протона који се каналише. Анализа се спроводи за праве и благо закривљене наноцеви. На крају се анализира кретање протона кроз наноцев (каналисање) и путем Монте Карло програмских симулација предвиђа конкретан утицај угљеничних наноцеви на протонске снопове.

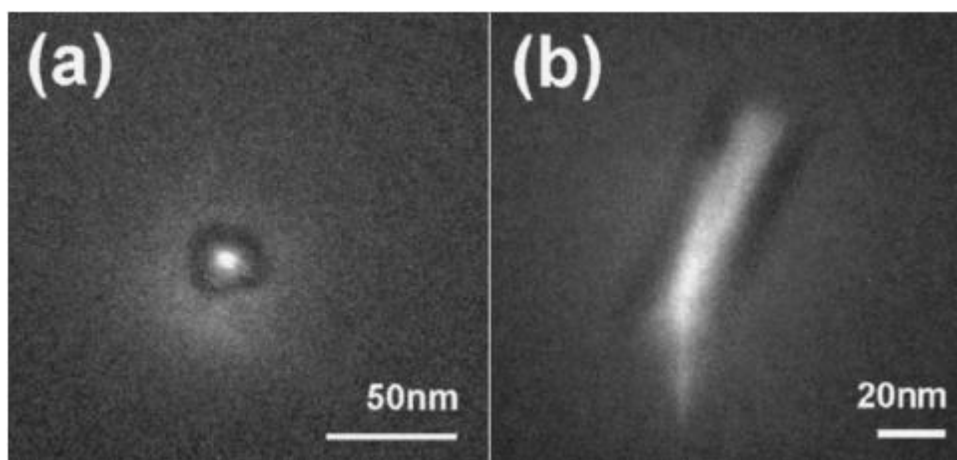
5.1 Опште поставке и преглед досадашњих резултата из области

Недуго након открића наноцеви Климов и Летоков [45] су предвидели могућност њиховог коришћења у процесу каналисања позитивно наелектрисаних честица. Наиме они су установили да за честицу која се креће дуж осе наноцеви под малим упадним углом, наноцев представља дубоку и широку потенцијалну јаму. Након бројних теоријских анализа каналисања јона кроз наноцеви [46-60] показано је да се наноцеви могу користити за формирање и усмеравање јонских наноснопова што би нашло примену у полупроводничкој индустрији, фокусирању и усмеравању јонских снопова у акцелераторима, и контролисању молекулског транспорта у биолошким истраживањима [61].

Експериментална анализа каналисања јона кроз наноцеви је још увек недовољно спроведена и налази се у почетној фази. Прве експерименталне резултате остварили су Zhu и сарадници [62]. У експерименту су коришћени јони хелијума иницијалне кинетичке

енергије 2 MeV, који су усмеравани на сноп правилно распоређених наноцеви креираних у алуминијум оксид супстрату. Први експеримент са каналисањем електрона у наноцевима спровели су Chaі и сарадници [63]. У експерименту су коришћени електрони енергија 300 keV и анализирано је њихово каналисање кроз вишеслојне наноцеви дужине између 0.7 и 3.0 μm инкапсулиране у угљеничном влакну [64]. Инкапсулацијом у оквиру омотача од угљеничног влакна је омогућено лакше манипулисање и усмеравање наноцеви. На овај начин је било могуће пропуштати добро усмерене електронске снопове, мале дивергенције, кроз праве појединачне наноцеви и анализирати каналисање електрона. Резултати ове експерименталне анализе су приказани на сликама 5.1 и 5.2.

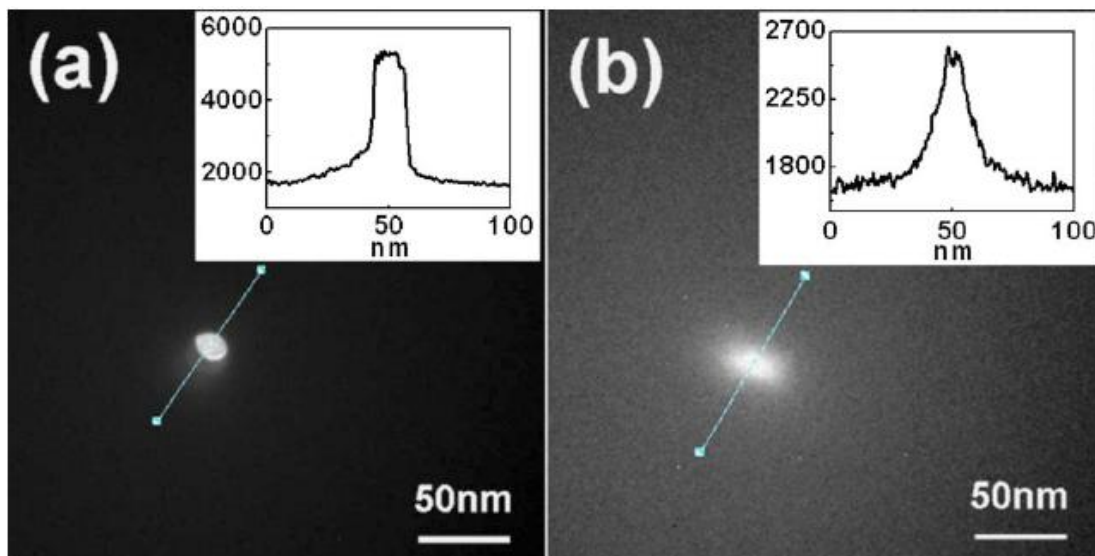
Слика 5.1 (а) представља снимак ТЕМ (трансмисиони електронски микроскоп) на застору који се налази иза наноцеви кроз коју се врши усмеравање електронског снопа који је паралелан са осом наноцеви (упадни угао 0°). Наноцев је дужине 0.72 μm . Слика 5.1 (b) представља такође ТЕМ снимак на застору, при чему је у овом случају упадни угао електронског снопа 5° . Обе слике показују да је највећи интензитет (концентрација) електрона у средини излазног снопа (центар круга), при чему је у случају (b) обзиром на ненулти упадни угао светла тачка мало размазана. Може се извести закључак да наноцев врши фокусирање електронског снопа.



Слика 5.1. ТЕМ слика добијена на застору након проласка: а) електронског снопа кроз наноцев дужине 0.72 μm при упадном углу од 0° и б) електронског снопа кроз наноцев дужине 0.72 μm при упадном углу од 5° [63].

Слика 5.2 (а) представља ТЕМ снимак зависности интензитета (електронског приноса) дуж усвојене осе за наноцев дужине 3 μm када се врши усмеравање електронског снопа који је паралелан са осом наноцеви (упадни угао 0°). У случају (b) је приказан случај када је упадни угао електронског снопа 1° . У овом случају дијаграми интензитета

јасно показују својство фокусирања наноцеви: највећи интензитети у оба случаја су у центру снопа.



Слика 5.2. Расподела интензитета електронског снопа са ТЕМ сликом добијеном на застору након проласка: а) електронског снопа кроз наноцев дужине 3 μm при упадном углу од 0° и б) електронског снопа кроз наноцев дужине 3 μm при упадном углу од 3° [63].

Овај рад се бави каналисањем искључиво позитивно наелектрисаних честица – јона (или протона), где су у претходним поглављима анализирани механизми интеракције између каналисаних честица и наноцеви и уз помоћ усвојених хидродинамичких модела. У наставку се износе резултати нумеричких израчунавања анализираних физичких величина које одређују начин каналисања, врши се поређење тих величина за све наведене хидродинамичке моделе и на крају Монте Карло симулацијама евалуира конкретан утицај на каналисање протона. У оквиру симулација кретања протона кроз наноцев симулирају се ефекти који би у реалним експерименталним условима били присутни, а резултати би се добили ТЕМ снимцима као у случају поменутих експеримената [63, 64]. Резултати потврђују својство усмеравања и фокусирања јонских снопова кроз наноцеви.

5.2 Једнофлуидни и двофлуидни модел: физичке величине, поређење, интеракција јона са наноцеви

У овом поглављу поредимо једнофлуидни и двофлуидни хидродинамички модел са аспекта теоријски претпостављених вредности усвојених физичких величина. Анализирамо каналисање јона кроз наноцеви у случају када интеракцију моделујемо једнофлуидним и двофлуидним моделом. Рачунамо угаону и просторну расподелу каналисаних јона у оба усвојена модела.

Анализирамо четири типа наноцеви:

- SWNT (6, 4)
- SWNT (8, 6)
- SWNT (11, 9)
- SWNT (15, 10)

Као каналисане честице узимамо протоне, брзина у опсегу од 0 – 10 а.у. За све физичке величине користимо систем атомских јединица. Како је већ наглашено у поглављу 4, наноцев посматрамо као цилиндричну структуру одговарајућег радијуса (зависи конкретно који од поменутих четири типа наноцеви посматрамо) и дужине. Дужину наноцеви узимамо тако да прелет протона траје довољно кратко времена при чему можемо сматрати да се лонгитудинална компонента брзине кретања протона не мења значајно током кретања кроз наноцев, а такође дужина наноцеви треба да буде довољно велика да би се елиминисали ефекти крајева на физичке величине које смо анализирали. Као оптимална вредност између ова два захтева усвојена је дужина од $L = 0.3 \mu\text{m}$ [37].

За репулзивни потенцијал (интеракција протона са језгрима угљеникових атома), као што смо већ напоменули у глави 3, узимамо вредност на основу израза 3.12. У овом изразу за константе узимамо следеће вредности:

$$a_j = \{ 0.115, 0.188, 0.072, 0.020 \},$$

$$b_j = \{ 0.547, 0.989, 1.982, 5.656 \},$$

на основу [13], где су ове вредности изражене у атомским јединицама.

Величина l у изразу 3.12 има вредност $l = 0.144 \text{ nm}$ и представља растојање угљеникових атома у оквиру угљеничних веза [65]. Z је атомски број атома угљеника и износи $Z = 6$.

Осим репулзивног потенцијала, интеракцију протон – наноцев одређује и потенцијал лика. У случају једнофлуидног модела, потенцијал лика дат је **изразом 4.58** док је за двофлуидни модел дат **изразом 4.63**.

Укупан потенцијал који одређује интеракцију протон – наноцев дат је као:

$$U(\rho_0) = U_{rep}(\rho_0) + U_{im}(\rho_0) \quad (5.1)$$

где је ρ_0 растојање протона од центра наноцеви, а U_{rep} , U_{im} су репулзивни потенцијал и потенцијал лика, респективно.

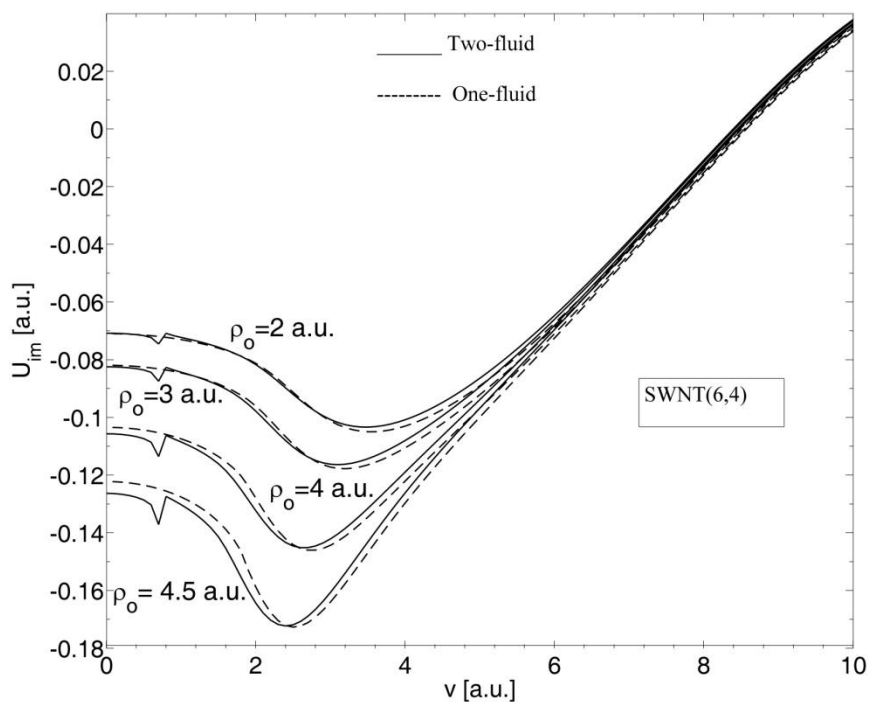
На почетку испитујемо утицај растојања протона ρ_0 на зависност потенцијала лика од брзине протона у усвојеном опсегу брзина (0-10 а.у.) за једнофлуидни и двофлуидни модел. При овој анализи узимамо коефицијент трења занемарљиве вредности $\gamma = 0.001$. Анализу спроводимо за сва четири типа наноцеви док ρ_0 узимамо тако да су равномерно обухваћена различита растојања у области унутар наноцеви (у односу на полупречник посматране наноцеви).

Слике **5.3-5.6** приказују поменуте зависности. Пуном линијом су приказани потенцијали лика за случај двофлуидног модела, док су испрекиданом линијом приказани за случај једнофлуидног модела.

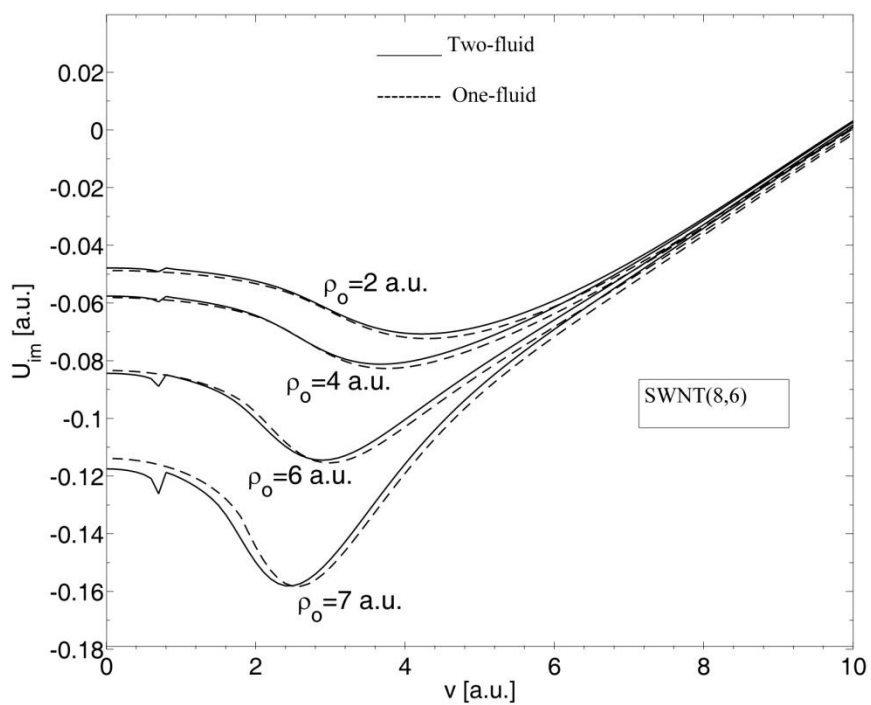
Полупречници наноцеви су $R = 0.346, 0.483, 0.689$ и 0.865 nm за SWNT (6, 4), SWNT (8, 6), SWNT (11,9) и SWNT (15,10) респективно.

За мале удаљености протона ρ_0 од центра наноцеви, оба модела дају сличне резултате у погледу зависности потенцијала лика од брзине каналисаног протона. За веће вредности ρ_0 (протон ближе зиду наноцеви) интеракција између протона и електронског гаса (флуида) на зиду наноцеви је јача, па је тиме и већа вредност потенцијала лика. Обзиром да се структуре електронског гаса у моделима разликују, постоји значајна разлика и у вредностима потенцијала лика без обзира на брзину кретања протона (за мање и средње брзине). За веће брзине потенцијал лика код оба модела има приближно исту вредност, што се може објаснити слабијом интеракцијом протона са електронским гасом обзиром на већу динамику пропагације протона. Наиме на већим брзинама протона, долази до изражаја инертност електронског гаса, тако да се ефективно смањује његова пертурбација што има за ефекат мањи потенцијал лика.

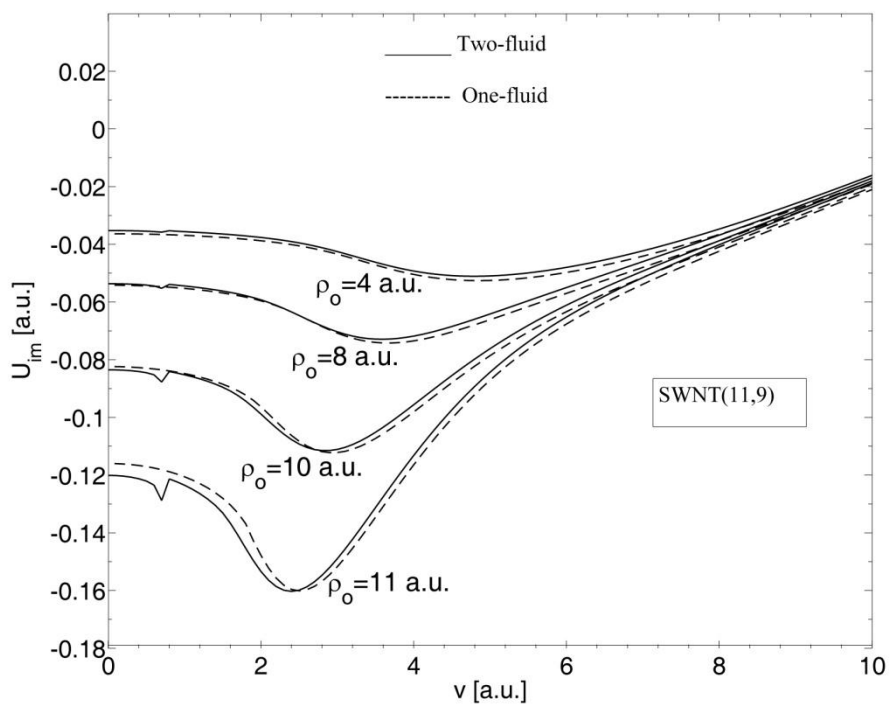
Са слика се може приметити да на мањим брзинама, око $v = 0.71$ а.у. постоји нагли скок у вредности потенцијала лика, али само за двофлуидни хидродинамички модел, што је већ наговештено у [66]. Двофлуидни хидродинамичк модел испољава ову особину у случају када се брзина каналисаног протона поклапа са фазном брзином квазиакустичког π плазмона.



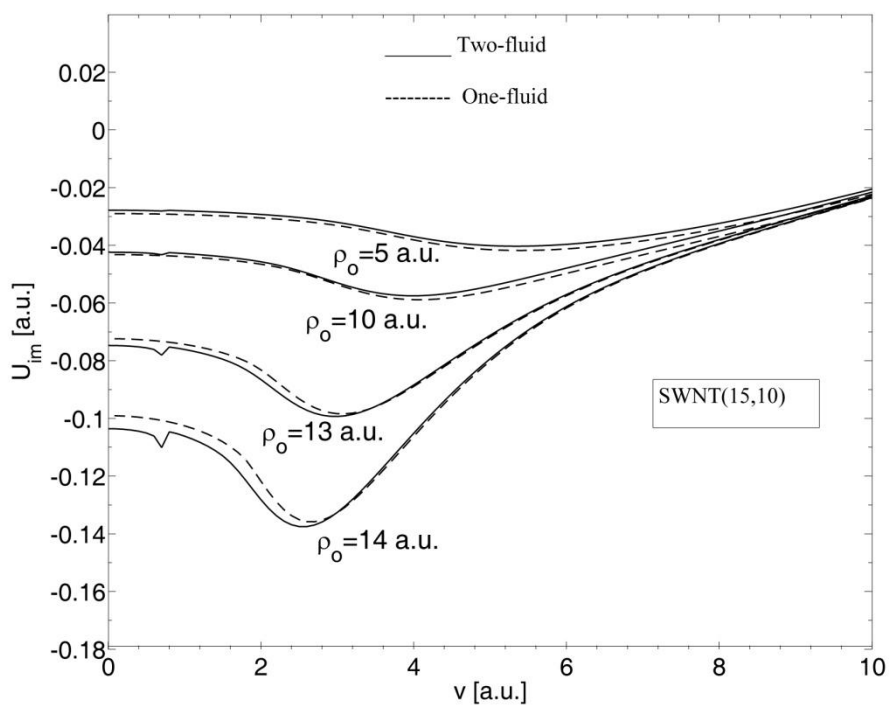
Слика 5.3. Утицај растојања протона на зависност потенцијала лика за SWNT(6,4).



Слика 5.4. Утицај растојања протона на зависност потенцијала лика за SWNT(8,6).



Слика 5.5. Утицај растојања протона на зависност потенцијала лика за SWNT(11,9).



Слика 5.6. Утицај растојања протона на зависност потенцијала лика за SWNT(15,10).

Овај ефекат је праћен јаком индивидуалном поларизацијом π и σ плазмона [27]. У случају већег дијаметра наноцеви (слика 5.6), и положаја протона ближе оси наноцеви, скок у околини $v = 0.71$ а.у. не постоји.

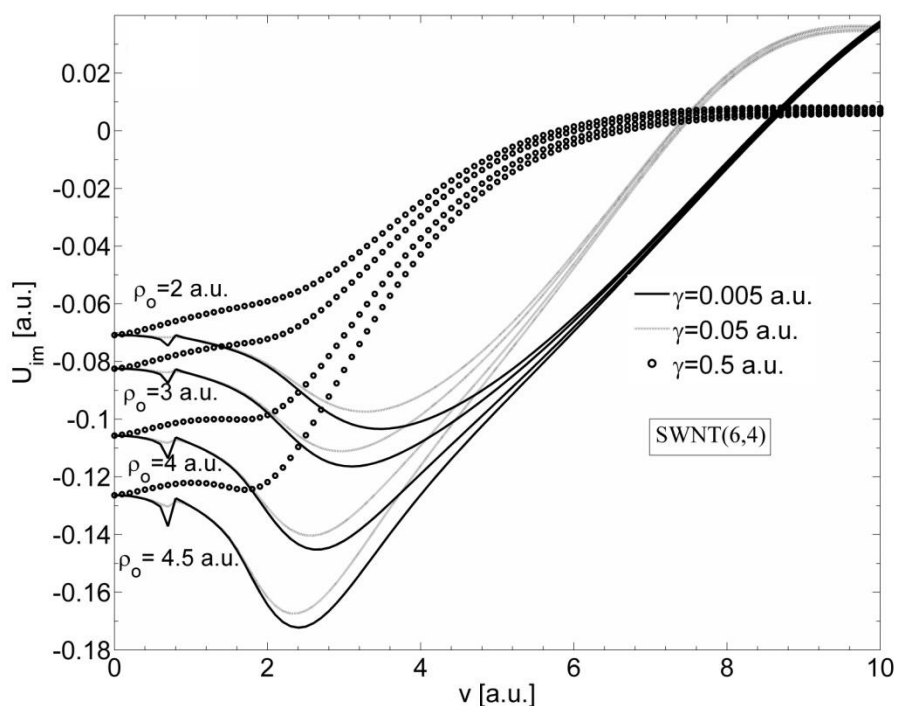
Даље анализирамо утицај фактора пригушења γ (трења између флуида) на зависност потенцијала лика од брзине протона. Анализу спроводимо за три вредности $\gamma = 0.5$, $\gamma = 0.05$ и $\gamma = 0.005$ за протон који се креће кроз SWNT (6, 4).

У првом случају (слика 5.7) анализирамо утицај γ за различите позиције протона ρ_0 од центра наноцеви за двофлуидни модел, док у другом случају (слика 5.8) анализирамо утицај γ за фиксну вредност позиције протона од центра наноцеви $\rho_0 = 4.5$ а.у. у случају једнофлуидног модела (испрекидане линије) и двофлуидног модела (пуне линије).

