

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УРАВНЕНИЯ ПОКЛИНГТОНА ДЛЯ АНАЛИЗА АНТЕНН ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

### Введение

Синтез новых ультрадисперсных наноуглеродных материалов, разработка нанокомпозитов на их основе, обладающих уникальными физико-химическими свойствами, исследование структуры и характеристик полученных наносистем является в настоящее время одним из приоритетных направлений мировой науки и предметом деятельности многих научных центров [1].

Современные исследования углеродных нанотрубок показали, что они обладают разнообразными электрическими свойствами: в зависимости от расположения в них атомов углерода (спирально или кольцами), нанотрубки ведут себя в отношении тока как проводники или полупроводники. Идеальная нанотрубка представляет собой свернутую в цилиндр графитовую плоскость, то есть поверхность, выложенную правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Результат операции сворачивания в цилиндр зависит от угла ориентации графеновой плоскости относительно оси нанотрубки. Угол ориентации, в свою очередь, задает хиральность нанотрубки, которая определяет, в частности, ее электрические свойства.

Хиральность нанотрубок обозначается набором символов  $(m, n)$ , указывающих координаты вершины шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с вершиной шестиугольника, находящимся в начале координат (рис. 1).

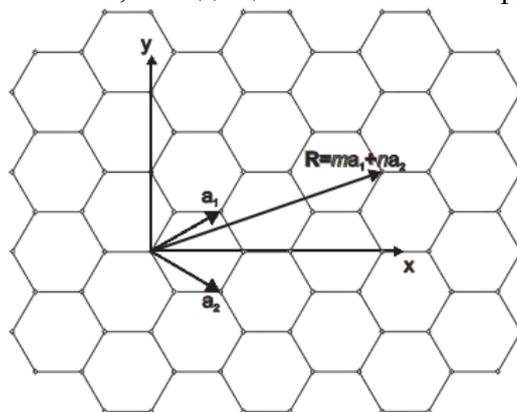


Рис. 1. Схематическая конфигурация кристаллической решетки графена

По значению параметров  $(n, m)$  различают: прямые (ахиральные) нанотрубки; «кресло» или armchair  $n=m$ ; zigzag  $m=3q, n=0$ ; хиральные нанотрубки.

При этом радиус углеродной нанотрубки определяется следующим образом:

$$a = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} b \sqrt{m^2 + mn + n^2}, \quad (1)$$

где  $b = 1.42 \cdot 10^{-8}$  м – межатомное расстояние;

На основе углеродных нанотрубок возможно также создание полупроводниковых гетероструктур или структур типа металл/полупроводник. Для этого в процессе роста нанотрубки в ней создается структурный дефект – заменяется один из углеродных шестиугольников пятиугольником и семиугольником (рис. 2, 3). В результате одна часть нанотрубки остается с металлической проводимостью, а другая – приобретает свойства полупроводника.

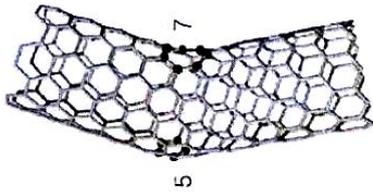


Рис. 2. УНТ с изгибом за счет дефекта семиугольник-пятиугольник

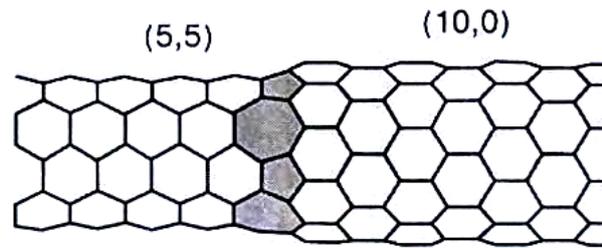


Рис. 3. Соединение нанотрубки типа «зигзаг» и «кресло» с помощью кольца из пяти- и семиугольников [4]

Необычные электрические свойства нанотрубок делают их одним из основных материалов нанoeлектроники [2], прогресс в развитии которой является существенным. На основе нанопроводников и нанотрубок уже созданы практически все базовые устройства, функционально эквивалентные современным цифровым или аналоговым схемам. Продемонстрированы экспериментальные образцы элементарных логических схем, модулей памяти на нанотрубках.

Перспективным также является применение УНТ в качестве антенных систем в различных областях – для связи между наноустройствами, устройствами волоконной связи, использование их для связи между нанoeлектронными и макроскопическими устройствами. Кроме того, еще одна потенциальная область применения нанoантен связана с использованием их в качестве химических или биологических датчиков. Но наиболее важными для нанoантен остаются традиционные сферы применения антенной техники, где актуальна миниатюризация устройств. Такие антенные системы обладают целым рядом особенностей, отличающих их, от традиционных антенных систем [3].

