

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОТРУБОК

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) вместе с фуллеренами и мезопористыми углеродными структурами образуют новый класс углеродных наноматериалов, со свойствами, которые значительно отличаются от других форм углерода, таких как графит и алмаз. В настоящее время ведутся интенсивные исследования возможности применять такие наноструктуры в электронике, энергетике и т.п. Анализ состояния и тенденций развития нанотехнологий показывает, что наметилось несколько перспективных сфер применения углеродных нанотрубок.

Одной из таких сфер является применение УНТ в антенной технике. С одной стороны, заманчивым является использование УНТ как в качестве одиночных излучателей, так и в качестве элементов более сложных антенных систем. Однако такие системы обладают целым рядом особенностей, отличающих их от традиционных антенных систем [1]. С другой стороны, на основе УНТ могут быть созданы композитные материалы для использования в устройствах микроволнового диапазона, например в качестве частотно-избирательных поверхностей или поглощающих материалов [2]. Успешное применение УНТ в этой сфере невозможно без знания их электродинамических характеристик, то есть характеристик излучения и рассеяния.

К концу 80-х годов большинству исследователей стали доступны мощные компьютеры, что стало причиной разработки большого числа сложных, численных методов решения уравнений Максвелла. Среди них особо следует отметить метод интегральных уравнений, метод конечных элементов (МКЭ) и конечно-разностный метод в частотной или временной области. К настоящему времени на основе данных методов (или их модификаций) разработано значительное количество исследовательских и коммерческих пакетов программ электродинамического анализа. Некоторые из них, например – Microwave Office, HFSS, CST Microwave Studio, стали своего рода эталонами при проектировании различного типа СВЧ устройств и антенн 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.

Цель работы - проанализировать возможность использования существующих программных пакетов для анализа электродинамических характеристик углеродных нанотрубок.

Основная часть

В данной работе представлена сравнительная оценка упомянутых выше методов расчета наноантенн из УНТ. Отличительные особенности таких антенн – большое отношение длины плеча вибратора к его радиусу, которое может быть порядка 10^7 , и значительная величина поверхностного импеданса за счет больших значений кинетической индуктивности и емкостивой емкости антенны [3]. Основное внимание уделено выбору метода расчета электродинамических параметров структур, обладающих первой из особенностей, а именно – структур, у которых отношение характерных размеров отличается на несколько порядков. В нашем случае это – отношение l/a (l – длина плеча вибратора из УНТ, a – его радиус). Сравнительная оценка проводилась для метода интегральных уравнений (ИУ) (пакет программ Wire), одной из модификаций метода FDTD (пакет CST Microwave Studio [4]) и метода конечных элементов (пакет HFSS [5]). Для этого были вычислены зависимости входного сопротивления одиночного вибратора (рис. 1) от отношения l/a с использованием упомянутых методов. При этом предельным было выбрано значение $l/a = 2000$.

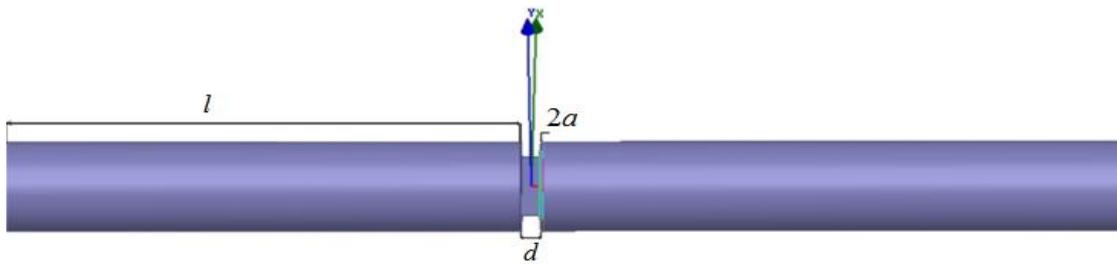


Рис. 1. Анализируемая модель вибратора

Результаты вычислений активной части входного сопротивления приведены на рис.2, а реактивной части – на рис. 3. Также частично результаты вычислений представлены в таблице.

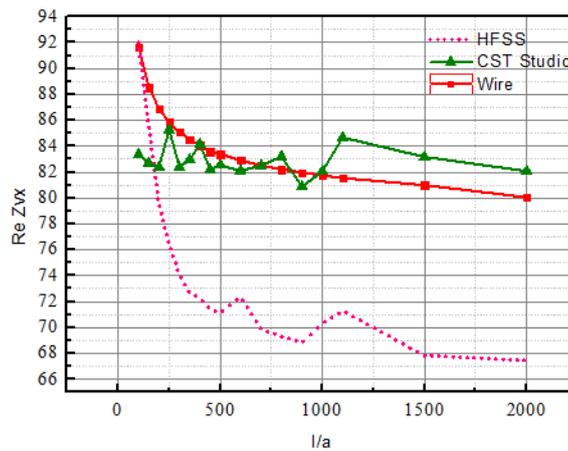


Рис. 2. Зависимость активной части входного сопротивления вибратора от отношения l/a