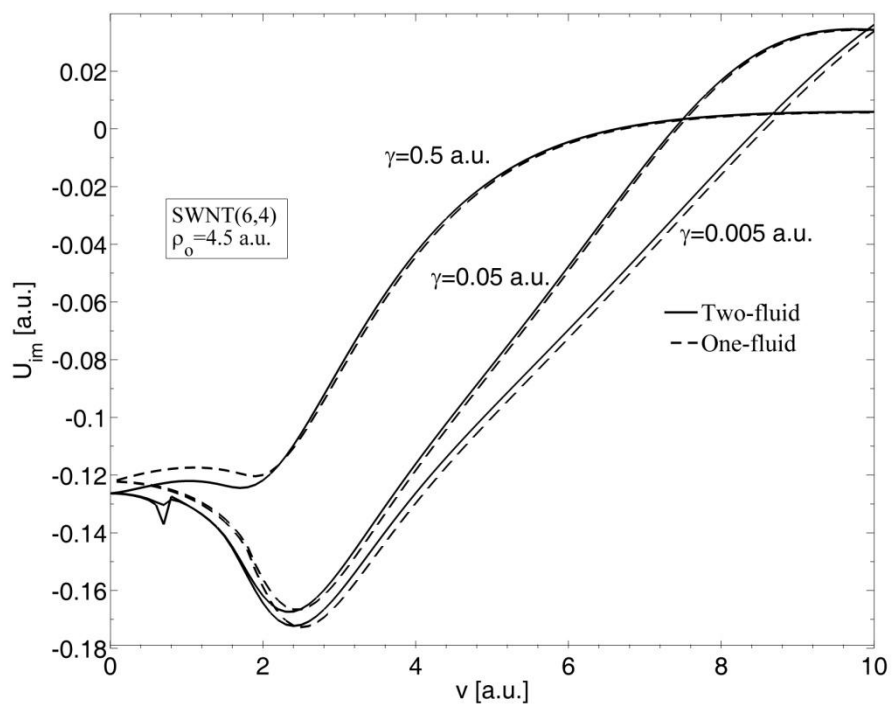
Слика 5.7 показује да у случају веће вредности фактора пригушења γ вредности потенцијала лика су мање за исте брзине и растојања ρ_0 протона од осе наноцеви. Ово се може објаснити да је последица слабије ексцитације плазмона услед присуства позитивно наелектрисаног протона због екстремног слабљења колективних модова изазваног расејањима протона на валентним електронима атома угљеника на зиду наноцеви.

Слика 5.8 показује утицај различитих хидродинамичких модела. Од интереса је уочити како различити степени слабљења утичу на потенцијал лика за три различите вредности фактора пригушења γ за фиксну вредност позиције протона од центра наноцеви $\rho_0 = 4.5$ а.у. и усвојени опсег брзина протона. Такође се може уочити да скок у вредностима за потенцијал лика за брзине око $v = 0.71$ а.у. постепено слаби како се увећава вредност фактора пригушења γ .

На основу ове анализе може се закључити да вредност потенцијала лика јако зависи од фактора пригушења γ , односно од степена инертности плазмона услед „трења“ са зидом наноцеви.

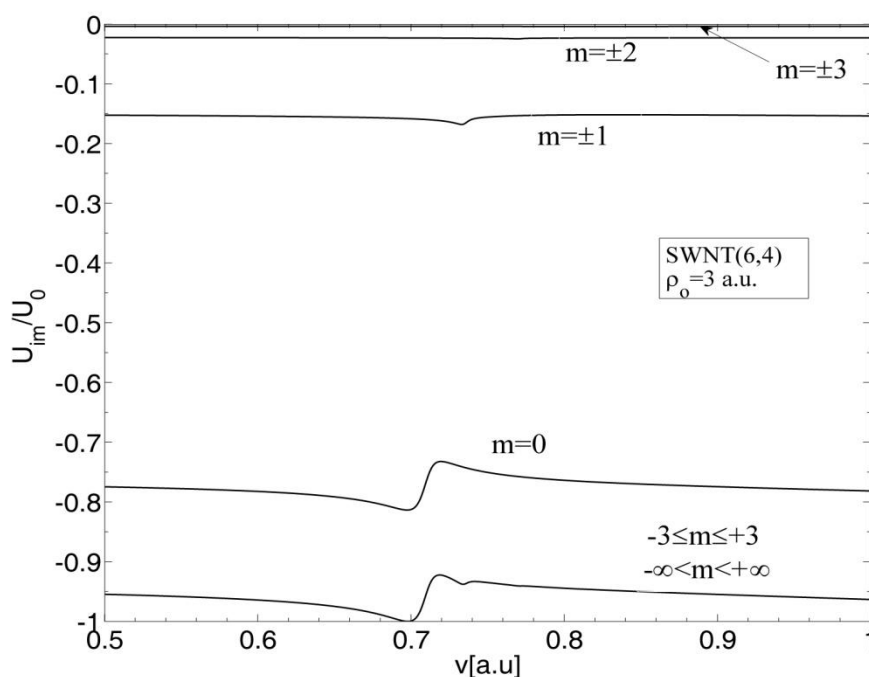


Слика 5.7. Утицај фактора пригушења γ на потенцијал lika за SWNT(6,4).

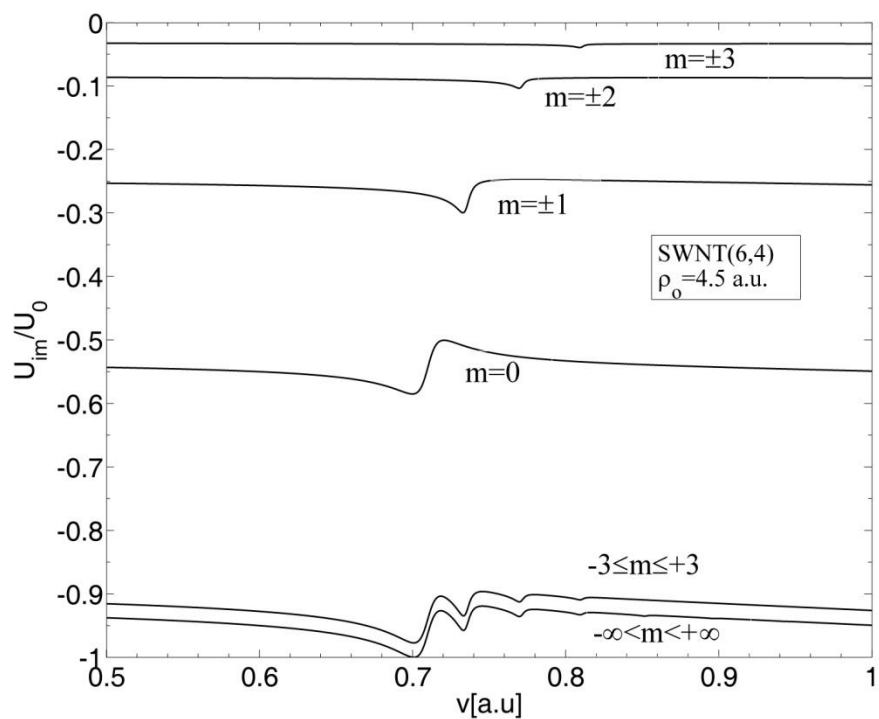


Слика 5.8. Утицај фактора пригушења γ на потенцијал lika (различити модели).

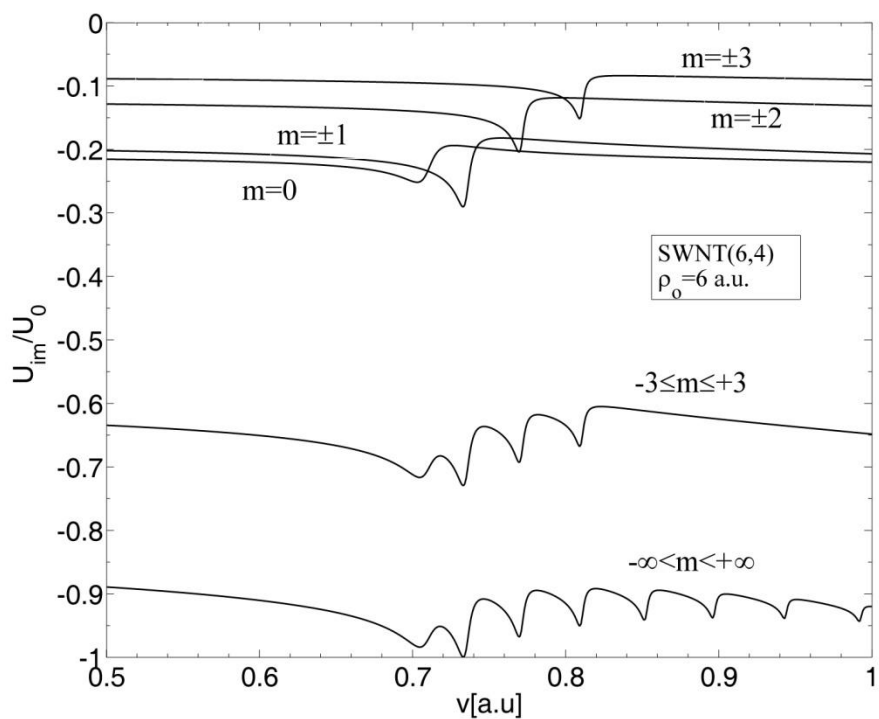
На сликама **5.9**, **5.10**, **5.11** је приказан ефекат утицаја модова ангуларног момента m на нормализовану вредност потенцијала lika U_{im}/U_0 (потенцијал lika подељен са својом максималном вредности у опсегу брзина од 0.5 до 1 а.у.). Сматрамо да се протон креће у наноцеви SWNT(6,4) на растојањима $\rho_0 = 3$ а.у., $\rho_0 = 4.5$ а.у. и $\rho_0 = 6$ а.у. у случају двофлуидног хидродинамичког модела за $\gamma = 0.001$. Потенцијал lika нормализујемо како бисмо што боље упоредили ова три случаја. Претходно смо установили да постоји варијација у вредности за потенцијал lika за брзине у околини $v = 0.71$ а.у. што је посебно приметно када се протон креће у близини зида наноцеви. Овде испитујемо шта је узрок таквом понашању у погледу варијације вредности потенцијала lika. Рачунамо појединачне чланове за потенцијал lika у **једначини 4.64** за вредности m у опсегу $-3 \leq m \leq 3$. За веће вредности мода угаоног момента m , скокови у вредности потенцијала lika за тај мод се дешавају на већим брзинама протона, али интензитет скока се смањује. На поменутиим сликама можемо уочити да је допринос скоковима у вредности потенцијала lika који потиче од чланова за $|m| > 3$, занемарљиво мали за $\rho_0 \leq 4.5$ а.у. У случају $\rho_0 = 3$ а.у., скокови за модове $|m| > 3$ се могу у потпуности занемарити. За $\rho_0 = 4.5$ а.у. чланови за $|m| > 3$ чине мали допринос потенцијалу lika, док за $\rho_0 = 6$ а.у. чланови за $|m| > 3$ чине значајан допринос потенцијалу lika. Наша анализа показује да што је протон ближе зиду наноцеви, допринос чланова за модове са већом вредности m се повећава драстично.



Слика 5.9. Утицај модова m на потенцијала lika за SWNT(6,4) за $\rho_0 = 3$ а.у..



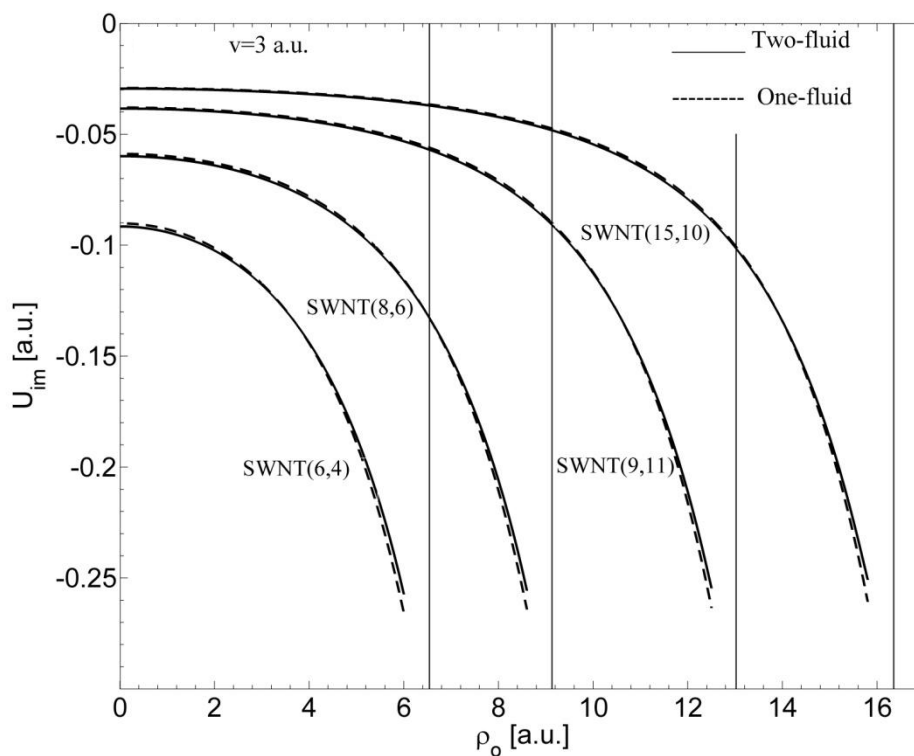
Слика 5.10. Утицај модова m на потенцијала лика за SWNT(6,4) за $\rho_0 = 4.5 \text{ a.u.}$.



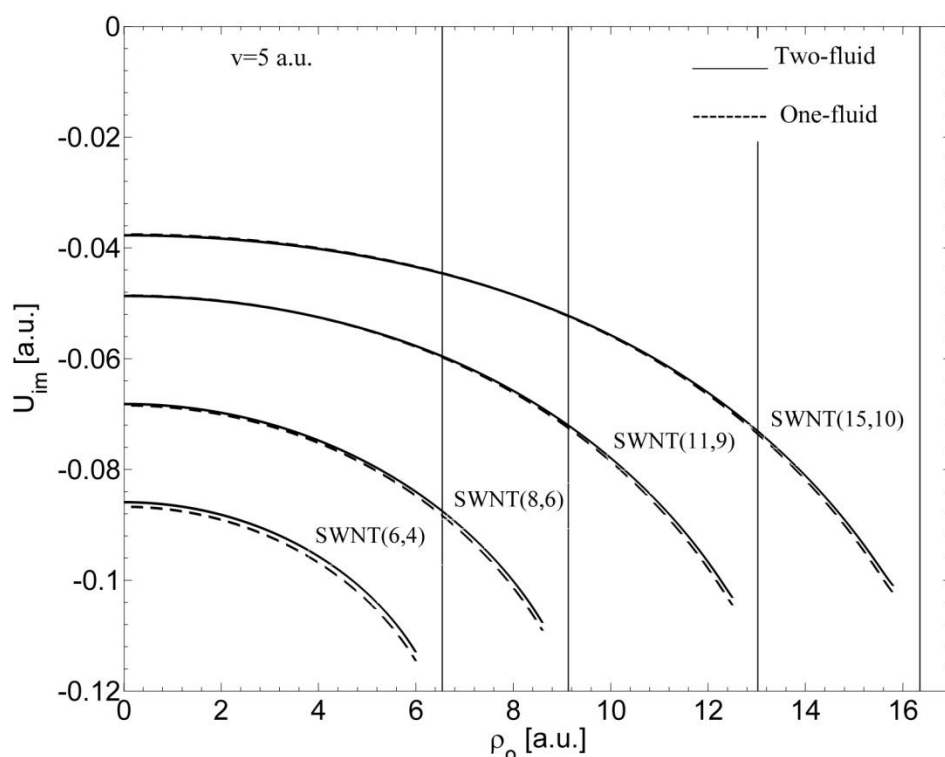
Слика 5.11. Утицај модова m на потенцијала лика за SWNT(6,4) за $\rho_0 = 6 \text{ a.u.}$.

На сликама 5.12 и 5.13 представљен је потенцијал лика за случај каналсања протона када се разматра утицај положаја протона у односу на осу наноцеви уз фиксну вредност његове брзине. Положај протона се мења у опсегу $0 \leq \rho_0 < R - a_{sc}$ а разматрамо утицај две брзине а) $v = 3$ а.у. и б) $v = 5$ а.у. Потенцијале рачунамо за наноцеви SWNT(6,4), SWNT(8,6), SWNT(11,9) и SWNT(15,10) за оба хидродинамичка модела. Пуном линијом су приказани потенцијали лика за двофлуидни модел а испрекиданом за једнофлуидни модел.

Са слика можемо закључити да се вредност потенцијала лика значајно брже мења (расте по апсолутној вредности) приближавањем зиду наноцеви када је брзина протона $v = 3$ а.у. него у случају за $v = 5$ а.у.. За случај двофлуидног модела вредност потенцијала лика је незнатно мања него у случају једнофлуидног модела за исту наноцев за обе посматране брзине протона. Као што се и могло очекивати, видимо да је вредност потенцијала лика знатно већа за исту позицију ρ_0 у случају када је пречник наноцеви мањи, ово можемо објаснити тиме што је протон тада ближи зиду наноцеви па је његов утицај на електронски гас израженији. Такође за SWNT(6,4), разлике између потенцијала лика за једнофлуидни и двофлуидни модел су веће него у случају наноцеви већег радијуса, рецимо SWNT(15,10). Ова разлика је посебно изражена за брзину $v = 5$ а.у..



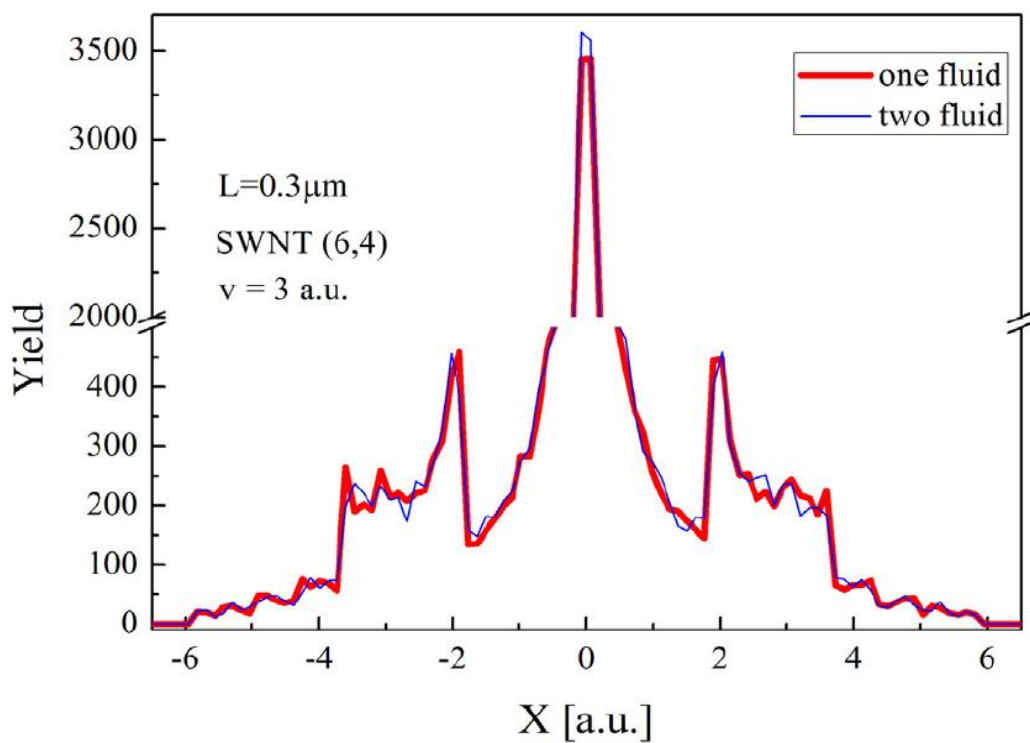
Слика 5.12. Зависност потенцијала лика од позиције протона ρ_0 за $v = 3$ а.у..



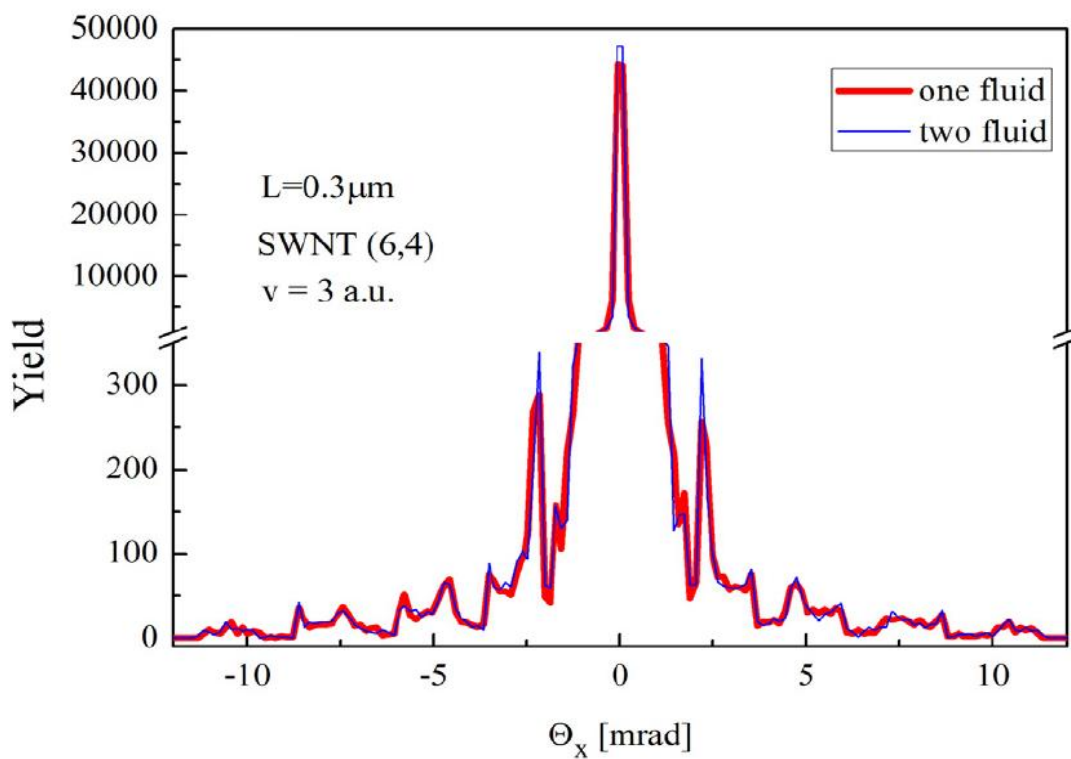
Слика 5.13. Зависност потенцијала lika од позиције протона ρ_0 за $v = 5$ a.u. .

У наставку анализирамо процес каналисања протона у простору наноцеви. Овде до изражаја долазе полазне претпоставке о дужини наноцеви. Сматрамо да су наноцеви кратке тако да занемарујемо промену брзине протона која би утицала и на измену потенцијала lika (пошто како смо видели потенцијал lika зависи од брзине кретања протона). Кретање протона квантитативно описујемо Њутновим једначинама кретања (класична механика). Сматрамо да се на улаз наноцеви усмерава снап протона док се у посматраном тренутку у простору наноцеви налази само један протон (протони један за другим улазе у наноцев). Сматрамо да су на улазу у наноцев протони униформно распоређени по површини попречног пресека наноцеви где уз помоћ Монте Карло симулација анализирамо кретање протонског снопа у простору наноцеви и пратимо концентрацију протона на фиктивном застору који би се нашао непосредно на изласку из наноцеви. На овај начин анализирамо утицај наноцеви на скретање протона односно фокусирање протонског снопа.

У овом конкретном примеру посматрамо протонски снап брзине $v = 3$ a.u., наноцев кроз коју се врши каналисање је SWNT(6,4). Анализу спроводимо за једнофлуидни и двофлуидни модел и вршимо поређење резултата симулације. На **слици 5.14** је приказана просторна расподела протона на застору иза наноцеви док је на **слици 5.15** приказана угаона расподела. Симулација је рађена на узорку од 500000 честица, док је усвојена дужина наноцеви $L = 0.3 \mu\text{m}$.



Слика 5.14. Просторна расподела протона каналисаних кроз SWNT(6,4).



Слика 5.15. Угаона расподела протона каналисаних кроз SWNT(6,4).

У овом поглављу смо анализирали интеракцију протона са четири различита типа наноцеви. У оквиру ове анализе смо користили дводимензионе хидродинамичке моделе: једнофлуидни и двофлуидни. Рачунали смо потенцијале лика за случај кретања протона дуж осе наноцеви и анализирали утицај фактора пригушења, радијуса наноцеви као и позиције протона на вредности потенцијала лика унутар наноцеви. На крају смо анализирали каналисање протона кроз наноцев и рачунали просторне и угаоне расподеле за случај оба хидродинамичка модела.