Кроме того, композитные материалы на основе УНТ могут быть использованы в устройствах микроволнового диапазона, например в качестве частотно-избирательных поверхностей. [4]. Широкое внедрение таких устройств в практику невозможно без знания их электродинамических характеристик.

В настоящее время их исследованию посвящено значительное количество работ: Впервые строгая теория нанoантенны была построена в работах [5 – 7]. При этом для анализа УНТ – вибраторов в [5, 6] применяется уравнение Поклингтона с добавлением резистивного члена. Это уравнение в дальнейшем с помощью одномерной функции Грина преобразовывается либо к уравнению Халлена, либо к уравнению Леонтовича – Левина [6]. В работах [8, 9] разработан метод расчета вибраторов основанный на решении парных интегральных уравнений относительно преобразования Фурье для плотности тока на вибраторе [7].

Исследования УНТ, проведенные с использованием упомянутых методов, позволили выявить целый ряд особенностей присущих нанoантеннам. В частности, в [5] описано, что, в случае радиусов порядка нанометров, антенны-нанотрубки обладают меньшими потерями, чем цилиндрические медные антенны тех же размеров, используя обычную зависимость проводимости меди от частоты. В [10] рассматривалась бесконечно тонкая трубка углеродная нанотрубка. Для исследования тока на бесконечно длинной антенне из УНТ, запитанной дельтовидным источником использовано преобразование Фурье. В [11] обсуждается возможность использования пучков из УНТ в качестве антенн в нижнем ГГц-диапазоне при простом изменении размеров. Также рассматривается механизм распространения волны вдоль пучка из нанотрубок в этом диапазоне. Эти задачи решались как с помощью интегрального уравнения пучка УНТ, так и основываясь на распространении поверхностной волны вдоль УНТ. Были получены резонансные характеристики, определена нижняя граница частотного диапазона, до которого возможно применение УНТ – антенн (порядка 100 ГГц). Ниже данной частоты входное сопротивление имеет емкостный характер и резонансы не на-

блюдаются [7]. В [12] Рассмотрены зависимости между радиусом нанопроводника, проводимостью, частотой и входным импедансом для дипольной антенны.

При этом в большинстве работ рассматриваются либо одиночные вибраторы (рис. 4) в виде прямолинейных УНТ, либо периодические решетки (рис.5), состоящие из таких вибраторов и находящиеся в однородном изотропном диэлектрике.

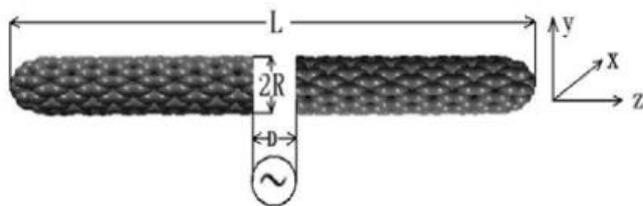


Рис.4. Вибратор на основе УНТ [13]

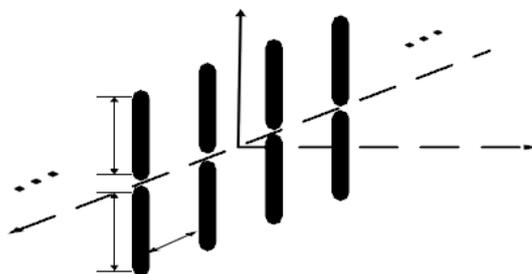


Рис.5. Линейная антенная решетка из УНТ [13]

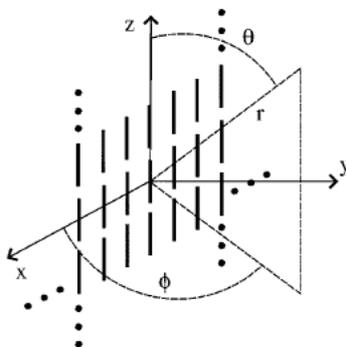


Рис. 6. Бесконечная периодическая плоская антенная решетка из УНТ [14] (каждый из диполей имеет длину  $2L$ , а периоды решетки вдоль осей  $x$  и  $y$  равны  $D_x$  и  $D_y$  соответственно)

Значительный шаг в исследовании структур из УНТ сделан в [7]. Авторами этой работы рассмотрены УНТ – вибраторы, лежащие на диэлектрической подложке  $\epsilon_1$  в диэлектрике  $\epsilon_2$  (рис. 7); периодическая система из УНТ-вибраторов (рис. 8.) [7].

