

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВОЙ ДИНАМИКИ В СИСТЕМАХ С ГЕТЕРОГЕННЫМИ СТРУКТУРАМИ

Аннотация. Рассматривается проекционная методика определения дескрипторов автономных блоков в виде прямоугольных параллелепипедов с магнитными нановключениями и виртуальными каналами Флоке на гранях и построение на их базе математических моделей для устройств сверхвысоких частот и инфракрасного диапазона на основе магнитных наноструктур.

Ключевые слова: гетерогенная структура, дескриптор, система нелинейных уравнений, математическая модель устройства.

Abstract. This article deals with the projection method for the creation of autonomous block descriptors. Autonomous blocks are considered to be rectangle parallelepipeds using nano-elements inside and Flokke virtual channels outside. Mathematic models for Super High Range and Infra Red Range Units based on magnetic nano-structures are constructed using the projection method.

Keywords: heterogeneous structure, descriptor, nonlinear equations system, mathematic model of unit.

Введение

Математическое моделирование волновой динамики в системах с гетерогенными структурами актуально, поскольку существующие методы, адекватные технологиям сегодняшнего дня, не учитывают физических процессов, свойственных, например, наноструктурам, обладающим, во-первых, сложной геометрической конфигурацией, а во-вторых – существенной нелинейностью характеристик.

Существующие методы математического моделирования применимы в основном для линейных или слабонелинейных систем, поддающихся линеаризации.

Традиционный метод Бубнова – Галеркина сводит решение краевой задачи к решению системы линейных алгебраических уравнений. Однако для исследования волновой динамики гетерогенных структур со средами, обладающими существенной нелинейностью параметров, этот метод до настоящего времени не применялся.

Метод поперечных сечений позволяет использовать двумерные электродинамические базисы при решении трехмерных краевых задач. Однако до настоящего времени этот метод не применялся к решению краевых задач для волноводных трансформаторов с количеством волновых каналов больше трех и для волноводов с нелинейными средами.

Для преодоления трудностей моделирования, связанных с учетом нелинейности свойств среды, используется вычислительный метод Трефтца, основанный на выделении в гетерогенной структуре элементарных объемов, характеризующихся постоянными значениями диэлектрических и магнитных проницаемостей. Хотя этот метод и менее универсален, чем метод Бубнова – Галеркина и метод поперечных сечений, тем не менее, он может быть эффективным при решении узкоспециальных задач.

Применение традиционных методов требует декомпозиции гетерогенной структуры на базовые элементы, характеризующиеся матрицами проводимости, сопротивления и рассеяния (дескрипторами). Существующие принципы определения дескрипторов при декомпозиции и рекомпозиции автономных блоков в прикладной электродинамике сводятся к матричным преобразованиям. Известны решения задач моделирования для определения дескрипторов волноводных трансформаторов, режимы функционирования которых имеют математические описания в виде многоканальных многомодовых матриц проводимости, сопротивления и рассеяния. Однако алгоритмы рекомпозиции нелинейных дескрипторов разработаны недостаточно полно.

1 Выбор объекта исследования

Для адекватности математического моделирования электромагнитных процессов в гетерогенных наноструктурах, отличающихся существенной нелинейностью свойств в малых окрестностях точек, необходимо использовать базовый элемент, отвечающий этим особенностям.

Этим требованиям удовлетворяет базовый элемент в виде прямоугольного параллелепипеда с магнитным нановключением внутри и виртуальными каналами Флоке на гранях.

Во-первых, пространство внутри параллелепипеда – сплошная среда, что позволяет использовать метод Трефтца для декомпозиции гетерогенной структуры.

Основными уравнениями электродинамики для сплошной среды, характеризующейся относительной диэлектрической проницаемостью ϵ и относительной магнитной проницаемостью μ , являются уравнения Максвелла:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \bar{H}(t) &= \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \bar{E}(t)}{\partial t} + \sigma \bar{E}(t); \\ \operatorname{rot} \bar{E}(t) &= -\frac{\partial \bar{B}(t)}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\bar{E}(t)$ и $\bar{H}(t)$ – векторы напряженности электрического и магнитного полей соответственно; $\bar{B}(t) = \bar{M}(t) + \mu_0 \bar{H}(t)$ – вектор магнитной индукции; $\bar{M}(t)$ – вектор намагниченности среды; σ – электропроводность среды; ϵ_0 , μ_0 – электрическая и магнитная постоянные соответственно.