На основу претходних резултата можемо закључити да је интеракција протона са наноцеви утолико јача уколико је положај протона ближи зиду наноцеви, као и када је радијус наноцеви мањи. Уочили смо да за брзине протона у околини $v = 0.71$ а.у. вредност потенцијала лика нагло варира, али само за случај двофлуидног модела. Двофлуидни модел испољава ово својство када се брзина протона поклапа са фазном брзином квазиакустичног π плазмона. Када је радијус наноцеви већи и позиција протона ближа осе наноцеви, овакви нагли скокови у вредностима потенцијала лика се не дешавају. Такође смо показали да је вредност потенцијала лика веома осетљива на износ фактора пригушења γ . Када је вредност фактора пригушења већа, у околини 0.5, варијације потенцијала лика око брзине протона $v = 0.71$ а.у. ишчезавају. Закључили смо да вредности модова ангуларног момента m у опсегу $(-3, 3)$ имају највећи допринос у износу за потенцијал лика. Показали смо да се просторна и угаона расподела протона у случају каналисања кроз наноцев за једнофлуидни и двофлуидни модел веома мало разликују иако је двофлуидни модел тачнији и прецизнији.

5.3 Двофлуидни и проширени двофлуидни модел: физичке величине, поређење, интеракција јона са наноцеви

У овом поглављу анализирамо интеракцију јона (протона) са наноцеви типа SWNT(6,4) при чему интеракцију са електронима наноцеви моделујемо дводимензионим двофлуидним и проширеним двофлуидним моделом. Рачунамо потенцијал лика, и зауставну силу за протоне који се крећу паралелно са осом наноцеви, где за разлику од претходног поглавља овде посматрамо и случајеве кретања протона ван наноцеви.

Посматрамо протоне брзина у опсегу од 0.5 – 15 а.у. Наноцев посматрамо као цилиндричну структуру одговарајућег радијуса (зависи од типа посматране наноцеви и дужине. Дужина наноцеви је изабрана тако да прелет протона траје довољно кратко да се лонгитудинална компонента брзине кретања протона није значајно променила током кретања кроз наноцев, а такође дужина наноцеви је довољно велика да би се елиминисали ефекти крајева на физичке величине које смо анализирали. Изабрана је дужина од $L = 0.3 \mu\text{m}$.

Такође рачунамо просторне и угаоне расподеле протона при нултом фактору пригушења за оба поменута модела.

Опсег брзина који овде разматрамо одговара енергијама протона 100 keV - 10 MeV, где су ефекти динамичке поларизације изразити. Ван овог опсега енергија динамичка поларизација слабо утиче на кретање протона, односно ефекти пертурбације електронског гаса услед присуства позитивно наелектрисане честице су занемарљиви.

За проширени двофлуидни модел користимо коначне повратне фреквенце и факторе пригушења за σ и π флуиде као у [67]. Као и у претходном поглављу разматрамо утицај ангуларних модова на вредности потенцијала лика у околини брзине протона где вредност потенцијала лика почиње знатно да варира.

За репулзивни потенцијал (интеракција протона са језгрима угљеникових атома) као што смо већ напоменули у претходном поглављу узимамо вредност на основу **израза 3.12**. Величине које фигуришу у овом изразу су идентичне као у претходном поглављу.

Осим репулзивног потенцијала, интеракцију протон – наноцев одређује и потенцијал лика. У случају двофлуидног модела потенцијал лика је дат **изразом 4.63** док је за проширени двофлуидни модел дат **изразом 4.70**. Ово важи када се протон налази унутар простора наноцеви, уколико је протон ван наноцеви (случај који овде такође анализирамо) за потенцијал лика важе изрази **4.64** и **4.71** за двофлуидни, односно проширени двофлуидни модел.

Укупан потенцијал који одређује интеракцију протон – наноцев дат је као:

$$U(\rho_0) = U_{rep}(\rho_0) + U_{im}(\rho_0) \quad (5.2)$$

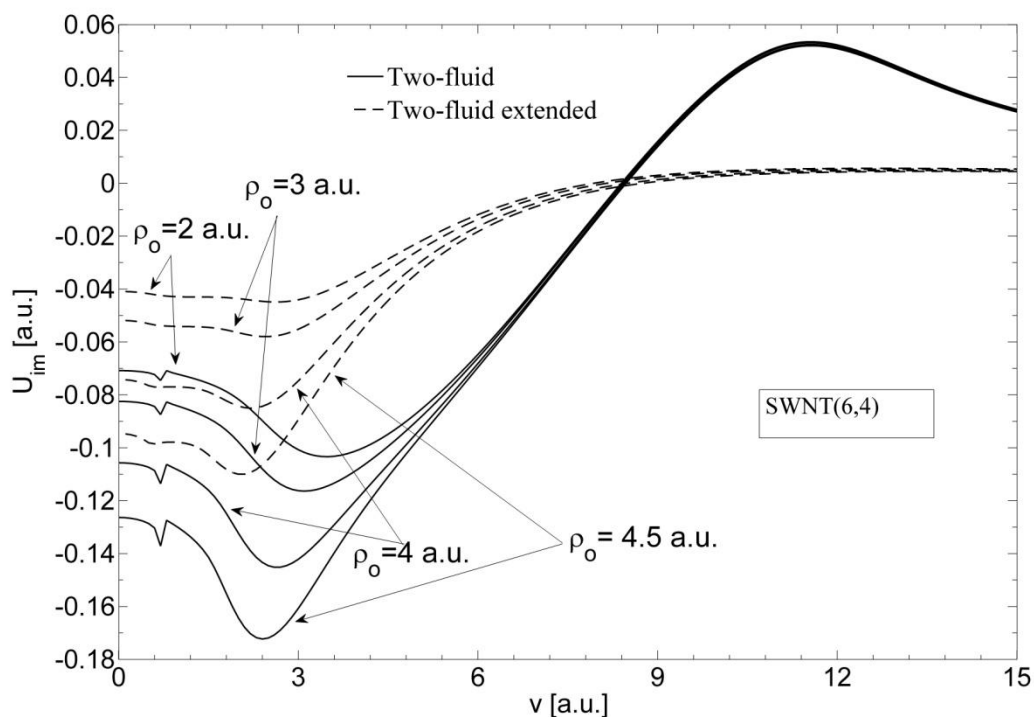
где је ρ_0 растојање протона од центра наноцеви, а U_{rep} , U_{im} су репулзивни потенцијал и потенцијал лика.

Зауоставна сила када се протон налази унутар наноцеви за двофлуидни модел је дата **изразом 4.61** док је за проширени двофлуидни модел дата **изразом 4.68**. Зауоставна сила када се протон налази ван наноцеви за поменуте моделе се рачуна према изразима **4.62** и **4.69**.

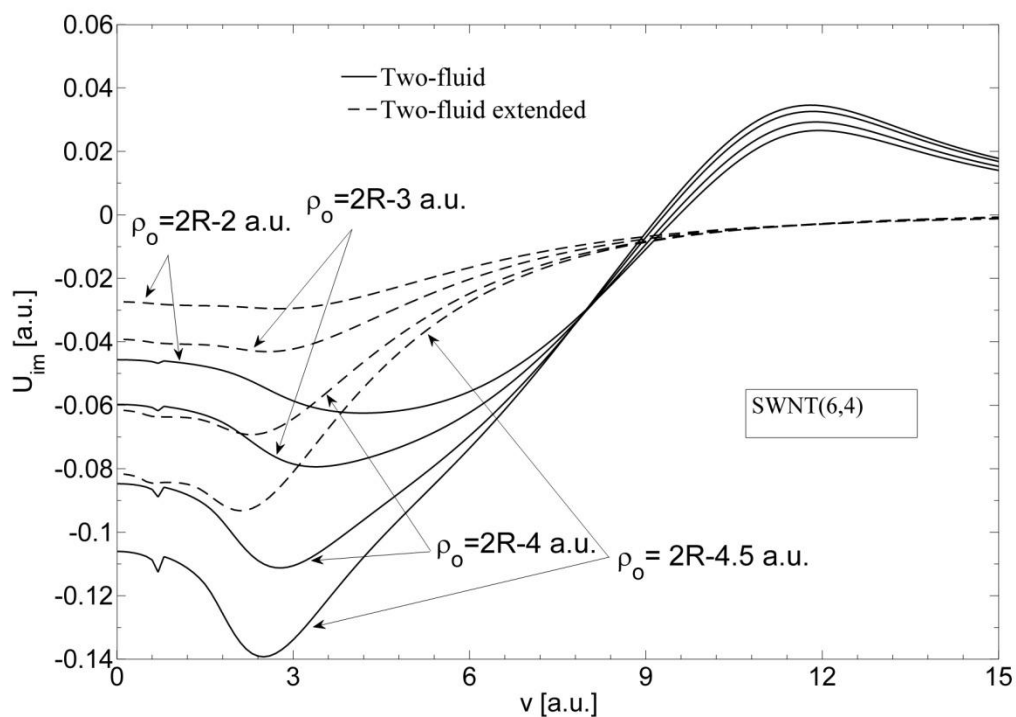
На почетку испитујемо утицај позиције протона ρ_0 на зависност потенцијала лика од брзине протона који се креће кроз наноцев SWNT(6,4) за случајеве: а) када је протон у простору наноцеви и б) када је протон ван простора наноцеви. Позиције протона у односу на осу наноцеви су $\rho_0 = 2, 3, 4, 4.5$ а.у. . Резултати су представљени за:

- двофлуидни хидродинамички модел са параметрима плазмона $\omega_{\sigma r} = 0$, $\omega_{\pi r} = 0$, $\gamma_{\sigma} = 0.001$ и $\gamma_{\pi} = 0.001$,
- проширени двофлуидни хидродинамички модел са параметрима плазмона $\omega_{\sigma r} = 0.48$, $\omega_{\pi r} = 0.15$, $\gamma_{\sigma} = 0.1$ и $\gamma_{\pi} = 0.09$.

Слика 5.16 приказује поменуте потенцијале лика за наведене услове. Добијени резултати нас наводе на закључак да су вредности потенцијала лика генерално мање у случају проширеног двофлуидног модела. У изразима које смо користили за проширени двофлуидни модел постоје чланови окарактерисани као повратне фреквенце (**израз 4.48**) и као што је већ речено узимамо вредности $\omega_{\sigma r} = 0.48 = 13.06$ eV и $\omega_{\pi r} = 0.15 = 4.08$ eV, како је сугерисано у [67]. За двофлуидни модел ови чланови не постоје, али због генерализације их можемо усвојити са нултим вредностима $\omega_{\sigma r} = 0$, $\omega_{\pi r} = 0$. За факторе пригушења у случају двофлуидног модела узимамо вредности $\gamma = \gamma_{\sigma} = \gamma_{\pi} = 0.001$, док за проширени двофлуидни модел узимамо $\gamma_{\sigma} = 0.1 = 2.72$ eV и $\gamma_{\pi} = 0.09 = 2.45$ eV, опет на основу [67]. Можемо закључити да су коначне вредности за повратне фреквенце и факторе пригушења разлог уочене мање вредности потенцијала лика у случају проширеног двофлуидног модела. Интересантно је уочити да у случају двофлуидног модела за брзине протона изнад 8.5 а.у. потенцијал лика има позитивне вредности, при чему се максимум постиже за $v \approx 11.5$ а.у..



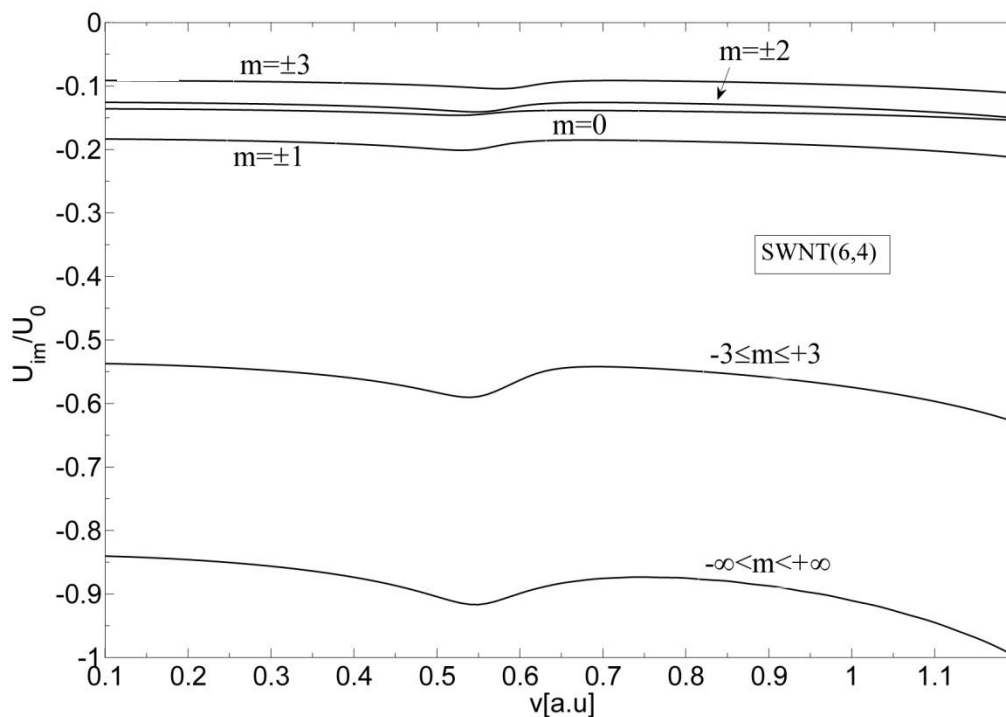
Слика 5.16. Зависност потенцијала lika од брзине протона када је протон у наноцеви.



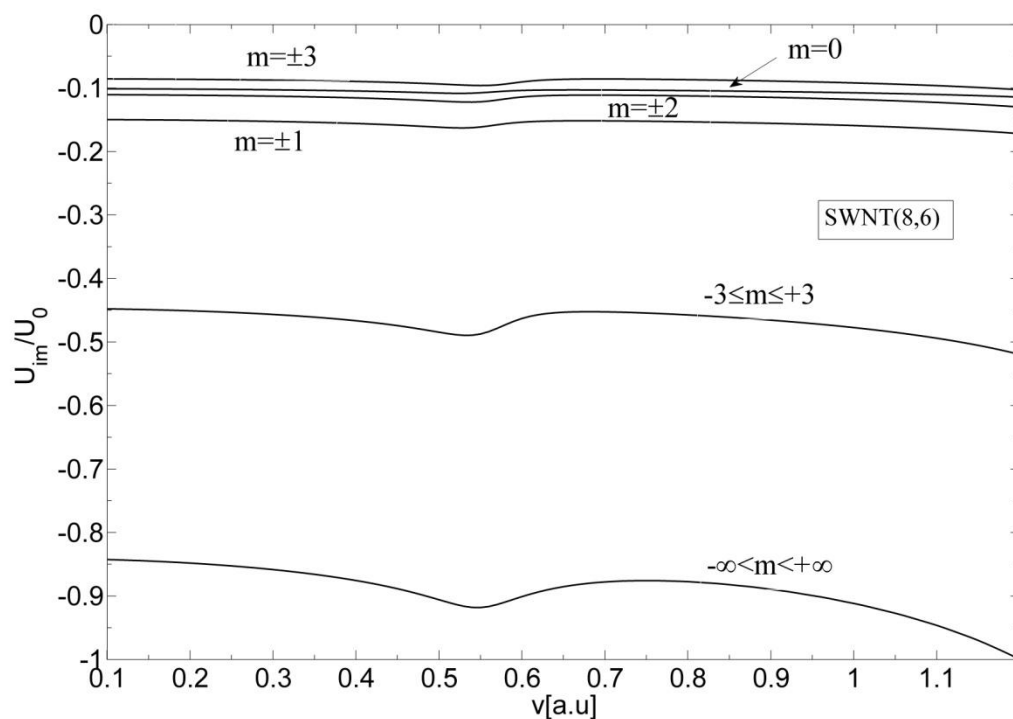
Слика 5.17. Зависност потенцијала lika од брзине протона када је протон **ван** наноцеви.

На **слици 5.17** је приказан утицај положаја протона на зависност потенцијала лика од брзине за двофлуидни и проширени двофлуидни модел с тим што се сада протон налази ван простора наноцеви. Позиције протона су симетричне у односу на зид наноцеви са позицијама које су усвојене у случају кретања протона унутар наноцеви и износе $\rho_0 = 2R-2, 2R-3, 2R-4$ и $2R-4.5$ а.у.. Опсег брзина је исти као у претходном случају. Добијени резултати су веома слични као у претходном случају али не идентични јер и симетрија у ова два случаја није потпуно иста. Вредности за потенцијал лика су опет мање за двофлуидни модел. За брзине протона веће од 9 а.у. у случају двофлуидног модела постоји мало већи градијент вредности потенцијала лика за кретање протона ван наноцеви за иста растојања од зида наноцеви. За све приказане случајеве са слика **5.16** и **5.17** можемо закључити да је зависност потенцијала лика веома осетљива на вредности повратних фреквенци и фактора пригушења.

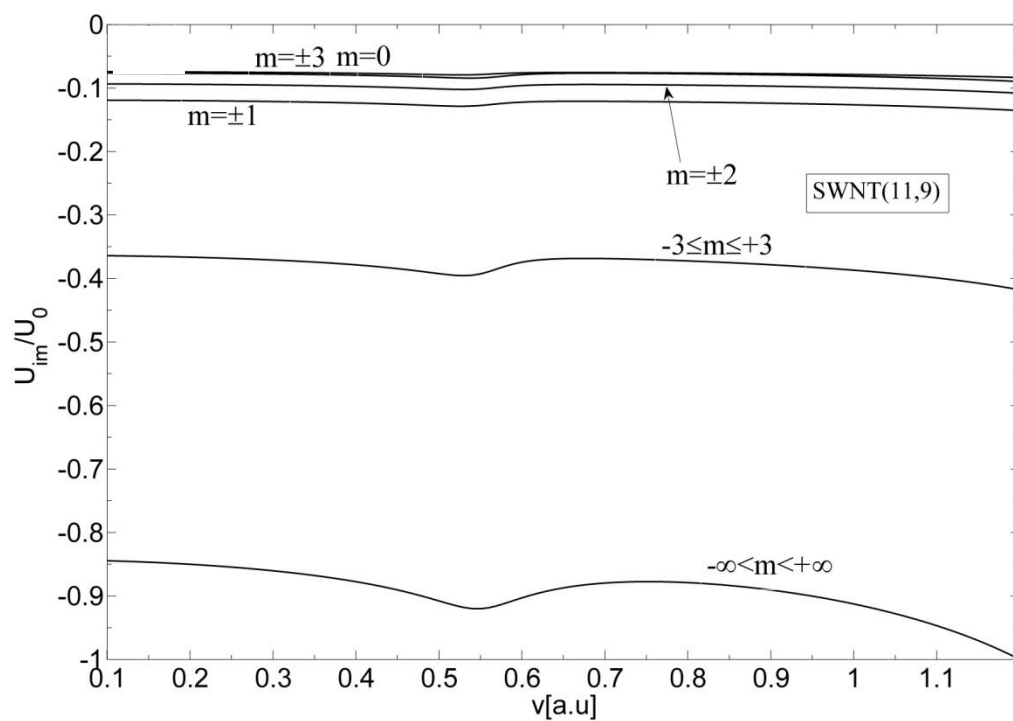
На сликама **5.18-5.21** анализирамо утицај различитих вредности ангуларних модова m на нормализовану вредност потенцијала лика U_{im}/U_0 (потенцијал лика подељен са својом максималном апсолутном вредности у опсегу брзина протона од 0.1 до 1.2 а.у.) за проширени двофлуидни модел. У овој анализи посматрамо четири типа наноцеви SWNT (6, 4) (**слика 5.18**), SWNT (8, 6) (**слика 5.19**), SWNT (11, 9) (**слика 5.20**), SWNT (15, 10) (**слика 5.21**) где су нормализационе вредности U_0 : 0.4782, 0.4754, 0.4675 и 0.4554 респективно.



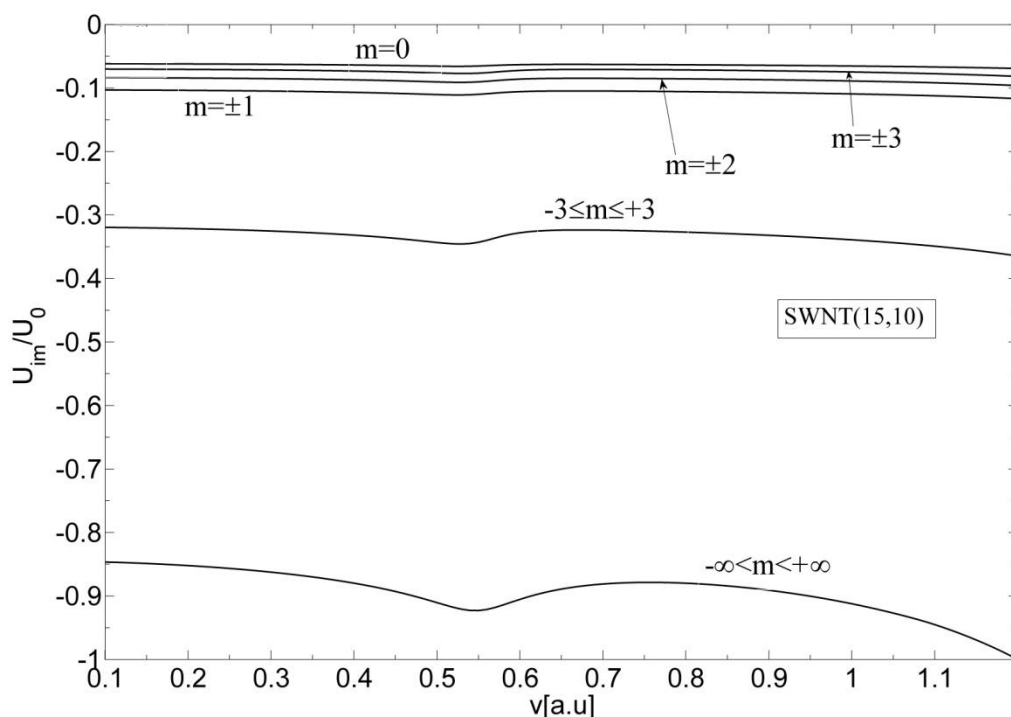
Слика 5.18. Утицај ангуларних модова m на потенцијал лика за SWNT (6, 4).



Слика 5.19. Утицај ангуларних модова m на потенцијал lika за SWNT (8, 6).



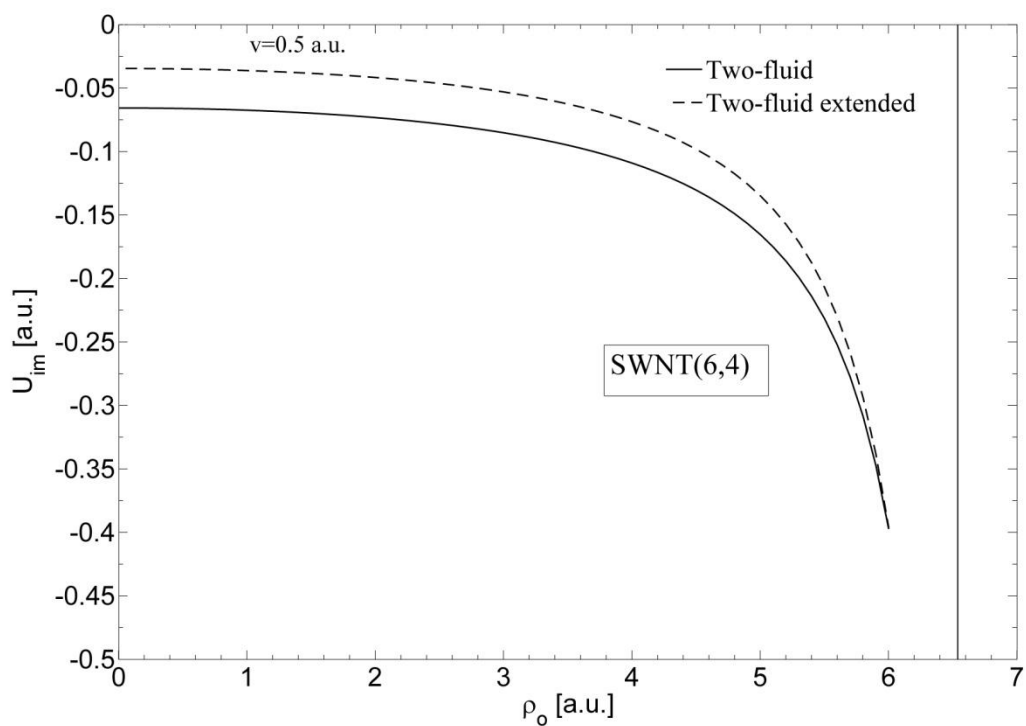
Слика 5.20. Утицај ангуларних модова m на потенцијал lika за SWNT (11, 9).