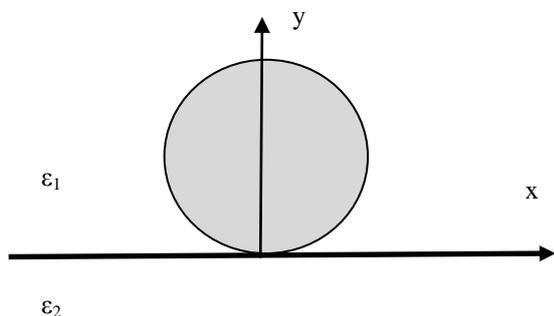


Рис. 7. Поперечное сечение УНТ, лежащей на диэлектрической подложке

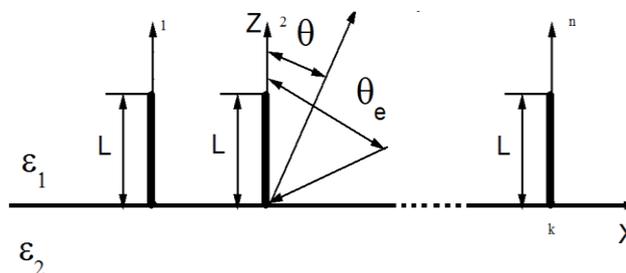


Рис.8. Периодическая система УНТ-вибраторов

Тем не менее, описанные выше методики расчета эффективны только для перечисленных задач.

Однако зачастую требуется исследование структур, представляющих собой совокупность произвольно ориентированных УНТ, и, кроме того, эти УНТ могут иметь произволь-



Для описания геометрии наноструктур произвольной конфигурации (НСПК) удобно ввести следующие понятия. Ветвь структуры – прямолинейная однородная УНТ (на рис. 11 ветви обозначены цифрами от 1 до 11). Однородность ветви предполагает неизменность ее импеданса и отсутствие в ней клемм для подключения источников возбуждения или сосредоточенных элементов в виде двухполюсников. При этом ток ветви может быть описан непрерывной функцией.

Узел структуры – точка соединения двух или более ветвей между собой или точка соединения одного из концов ветви с экраном (на рис. 11 узлы с номерами 1 – 8 обведены пунктиром).

При рассмотрении узлов структуры необходимо учитывать, что:

- во всех узлах НСПК выполняется закон Кирхгофа для токов;
- дивергенция тока во всех узлах НСПК равна нулю, что соответствует отсутствию накопления заряда в этих точках;
- узлы НСПК (клеммы для подключения источников возбуждения или элементов с сосредоточенными параметрами) моделируются в виде бесконечно узких зазоров;

На концах ветвей, которые не соединяются с каким-либо узлом, ток обращается в нуль.

При решении электродинамической задачи предполагалось, что на поверхностях УНТ выполняется граничное условие вида

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = z_i \mathbf{n} \times [\mathbf{n} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)], \quad (2)$$

где  $z_i = \frac{1}{2\pi a \sigma_{cn}(\omega)}$  – поверхностный импеданс УНТ;  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$  и  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$  – векторы напряженности электрического и магнитного полей в точке  $\mathbf{r}$  на поверхности УНТ;  $\mathbf{n}$  – нормаль к поверхности УНТ в той же точке.

Таким образом, электрические свойства УНТ характеризовались проводимостью  $\sigma_{cn}$ , которую в широком диапазоне частот (вплоть до терагерцового диапазона) с достаточной точностью можно определить следующим образом [19]:

$$\sigma_{cn}(\omega) = \sigma_{zz}(\omega) \approx -j \frac{2e^2 v_F}{\pi^2 \hbar a (\omega - j\nu)}. \quad (3)$$

где  $v_F \approx 9.71 \times 10^5$  м/с – скорость Ферми;  $\nu = \frac{1}{\tau} = (3 \times 10^{-12})^{-1}$  – частота релаксации;  $\tau$  – время релаксации;  $\hbar$  – постоянная Планка;  $e$  – заряд электрона;

Данная формула справедлива [19], также и для УНТ типа zig-zag с металлическими свойствами.

В результате, для рассматриваемой структуры было получено уравнение Поклингтона относительно распределения тока вдоль УНТ, которое имеет вид

$$\int_L I(\xi') \left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \xi'} + (\xi_0 \xi'_0) k^2 \right\} K(|\xi - \xi'|) d\xi' + j4\pi\omega \varepsilon_0 z_i I(\xi) = -j4\pi\omega \varepsilon E_{tg}^{ct}(\xi). \quad (4)$$

где  $\xi, \xi'$  – радиус-векторы точек наблюдения и интегрирования;  $E_{tg}^{ct}(\xi) = \xi_0 \mathbf{E}^{ct}(\xi)$  – касательная составляющая стороннего поля, возбуждающего структуру;  $\xi_0, \xi'_0$  – единичные векторы, касательные оси УНТ в точках  $\xi, \xi'$  соответственно,  $K(z-z') = \frac{e^{-jk\sqrt{(z-z')^2+a^2}}}{\sqrt{(z-z')^2+a^2}}$  – ядро уравнения;  $k$  – волновое число. Интегрирование в (4) ведется вдоль всех УНТ структуры.

