

МОДИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ ЭФФЕКТИВНОЙ СРЕДЫ ДЛЯ УЧЁТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ПО РАЗМЕРУ, СОСТАВУ И КОНЦЕНТРАЦИИ

Лихачев А.А., Черняков В.А., Астахов А.С.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Республика Беларусь

Баранова М. С. – канд. физ.-мат. наук, зав.
СНИЛ НИЧ,

Данилюк А. Л. – канд. физ.-мат. наук, доцент

Аннотация. Модели эффективной среды широко используются для описания взаимодействия электромагнитного излучения (ЭМИ) с композитом. Зачастую рассматривается взаимодействие ЭМИ с двухкомпонентной матричной средой, где матрица – первый компонент, а наночастицы (включения) – второй компонент. В работе предложен метод расчета эффективных электродинамических параметров нанокompозита с двумя и более типами сферических магнитных наночастиц. Особенностью предложенного метода является то, что он не приводит к значительным усложнениям в вычислениях и основан на известной модели Браггемана.

Ключевые слова: Углеродный наноструктурированный композит, Электромагнитное излучение, Модель эффективной среды, Электродинамические параметры.

Введение

Модель Браггемана одна из модификаций моделей эффективной среды [1], которая используется для описания взаимодействия электромагнитного излучения (ЭМИ) с композитом. Данная модель используется для сред, как с макроскопическими включениями, так и для сред, содержащих наноструктурные объекты [2]. Композит рассматривается, как среда с включениями, обладающая определенными значениями эффективной диэлектрической и магнитной проницаемостей. В [3] предложена адаптация модели эффективной среды для наноструктурированного углеродного композита, содержащего магнитные наночастицы. Выражения для расчета эффективных электродинамических параметров включают импедансы RLC-контуров, которые являются модельными представлениями структурных элементов нанокompозита: индуктивность – наночастицы, емкость – переходные оболочки, которые возникают на поверхности наночастицы, сопротивление – углеродная матрица. Однако данная модель предполагает учет наночастиц одного вида, что вносит существенные ограничения и не позволяет учесть сложные системы со многими включениями. В работе предложен подход, который позволяет адаптировать модель с целью дальнейшего моделирования более сложных нанокompозитов: вычислять эффективные электродинамические параметры среды с любым количеством включений. Реализация подобной модели позволит рассчитывать коэффициенты отражения R , пропускания T материалов с набором включений, различающихся как по размеру, так и по составу.

Методика моделирования

Эффективное значение магнитной проницаемости для двухкомпонентной среды, где первый компонент – матрица, а второй – ферромагнитные наночастицы, находится по следующим формулам:

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{-B_{\mu} + \sqrt{B_{\mu}^2 + 8\mu_m Q_{\mu}}}{4Q_{\mu}} \quad (1)$$

$$Q_{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{i\omega a \mu_0}{2Z}; \quad B_{\mu} = \frac{(3-5c) - \mu_m Q_{\mu}(6-7c)}{3-2c} \quad (2)$$

где μ_m и μ_1 – относительные магнитные проницаемости матрицы и ферромагнитных наночастиц соответственно; a – диаметр наночастиц; ω – циклическая частота ЭМИ; μ_0 – магнитная константа; c – объемная концентрация наночастиц; Z – импеданс переходной оболочки (RLC-контур).

Эффективное значение диэлектрической проницаемости двухкомпонентной среды находится по следующим формулам:

$$\varepsilon_{eff} = \frac{-B_\varepsilon + \sqrt{B_\varepsilon^2 + 8\varepsilon_m Q_\varepsilon}}{4Q_\varepsilon} + i \frac{\sigma}{\omega} \quad (3)$$

$$Q_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{i\omega a \varepsilon_0}{2Z}; \quad B_\varepsilon = \frac{(3-5c) - \varepsilon_m Q_\varepsilon (6-7c)}{3-2c} \quad (4)$$

где ε_m и ε_1 – комплексные относительные диэлектрические проницаемости углеродной матрицы и наночастиц соответственно; ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, σ – проводимость матрицы.

