

Электродинамическое моделирование композитов на основе углеродных нанотрубок

В. И. Демидчик, Р. В. Корнев

Белорусский государственный университет, Минск, e-mail: demidvi@bsu.by

Разработана методика и комплекс программ для расчета электродинамических характеристик углеродных нанотрубок произвольной геометрии и композиционных материалов на их основе. Предложена методика расчета коэффициентов отражения и прохождения электромагнитных волн от слоя подобного композита.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, интегральное уравнение Поклингтона, коэффициенты поляризуемости, диэлектрическая и магнитная проницаемости, коэффициент отражения, коэффициент прохождения.

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) находят широкое применение в антенной технике как в качестве одиночных излучателей, так и в составе сложных устройств. Это приводит к необходимости расчета характеристик излучения УНТ.

На основе УНТ диспергированных в диэлектрическую матрицу разрабатываются композиционные материалы, которые могут быть использованы, к примеру, как частотно-селективные поверхности либо как поглотители электромагнитных волн (ЭМВ). Взаимодействие ЭМВ с подобным композитом определяется характером взаимодействия ЭМВ с отдельной УНТ, что предполагает изучение их характеристик рассеяния.

К настоящему времени разработано значительное количество пакетов программ электродинамического анализа: Microwave Office, HFSS, CST Microwave Studio и др. Они применяются при проектировании различного типа СВЧ устройств и могут быть использованы для анализа электродинамических характеристик структур из УНТ. Однако не все они позволяют корректно и достаточно эффективно производить расчет излучающих и рассеивающих свойств таких структур [1].

Отличительная особенность УНТ – большое отношение ее длины к радиусу, которое может быть порядка 10^7 и значительная величина поверхностного импеданса за счет больших значений кинетической индуктивности и квантовой емкости УНТ [2]. Выше указанные особенности и побуждают разработчиков создавать специализированные программные комплексы для анализа УНТ [1].

1. Методика электродинамического анализа

Авторами в свое время был разработан программный комплекс по электродинамическому моделированию киральных частиц из тонких проводников в виде маловитковых спиралей, комбинации витка спирали с присоединенными прямолинейными проводниками и композиционных материалов на их основе [3]. По методике, описанной в [3] решалась задача рассеяния электромагнитной волны на такой частице. Расчет токораспределения частицы основан на решении интегрального уравнения Поклингтона для тонких проводников произвольной геометрии. По найденному амплитудно-фазовому распределению тока рассчитывались коэффициенты поляризуемости (КП) частиц. Затем методом Максвелла-Гарнетта находились эффективные электродинамические параметры композита содержащего киральные включения: диэлектрическая и магнитная проницаемости, параметр киральности. По известным материальным параметрам проводилось изучение взаимодействия электромагнитных волн с плоским слоем композита в соответствии с методиками, изложенными в [4–6].

Поскольку одним из способов анализа УНТ и устройств на их основе является представление УНТ в виде тонких проводников, обладающих поверхностным импедансом, разработанный программный комплекс по анализу киральных структур был адаптирован для моделирования УНТ.

В общем случае для рассеивателей в виде электрически тонких проводников вычисление КП базируется, как правило, на расчете тока и последующем определении дипольных (в общем случае мультипольных) моментов. Расчет тока предполагает решение интегрального уравнения для тока в тонком проводнике при различных способах возбуждения. В случае произвольной геометрии проводника необходимо решать задачу для шести вариантов возбуждения [7]. Вместе с тем, в работе [8] предложен подход, позволяющий исключить как непосредственное вычисление токораспределения в тонком проводнике произвольной геометрии, так и информацию о направлении поля возбуждающей волны. Основное ограничение, накладываемое на метод – малость размеров рассеивателя по сравнению с длиной волны. Для УНТ, используемых в микроволновом диапазоне данное условие выполняется в широком диапазоне частот. Подобный подход и был реализован для анализа УНТ [9, 10].

Следует также отметить, что последнее время наблюдается определенный интерес к УНТ спиралевидной формы. Спиральная конфигурация УНТ позволяет повысить механическую прочность композитов даже при отсутствии прямой химической связи между нанотрубками и матрицей. Для спиральных УНТ характерны такие привлекательные свойства как структурная стабильность, относительно высокая электропроводность, эластичность, эффективное поглощение электромагнитных волн [11–13]. При этом, как отмечается в [13], среда, содержащая включения в виде спиралевидных УНТ может обладать заметными киральными свойствами и описывается в общем виде следующими материальными уравнениями:

$$\vec{D} = \varepsilon_{эфф} \vec{E} + i\kappa_{эфф} \vec{H}, \quad \vec{B} = -i\kappa_{эфф} \vec{E} + \mu_{эфф} \vec{H}, \quad (1)$$

где $\varepsilon_{эфф}$, $\mu_{эфф}$ - эффективные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, $\kappa_{эфф}$ - параметр киральности.