Для решения этого интегрального уравнения был использован метод Галеркина, в результате чего (4) было преобразовано к системе линейных алгебраических уравнений вида

$$\mathbf{Z}(\omega)\mathbf{I}(\omega) = \mathbf{U}(\omega), \quad (5)$$

где  $\mathbf{Z}(\omega)$  – матрица обобщенных импедансов;  $\mathbf{I}(\omega)$  – вектор искомых коэффициентов разложения распределения тока по выбранной системе базисных функций;  $\mathbf{U}(\omega)$  – вектор обобщенных напряжений, характеризующий способ возбуждения НСПК.

При выборе системы базисных функций необходимо руководствовались такими же требованиями, что и при выборе системы базисных функций для решения ИУ тонкопроволочных излучателей. В ряде работ, посвященных анализу тонкопроволочных излучателей, показано, что в качестве базисных и весовых наиболее целесообразно использовать функции, обеспечивающие непрерывность тока, как вдоль ветвей, так и в узлах. Была использована система кусочно-синусоидальных базисных функций (базис Ричмонда).

Применение таких функций в качестве базиса обеспечивает:

- возможность эффективного вычисления элементов матрицы обобщенных импедансов  $\mathbf{Z}(\omega)$  и вектора обобщенных напряжений  $\mathbf{U}(\omega_0)$ , поскольку для многих интегралов в данном случае могут быть получены замкнутые выражения;
- быструю сходимость решения ИУ (так, при аппроксимации тока симметричного вибратора в данном базисе размерность последнего в 6 – 8 раз меньше, чем при использовании кусочно-постоянного базиса, и в 3 – 5 раз меньше, чем в случае применения кусочно-треугольного базиса);
- возможность достаточно простого расширения алгоритма для расчета излучателей, имеющих включенные в расчески сосредоточенные сопротивления.

На основе данного алгоритма был реализован пакет программ на языке FORTRAN-90, по которому и проводились вычисления.

### Результаты вычислений

Рассчитанные частотные зависимости  $\sigma_{cn}(\omega)$  показаны на рис. 12. Явно видны две особенности, которые необходимо учитывать при решении задач излучения и рассеяния УНТ. Во-первых, импеданс УНТ и по величине, и по зависимости от частоты существенно отличается от импеданса обычного, например медного, проводника (рис. 12, а) и, во-вторых, значительно зависит от радиуса УНТ (рис. 12, б).

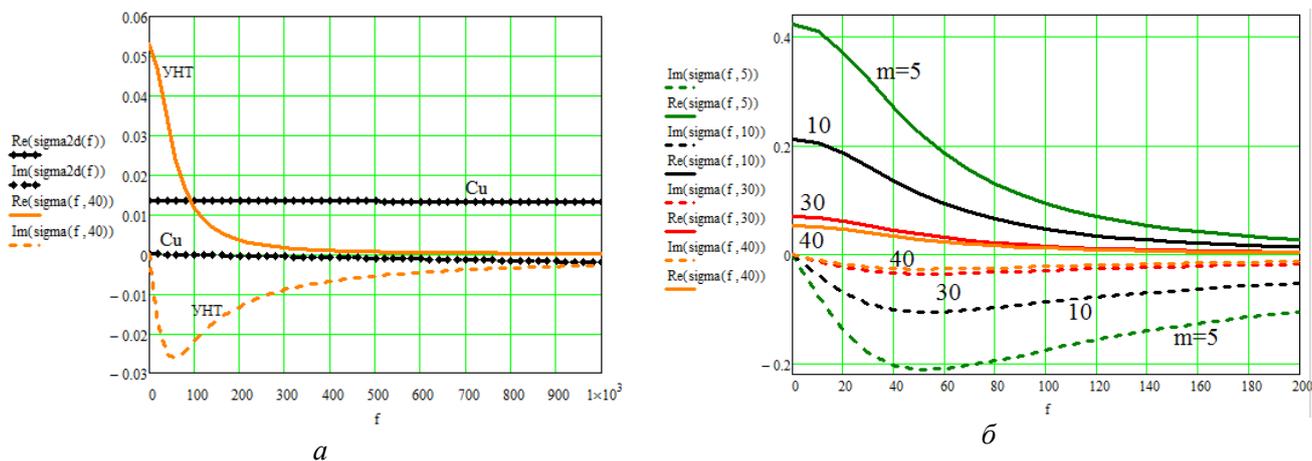


Рис. 12. Зависимость проводимости нанотрубок от частоты

а – действительная и мнимая часть проводимости УНТ с  $m = 40$  ( $a = 2.712$  нм) и медной (Cu) трубки такого же диаметра; б – действительная и мнимая части проводимости УНТ различных радиусов ( $m = 5; 10; 30; 40$ )