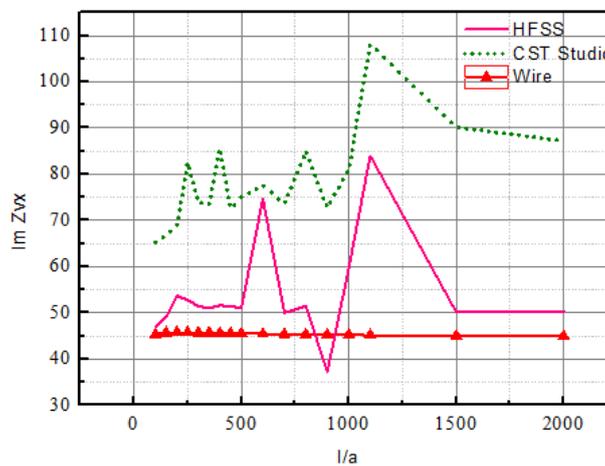


Рис. 3. Зависимость реактивной части входного сопротивления вибратора от отношения l/a

Результаты моделирования вибратора разными методами

l/a	Метод ИУ	Метод FDTD	Метод МКЭ
100	91,66+j45.27	83,34+j65,22	92,02+j46,87
700	82,51+j45.33	82,49+j73,51	69,876+j50,01
2000	80,05+j44.90	82,07+j87.2	67,43+j50,34

При расчете с помощью метода интегральных уравнений была использована методика и пакет программ электродинамического анализа на основе интерго-дифференциального уравнения Поклингтона, предложенные и подробно описанные в [6]. В этой работе показано, что хорошее количественное совпадение результатов расчетов с использованием предложенной методики и разработанного пакета программ с известными данными других авторов свидетельствует о работоспособности и достоверности методики и разработанного пакета программ. В методе ИУ все поля в структуре выражаются через некоторую величину, заданную на поверхности (электрический и магнитный ток). Проблема сложных сред в ИУ, имеющих сложную форму всегда связана с поиском подходящего представления функции Грина, выражающей поля в структуре через токи на некоторых поверхностях. Особый случай – задачи, связанные с расчетом излучения в свободное пространство. Поскольку функция Грина свободного пространства хорошо известна, то, следовательно, и реализация метода ИУ не вызывает затруднений. Кроме того использование метода ИУ в ряде случаев позволяет существенно уменьшить размерность решаемой задачи, что приводит к увеличению скорости решения и экономии компьютерных ресурсов. Поэтому, в рассматриваемой задаче можно ожидать преимущества метода ИУ по сравнению с упомянутыми выше методами. Действительно, как видно из рис. 2, вычисленные с использованием метода ИУ результаты обладают достаточной устойчивостью и, кроме того, как показали результаты расчетов, данный метод обладает очень высокой эффективностью.

Вычисленные с использованием метода МКЭ значения активной части входного сопротивления, как видно из рис. 2, существенно отличаются от значений, полученных с использованием метода ИУ.

На наш взгляд, это различие обусловлено следующим. Метод МКЭ является вариационным методом решения электродинамических задач в пространственно-частотной области. Он позволяет определить распределение электрического и магнитного полей в некоторой области пространства, называемой областью моделирования. Для этого вся область моделирования разбивается на подобласти (конечные элементы), в пределах каждой из которых искомые распределения поля аппроксимируются некоторыми простыми функциями с неизвестными коэффициентами. Подстановка этих аппроксимаций в исходный вариационный функционал и минимизация данного функционала приводит к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно неизвестных коэффициентов аппроксимации. Размерность полученной СЛАУ непосредственно связана с числом подобластей и, следовательно, с их размерами. При решении электродинамических задач размеры подобластей обычно выбираются значительно меньше рабочей длины волны и должны быть меньше типичных размеров исследуемой электродинамической структуры. Такое требование приводит к тому, что при расчете распределений полей проволочных структур подобласти, расположенные вблизи провода, имеют размеры порядка радиуса проводника. Так как размеры всей области моделирования определяются большим из характерных размеров структуры (который в нашем случае равен длине вибратора $2l$), то для структур с большим отношением l/a число подобластей достаточно велико и, следовательно, матрица полученной СЛАУ имеет большой порядок. Поэтому, главная трудность в методе МКЭ – это обращение матрицы большого порядка при решении системы линейных уравнений (порядок матрицы СЛАУ при расчете вибратора с $l/a \sim 1500$ был около 10^5). Данная процедура требует значительного времени и может приводить к ошибкам вычислений, что объясняет различие полученных результатов.

Метод FDTD относится к общему классу сеточных методов решения дифференциальных уравнений. Так же как и в методе МКЭ, в этом методе, определяется распределение электрического и магнитного полей в области моделирования. Эта область также разбивается на подобласти, размеры которых должны быть значительно меньше рабочей длины волны и типичных размеров исследуемой электродинамической структуры. Существенным отличием метода FDTD от метода МКЭ является то, что это метод решения электродинамических задач в пространственно-временной области. Данное обстоятельство позволило в 1966 г.