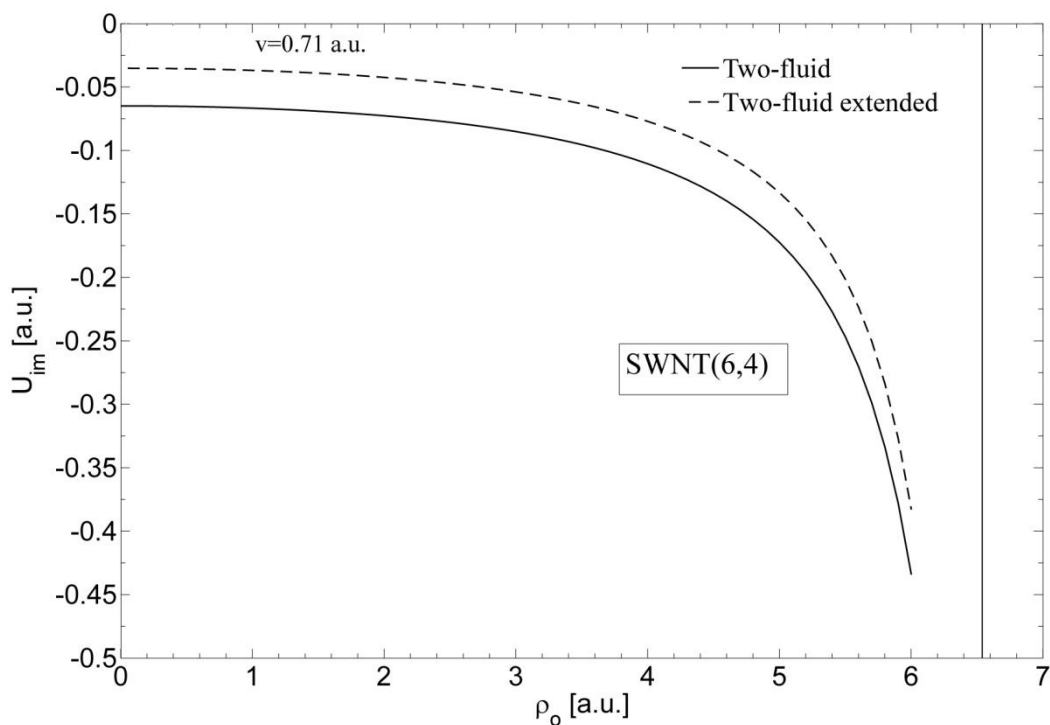
Слика 5.21. Утицај ангуларних модова m на потенцијал лика за SWNT (15, 10).

Анализу спроводимо за растојање протона $\rho_0 = R - a_{sc}$ од осе наноцеви (R је полупречник наноцеви и зависи од посматраног типа, а a_{sc} је радијус екранирања који износи $a_{sc} = [9\pi^2 / (128Z_2)]^{1/3} a_0$, где је a_0 Боров радијус). Рачунамо индивидуалне чланове у изразу за потенцијал лика (израз 4.7) који зависе од m за опсег вредности $-3 \leq m \leq 3$. Овај опсег је изабран јер веће вредности врло мало доприносе вредности потенцијала лика. За сваки тип наноцеви можемо уочити да редуковани потенцијал лика који потиче од једног ангуларног мода (одређена вредност за m) има мали скок у околини брзине протона $v \approx 0.55$ а.у.. За веће радијусе наноцеви утицај чланова у опсегу ангуларног мода $-3 \leq m \leq 3$ на укупну вредност потенцијала лика је мањи. У случају двофлуидног хидродинамичког модела скок у вредности потенцијала лика смо имали на брзинама $v \approx 0.71$ а.у., док се овде скок дешава на знатно мањим брзинама $v \approx 0.55$ а.у.. Ова појава је проузрокована већим вредностима фактора пригушења и повратних фреквенци.

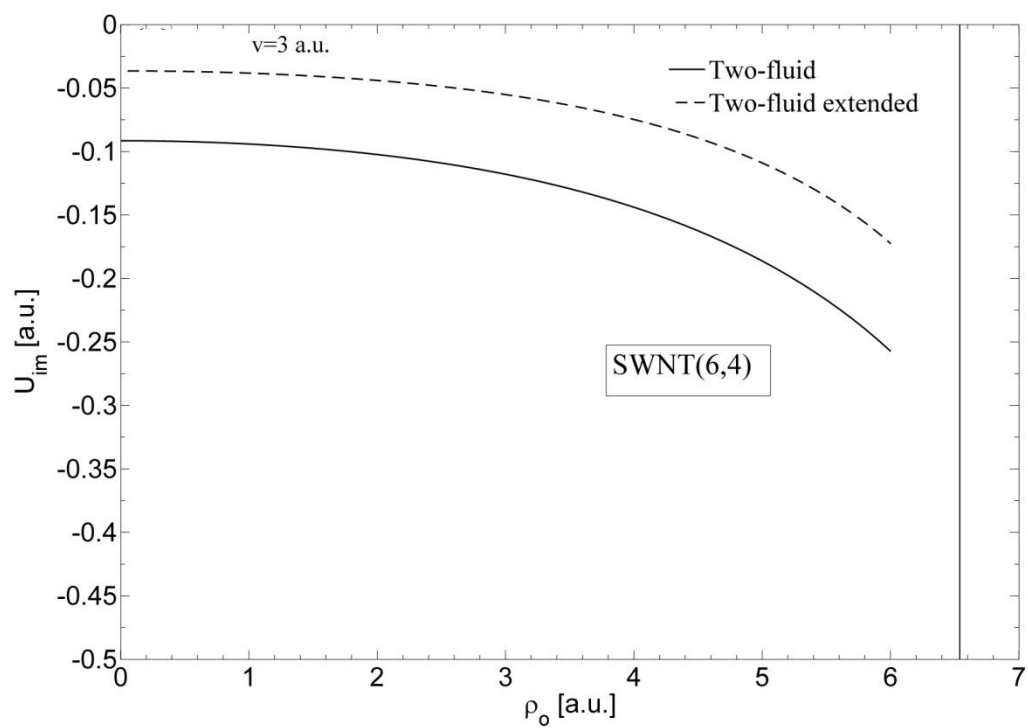
На сликама 5.22-5.25 је приказано како потенцијал лика зависи од растојања протона од осе наноцеви за различите вредности брзине кретања протона. Зависност је рачуната за SWNT (6, 4), док су брзине кретања протона $v = 0.5$ а.у. (слика 5.22), $v = 0.71$ а.у. (слика 5.23), $v = 3$ а.у. (слика 5.24) и $v = 15$ а.у. (слика 5.25). Анализа је спроведена за двофлуидни и проширени двофлуидни модел.



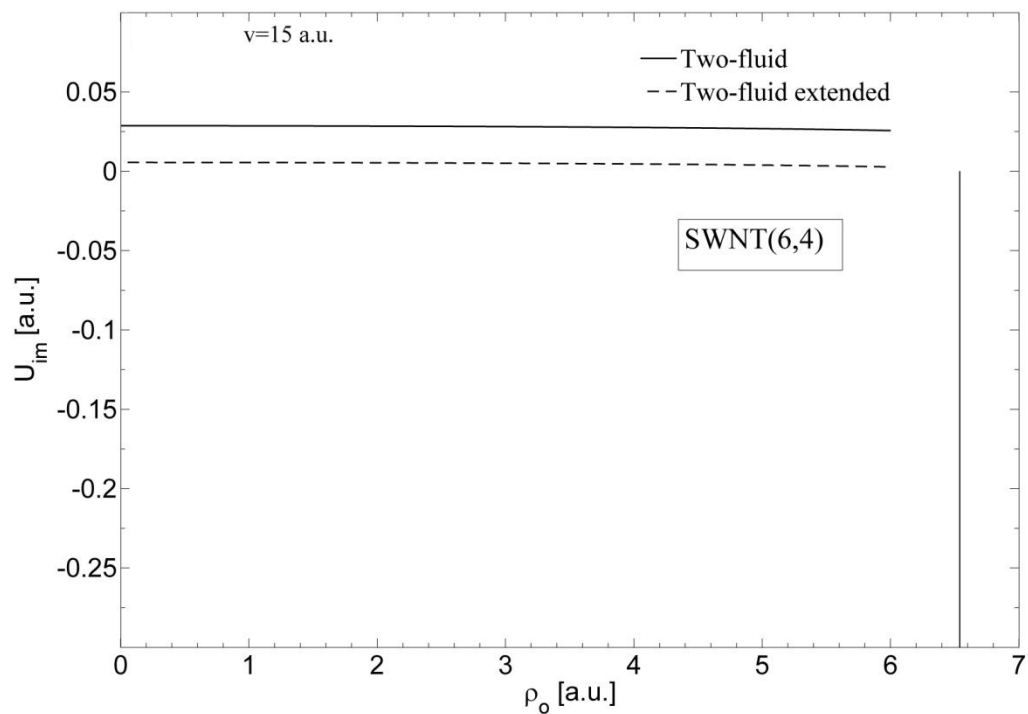
Слика 5.22. Зависност потенцијала лика од положаја протона за SWNT (6, 4) за $v=0.5$ a.u.



Слика 5.23. Зависност потенцијала лика од положаја протона за SWNT (6, 4) за $v=0.71$ a.u.



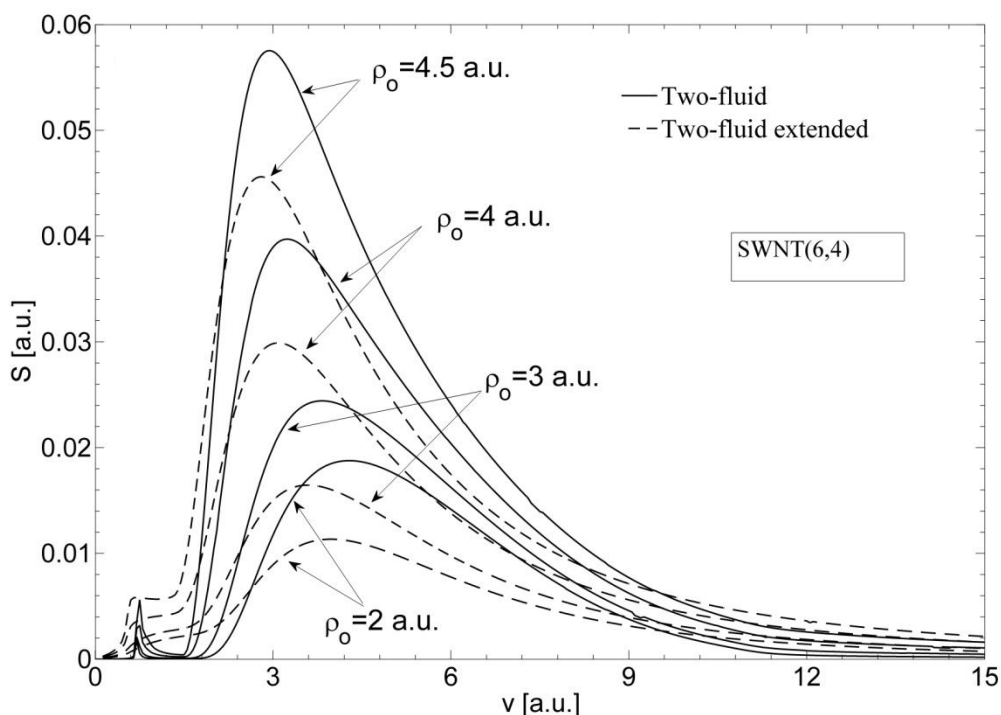
Слика 5.24. Зависност потенцијала лика од положаја протона за SWNT (6, 4) за $v = 3$ a.u.



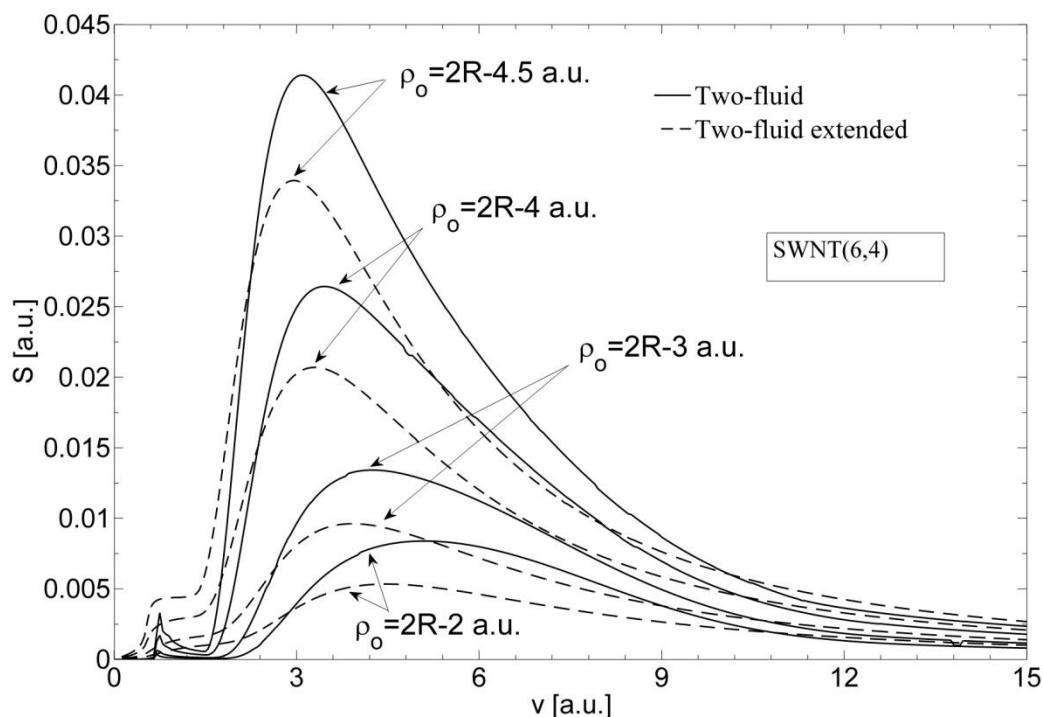
Слика 5.25. Зависност потенцијала лика од положаја протона за SWNT (6, 4) за $v = 15$ a.u.

Апсолутне вредности потенцијала lika су мање у случају проширеног двофлуидног модела невезано за позицију протона. Ово је у складу са претходним закључком у вези односа вредности потенцијала lika за два усвојена хидродинамичка модела. За вредности брзине протона $v = 0.5$ a.u. и $v = 0.71$ a.u. разлика између потенцијала lika у оба модела се смањује када се протон креће ближе зиду наноцеви. За веће брзине кретања протона разлика између вредности потенцијала lika је скоро идентична за сва растојања дуж пречника наноцеви. На **слици 5.25** се може уочити да је вредност потенцијала lika практично константна за оба хидродинамичка модела, што значи да потенцијал lika за веће брзине кретања протона не зависи од позиције трајекторије протона и практично има вредност нула.

На сликама **5.26** и **5.27** је приказано како зауставна сила која се противи лонгитудиналном кретању протона зависи од брзине кретања протона. Анализа се спроводи за наноцев SWNT (6, 4) у две различите ситуације. У првој сматрамо да се протон креће унутар наноцеви, где разматрамо четири различите позиције. Растојања протона од осе наноцеви за овај случај су $\rho_0 = 2, 3, 4$ и 4.5 a.u.. У другој ситуацији сматрамо да је протон ван наноцеви, где су позиције протона симетричне оним у првом случају у односу на зид наноцеви и износе $\rho_0 = 2R-2, 2R-3, 2R-4$ и $2R-4.5$ a.u.



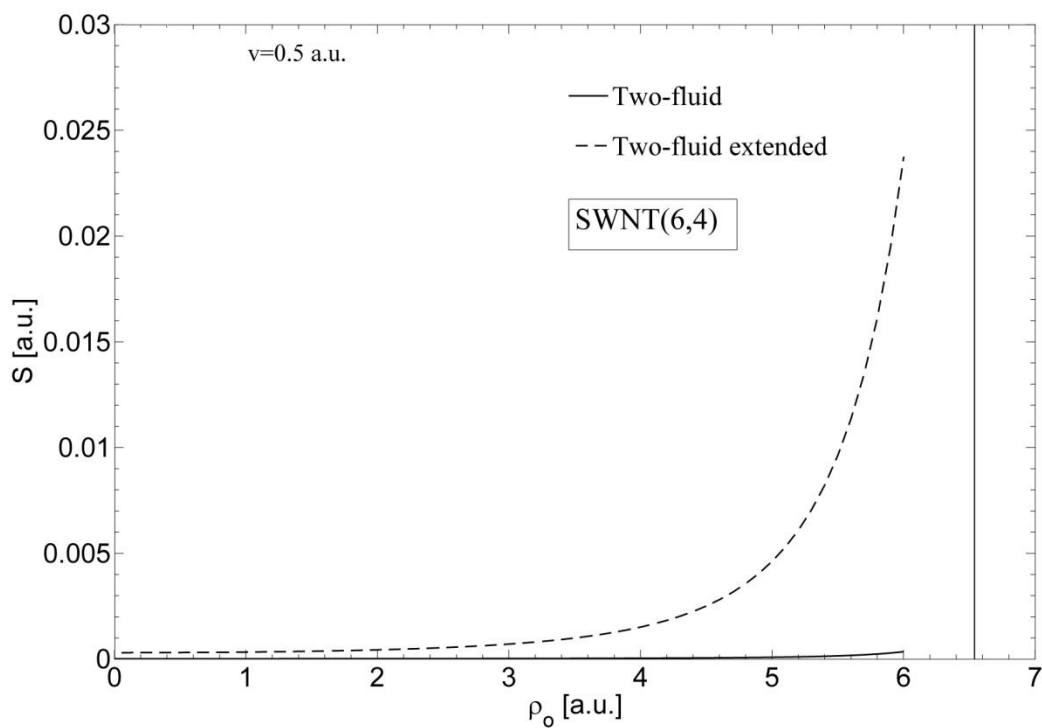
Слика 5.26. Зависност зауставне силе од брзине протона за SWNT (6, 4) када је протон у наноцеви.



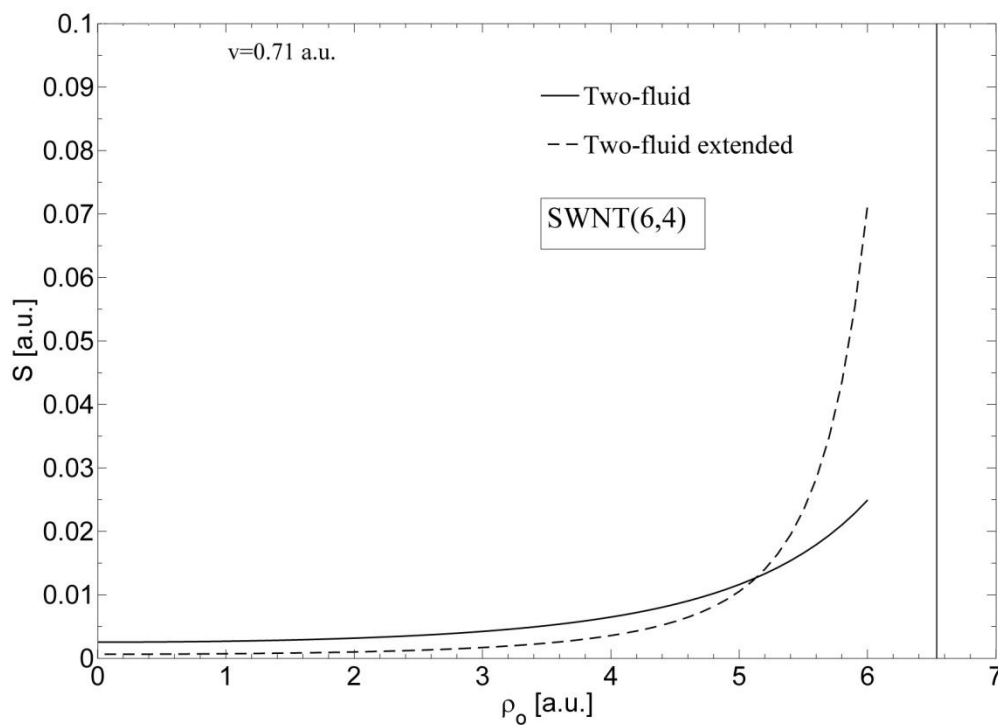
Слика 5.27. Зависност зауставне силе од брзине протона за SWNT (6, 4) када је протон ван наноцеви.

Резултате који смо добили у оба случаја кретања протона су слични. Зауставна сила је значајно мања у случају проширеног двофлуидног модела за брзине протона у опсегу $0 \leq v \leq 9$ a.u.. Овакво понашање се може објаснити различитим вредностима параметара којима су описани хидродинамички модели, за двофлуидни имамо $\omega_{\sigma r} = 0$, $\omega_{\pi r} = 0$, $\gamma_{\sigma} = 0.001$ и $\gamma_{\pi} = 0.001$, док за проширени двофлуидни модел имамо $\omega_{\sigma r} = 0.48$, $\omega_{\pi r} = 0.15$, $\gamma_{\sigma} = 0.1$ и $\gamma_{\pi} = 0.09$. Вредности ових параметара јако утичу на вредности зауставне силе. Највећу вредност зауставна сила има за брзине протона у опсегу 3 a.u. и 5 a.u. и када је протон најближи зиду наноцеви.

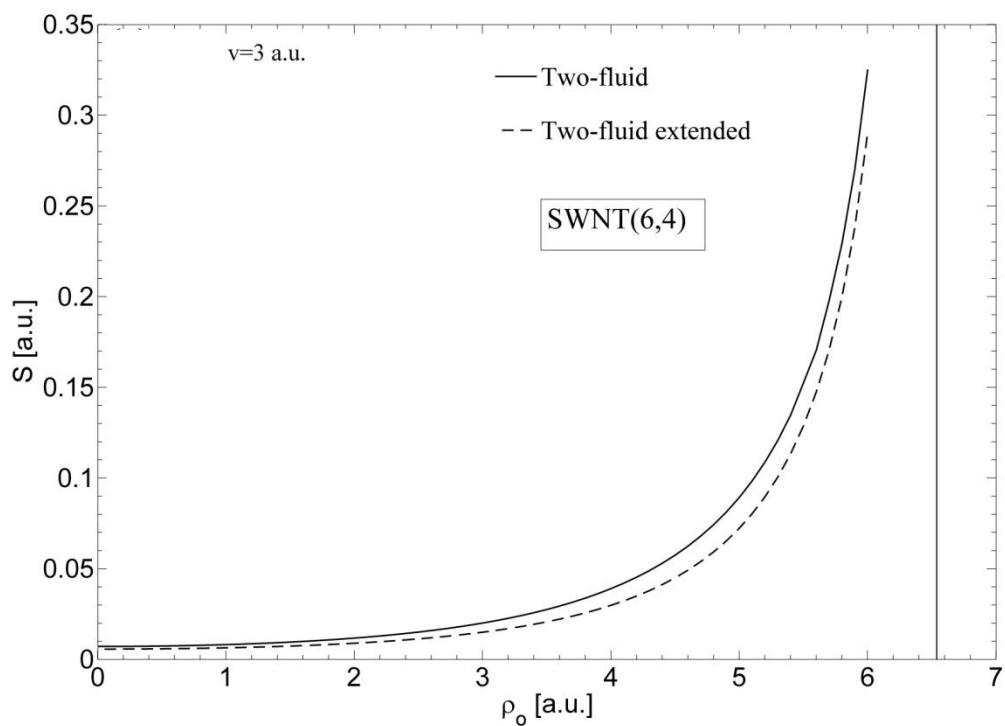
На сликама **5.28-5.31** приказано је како зауставна сила зависи од позиције трајекторије протона ρ_0 каналисаног кроз SWNT (6, 4). Сматрамо да се протон налази у наноцеви. Зауставну силу рачунамо за двофлуидни и проширени двофлуидни модел. Сматрамо да се позиција трајекторије кретања протона налази у опсегу $0 \leq \rho_0 \leq R - a_{sc}$. Прорачун спроводимо за четири брзине протона: $v = 0.5$ a.u. (слика **5.28**), $v = 0.71$ a.u. (слика **5.29**), $v = 3$ a.u. (слика **5.30**) и $v = 15$ a.u. (слика **5.31**), где сматрамо да је брзина кретања протона константна.