При проведении тестовых расчетов было выяснено, что из-за особенностей УНТ

- требуется вычисление элементов матрицы  $\mathbf{Z}(\omega)$  с удвоенной точностью,
- требуется корректный учет концевых зарядов для токов, описываемых базисными функциями, особенно в узлах НСПК, которые описывают либо изгибы УНТ, либо их разветвление.

Проверка корректности использования уравнения Поклингтона для анализа НСПК проводилась путем сравнения результатов из [5] с результатами вычислений, полученных по разработанной программе, в которой используется для решения интегральное уравнение Поклингтона. Результаты вычислений приведены на рис. 13 – 17.

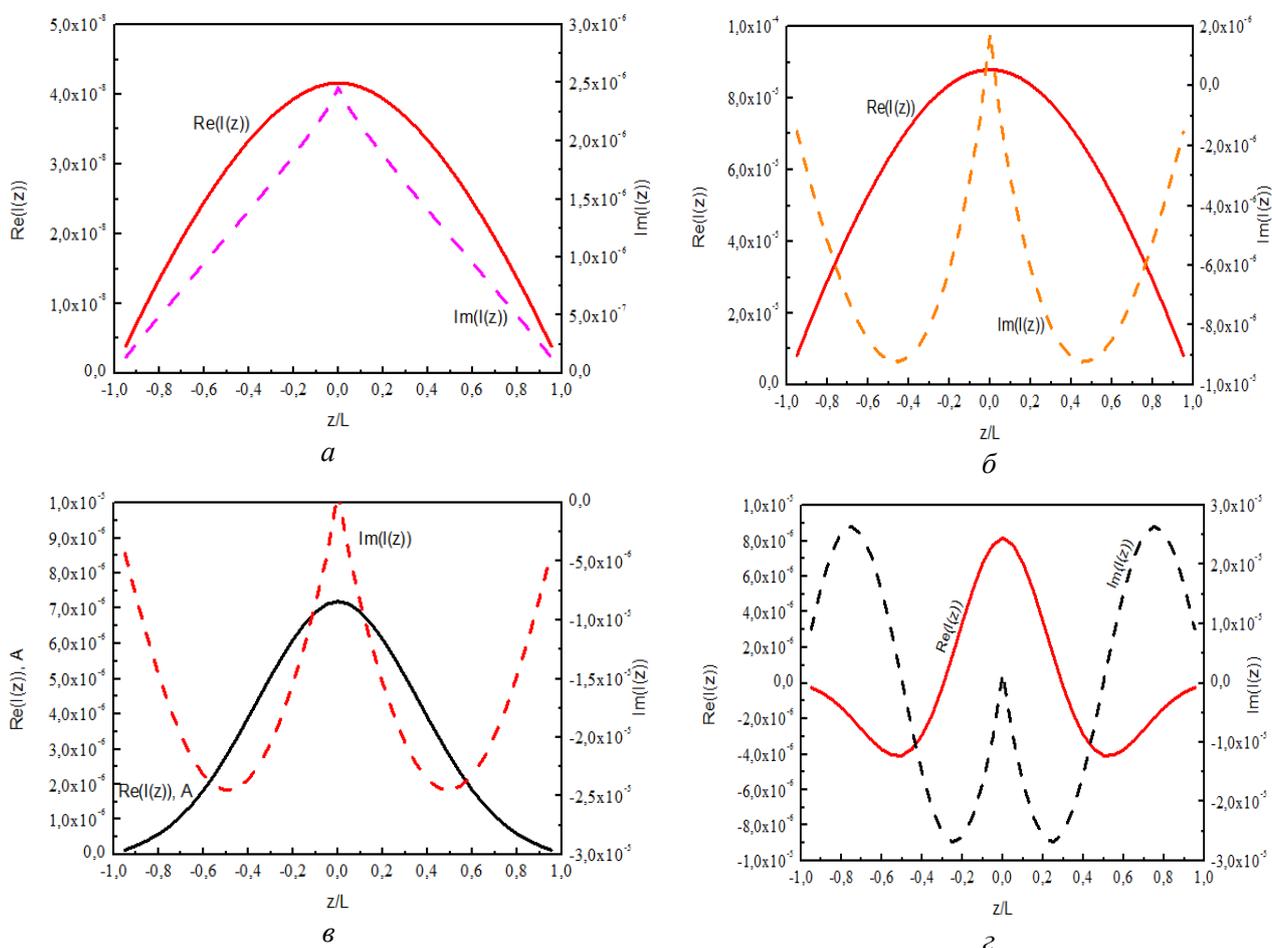


Рис. 13. Распределение тока вдоль УНТ с  $m = 40$  ( $a = 2.712$  нм) длиной  $L = 10$  мкм на различных частотах : а –  $f = 10$  ГГц ; б –  $f = 160$  ГГц ; в –  $f = 292$  ГГц ; г –  $f = 578$  ГГц