Во-вторых, нановключение, отличающееся по своим электромагнитным свойствам от заполняющей среды, позволяет сохранить признаки нелинейности свойств гетерогенной наноструктуры в целом.

В первом приближении нановключение обладает свойствами, присущими ферромагнетикам. Для ферромагнитных сред система уравнений Максвелла дополняется уравнением движения вектора намагниченности (материальным уравнением Ландау – Лифшица), которое учитывает магнитные потери:

$$\frac{d\bar{M}(t)}{dt} = -\gamma (\bar{M}(t) \times \bar{H}_{\text{эф}}(t)), \quad (2)$$

где γ – гиромагнитное отношение; $\bar{H}_{\text{эф}}(t)$ – вектор напряженности эффективного магнитного поля обменного взаимодействия.

Для ферромагнитных макроструктур влияние магнитного поля обменного взаимодействия не учитывается, так как оно (влияние) оказывается существенным лишь на расстояниях порядка 100 нм. В реальных макроструктурах с ферромагнетиками наличие магнитных потерь приводит к тому, что прецессия вектора намагниченности является затухающей, а при отсутствии внешнего переменного поля очень скоро устанавливается статическая намагниченность. Для наноструктур с размерами 10–350 нм это влияние может оказаться весьма существенным, поэтому поле обменного взаимодействия необходимо учитывать.

Для описания эффективного поля обменного взаимодействия в гетерогенных наноструктурах введем дополнительную векторную функцию [1]

$$\bar{F}(t) = \text{rot } \bar{M}(t), \quad (3)$$

которая позволяет записать уравнение обменного взаимодействия в следующем виде:

$$\bar{H}_q(t) = -q \text{rot } \bar{F}(t), \quad (4)$$

где $\bar{H}_q(t)$ – эффективное магнитное поле обменного взаимодействия; q – константа обменного взаимодействия.

В-третьих, использование виртуальных каналов на гранях базового элемента позволит определять свойства наноматериала как регулярной структуры с использованием теоремы Флоке.

Таким образом, полная система уравнений электродинамики, адекватно описывающая физические явления электромагнетизма, протекающие в магнитных наноструктурах, состоит из уравнений Максвелла (1) для сплошных сред в целом, уравнения движения вектора намагниченности в форме Ландау – Лифшица (2) для ферромагнитных сред в частности, а также уравнений (3) и (4), учитывающих эффективное поле обменного взаимодействия в наноструктурах.

Будем считать источники электромагнитного поля гармоническими, а магнитную среду – нелинейной, тогда векторы $\bar{E}(t)$, $\bar{H}(t)$, $\bar{M}(t)$, $\bar{F}(t)$, $\bar{H}_q(t)$ представим в виде рядов Фурье по комбинационным частотам ω_m . Систему нелинейных уравнений для описания процесса преобразуем к виду

$$\begin{aligned} \text{rot } \bar{H}(\omega_m) &= i\omega_m \varepsilon_0 \dot{\bar{E}}(\omega_m); \\ \text{rot } \bar{E}(\omega_m) &= -i\omega_m \bar{M}(\omega_m) - i\omega_m \mu_0 \bar{H}(\omega_m); \\ \gamma \sum_{i=-\infty}^{\infty} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \gamma_{ij} (\bar{M}(\omega_i) \times (\bar{H}(\omega_j) + \bar{H}_q(\omega_j))) &= \\ &= -(\omega_r + i\omega_m) \bar{M}(\omega_m) + \omega_r \chi_0 \bar{H}(\omega_m) - \\ -\gamma \bar{M}_0 \times \bar{H}(\omega_m) - \gamma \bar{M}_0 \times \bar{H}_q(\omega_m) - \gamma \bar{M}(\omega_m) \times \bar{H}_0; & \\ \text{rot } \bar{M}(\omega_m) &= \bar{F}(\omega_m); \end{aligned} \quad (5)$$

$$\operatorname{rot} \bar{F}(\omega_m) = -q^{-1} \bar{H}_q(\omega_m);$$

$$m = \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$$\text{где } \gamma_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{при } \omega_i + \omega_j \neq \omega_m; \\ 1 & \text{при } \omega_i + \omega_j = \omega_m; \end{cases}; \quad \hat{\epsilon}(\omega_m) = \epsilon(\omega_m) - i \frac{\sigma(\omega_m)}{\epsilon_0 \omega_m}, \quad \bar{M}_0 = \bar{M}(\omega_0),$$

$$\bar{H}_0 = \bar{H}(\omega_0).$$

В результате краевую задачу дифракции для базового элемента в виде прямоугольного параллелепипеда с магнитным нановключением и виртуальными каналами Флоке на гранях сформулируем следующим образом:

- в области магнитного нановключения электромагнитное поле и намагниченность удовлетворяют уравнениям (5);
- в остальной области блока – уравнениям Максвелла (1);
- на гранях блока – условиям неасимптотического излучения [2].

2 Формирование дескрипторов нелинейных базовых элементов

Для построения математических моделей функционирования устройств на основе магнитных наноструктур необходимо определенным образом формировать дескрипторы базовых элементов. Методика определения дескрипторов приведена в работах [1–4].

Дескрипторы традиционно используемых в моделировании линейных базовых элементов (функционирующих, как правило, при малых напряженностях внутреннего электрического и магнитного полей) обычно формируются в виде многомодовых многоканальных матриц проводимости, сопротивления и рассеяния.

Дескрипторы нелинейных базовых элементов сформируем в виде систем нелинейных уравнений, являющихся аналогами матриц рассеяния и проводимости.

Для нелинейного базового элемента аналогом матрицы рассеяния выберем систему нелинейных функций $R_{k(\alpha)}$, связывающую коэффициенты падающих волн $c_{n(\beta)}^+(\omega_l)$ в рядах Фурье представления электромагнитного поля с коэффициентами отраженных волн $c_{k(\alpha)}^-(\omega_m)$ на комбинационных частотах:

$$c_{k(\alpha)}^-(\omega_m) = R_{k(\alpha)}(\omega_m; \mathbf{c}^+), \quad (6)$$

где вектор $\mathbf{c}^+ = (c_{1(1)}^+(\omega_1), c_{1(1)}^+(\omega_2), \dots, c_{n(\beta)}^+(\omega_l), \dots)$ – аргумент функции $R_{k(\alpha)}$; l, k – номера базисных функций для падающей и отраженной волн соответственно; m – номер комбинационной частоты; β, α – номера граней для падающей и отраженной волн соответственно.

Аналогом матрицы проводимости выберем систему нелинейных функций $Y_{k(\alpha)}$, связывающую коэффициенты рядов Фурье представления касательного электрического поля $a_{n(\beta)}(\omega_l)$ с коэффициентами рядов Фурье

представления касательного магнитного поля в виртуальных каналах Флоке блока $b_{k(\alpha)}(\omega_m)$ на комбинационных частотах:

$$b_{k(\alpha)}(\omega_m) = Y_{k(\alpha)}(\omega_m; \mathbf{a}), \quad (7)$$

где вектор $\mathbf{a} = (a_{1(1)}(\omega_1), a_{1(1)}(\omega_2), \dots, a_{n(\beta)}(\omega_l), \dots)$ – аргумент функции $Y_{k(\alpha)}$.

В дальнейшем дескрипторы нелинейных базовых элементов подвергнем рекомпозиции (объединению в более крупные блоки) так же, как для линейных, и в результате этого процесса получим суммарные матрицы проводимости или рассеяния, записанные относительно их входных сечений в базисах собственных волн виртуальных каналов Флоке.

Однако для математического моделирования динамики реальных волновых каналов (прямоугольных волноводов, полосковых, щелевых, компланарных линий и т.п.) дескрипторы должны быть записаны в базисах собственных волн этих каналов. Преобразования дескрипторов произведем на основе решения классической задачи прикладной электродинамики о стыке волноводов. Скачкообразную нерегулярность, вызванную наличием в объединяемых каналах Флоке волн разных типов, рассмотрим как волноводный трансформатор нулевого объема, для которого существует только матрица рассеяния. Это позволит учесть стыки базовых элементов в качестве дополнительных элементов гетерогенной структуры и записать дескрипторы волноводного трансформатора и присоединенных к нему каналов в базисах собственных волн волноводных каналов в форме, аналогичной (6) или (7).