Наноккомпозит представляет собой систему со сложной микро- и макроструктурой, для описания которой необходимо вводить учет дополнительных компонентов. Для решения такой задачи использован метод вложения, который позволяет поэтапно гомогенизировать среду. Каждому типу включений соответствует определенный набор параметров, используемых в уравнениях (1)-(4). На первом этапе вычисляются значения эффективных параметров для матрицы и наночастиц первого типа без учета наночастиц второго типа с объемная концентрация наночастиц c_1 ($c_1 = V_1 / (V_m + V_1)$, где V_1 – объем наночастиц первого типа, V_m – объем углеродной матрицы). На втором этапе рассчитываются эффективные электродинамические параметры для системы, состоящей из наночастиц второго типа с объемной концентрацией c_2 ($c_2 = V_2 / (V_m + V_1 + V_2)$, где V_1 – объем наночастиц первого типа, V_2 – объем наночастиц второго типа, V_m – объем углеродной матрицы) и эффективной среды, полученной на предыдущем этапе:

$$\mu_{eff01} = \frac{-B_{\mu1} + \sqrt{B_{\mu1}^2 + 8\mu_m Q_{\mu1}}}{4Q_{\mu1}} \quad (5)$$

$$\mu_{eff} = \frac{-B_{\mu2} + \sqrt{B_{\mu2}^2 + 8\mu_{eff01} Q_{\mu2}}}{4Q_{\mu2}} \quad (6)$$

где, μ_{eff01} эффективная магнитная проницаемость между композитом и наночастицами первого типа.

Аналогичный подход применяется для расчета эффективной диэлектрической проницаемости ε_{eff} :

$$\varepsilon_{eff01} = \frac{-B_{\varepsilon1} + \sqrt{B_{\varepsilon1}^2 + 8\varepsilon_m Q_{\varepsilon1}}}{4Q_{\varepsilon1}} \quad (7)$$

$$\varepsilon_{eff} = \frac{-B_{\varepsilon2} + \sqrt{B_{\varepsilon2}^2 + 8\varepsilon_{eff01} Q_{\varepsilon2}}}{4Q_{\varepsilon2}} \quad (8)$$

Процедуру расчета можно повторить и тем самым ввести в модель учет дополнительных компонентов.

Данный подход позволит вычислить параметры среды, учитывая различный тип включений, их различный диаметр и концентрацию в композите.

Далее, используя полученные значения магнитной и диэлектрической проницаемости, можно рассчитать коэффициенты отражения R и пропускания T электромагнитного излучения по формулам:

$$R = 20 \log \left(\left| \frac{Z_c - 377}{Z_c + 377} \right| \right) \quad (9)$$

где Z_c – волновое сопротивление композита, которое вычисляется как

$$Z_c = \sqrt{\mu_0 \mu_{eff} / (\varepsilon_0 \varepsilon_{eff})}.$$

$$T = 8,68 \cdot \alpha d \cdot 20 \log \left(\left| \frac{(377 + Z_c)^2}{4 \cdot 377 \cdot Z_c} \right| \right) \cdot 20 \log \left(\left| 1 + e^{\frac{-2\alpha d}{8,68}} \cdot \frac{(377 - Z_c)^2}{(377 + Z_c)^2} \right| \right) \quad (10)$$

где α – коэффициент, равный $\alpha = \text{Re}(i \omega \sqrt{\mu_0 \mu_{\text{eff}} \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{eff}}})$.

Заключение

Разработан подход на основе модели эффективной среды, который предоставляет возможность моделировать взаимодействие электромагнитного излучения с многокомпонентным углеродным наноккомпозитом без привлечения сложных и ресурсоемких расчетов.

Список использованных источников:

1. Choy, T.C. Effective medium theory. Second edition / T.C. Choy – Oxford: Oxford university press, 2016. – 241 p.
2. Ефимова, А. И. Инфракрасная спектроскопия твердотельных систем пониженной размерности / А. И. Ефимова, Л. А. Головань, П. К. Кашкаров, В. М. Сенявин, В. Ю. Тимошенко – Санкт-Петербург.: «Лань», 2016. – 246 с.
3. Atdayev, A. Interaction of electromagnetic radiation in the 20–200 GHz frequency range with arrays of carbon nanotubes with ferromagnetic nanoparticles / A. Atdayev, A. L. Danilyuk, S. L. Prischeva // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2015. – Vol. 6. – P. 1056 – 1064.