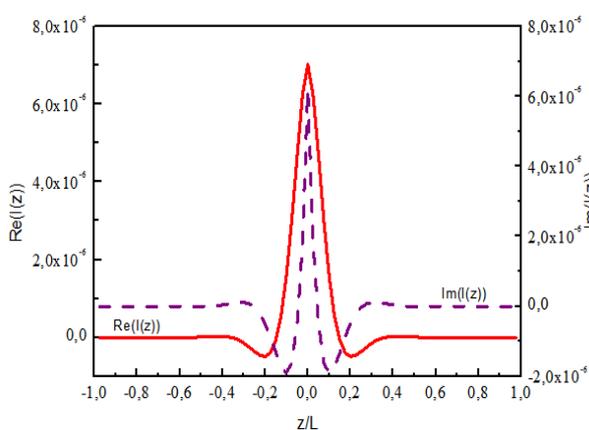


Рис. 14. Распределение тока вдоль вибратора с  $m = 40$  ( $a = 2.712$  нм) и  $L = 1$  мм на частоте 10 ГГц

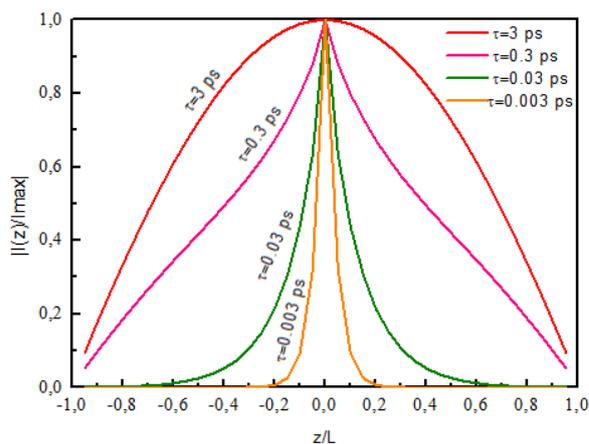


Рис. 15. Распределение тока вдоль вибратора с  $m = 40$  ( $a = 2.712$  нм) и  $L = 10$  мкм для различного времени релаксации  $\tau = 1/\nu$

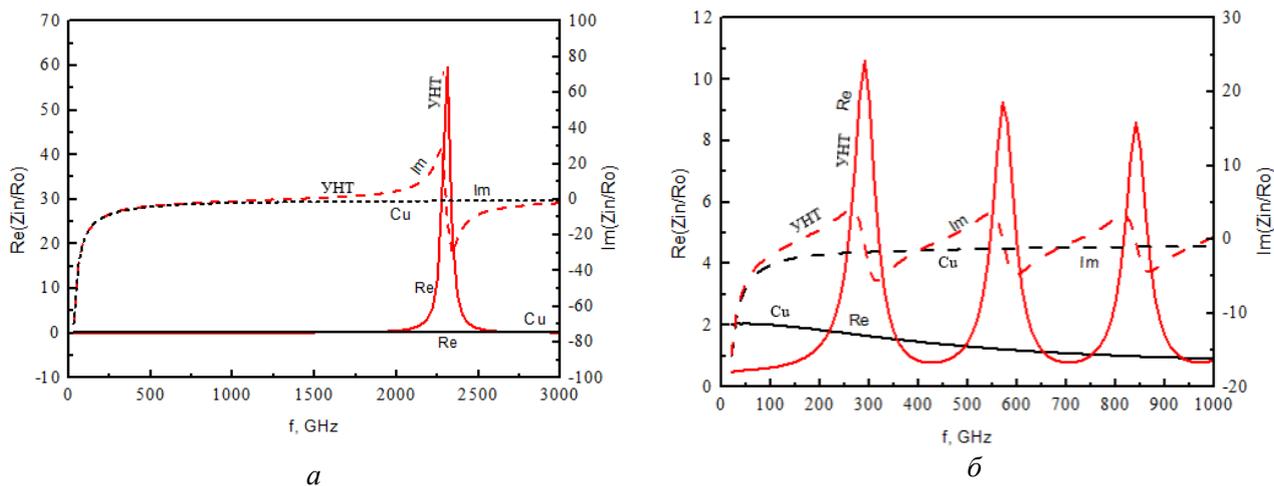


Рис. 16. Частотные зависимости нормированного входного импеданса УНТ с  $m = 40$  ( $a = 2.712$  нм) и трубки из меди (Cu) такого же радиуса для различной длины вибратора  
 $a - L = 1$  мкм ;  $b - L = 10$  мкм