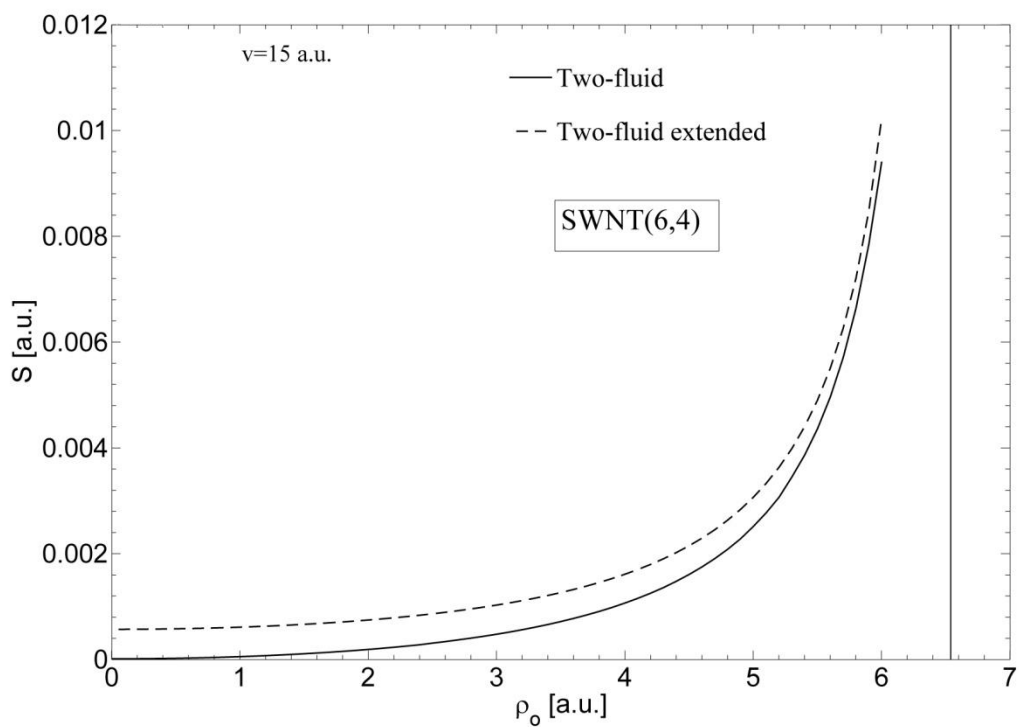
Слика 5.28. Зависност зауставне силе од позиције протона за SWNT (6, 4) за $v = 0.5$ а.у..



Слика 5.29. Зависност зауставне силе од позиције протона за SWNT (6, 4) за $v = 0.71$ а.у..



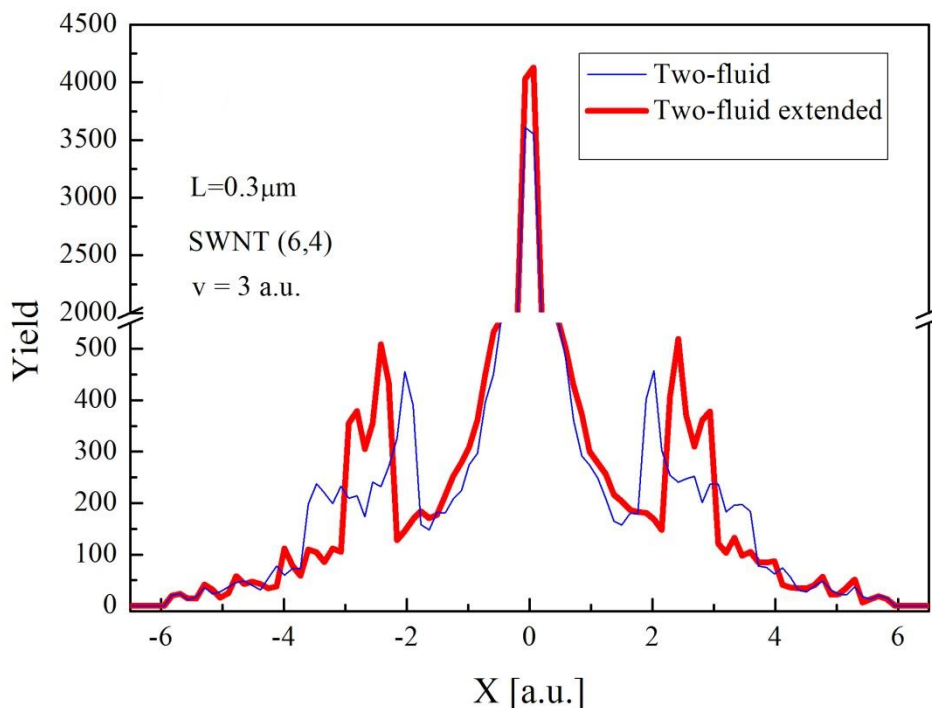
Слика 5.30. Зависност зауставне силе од позиције протона за SWNT (6, 4) за $\nu = 3$ а.у..



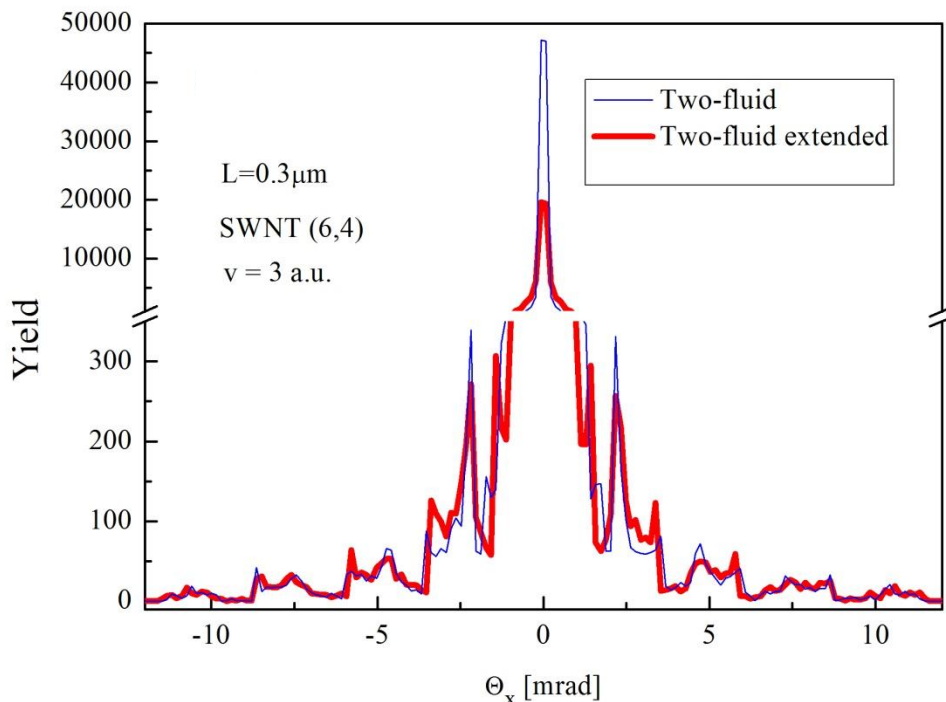
Слика 5.31. Зависност зауставне силе од позиције протона за SWNT (6, 4) за $\nu = 15$ а.у..

Апсолутне вредности зауставне силе су углавном мање за двофлуидни модел без обзира на позицију трајекторије протона. Разлог за овакво понашање је у вредностима фактора пригушења који у случају двофлуидног модела имају веома мале вредности $\gamma_\sigma = \gamma_\pi = \gamma = 0.001$, док су у случају проширеног модела вредности знатно веће и износе $\gamma_\sigma = 0.1 = 2.72$ eV и $\gamma_\pi = 0.09 = 2.45$ eV. За мање брзине кретања протона, разлика између вредности зауставних сила за двофлуидни и проширени двофлуидни модел је велика, како се брзина повећава тако и ова разлика опада. Када се протон приближава зиду наноцеви, вредности за зауставну силу јако расту и за један и за други модел, што се може објаснити већим интензитетом интеракције протона са електронским гасом.

На **слици 5.32** приказујемо просторну расподелу протона каналисаних кроз наноцев SWNT (6, 4), брзина протона је $v = 3$ a.u.. Симулација је рађена за оба хидродинамичка модела. **Слика 5.33** представља угаону дистрибуцију протона каналисаних кроз исту наноцев истом брзином. Симулација је такође рађена за оба модела. Може се уочити да се просторна и угаона расподела добијена у случају проширеног двофлуидног хидродинамичког модела разликују од истих расподела за проширени двофлуидни модел. Приноси централних максимума су већи у случају проширеног двофлуидног модела за просторну расподелу, док је обрнута ситуација за угаону расподелу.



Слика 5.32. Просторна расподела протона каналисаних у SWNT (6, 4).



Слика 5.33. Угаона расподела протона каналисаних у SWNT (6, 4).

Позиције периферних максимума у просторној и угаоној расподели у проширеном двофлуидном моделу су мало померене у односу на двофлуидни модел, такође и ширина ових максимума се мало разликује. Разлика је већа за случај двофлуидни – проширени двофлуидни модел, него у случају двофлуидни – једнофлуидни модел. Овакав ефекат је последица утицаја различитих фактора пригушења и повратних фреквенци.

У овом поглављу смо разматрали ефекте динамичке поларизације (потенцијал лика и зауставна сила) као последицу интеракције позитивно наелектрисане честице и зида наноцеви. Анализа је рађена превасходно за SWNT(6, 4) наноцев за случај моделовања електронског гаса на зидовима наноцеви двофлуидним и проширеним двофлуидним моделом. Рачунали смо потенцијал лика и зауставну силу за случај када се протон креће паралелно са осом наноцеви унутар и ван наноцеви. Анализирали смо како брзина, као и положај протона, утичу на поменуте физичке величине. Такође смо разматрали утицај ангуларних модова на вредност потенцијала лика. На крају смо радили симулацију кретања протонског снопа кроз унутрашњост наноцеви и анализирали просторну и угаону расподелу честица на фиктивном застору непосредно иза наноцеви. Можемо закључити да је интеракција протона са наноцеви најјача у опсегу брзина протона 3 и 5 a.u.. Такође интеракција постаје израженија како се протон приближава зиду наноцеви, као и када се

креће кроз наноцеви мањег радијуса. Интеракција протона са наноцеви када се протон креће унутар и ван наноцеви је слична. У двофлуидном моделу за брзине протона 8.5 а.у. вредности за потенцијал лика постају позитивне, док се максимум постиже за брзине око $v \approx 11.5$ а.у.. Такође можемо уочити да у околини брзине $v = 0.71$ а.у. (када се брзина честице поклапа са фазном брзином квазиакустичког π плазмона) и потенцијал лика и зауставна сила имају скоковиту промену, али само за случај двофлуидног модела. За проширени двофлуидни модел, ова промена се дешава на мањим брзинама, око $v \approx 0.55$ а.у. и доста је мање изражена. Такође можемо закључити да вредности ангуларних модова m у опсегу $(-3, 3)$ највише утичу на вредност потенцијала лика за сва четири типа наноцеви који се разматра у овом раду. Што је радијус наноцеви мањи то је утицај поменутих модова већи. Видели смо такође да је каналисање протонских снопова кроз наноцев SWNT(6, 4) различито у случају различитих модела (овде двофлуидног и проширеног двофлуидног).

Општи закључак би био да се ефекти динамичке поларизације морају урачунати приликом симулације или анализа кретања (каналисања) протона енергија 100 keV - 10 MeV кроз наноцеви. За вредности енергије протона изнад 10 MeV одзив електронског гаса наноцеви је довољно спор тако да се тада приликом рачунања трајекторије протона, угаоних и просторних расподела ови ефекти занемарују [69-71].

5.4 Каналисање јона кроз праве и закривљене наноцеви у двофлуидном и проширеном двофлуидном моделу

У овом поглављу анализирамо интеракцију позитивно наелектрисаних честица (протона, јона) са правим и закривљеним наноцевима у оквиру двофлуидног и проширеног двофлуидног модела. Рачунамо потенцијал лика за протоне који се крећу кроз четири типа наноцеви:

- SWNT (6, 4)
- SWNT (8, 6)
- SWNT (11, 9)
- SWNT (15, 10)

при брзини од 3 а.у. Рачунамо укупни потенцијал у закривљеним наноцевима. Анализирамо процес каналисања протонских снопова кроз праве и закривљене наноцеви. Рачунамо просторну и угаону расподелу и симулирамо приказе електронског детектора на застору непосредно иза наноцеви. За проширени двофлуидни модел параметре узимамо као и у претходном поглављу на основу експерименталних резултата за графен.

За репулзивни потенцијал (интеракција протона са језгрима угљеникових атома) као што смо већ напоменули у претходном поглављу узимамо вредност на основу **израза 3.12**. У овом изразу за константе узимамо следеће вредности:

$$a_j = \{ 0.115, 0.188, 0.072, 0.020 \},$$

$$b_j = \{ 0.547, 0.989, 1.982, 5.656 \},$$

на основу [13], где су ово вредности изражене у атомским јединицама.

Осим репулзивног потенцијала, интеракцију протон – наноцев одређује и потенцијал лика. У случају двофлуидног модела потенцијал лика је дат **изразом 4.63**, док је за проширени двофлуидни модел дат **изразом 4.70**. Кретање протона анализирамо искључиво унутар наноцеви, при чему у овом случају узимамо дужину наноцеви од $L = 0.2 \mu\text{m}$ (и за праве и закривљене наноцеви).

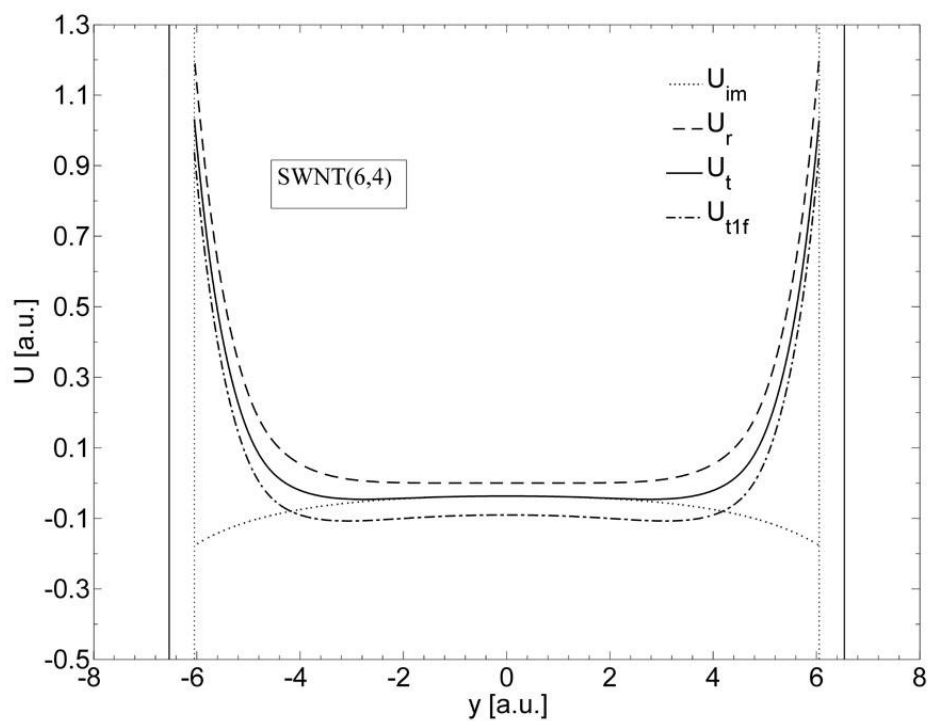
Сматрамо да су криве наноцеви закривљене дуж позитивног дела у осе са углом закривљења $\alpha = 4 \text{ mrad}$. Закривљене наноцеви су анализирани у **поглављу 4.6**, где је речено да се ефекат закривљења огледа у измењеној вредности укупног потенцијала који је дат **изразом 4.74**, где је R_b радијус кривине који износи $R_b = L / \alpha$. Укупни потенцијал код закривљених наноцеви се разликује од укупног потенцијала код правих наноцеви управо за члан који потиче од центрифугалне силе и дат је као:

$$U_t(\rho_0) = U_{rep}(\rho_0) + U_{im}(\rho_0) + mv_0^2 y / R_b, \quad (5.3)$$

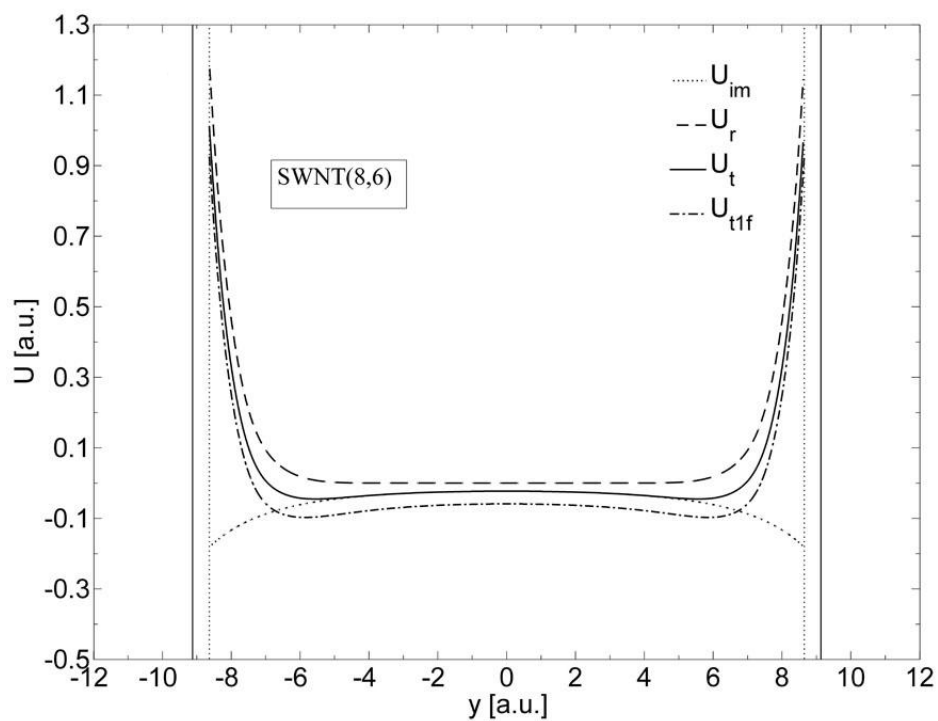
док је за праве наноцеви дат **изразом 5.2.**

Каналисање јона кроз наноцев је програмски симулирано Монте Карло методом где је на основу симулације генерисана просторна и угаона расподела, као и просторни приказ попречног пресека снопа протона на излазу из наноцеви. Почетне позиције трајекторије протона x_0 и y_0 су узимане као случајне вредности са униформном 2Д расподелом при услову $\rho_0 = (x_0^2 + y_0^2)^{1/2} < R - a_{sc}$, где је $a_{sc} = [9\pi^2 / (128Z_2)]^{1/3} a_0$ радијус екранирања атома наноцеви, а a_0 је Боров радијус. Тренутна позиција протона је добијена нумеричким решавањем једначина кретања у трансверзалној равни (нормално на осу наноцеви).

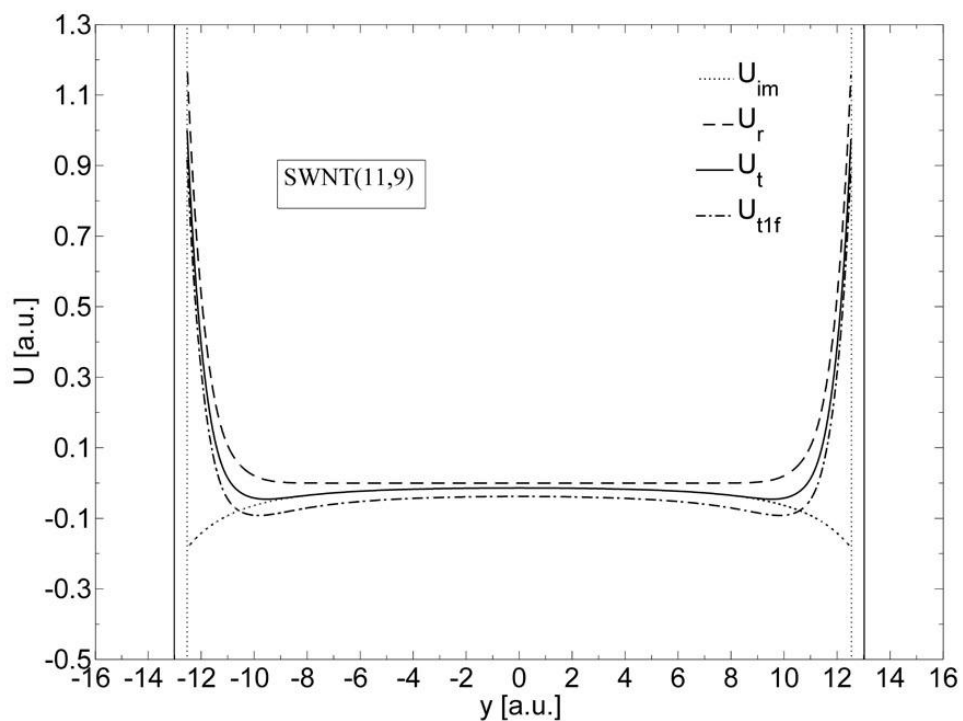
Слике **5.34-5.37** приказују како потенцијал лика U_{im} , репулзивни потенцијал U_r и тотални потенцијал U_t зависе од позиције протона ρ_0 од центра наноцеви. Рачун је спроведен за сва четири типа наноцеви при брзини протона од $v = 3$ а.у. и фактору пригушења $\gamma = 0.005$. Радијуси наноцеви су $R = 0.346, 0.483, 0.689$ и 0.865 nm за SWNT (6, 4), (8, 6), (11,9) и (15,10), респективно. Вертикалне испрекидане линије представљају границу до које је вршен прорачун поменутих величина и налазе се на растојању $R - a_{sc}$ од осе наноцеви. Приликом кретања протона се може десити да протон напусти ову област ($\rho_0 < R - a_{sc}$), у том случају сматрамо да је протон деканалисан и даље не разматрамо његово кретање. У свим случајевима потенцијали су цилиндрично симетрични, то јест важи $U_i(\rho_0) = U_i(-\rho_0)$ ($i = im, r, t$). На сликама се такође може видети утицај потенцијала лика U_{im} на тотални потенцијал U_t . Тотални потенцијал је ефективно мањи уколико урачунавамо и потенцијал лика U_{im} и постаје привлачан у неким областима наноцеви.



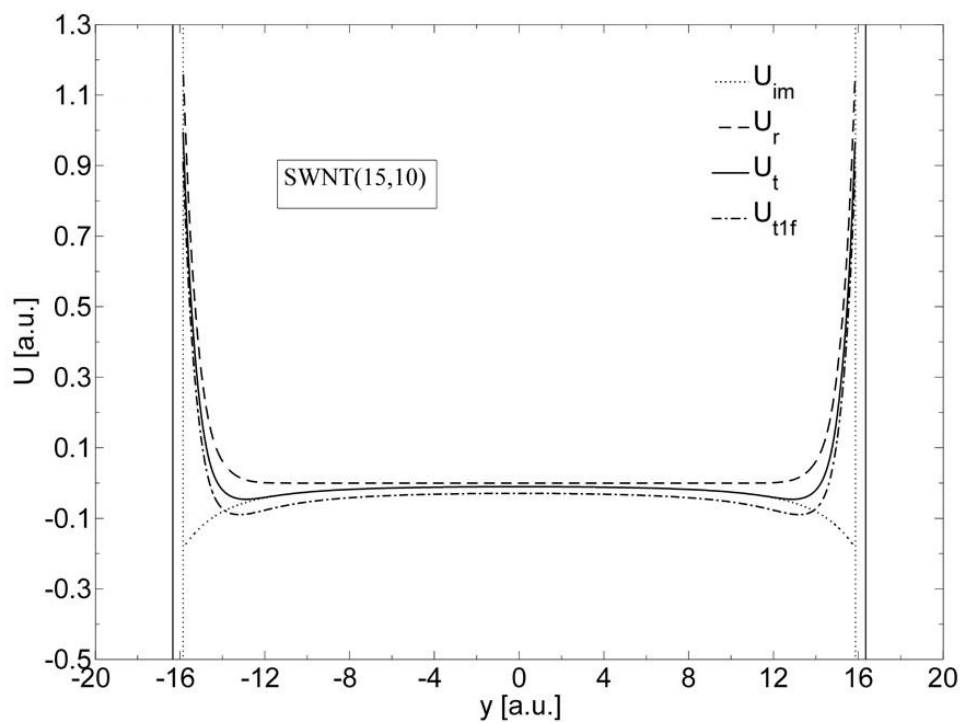
Слика 5.34. Потенцијали у наноцеви SWNT(6,4) приликом каналисања протона.