Такая особенность композитов на основе спиралевидных УНТ и позволяет использовать методику решения задач распространения ЭМВ в киральных средах, изложенную в [3] для решения задач по электродинамическому анализу композитов, содержащих УНТ произвольной, в том числе и спиральной, геометрии.

Заключение

Таким образом, на базе метода интегральных уравнений для тонких проводников решена задача электродинамического анализа УНТ произвольной геометрии в режиме излучения и рассеяния. Предложен способ расчета коэффициентов поляризуемости УНТ. Разработана методика расчета эффективных материальных параметров композита на основе УНТ с учетом их возможных киральных свойств. Предложена методика и разработан программный комплекс по расчету коэффициента отражения от слоя подобного композита и коэффициента прохождения через слой.

Литература

1. Медведев Е.А., Уайд С.Р.. Сравнительная оценка различных методов анализа электродинамических свойств нанотрубок. Радиотехника. 2013. Вып. 175. С. 97–101.
2. Maksimenko S.A., Slepian G.Y., Lakhtakia A., Yevtushenko O., Gusakov A.V. Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation. Phys. Rev. B, 1999. Vol. 60, P. 17136–17149.

3. Демидчик В.И., Корнев Р.В., Кухарчик П.Д. Математическое моделирование характеристик рассеяния проволочных частиц произвольной конфигурации и композиционных материалов на их основе. Доклады НАН Беларуси. 2005. Т. 49, № 2. С. 38–41.
4. Неганов В.А., Осипов О.В. Отражение электромагнитных волн от плоских киральных структур. Изв. ВУЗов. Радиофизика. 1999. Т. 42, № 9. С. 870–878.
5. Иванов О.В., Семенов Д.И. Распространение света в хиральных слоистых средах. Метод матриц 4x4. Кристаллография. 2000. Т. 45, № 3. С. 534–540.
6. Bassiri S., Papas C.H., Engheta N. Electromagnetic wave propagation through a dielectric-chiral interface and through a chiral slab. Journal of the Optical Society of America A. 1988. Vol.5, No. 9. P. 1450–1459.
7. Erofeenko V.T., Demidchik V.I., Malyi S.V., Kornev R.V. Penetration of electromagnetic waves through composite screens containing ideally conducting helices. Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2011. V. 84, № 4. P. 799–806.
8. Reinert J., Jacob A. Multipolarizability tensors of thin-wire scatters: a direct calculation approach. IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 2001. V. 49, № 11. P. 1532–1538.
9. Демидчик В.И., Корнев Р.В. Расчет динамической поляризуемости углеродных нанотрубок произвольной геометрии. Сборник статей Пятой Всероссийской научной школы-семинара «Взаимодействие сверхвысокачестотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами». 2018. Саратов, «Саратовский источник», С. 150–153.
10. Демидчик В.И., Корнев Р.В. Численно-аналитический метод расчета коэффициентов поляризуемости углеродных нанотрубок. Сборник статей Шестой Всероссийской научной школы-семинара «Взаимодействие сверхвысокачестотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами». Саратов, 2019. С. 46–49.
11. Zhao, D.-L., Shen, Z.-M. Preparation and Microwave Absorption Properties of Carbon Nanocoils. Materials Letters. 2008. № 62. P. 3704–3706.
12. Ihara, S., Itoh S. Helically coiled and toroidal cage forms of graphitic carbon. 1995. Vol. 33, P. 931–939.
13. Yoshiyuki Suda, Ryusei Matsuo, Takamasa Yoshii, Shingo Yasudomi. Electromagnetic wave absorption properties of carbon nanocoil composites in the millimeter waveband. AIP Conference Proceedings. 2018. V. 1929. DOI: 10.1063/1.5021934.

Electrodynamic modeling of composites consisting of carbon nanotubes

V. I. Demidchik, R. V. Kornev

*Belarusian State University, Minsk,
e-mail: demidvi@bsu.by*

A methodology and a set of programs for calculating the electrodynamic characteristics of carbon nanotubes of arbitrary geometry and composite materials based on them have been developed. A method is proposed for calculating the coefficients of reflection and transmission of electromagnetic waves from a layer of such a composite.

Key words: carbon nanotube, Pocklington integral equation, polarizability coefficients, permittivity and permeability, reflection coefficient, transmission coefficient.