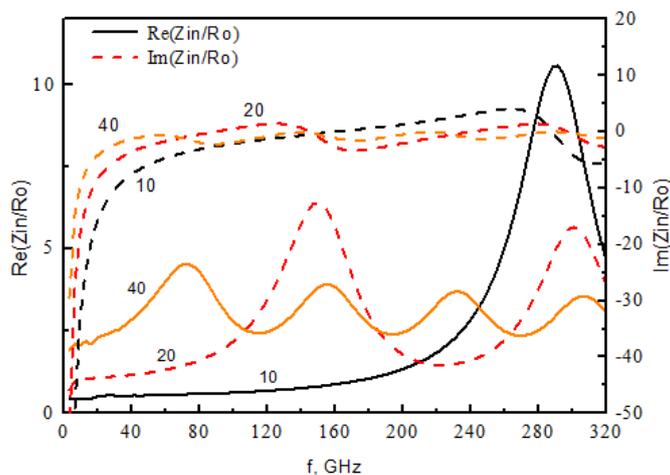


Рис. 17. Частотные зависимости нормированного входного импеданса УНТ с  $m = 40$  ( $a = 2.712$  нм) и различной длины ( $L = 10$  мкм ;  $L = 20$  мкм ;  $L = 40$  мкм)

На рис. 13 видно распределение тока на различных частотах УНТ-диполя размером  $L=10$  мкм. Как можем видеть на рис.13,  $a$ , что частоты намного ниже резонансной, и распределение тока приблизительно треугольное, как и для простого короткого вибратора. На рис.13,  $b$  изображено распределение тока вблизи первого резонанса, где видно, что ток имеет вид синусоиды. На рис. 13,  $в, г$  видно распределение тока вблизи первых двух параллельных резонансов тока. Распределение тока для такой же медной трубки значительно отличается. На рис. 14 изображено распределение тока антенны из УНТ длиной 1 мм на частоте 10 ГГц. Необходимо отметить, что при удалении от места включения источника УНТ-вибратора, амплитуда тока резко уменьшается. Влияние частоты релаксации на распределение тока показано на рис. 15 для диполя длиной 10 мкм на частоте 160 ГГц.

На рис. 16,  $a$  изображены частотные зависимости входного импеданса УНТ и трубки из меди, такого же радиуса и длины. Рассматриваемые нанотрубки имели длину плеча  $L=1$  мкм. Первый последовательный резонанс антенны из УНТ наблюдается на частоте  $F=1300$  ГГц, а первый параллельный резонанс на частоте 2300 ГГц. Медный вибратор, имеющий длину 1 мкм, не имеет резонансов в рассматриваемом диапазоне частот.

На рис. 16,  $b$ , изображены полученные частотные зависимости нормированного входного импеданса УНТ с  $m=40$  ( $a=2.712$  нм), и трубки из меди, такого же радиуса и длины. Как

и ожидалось, медный вибратор не имеет резонанса в данной частотной области. В отличие от медной, УНТ имеет ярко выраженный резонанс.

И наконец, на рис. 17 показана зависимость входного импеданса антенны от частоты при разных длинах УНТ ( $L=10, 20, 40$  мкм), показан эффект ослабления частотного затухания резонанса антенны.

Все приведенные выше результаты получены с помощью разработанного пакета программ, реализующего решение интегрального уравнения Поклингтона. Как можно заметить, все результаты совпадают с графической точностью с [5].

В таблице приведены числовые результаты сравнений. Видно, что результаты, полученные при использовании интегрального уравнения Поклингтона [5], совпадают с численной точностью, при этом погрешность составляет менее 4%.

Входное сопротивление УНТ с  $m = 40$  ( $a = 2.712$  нм) и  $L = 10$  мкм

Частота, ГГц	Входное сопротивление ( $Z_{вх} / R_0$ )	
	Уравнение Халлена [1]	Уравнение Поклингтона
10	0.527-j31.24	0.532-j31.62
160	0.876-j0.014	0.882-j0.0177
292	10.46-j1.48	10.65-j1.12
450	0.83+j0.0058	0.79+j0.0033

## Выводы

1. Для сложных структур, образованных УНТ произвольной конфигурации, в работе предложена методика электродинамического анализа на основе интегро-дифференциального уравнения Поклингтона. Результаты расчетов с использованием предложенной методики и разработанного пакета программ сравнивались с известными данными других авторов [5].