Слика 5.35. Потенцијали у наноцеви SWNT(8,6) приликом каналисања протона.



Слика 5.36. Потенцијали у наноцеви SWNT(11,9) приликом каналисања протона.

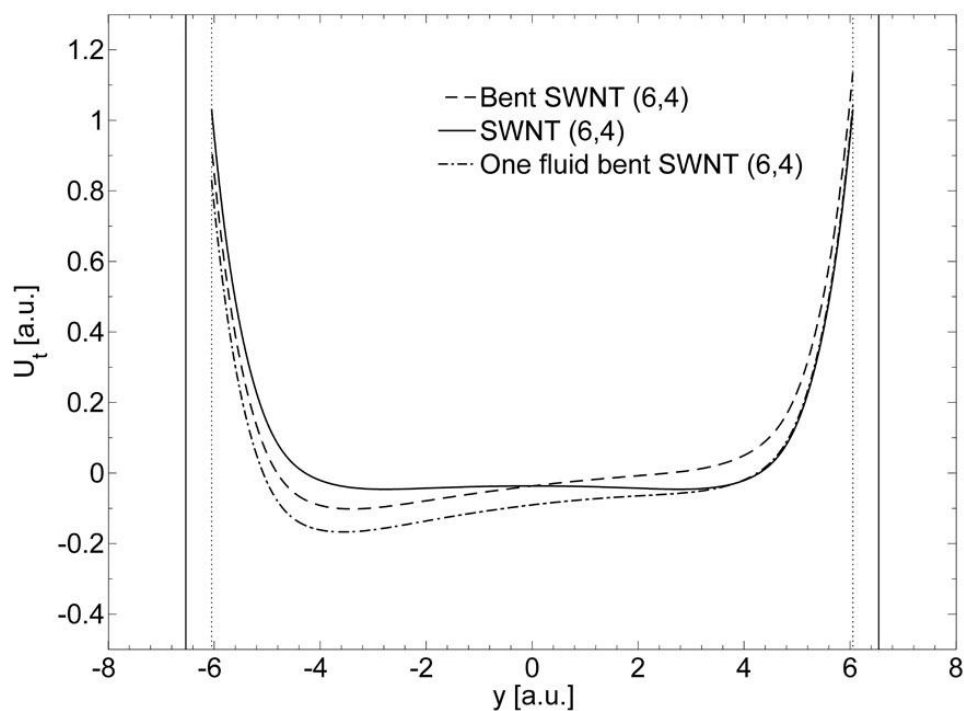


Слика 5.37. Потенцијали у наноцеви SWNT(15,10) приликом каналисања протона.

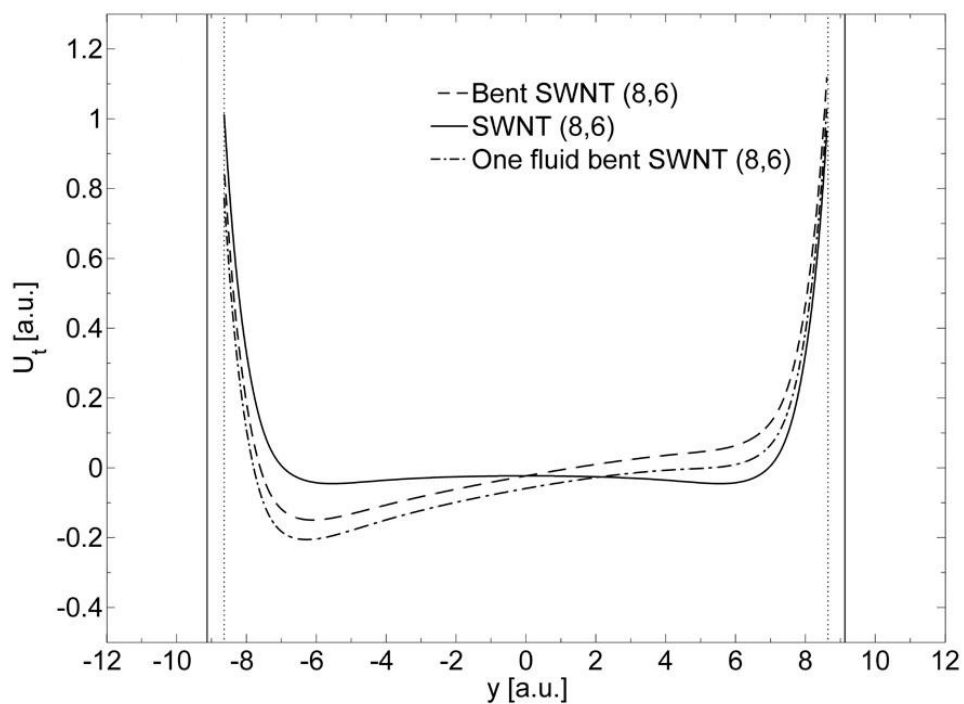
На сликама **5.38-5.41** је приказана зависност укупног потенцијала од положаја протона ρ_0 од центра наноцеви. Анализирамо закривљене наноцеви и поредимо са случајем правих наноцеви. Сматрамо да се протон креће брзином $v = 3$ а.у., фактор пригушења узимамо да је $\gamma = 0.005$, дужина наноцеви је $L = 0.2 \mu\text{m}$, док је угао закривљења $\alpha = 4$ mrad. Са слика можемо закључити да укупан потенцијал у закривљеним наноцевима више није цилиндрично симетричан и не важи једнакост $U_t(\rho_0) = U_t(-\rho_0)$. Оваква особина функције потенцијала последица је центрифугалне силе која делује на протон. Како се растојање протона ρ_0 од центра закривљене наноцеви увећава, разлика потенцијала у односу на праве наноцеви је све већа. Ово се може протумачити на основу **израза 5.3** где фигурише члан који линеарно зависи од ρ_0 . Ако у **изразу 5.3** дефинишемо члан U_{eff} као:

$$U_{eff}(\rho_0) = U_{rep}(\rho_0) + mv_0^2 y / R_b, \quad (5.4)$$

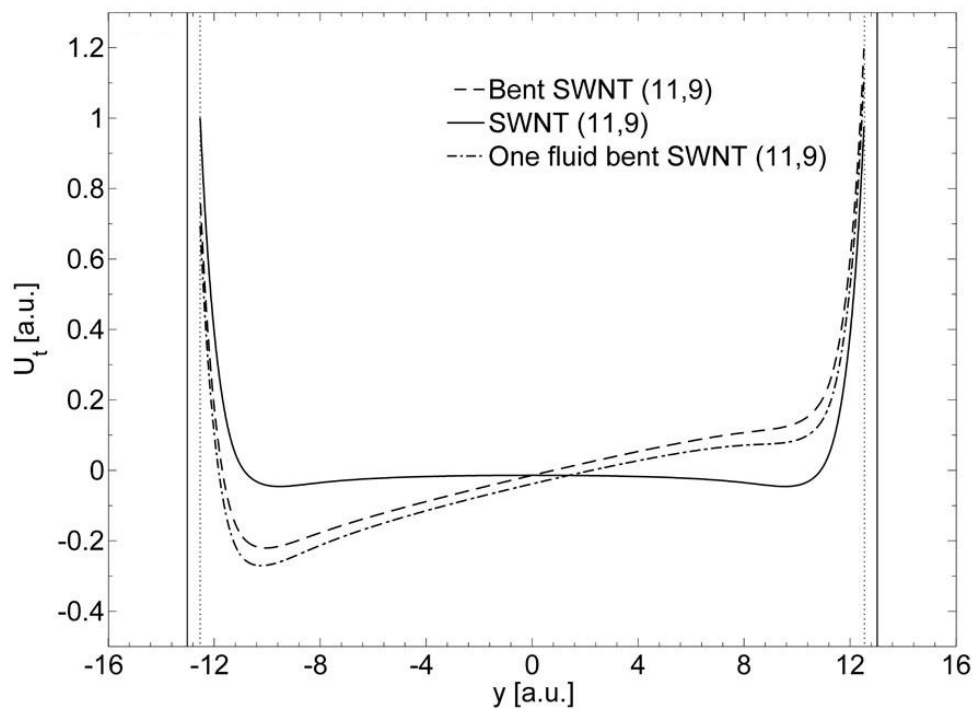
видимо да због присуства члана који потиче од центрифугалне силе овај потенцијал може бити привлачан у релативно широком простору наноцеви. Потенцијал lika U_{im} утиче да се овај регион додатно увећа.



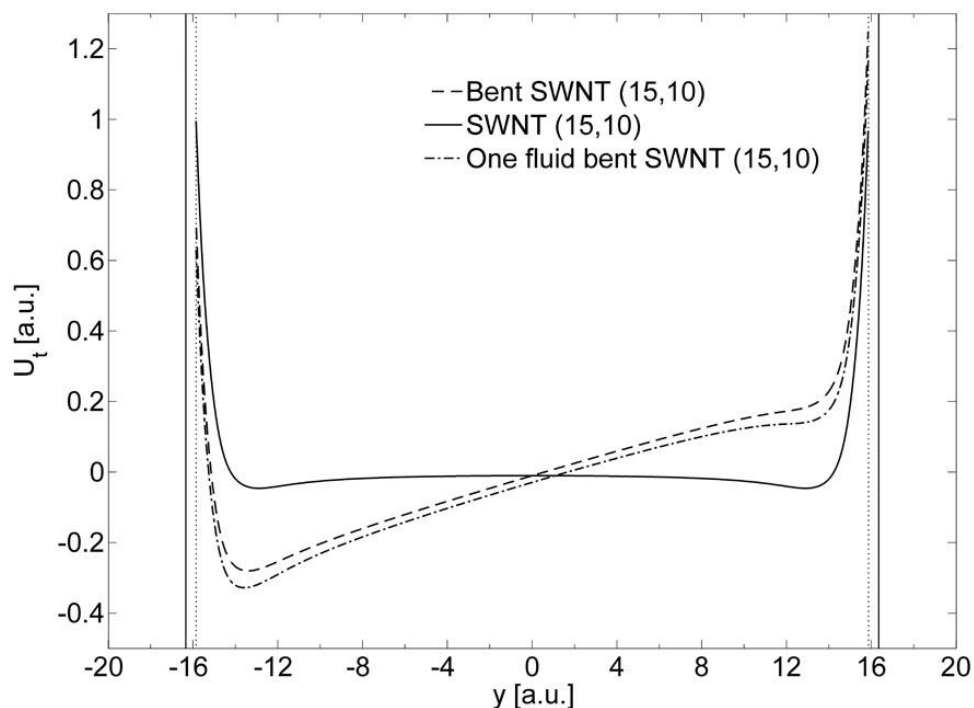
Слика 5.38. Потенцијали у правој и закривљеној SWNT(6,4) приликом каналисања протона.



Слика 5.39. Потенцијали у правој и закривљеној SWNT(8,6) приликом каналисања протона.

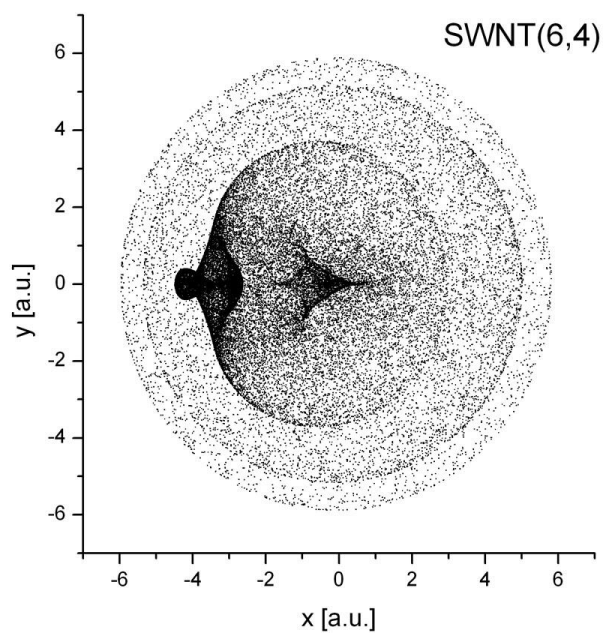


Слика 5.40. Потенцијали у правој и закривљеној SWNT(11,9) приликом каналисања протона.

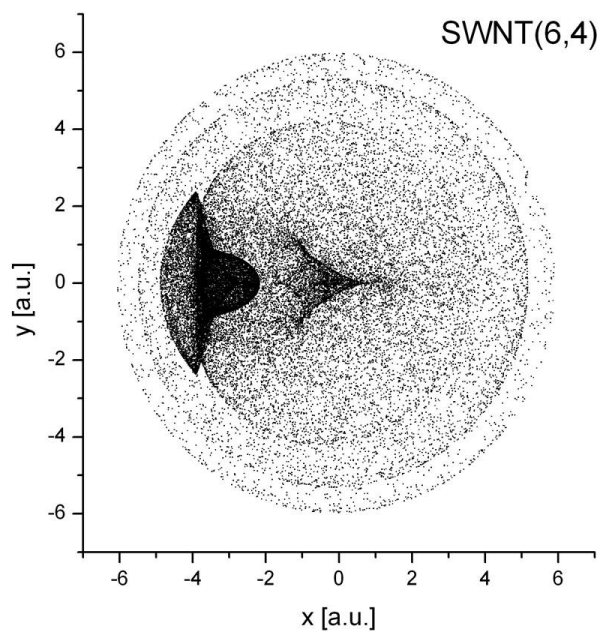


Слика 5.41. Потенцијали у правој и закривљеној SWNT(15,10) приликом каналисања протона.

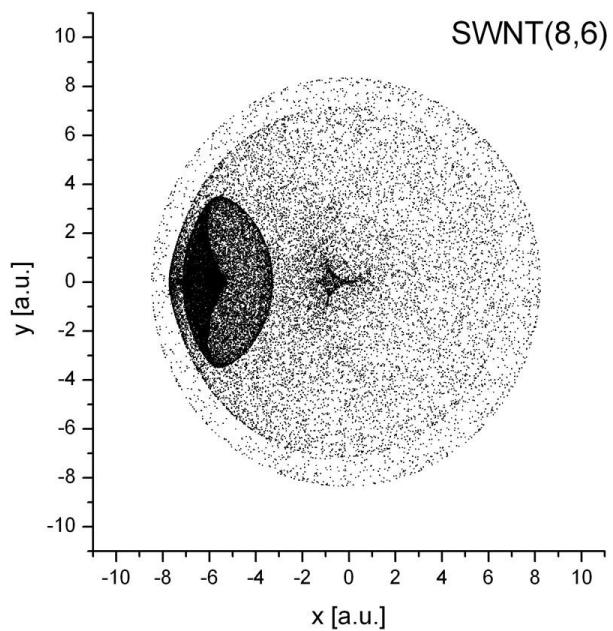
На сликама **5.42-5.49** је приказана просторна расподела протонског снопа у xy равни након каналисања у закривљеним наноцевима са углом закривљења $\alpha = 4$ mrad у случају SWNT(6, 4) (слике **5.42-5.43**), SWNT(8, 6) (слике **5.44-5.45**), SWNT(11, 9) (слике **5.46-5.47**) и SWNT(15, 10) (слике **5.48-5.49**). Сматрамо да се у посматраном тренутку у наноцеви налази само један протон. Сноп протона је сачињен од великог броја индивидуалних честица где се кретање протона одређује решавањем класичних једначина кретања. Симулација каналисања протона је урађена Монте Карло методом. За испитивање утицаја потенцијала лика на просторну расподелу каналисаних протона користимо дводимензиони проширени хидродинамички модел. На основу приказаних слика, можемо закључити да се утицај потенцијала лика огледа у ширењу протонског снопа који се пропушта кроз наноцеви. За наноцеви већег радијуса овај ефекат је израженији.



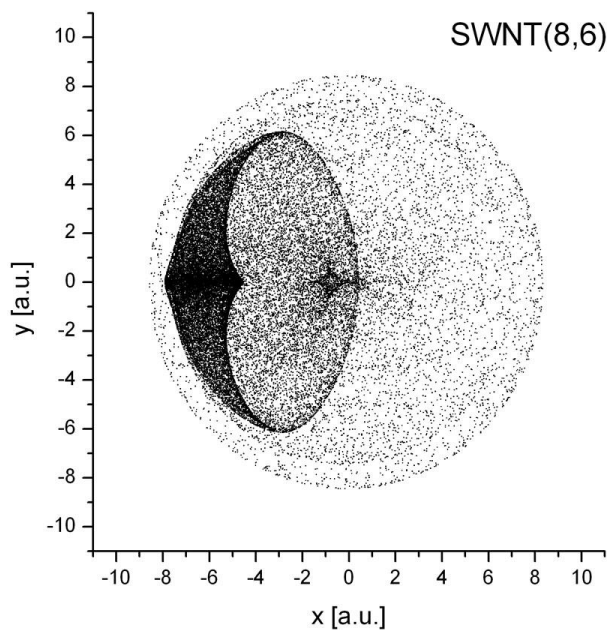
Слика 5.42. Просторна расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).



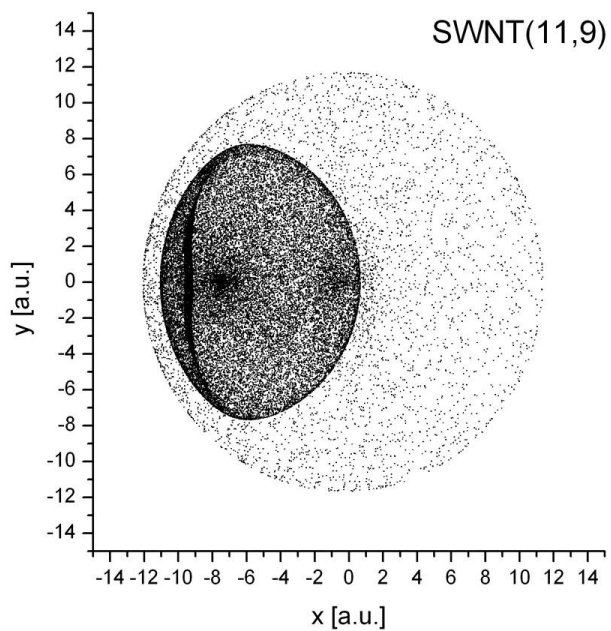
Слика 5.43. Просторна расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).



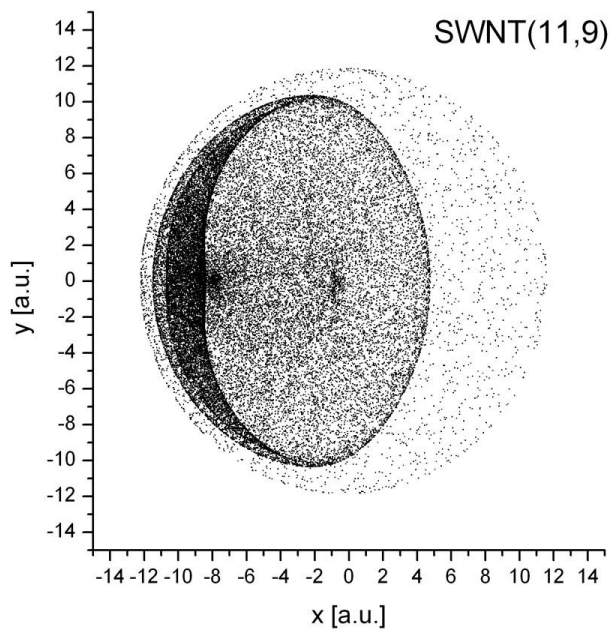
Слика 5.44. Просторна расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(8,6).



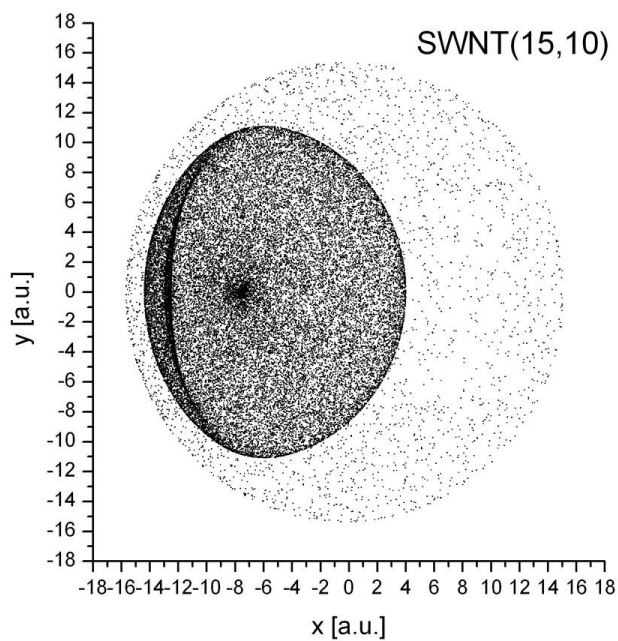
Слика 5.45. Просторна расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(8,6).



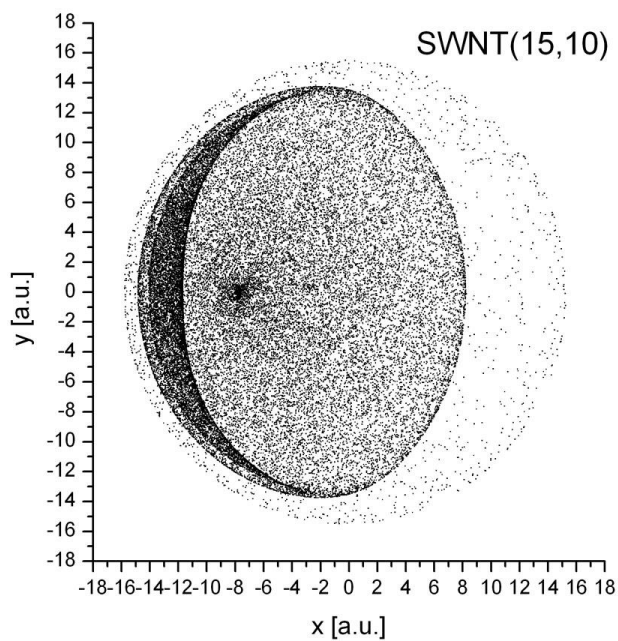
Слика 5.46. Просторна расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(11,9).



Слика 5.47. Просторна расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(11,9).

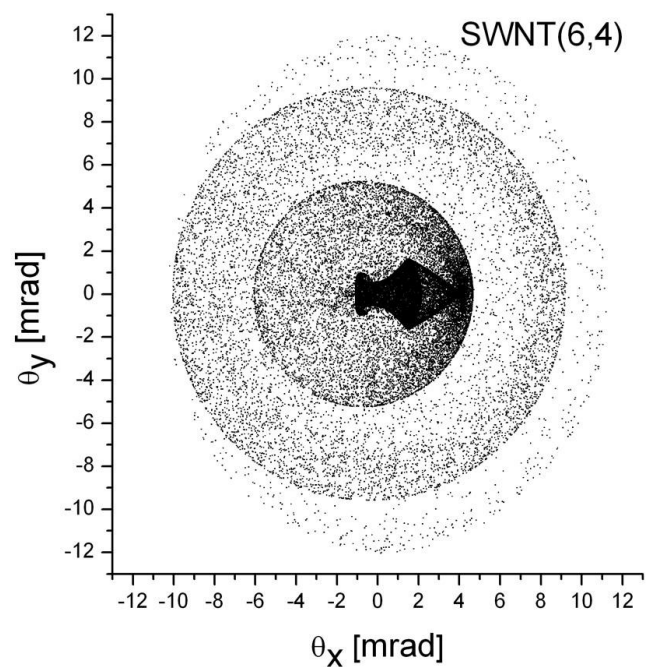


Слика 5.48. Просторна расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(15,10).