К.С.Уее предложить удобную дискретизацию области моделирования и эффективный алгоритм для нахождения распределения полей, в котором отсутствует процедура решения СЛАУ большого порядка и связанные с этим проблемы сходимости и устойчивости решения. Вследствие этого результаты расчета активной составляющей входного сопротивления, полученные с использованием метода FDTD, довольно близки к результатам, полученным на основе интегральных уравнений, однако полученное решение не обладает достаточной устойчивостью (см. рис. 2).

Отмеченные выше особенности результатов расчета активной части входного сопротивления в основном присутствуют при расчете реактивной составляющей (рис. 3). Однако при расчете реактивной составляющей с использованием метода FDTD появляется различие в величине $X_{вх}$ по сравнению с значениями, рассчитанными на основе методов ИУ и МКЭ. Это объясняется различными моделями точки питания, используемыми в различных методах (рис. 4).

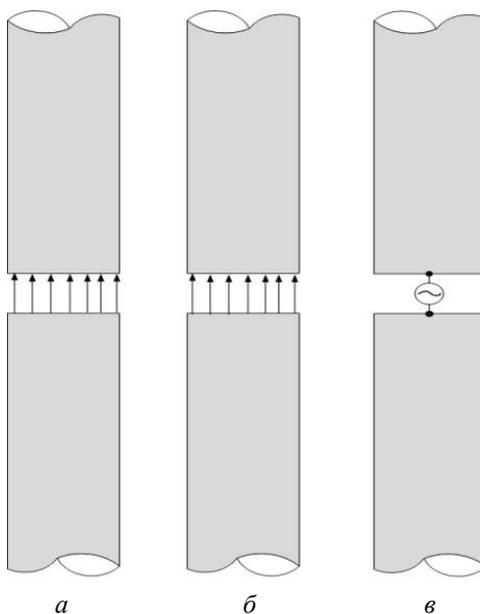


Рис. 4. Модели точки питания для разных методов: *а* – ИУ; *б* – МКЭ; *в* – FDTD

В методе ИУ в качестве модели точки питания используется бесконечно узкая щель (рис. 4, *а*), в МКЭ в качестве модели области питания используется щель конечной ширины в предположении однородного распределения электрического поля (рис. 4, *б*), в FDTD использовано возбуждение сосредоточенным источником тока (рис. 4, *в*).

Из приведенных графиков можно сделать заключение, что метод интегральных уравнений показывает достаточную точность и стабильность и является более эффективным в сравнении с методами FDTD и МКЭ при моделировании нановибраторов из УНТ. Отличительная особенность метода интегральных уравнений – это не только точность расчета, но и скорость, что позволяет быстро получить корректные характеристики.

В процессе проведения расчетов было также установлено, что метод конечных элементов (программный пакет HFSS) не позволяет проанализировать нановибраторы, так как при увеличении l/a (свыше 150) программа показывает некорректные результаты моделирования. И при этом резко увеличивается время расчета.

Таким образом, в статье представлены результаты, демонстрирующие, что моделирование nanoизлучателей из углеродных нанотрубок наиболее целесообразно проводить используя метод интегральных уравнений.

Заключение

Данные показали, что пакет HFSS, использующий метод конечных элементов является недостаточно эффективным при расчете антенн нанодиапазона, так как при уменьшении радиуса увеличивается погрешность моделирования электродинамических характеристик структур из УНТ и резко увеличивается время расчета. Корректные результаты получены также при использовании программы CST Studio, использующей метод FDTD, но при этом время моделирования меньше в сравнении с МКЭ и существенно больше, чем у метода ИУ, поэтому моделирование наноизлучателей из углеродных нанотрубок целесообразней проводить, используя метод интегральных уравнений. Эффективным инструментом при этом, в частности, может быть программа Wire [7].

Список литературы: 1. П.Н. Дьячков. Электронные свойства и применение нанотрубок. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 488 с. 2. 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. 3. Слюсар В. Наноантенны: подходы и перспективы // ЭЛЕКТРОНИКА: Наука, Технология, Бизнес. – 2009. – № 2. – С. 58-65. 4. CST-Computer Simulation Technology – CST Studio Suite 2008 Ru // eBook, 2008. – С.221. 5. Банков С.Е., Курушин А.А. Расчет антенн и СВЧ структур с помощью HFSS Ansoft. – М. : ЗАО «НПП «РОДНИК», 2009. – 256 с. 6. А.И. Лучанинов, Е.А. Медведев, Уайд С. Р. Использование уравнения Поклингтона для анализа антенн из углеродных нанотрубок // Радиотехника. – 2013. – Вып.174. – С. 112-121. 7. Лучанинов А.И., Гавва Д.С., Омаров М.А. Пакет программ “Wire” для моделирования тонкопроволочных антенн произвольной конфигурации с линейными и нелинейными свойствами поверхностного импеданса // Прикладная радиоэлектроника. – 2002. – Т. 1, №2. – С. 225-230.

*Харьковский национальный
университет радиоэлектроники*

Поступила в редколлегию 11.10.2013