2. Хорошее количественное совпадение результатов свидетельствует о работоспособности и достоверности методики и разработанного пакета программ.

3. Одним из достоинств предложенной методики является возможность разработки достаточно универсального алгоритма и пакета программ расчета электродинамических характеристик наноструктур произвольной конфигурации, в составе которых могут быть сосредоточенные элементы как с линейными, так и с нелинейными характеристиками.

**Список литературы:** 1. Слепян Г.Я., Максименко С.А., Кужур П.П., «Современные тенденции развития наноэлектромагнетизма» / НИИ ядерных проблем БГУ, 2012. 2. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 488 с. 3. Слюсар В. Наноантенны: подходы и перспективы // Электроника : Наука, Технология, Бизнес. – 2009. – № 2. – С. 58-65. 4. Loh K.J., Lynch J.P., Kotov N.A. Inductively Coupled Multifunctional Carbon Nanotube-Based Nanocomposite Sensors // Proc. Int. Symp. of Applied Electromagnetics & Mechanics. – Lansing, MI. – 2007. 5. G.W. Hanson. Fundamental Transmitting Properties of Carbon Nanotube Antennas. // IEEE Transactions on antennas and propagation. – Vol.53, N.11. – 2005. – p. 3426-3435. 6. G. Ya. Slepuyan, M. V. Shuba, S. A. Maksimenko, A. Lakhtakia. Theory of optical scattering by achiral carbon nanotubes, and their potential as optical nanoantennas, Phys. Rev. B 73, 195416 (2006). 7. Лерер А.М., Махно В.В., Махно П.В. Электродинамический анализ наноструктур миллиметрового, оптического и рентгеновского диапазонов. – Изд-во LAP LAMBERT Academic Publishing. Saarbrucken, 2011. – 190 с. 8. Лерер А.М. Радиопередающие свойства углеродной нанотрубки-вибратора, расположенной на границе раздела диэлектриков // Вестник МУ. Серия 3. – 2010. – №5. – С.43-49. 9. Лерер А.М., Синявский Г.П. Дифракция электромагнитной волны на конечной решетке углеродных нанотрубок-вибраторов, расположенных на границе раздела диэлектриков // Вестник МУ. – Серия 3. – 2010. – №6. – С. 48-53. 10. G.W. Hanson. Current on an infinitely-long carbon nanotube antenna excited by a gap generator // IEEE transactions on antennas and propagation. – Vol. 54, N.1. – 2006. – P.76. 11. Attiya A. M. Lower frequency limit of carbon nanotube antenna // Progress In Electromagnetics Research, PIERS 94, 419–433, 2009. 12. Hanson G.W. Radiation efficiency of nanoradius dipole antennas in the microwave and far-infrared regime // IEEE Antennas and Propagation Magazine. – Vol. 50, No. 3, June 2008. – pp. 66-77. 13. Yue WANG, Yu-

Ming WU, Qun WU. Characteristics of Radiation from Zig-Zag carbon Nanotubes at Terahertz Range // Wireless and Microwave Technologies. – 2009. – № 1. – p.52-59. 14. Jin Hao, George W. Hanson. Electromagnetic scattering from finite-length metallic carbon nanotubes in the lower IR bands // PHYSICAL REVIEW B **74**, 035119 2006. 15. Y. Wang, K. Kempa, B. Kimball, J. B. Carlson, G. Benham, W. Z. Li, T. Kempa, J. Rybczynski, A. Herczynski, and Z. F. Ren. Receiving and transmitting light- like radio waves: Antenna effect in arrays of aligned carbon nanotubes // Applied Physics Letters, 85(13): 2607 – 2609, 2004. 16. Гавва Д.С., Лучанинов А.И. и др. Расчет параметров проволочных излучающих структур произвольной конфигурации // Дистанционные методы и средства исследования процессов в атмосфере Земли. Гл. 10 ; под ред. Б. Л. Кашеева, Е. Г. Прошкина, М. Ф. Лагутина. – Харьков, 2002. – С. 399-425. 17. M. Menon, D. S. Srivastava. Carbon Nanotube «T Junctions»: Nanoscale metal-semiconductor- metal contact devices // Phys. Rev. Lett., 79, 22, 4453-4456 (1997). 18. Лучанинов А.И. Анализ проволочных антенн произвольной конфигурации // Автоматизированное проектирование антенн и устройств СВЧ. – М. : Изд-во МАИ, 1990. 19. 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, vol. 60, Dec. 1999. – pp. 17136 – 17149.

*Харьковский национальный  
университет радиоэлектроники*

*Поступила в редколлегию 15.06.2013*