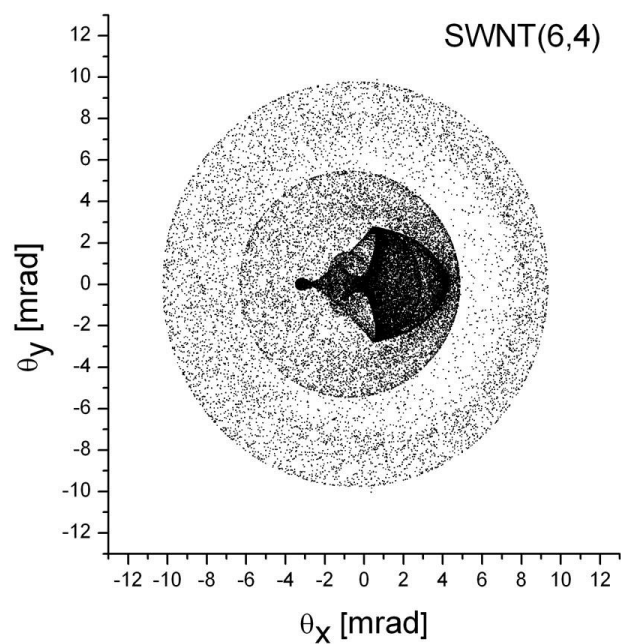


Слика 5.49. Просторна расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(15,10).

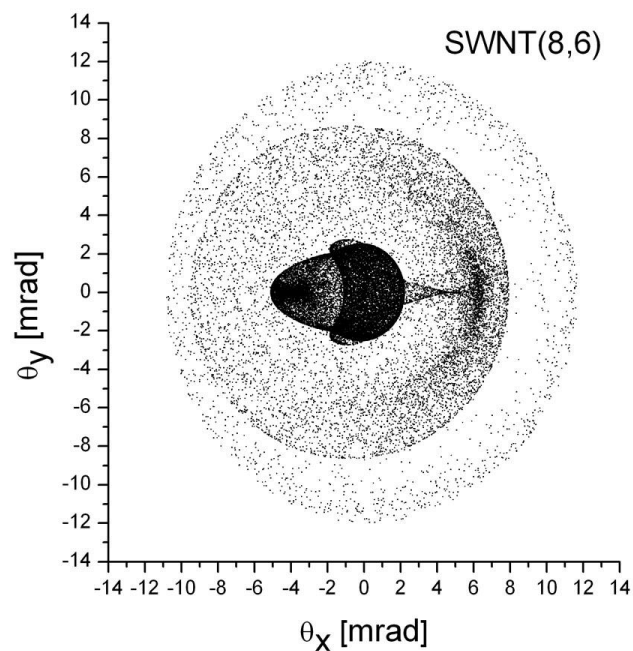
На сликама **5.50-5.57** је дата угаона расподела протонског снопа у равни угла расејања $\theta_x\theta_y$ након каналисања у закривљеним наноцевима са углом закривљења $\alpha = 4$ mrad. Посматрани су случајеви SWNT(6, 4) (слике **5.50-5.51**), SWNT(8, 6) (слике **5.52-5.53**), SWNT(11, 9) (слике **5.54-5.55**) и SWNT(15, 10) (слике **5.56-5.57**). Претпостављамо да се у датом тренутку у наноцеви налази само један протон, а да је снап протона сачињен од великог броја индивидуалних честица где се кретање протона одређује решавањем класичних једначина кретања. Испитујемо утицај потенцијала лика на просторну расподелу каналисаних протона користећи дводимензиони проширени хидродинамички модел. Са слика се може уочити да потенцијал лика значајно утиче на прерасподелу протонског флукса у равни угла расејања (посматрамо зацрњене области). Ова прерасподела је посебно уочљива за мање углове. Као и код просторне расподеле можемо уочити да се протонски снап шири у случају када се узима у разматрање и потенцијал лика.



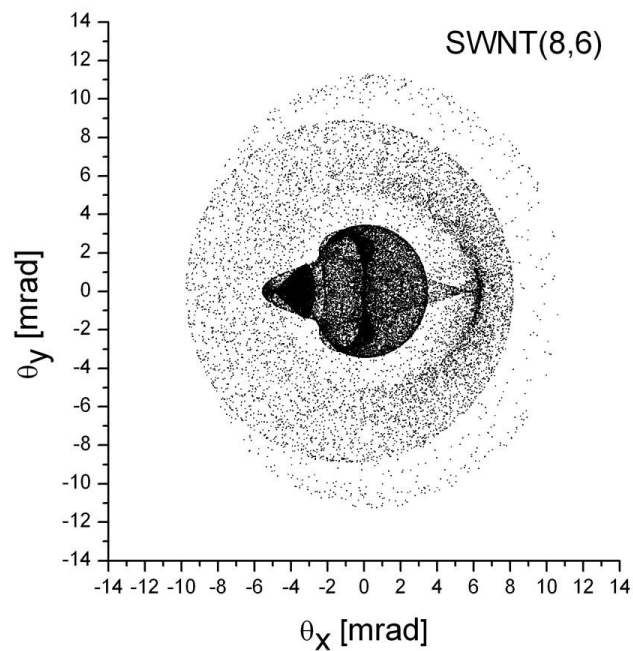
Слика 5.50. Угаона расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).



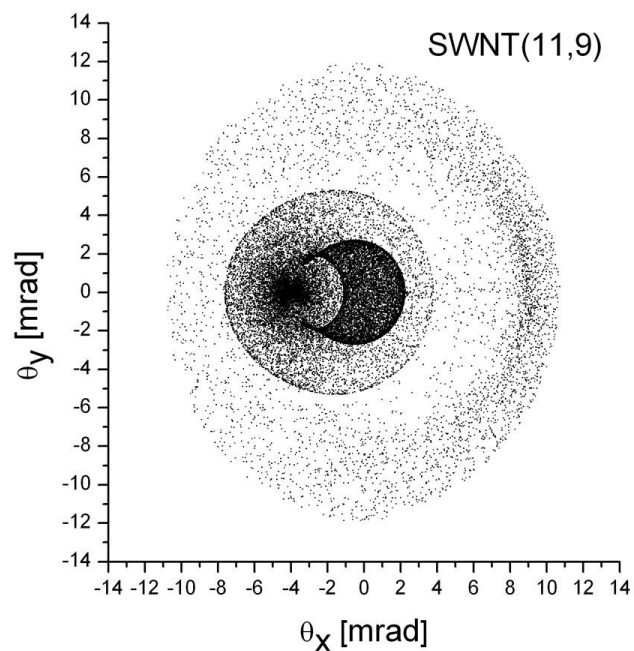
Слика 5.51. Угаона расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).



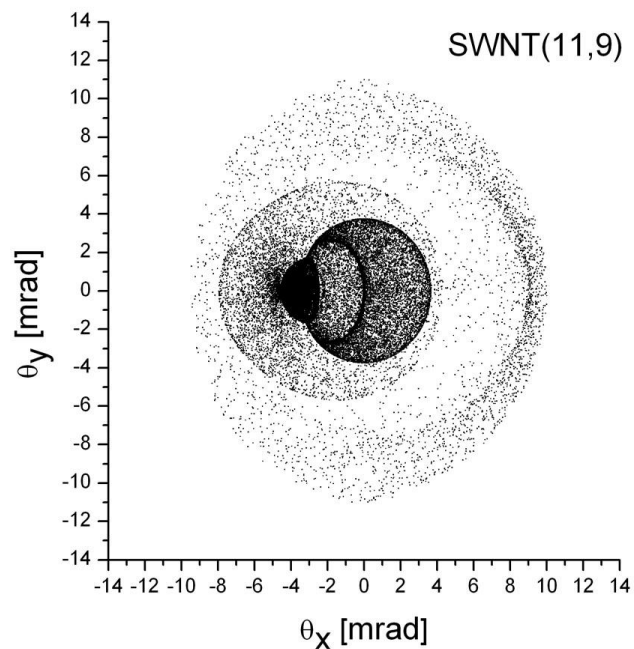
Слика 5.52. Угаона расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(8,6).



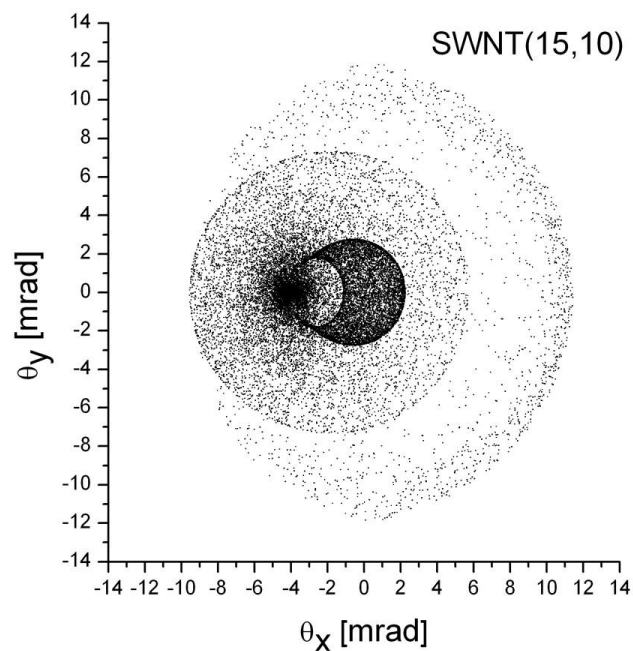
Слика 5.53. Угаона расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(8,6).



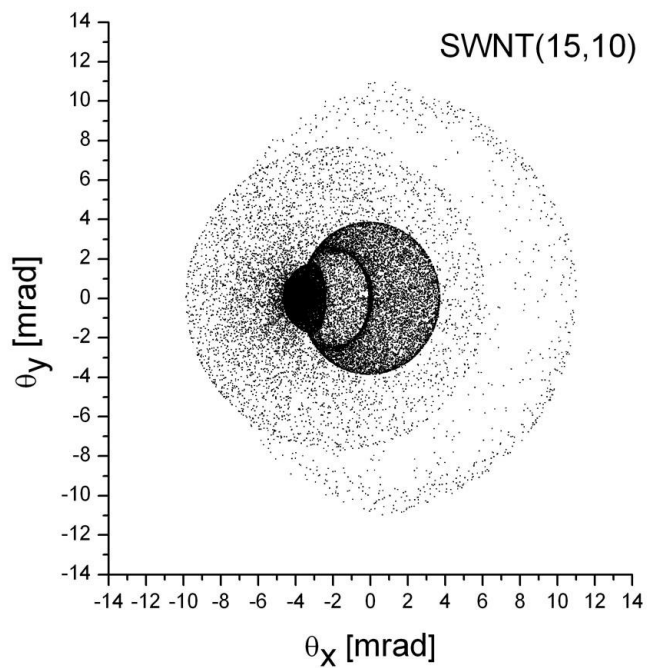
Слика 5.54. Угаона расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(11,9).



Слика 5.55. Угаона расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(11,9).



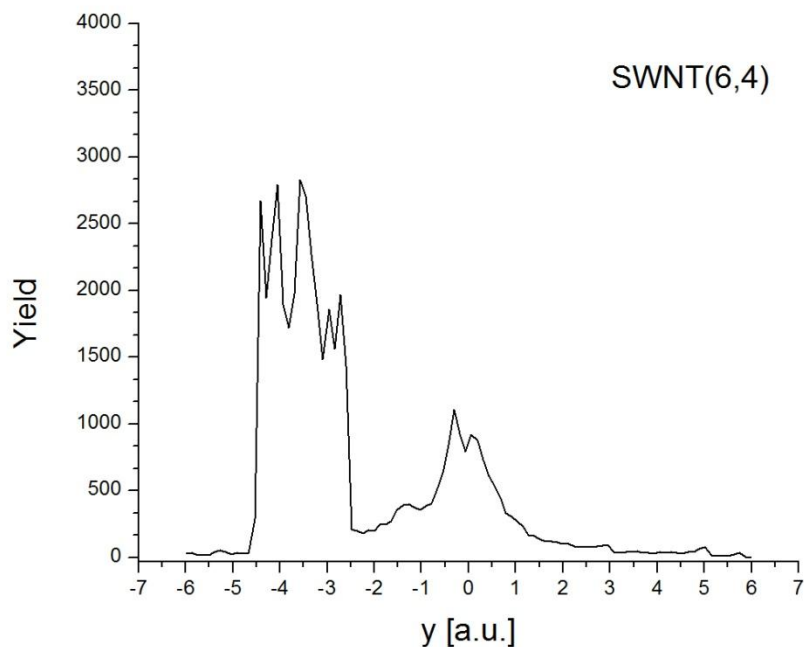
Слика 5.56. Угаона расподела у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(15,10).



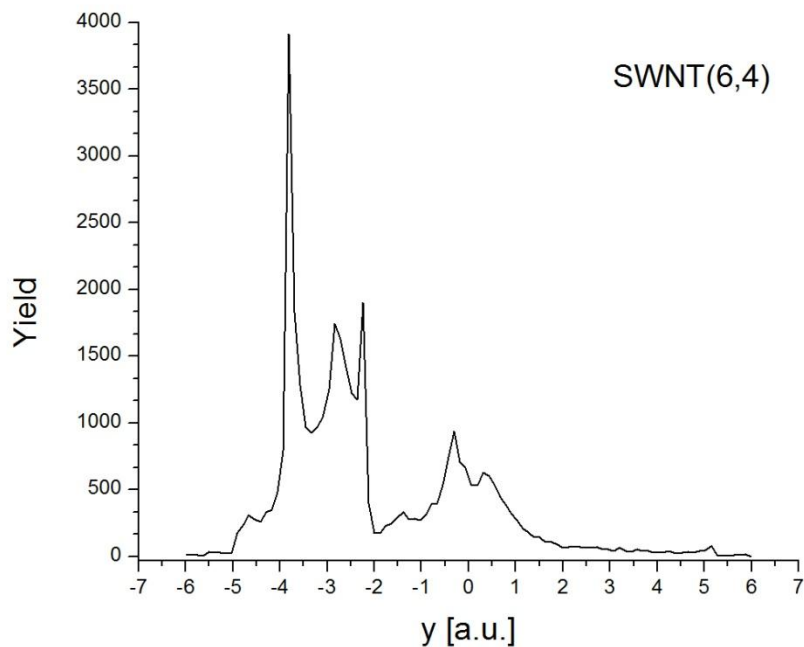
Слика 5.57. Угаона расподела у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(15,10).

На сликама **5.58-5.59** је приказана расподела приноса протона дуж осе радијуса наноцеви. Расподелу рачунамо само за закривљену SWNT(6,4) наноцев, где је угао закривљења исти као у случају приказане просторне расподеле у равни. На слици **5.58** је приказана просторна расподела када није разматран утицај потенцијала лика на каналисање протонских честица, док слика **5.59** приказује расподелу када се урачунава и потенцијал лика. На сликама можемо уочити постојање централног пика у опсегу око нуле као и периферног пика већег интензитета. Поређењем ова два графика можемо закључити да се утицај потенцијала лика више огледа у измени интензитета и ширине периферног пика, а мање утиче на централни пик.

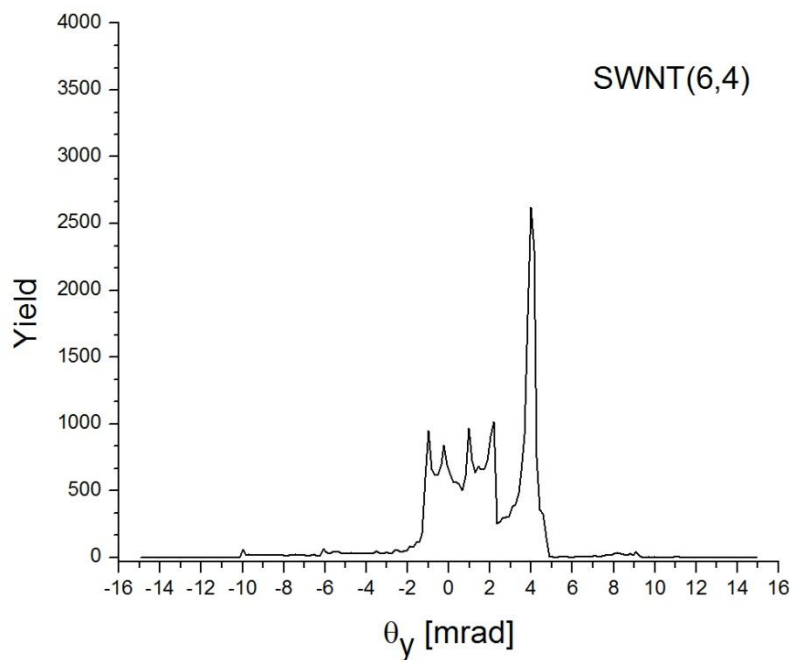
На сликама **5.60-5.61** је приказана угаона расподела приноса протона дуж θ_y осе. Расподелу рачунамо само за закривљену SWNT(6,4) наноцев, где је угао закривљења као у претходним случајевима. На слици **5.60** је приказана угаона расподела када није разматран утицај потенцијала лика на каналисање протона, док слика **5.61** приказује угаону расподелу када се урачунава и потенцијал лика. У овом случају је јасно уочљив утицај потенцијала лика на ширење протонског снопа. Такође можемо уочити постојање пика на $\theta_y \approx 4 \text{ mrad}$ што се може објаснити рефлексijом протона о зидове наноцеви услед њеног закривљења које такође износи $\alpha = 4 \text{ mrad}$.



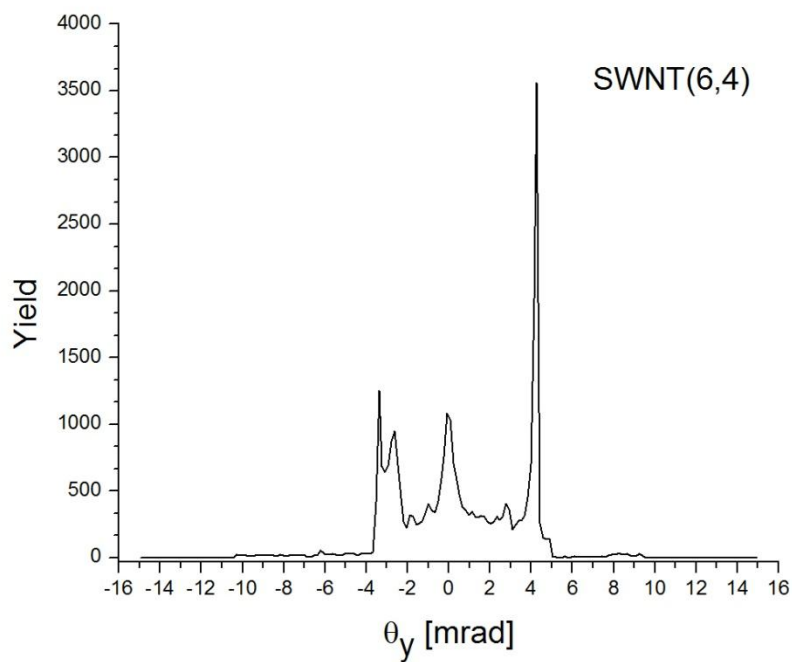
Слика 5.58. Просторна расподела дуж осе радијуса наноцеви у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).



Слика 5.59. Просторна расподела дуж осе радијуса наноцеви у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).



Слика 5.60. Угаона расподела дуж θ_y осе у случају када **није** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).



Слика 5.61. Угаона расподела дуж θ_y осе у случају када **је** урачунат потенцијал лика у закривљеној SWNT(6,4).

У овом поглављу смо анализирали процес каналисања протонских снопова кроз различите праве и закривљене наноцеви. Типови наноцеви које смо анализирали су SWNT (6, 4), (8, 6), (11, 9) и (15, 10). Усвојена је брзина протона од 3 а.у.. Приликом анализирања услова каналисања протона унутар наноцеви користили смо проширени двофлуидни хидродинамички модел како бисмо одредили потенцијал лика који потиче од интеракције са валентним електронима наноцеви. Осим ове интеракције укључили смо и интеракцију са атомима угљеника преко Дојл –Тарнеровог репулзивног потенцијала. У случају закривљених наноцеви, у изразу за укупни потенцијал смо имали члан који потиче од центрифугалне силе. Каналисање протона смо симулирали Монте – Карло методом. За сваки протон смо рачунали путању кретања нумеричким решавањем класичних једначина кретања, где смо почетни положај у равни која дефинише пресек наноцеви одредили као случајну вредност. Израчунали смо просторну и угаону расподелу на изласку из наноцеви (симулиран застор, тј. електронски детектор), такође смо одређивали и принос дуж изабране осе радијуса наноцеви односно дуж угла.

Акцент у спроведеним анализама је био у одређивању значаја урачунавања ефеката динамичке поларизације на каналисање протонских снопова, односно на њихово усмеравање и фокусирање у закривљеним наноцевима. Резултати су показали да динамичка поларизација у значајној мери утиче на каналисање протона тако што врши ширење протонских снопова, што се може закључити на основу графика просторне и угаоне расподеле каналисаних протонских снопова. Оваква анализа сугерише да се ефекти динамичке поларизације не смеју занемарити симулацијама каналисања честица кроз наноцеви, односно у експерименталним анализама посебно за случајеве енергија честица у опсегу до 10 MeV, односно брзина које су реда величина неколико Борових брзина.

Глава 6

Закључак

У овој докторској дисертацији анализирани су са теоријског аспекта услови за каналисање и сам процес каналисања наелектрисаних честица кроз угљеничне наноцеви. Енергије каналисаних честица које се овде разматрају су у опсегу 100 keV - 10 MeV. Ове енергије каналисаних честица индукују јаку динамичку поларизацију валентних електрона на омотачу наноцеви што има за последицу креирање додатног електричног поља унутар наноцеви које у знатној мери утиче на процес каналисања, односно расподелу честица на застору на изласку из наноцеви. Процес каналисања је углавном разматран кроз интеракцију честица са четири типа угљеничних наноцеви SWNT (6, 4), SWNT(8, 6), SWNT(11, 9) и SWNT(15, 10). Пертурбација електронског гаса на омотачу наноцеви и динамичка поларизација су анализирани дводимензионим линеаризованим хидродинамичким моделима: једнофлуидним, двофлуидним и проширеним двофлуидним моделима путем којих је анализирана интеракција каналисаних честица са валентним електронима на омотачу наноцеви. Осим ове интеракције у анализу је укључена и интеракција каналисаних честица са језгрима атома угљеника кроз модел интеракције честица у кристалима. Овај модел укључује Дојл-Тарнеров потенцијал као меру интеракције са језгрима који уз потенцијал лика одређује услове каналисања честица кроз наноцев. Допринос овог рада се огледа управо у квалитативној и квантитативној анализи услова каналисања честица, као и симулације кретања честица кроз наноцев за три поменута хидродинамичка модела. Физичке величине које одређују услове кретања честица приликом каналисања су изведене аналитичким путем а онда израчунате нумеричким методама програмским путем. Симулација процеса каналисања је вршена програмским путем Монте Карло методом. Вредности за потенцијал лика, зауставну силу, и силу лика су одређене аналитичким путем за сва три поменута хидродинамичка модела, а онда је нумеричким методама израчуната зависност ових физичких величина од брзине кретања каналисаних честица, геометрије посматране наноцеви кроз које се врши процес каналисања, позиције каналисане честице као и параметара који карактеришу

хидродинамичке моделе. Одређивана је просторна и угаона расподела као право мерило утицаја динамичке поларизације на кретање протонских снопова кроз наноцев.

Најпре су анализирани једнофлуидни и двофлуидни модели и као допринос спроведене анализе изведен закључак да је интеракција каналисане честице са електронским гасом на зиду наноцеви јача уколико је позиција честице ближа зиду наноцеви као и у случају наноцеви мањег радијуса [72]. Уочено је да само у случају двофлуидног хидродинамичког модела постоји приметна варијација у брзинској зависности потенцијала лика за протонске брзине око $v = 0.71$ a.u. Изведен је закључак да та брзина одговара фазној брзини квазиакустичког π плазмона. Ако се брзина честица повећава или ако се честице крећу ближе оси наноцеви ова варијација у вредности потенцијала лика је неприметна. Показано је да је вредност потенцијала лика јако осетљива на фактор пригушења γ код оба хидродинамичка модела. Када фактор пригушења има веће вредности, нпр. око 0.5, поменути скок у зависности потенцијала лика од брзине практично нестаје. Још један допринос се огледа у анализи утицаја ангуларних модова на промену вредности потенцијала лика за брзине око $v = 0.71$ a.u.. Установљено је да чланови ангуларних модова у опсегу $-3 \leq m \leq 3$ значајно утичу на вредности потенцијала лика у овом случају док се утицај осталих чланова може занемарити. Показано је и како просторна и угаона расподела каналисаних честица зависи од примењеног хидродинамичког модела. Без обзира што је двофлуидни модел доста тачнији од једнофлуидног модела, разлика у расподелама је релативно мала. Принос централног максимума је већи у случају двофлуидног модела и за просторну и за угаону расподелу. Позиције бочних максимума се мало разликују за ове моделе.

У наставку су анализирани двофлуидни и проширени двофлуидни хидродинамички модели [73]. Рачунати су потенцијали лика и зауставна сила за каналисане протоне као и њихова зависност од геометрије (полупречника) наноцеви и позиције протона. Анализиран је утицај различитих вредности ангуларних модова на зависност редукованог потенцијала лика од брзине за проширени двофлуидни хидродинамички модел за опсег брзина где долази до значајне варијације у вредности (анализа као и у случају двофлуидног модела). Закључено је да је интеракција између каналисаних протона и наноцеви најјача за брзине протона у опсегу од 3 до 5 a.u.. Ова интеракција постаје јача уколико се протон креће ближе зиду наноцеви, као и када наноцев има мањи пречник (слично као у случају поређења једнофлуидног и двофлуидног модела). Такође су анализирани услови каналисања протона у случају да се протони крећу изван наноцеви. У том смислу је изведен израз за потенцијал лика и нумерички израчуната зависност потенцијала лика од брзине за разне положаје честице при чему су ови положаји узети симетрично у односу на зид наноцеви са позицијама за случај каналисања протона унутар наноцеви. Показано је да су вредности потенцијала лика приближно исте за каналисање унутар и ван наноцеви за оба хидродинамичка модела, што представља још један од доприноса. Примећено је да у случају проширеног двофлуидног модела варијација у

вредности потенцијала лика постоји на мањим брзинама $v \approx 0.55$ а.у. као и да та варијација није толико изражена као у случају обичног двофлуидног модела где се она дешава при брзинама око $v = 0.71$ а.у.. Као и у случају двофлуидног модела и за проширени двофлуидни модел је спроведена анализа утицаја ангуларних модова на вредности поменуте варијације потенцијала лика. Установљено је као и у обичном двофлуидном моделу да чланови ангуларних модова у опсегу $-3 \leq m \leq 3$ значајно утичу на вредности потенцијала лика у овом случају, док се утицај осталих чланова може занемарити. Такође је примећено да уколико је радијус наноцеви мањи, утицај ових чланова на вредности потенцијала лика је израженији. Као и у претходном поређењу модела и овде је одређивана просторна и угаона расподела каналисаних протона. Установљено је да је разлика између двофлуидног и проширеног двофлуидног модела доста израженија него између двофлуидног и једнофлуидног модела. Разлог веће разлике се огледа у већем утицају параметара који карактеришу двофлуидне хидродинамичке моделе, у питању су повратне фреквенце као и фактори пригушења σ и π флуида који за случај проширеног двофлуидног модела имају коначне вредности док у случају обичног двофлуидног модела имају нулте вредности.

На крају је анализиран процес каналисања протона кроз закривљене наноцеви [74]. Посматрана су сва четири раније наведена типа наноцеви. За опис интеракције каналисаних протона са валентним електронима наноцеви је коришћен проширени двофлуидни хидродинамички модел као најтачнији. Анализиран је утицај динамичке поларизације на просторну и угаону расподелу за закривљене наноцеви, односно ове расподеле су приказане за случај када се не урачунавају ефекти динамичке поларизације односно када су они урачунати. Показано је да присуство потенцијала лика утиче на ширење и увећање потенцијалне јаме. На облик потенцијалне јаме утиче и центрифугална сила услед закривљења наноцеви. Као последица ове појаве, просторна расподела каналисаних протона је шира (сноп протона је мање фокусиран) у случају када се урачуна ефекат динамичке поларизације. Код угаоне расподеле дешава се слична појава, област највећег флукса снопа протона је нешто увећана, али мање него у случају просторне расподеле. Општи закључак је да динамичка поларизација има велики утицај на процес фокусирања наелектрисаних честица кроз наноцеви.

За све поменуте анализе је карактеристично да су спроведене под претпоставком да су наноцеви кроз које се врши каналисање честица кратке, дужине дела микрометра, што олакшава анализу кретања честица обзиром да физичке величине које одређују услове каналисања зависе и од брзине кретања честица за коју се сматра да је константна. Даља истраживања у овој области се могу проширити управо на случај дугих наноцеви, где се дужина не сме занемарити. Анализа у тим случајевима би била доста сложенија јер би прорачун кретања честица подразумевао урачунавање измена у вредностима физичких величина које одређују услове каналисања. Израчунавање ових физичких величина је доста захтевно у погледу извођења математичких операција и захтевало би примену

кластера, то јест мултипроцесорског система како би се симулација каналисања протонских снопова извршила у разумном времену.

Библиографија

- [1] S. Iijima. *Helical microtubules of graphitic carbon*. Nature, 354, 56, 1991.
- [2] C. Thomsen, S. Reich, J. Maultzsch. *Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004.
- [3] Y. Saito. *Carbon Nanotube and Related Field Emitters*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010.
- [4] C. Hierold. *Carbon Nanotube Devices*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008.
- [5] S. C. Tjong. *Carbon Nanotube Reinforced Composites*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009.
- [6] H. S. Dumas, J. A. Ellison, A. W. Sáenz. *Axial channeling in perfect crystals, the continuum model, and the method of averaging*. Ann. Phys., 209, Issue 1, 97, 1991.
- [7] H. S. Dumas, J. A. Ellison, F. Golse. *A mathematical theory of planar particle channeling in crystals*. Physica D 146, Issues 1–4, 341, 2000.
- [8] J. Lindhard. *Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles*. Matematisk-fysiske meddelelser, bd. 34, nr. 14. København : Munksgaard, 1965.
- [9] X. Artru, S. P. Fomin, N. F. Shul'ga, K. A. Ispirian, N. K. Zhevago. *Carbon nanotubes and fullerites in high-energy and X-ray physics*. Phys. Rep. 412, Issues 2–3, 89, 2005.
- [10] N. K. Zhevago, V. I. Glebov. *Diffraction and channeling in nanotubes*. JETP 91, Issue 3, 504, 2000.
- [11] G. Molière. *Theory of Scattering of Fast Charged Particles. I. Single Scattering in a Screened Coulomb Field*. Z. Naturforschung, A2:133, 1947.
- [12] P. A. Doyle, P. S. Turner. *Relativistic Hartree-Fock X-ray and electron scattering factors*. Acta Cryst. A24, 390, 1968.
- [13] A. J. C. Wilson (Ed.). *International Tables for Crystallography C*. Kluwer Academic, Dordrecht, 1992.
- [14] D. J. Mowbray. *Hydrodynamic Modelling of the Electronic Response of Carbon Nanotubes*. Ph.D thesis. Waterloo, Ontario, Canada, 2007.

- [15] A. L. Fetter. *Electrodynamics of a layered electron gas. I. Single layer*. Ann. Phys., 81, Issue 2, 367, 1973.
- [16] A. L. Fetter. *Electrodynamics of a layered electron gas. II. Periodic array*. Ann. Phys., 88, Issue 1, 1, 1974.
- [17] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, “*Fluid Mechanics*,” Section 2, Addison Wesley, Reading, MA, 1959.
- [18] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, “*Electrodynamics of Continuous Media*,” Section 51, Addison Wesley, Reading, MA, 1960.
- [19] D. J. Mowbray, S. Segui, J. Gervasoni, Z. L. Mišković, N. R. Arista. *Plasmon excitations on a single-wall carbon nanotube by external charges: Two-dimensional two-fluid hydrodynamic model*. Phys. Rev. B 82, 035405, 2010.
- [20] A. D. McNaught and A. Wilkinson. *Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book")*. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997).
- [21] V. I. Minkin, *Glossary of terms used in theoretical organic chemistry*. Pure Appl. Chem. 71, 1919, 1999.
- [22] Y.-N. Wang, Z. L. Mišković. *Interactions of fast ions with carbon nanotubes: Self-energy and stopping power*. Phys. Rev. A 69, 022901, 2004.
- [23] T. Stöckli, J.-M. Bonard, A. Châtelain, Z. L. Wang, P. Stadelmann. *Collective oscillations in a single-wall carbon nanotube excited by fast electrons*. Phys. Rev. B 64, 115424, 2001.
- [24] D. Östling, D. Tománek, A. Rosén. *Electronic structure of single-wall, multiwall, and filled carbon nanotubes*. Phys. Rev. B 55, 13980, 1997.
- [25] T. Pichler, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink, A. Rinzler, R. E. Smalley. *Localized and Delocalized Electronic States in Single-Wall Carbon Nanotubes*. Phys. Rev. Lett. 80, 4729, 1998.
- [26] M. Knupfer, T. Pichler, M.S. Golden, J. Fink, A. Rinzler, R.E. Smalley. *Electron energy-loss spectroscopy studies of single wall carbon nanotubes*. Carbon 37, 733, 1999.
- [27] D. J. Mowbray, Z. L. Mišković, F. O. Goodman, Y.-N. Wang. *Interactions of fast ions with carbon nanotubes: Two-fluid model*. Phys. Rev. B 70, 195418, 2004.
- [28] G. Barton, C. Eberlein. *Plasma spectroscopy proposed for C60 and C70*. J. Chem. Phys. 95, 1521, 1991.
- [29] X. Jiang. *Collective plasmon excitations in graphene tubules*. Phys. Rev. B 54, 13, 487, 1996.

- [30] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics, 3rd ed.* (Wiley, New York, 1999).
- [31] J. Cazaux. *Sur la constante dielectrique du graphite dans l'ultraviolet.* Solid State Commun. 8, Issue 7, 545, 1970.
- [32] D. A. Gorokhov, R. A. Suris, V. V. Cheianov. *Electron-energy-loss spectroscopy of the C60 molecule.* Phys. Lett. A 223, 116, 1996.
- [33] A. Aldea, B. Bârsan. *Trends in Nanophysics, Theory, Experiment and Technology.* ISBN 978-3-642-12070-1. Springer, 2010.
- [34] D. J. Mowbray, Z. L. Mišković, F. O. Goodman. *Ion interactions with carbon nanotubes in dielectric media.* Phys. Rev. B 74, 195435, 2006.
- [35] J. H. Fink, P. Lambin. *Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Applications*, edited by M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P. Avouris Springer, Berlin, 247, 2000.
- [36] D.-P. Zhou, Y.-N. Wang, L. Wei, Z. L. Miskovic, "Dynamic Polarization Effects in Ion Channeling through Single-Wall Carbon Nanotubes", Physical Review A 72, 023202, 2005.
- [37] D. Borka, S. Petrović, N. Nešković, D. J. Mowbray, Z. L. Mišković, *Influence of the dynamical image potential on the rainbows in ion channeling through short carbon nanotubes*, Phys. Rev. A 73, 062902, 2006.
- [38] Wolfram Research. Modified Bessel function of the first kind. <http://functions.wolfram.com/Bessel-TypeFunctions/BesselI/20/ShowAll.html>.
- [39] Wolfram Research. Modified Bessel function of the second kind. <http://functions.wolfram.com/Bessel-TypeFunctions/BesselK/20/ShowAll.html>.
- [40] Душко Борка. *ДУГЕ СА КРАТКИМ УГЉЕНИЧНИМ НАНОЦЕВИМА.* Докторска дисертација. Институт за нуклеарне науке "Винча" Београд, 2006. год.
- [41] N. Nešković, D. Borka, S. Šopić, S. Petrović, *Rainbows in channeling of 1 GeV protons in a bent very short (11, 9) single-wall carbon nanotube*, Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 11, 1131, 2010.
- [42] V. M. Biryukov, S. Bellucci. *Nanotube diameter optimal for channeling of high-energy particle beam.* Phys. Lett. B 542, Issues 1–2, 111, 2002.
- [43] N. K. Zhevago, V. I. Glebov. *Computer simulations of fast particle propagation through straight and bent nanotubes.* Phys. Lett. A 310, 301, 2003.
- [44] E. N. Tsyganov, Fermi National Accelerator Laboratory Report TM-682, 1976.

- [45] V. V. Klimov, V. S. Letokhov. *Hard X-radiation emitted by a charged particle moving in a carbon nanotube*. Phys. Lett. A 222, 424, 1996.
- [46] L. A. Gevorgian, K. A. Ispirian, R. K. Ispirian. *High energy particle channeling in nanotubes*. Nucl. Instrum. Meth. B 145, 155, 1998.
- [47] N. K. Zhevago, V. I. Glebov. *Channeling of fast charged and neutral particles in nanotubes*. Phys. Lett. A 250, 360, 1998.
- [48] A. A. Greenenko, N. F. Shulga. *Fast ion passing through straight and bent nanotubes*. Nucl. Instrum. Meth. B 205, 767, 2003.
- [49] N. K. Zhevago, V. I. Glebov. *Theory of propagation of charged particles and soft X-rays in fullerites*. Phys. Lett. A 282, 97, 2001.
- [50] A. V. Krashennnikov, K. Nordlund. *Multi-walled carbon nanotubes as apertures and conduits for energetic ions*. Phys. Rev. B 71, 245408, 2005.
- [51] S. Petrović, D. Borka, N. Nešković. *Rainbow effect after 1 GeV proton channelling through a short rope of SWNTs(10,10)*. Eur. Phys. J. B 44, 41, 2005.
- [52] N. Nešković, S. Petrović, D. Borka. *Angular distributions of 1 GeV protons channeled in bent short single-wall carbon nanotubes*. Nucl. Instrum. Meth. B 230, 106, 2005.
- [53] S. Petrović, D. Borka, N. Nešković. *Rainbow effect in channeling of high energy protons through single-wall carbon nanotubes*. Nucl. Instrum. Meth. B 234, 78, 2005.
- [54] D. Borka, S. Petrović, N. Nešković. *Channeling star effect with bundles of carbon nanotubes*, Phys. Lett. A 354, 457, 2006.
- [55] C. S. Moura, L. Amaral. *Carbon nanotube ropes proposed as particle pipes*. Carbon 45, 1802, 2007.
- [56] D. Borka, D. J. Mowbray, Z. L. Mišković, S. Petrović, N. Nešković. *Dynamic polarization effects on the angular distributions of protons channeled through carbon nanotubes in dielectric media*. Phys. Rev. A 77, 032903, 2008.
- [57] S. Petrović, I. Telecki, D. Borka, N. Nešković. *Proton channeling through long chiral carbon nanotubes: The rainbow route to equilibration*, Phys. Lett. A 372, 6003, 2008.
- [58] L.-P. Zheng, Zh.-Y. Zhu, Y. Li, D.-Zh. Zhu, H.-H. Xia. *Ion mass dependence for low energy channeling in single-wall nanotubes*. Nucl. Instrum. Meth. B 266, 849, 2008.
- [59] S. I. Matyukhin. *Efficiency of ion deviation by bent carbon nanotubes*. Tech. Phys. Lett. 35, 318, 2009.

- [60] D. Borka, D. J. Mowbray, Z. L. Mišković, S. Petrović, N. Nešković. *Donut and dynamic polarization effects in proton channeling through carbon nanotubes*. New J. Phys. 12, 043021, 2010.
- [61] Z. L. Mišković. *Ion channeling through carbon nanotubes*. Radiat. Eff. Def. Solids 162, 185, 2007.
- [62] Zh. Zhu, D. Zhu, R. Lu, Zh. Xu, W. Zhang, H. Xia. *The experimental progress in studying of channeling of charged particles along nanostructure*. Proceedings of the International Conference on Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena (Vol. 5974) (SPIE, Bellingham, Washington), p. 13-1, 2005.
- [63] G. Chai, H. Heinrich, L. Chow, T. Schenkel. *Electron transport through single carbon nanotubes*. Appl. Phys. Lett. 91, 103101, 2007.
- [64] S. Kleckley, G. Chai, D. Zhou, R. Vanfleect, L. Chow. *Fabrication of multilayered nanotube probe tips*. Carbon 41, 833, 2003.
- [65] R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press, London, 2001.
- [66] S. Chung, D. J. Mowbray, Z. L. Mišković, F. O. Goodman, Y.-N. Wang. *Dynamic interactions of fast ions with multiwalled carbon nanotubes*. Radiation Physics and Chemistry 76, 524, 2007.
- [67] V. Borka Jovanović, I. Radović, D. Borka, Z. L. Mišković. *High-energy plasmon spectroscopy of freestanding multilayer graphene*. Phys. Rev. B 84, 155416, 2011.
- [68] G. V. Dedkov. *Fullerene nanotubes can be used when transporting gamma-quanta, neutrons, ion beams and radiation from relativistic particles*. Nucl. Instrum. Meth. B 143, 584, 1998.
- [69] D. Borka, S. Petrović, N. Nešković, *Channeling of protons through carbon nanotubes*, Nova Science Publishers, Series: Nanotechnology Science and Technology, pages 1-78, ISBN 978-1-61122-050-6, New York (2011).
- [70] D. Borka, V. Lukić, J. Timko, V. Borka Jovanović, *Using proton beams as a diagnostic tool in carbon nanotubes*, Nucl. Instrum. Meth. B 279, 169, 2012.
- [71] D. Borka, V. Lukić, J. Timko, V. Borka Jovanović, *Identification of the types of carbon nanotubes using donut effects*, Nucl. Instrum. Meth. B 279, 198, 2012.
- [72] L. Karbunar, D. Borka, I. Radović, Z. L. Mišković, *Image potential in the interaction of fast ions with carbon nanotubes: A comparison between the one- and two-fluid hydrodynamic models*, Nucl. Instrum. Meth. B 358, 82, 2015.

[73] L. Karbunar, D. Borika, I. Radović, *Image potential and stopping force in the interaction of fast ions with carbon nanotubes: The extended two-fluid hydrodynamic model*, Nucl. Instrum. Meth. B, 366, 83, 2016.

[74] L. Karbunar, D. Borika, I. Radović, Z. L. Mišković, *Channeling of fast ions through the bent carbon nanotubes: The extended two-fluid hydrodynamic model*, послато (2015).

Биографија аутора

Лазар Карбунар је рођен 24. августа 1979. у Панчеву. Од 1994 живи у Панчеву где је 1998. завршио Гимназију „Урош Предић”. Електротехнички факултет у Београду је уписао 1998, смер Електроника. Дипломирао је 05. 11. 2003 на теми „Математички модели за опис система у енергетској електроници”, ментор проф. др Предраг Пејовић. На основним студијама је остварио просечну оцену 9,76. Титулу магистра електротехничких наука је стекао 16. 07. 2008 на истом факултету одбравивши магистарски рад под насловом „Активна емуляција отпорности у трофазном исправљачу са високим фактором снаге заснованом на убризгавању струје”, ментор проф. др Предраг Пејовић.

Од 2004 је запослен на Електротехничком факултету Универзитета у Београду у звању асистента приправника. У току радног ангажмана учествовао је у спровођењу наставе на Катедри за електронику извођењем рачунских и лабораторијских вежби на великом броју предмета Катедре. Неки од предмета на којима је био ангажован у улози предметног асистента су: Дигитална обрада сигнала, Основи рачунарске електронике, Основи дигиталне електронике, Практикум из виртуелне инструментације итд..

Од 2009. године је у звању асистента на истом факултету где обавља послове сарадника у настави, учествује у извођењу рачунских и лабораторијских вежби.

У току радног ангажовања учествовао је у неколико пројеката везаних за развој и усавршавање индустријских постројења имплементацијом оригиналних софтверских и хардверских решења. Аутор је неколико техничких решења и електронских модула. У периоду 2011-2015 био је ангажован на научно – технолошком пројекту Министарства за науку и технологију под називом „Хардверска, софтверска, телекомуникациона и енергетска оптимизација ИПТВ система“.

Коаутор је збирке задатака из Основа дигиталне електронике која се користи као уџбеник за потребе извођења наставе на истоименом предмету Катедре за електронику.

У оквиру научних интересовања бавио се суперпроводним структурама и изучавањем појава у угљеничним наноцевима у оквиру сарадње са Институтом за нуклеарне науке „Винча“ као и развијањем фрејмворка за анализу и валидацију квалитета преноса видео секвенци преко класичне интернет инфраструктуре.

Научни радови везани за дисертацију:

M21

1. L. Karbunar, D. Borka, I. Radović, Z. L. Mišković, *Image potential in the interaction of fast ions with carbon nanotubes: A comparison between the one- and two-fluid hydrodynamic models*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volume 358, 1 September 2015, Pages 82-87. (if = 1.266)(ISSN: 0168-583X)(DOI: 10.1016/j.nimb.2015.05.041)

2. L. Karbunar, D. Borka, I. Radović, *Image potential and stopping force in the interaction of fast ions with carbon nanotubes: The extended two-fluid hydrodynamic model*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volume 366, 1 January 2016, Pages 83-89. (if = 1.266)(ISSN: 0168-583X)(DOI: 10.1016/j.nimb.2015.10.033)

M22

1. L. Karbunar, D. Borka, I. Radović, Z. L. Mišković, *Channeling of fast ions through the bent carbon nanotubes: The extended two-fluid hydrodynamic model*, послато (2015).

Остали радови кандидата:

M22

M. Milic, N. Lazarov, L. Karbunar, *Influence of Ortho-II structural phase on the 60 K plateau formation in $YBa_2Cu_3O_{6+x}$* , PHYSICA C, Vol. 476, pp. 63-67, Jun, 2012. (if = 0.94) (ISSN: 0921-4534)(DOI: 10.1016/j.physc.2012.02.008).

M63

Lazar Karbunar, Milan Prokin, *Power and Cost Efficient IPTV Systems*, Zbornik radova 19. Telekomunikacionog foruma TELFOR 2011, Beograd 22-24 Novembar 2011.

Лазар Карбунар, *Могућност имплементације NSAP модула паметног сензора на РС рачунару према IEEE 1451.1 стандарду*, Зборник радова 54. конференције за ЕТРАН, Доњи Милановац, 7-10. јуна 2010.

Лазар Карбунар, Милан Прокин, *Отпорност H.264 видео секвенце на грешке*, Зборник радова 53. конференције за ЕТРАН, Врњачка Бања, 15-18. јуна 2009.

Lazar Karbunar, Predrag Pejović, *Current Programming in Three-Phase Diode Bridge Rectifiers that Apply Suboptimal Current Injection*, 14th International Symposium on Power Electronics, Ee 2007, Novi Sad, November 2007.

Лазар Карбунар, Предраг Пејовић, *Утицај таласног облика убризгане струје на укупно хармонијско изобличење улазних струја трофазног исправљача*, Конференција за ЕТРАН, Београд, Јун 2006, том I, стр. 11-14.

ПРИЛОГ 1

Изјава о ауторству

Потписан: Лазар Карбунар

број индекса: (по старом програму је)

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом:

Утицај динамичке поларизације на интеракцију наелектрисаних честица са угљеничним наноцевима у двофлуидном хидродинамичком моделу

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

У Београду, 06.11.2015

Потпис докторанда



ПРИЛОГ 2

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора: Лазар Карбунар

Број индекса: (по старом програму је)

Студијски програм: Наноелектроника и фотоника

Наслов рада: Утицај динамичке поларизације на интеракцију наелектрисаних честица са угљеничним наноцевима у двофлуидном хидродинамичком моделу

Ментор: проф. др Милан Тадић

Потписан: Лазар Карбунар

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

У Београду, 06.11.2015

Потпис докторанда



ПРИЛОГ 3

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Утицај динамичке поларизације на интеракцију наелектрисаних честица са угљеничним наноцевима у двофлуидном хидродинамичком моделу

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио.

1. Ауторство
2. Ауторство - некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прераде
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

У Београду, 06.11.2015

Потпис докторанда



1. Ауторство - Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. Ауторство - некомерцијално – без прераде. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. Ауторство - некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. Ауторство – без прераде. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.