3 Результаты математического моделирования электромагнитных свойств наноматериалов

Для математического моделирования устройств на основе магнитных наноматериалов необходимо иметь модель материала, описываемого уравнениями (5), учитывающую его электромагнитные свойства.

Поскольку структура упорядоченной системы обладает периодичностью по нескольким направлениям, магнитный наноматериал в целом может считаться анизотропным.

В основу методики определения основных электромагнитных свойств наноматериала положим сравнение численных значений постоянных распространения волн в безграничной гиромангнитной среде и значений постоянных распространения волн основного типа в безграничной трехмерной периодической наноструктуре. Использование этой методики позволяет получить эффективные значения компонентов тензора магнитной проницаемости, эффективные значения диэлектрической проницаемости, а также значения электрических и магнитных потерь [2].

В процессе исследования зависимости гиромангнитных свойств от плотности упаковки ячеек структуры было установлено, что при значениях плотности упаковки $0,275 \leq \frac{r}{a} \leq 0,35$ (r – радиус нановключения, a – размер базового элемента) результаты вычислительного эксперимента, полученные для моделей с учетом и без учета поля обменного взаимодействия, сущест-

венно различаются. Чем больше расхождение результатов, тем выше мотивация к использованию моделей без допущений и упрощений. В связи с этим при дальнейших исследованиях для адекватного отображения физических процессов, протекающих в магнитных наноструктурах, используем математическую модель магнитной наноструктуры, построенную с учетом поля обменного взаимодействия.

4 Результаты математического моделирования функционирования устройств на основе гетерогенных наноструктур

Математическая модель устройства управления потоком волновой электромагнитной энергии в инфракрасном диапазоне частот отличается от ранее известных тем, что она построена для магнитной структуры из нанопроволок, обладающей сильной пространственной анизотропией (рис. 1). На рис. 1: \vec{k} – направление распространения падающей волны с напряженностями электрического и магнитного полей \vec{E}^0 и \vec{H}^0 соответственно; V_0 – область базового элемента размерами $a \times b \times c$; S_1 , S_2 – входные сечения базового элемента; l , $2r$ – размеры нанопроволоки; \vec{H}_0 – напряженность постоянного поля намагничивания.

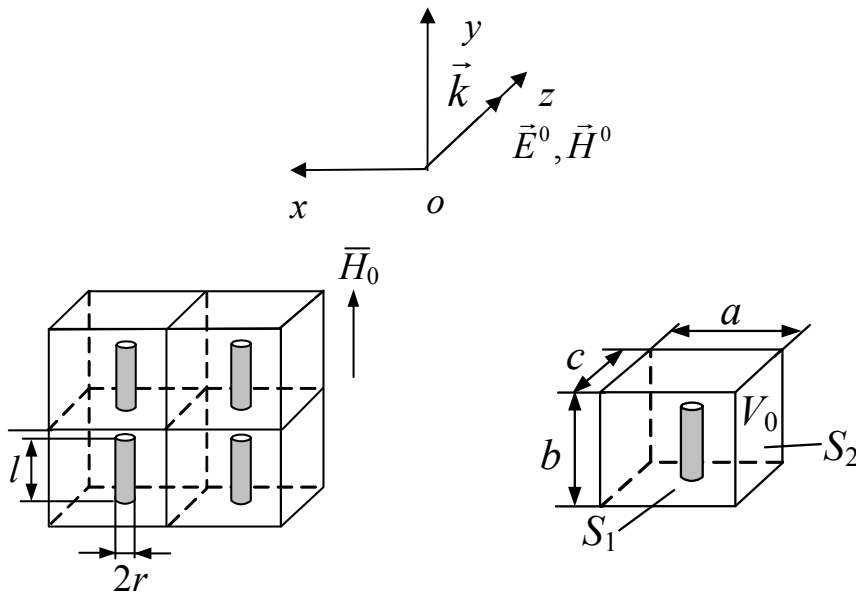


Рис. 1 Двумерная периодическая структура слоя магнитных нанопроволок

Цель математического моделирования – исследование основных процессов, протекающих при управлении потоком волновой электромагнитной энергии в инфракрасном диапазоне частот, на модели и проверка адекватности моделируемых процессов реальным. На рис. 2 приведен один из результатов моделирования: зависимость коэффициента прохождения волны (элемент матрицы рассеяния $|R_{11}^{12}|$) от напряженности постоянного поля H_0 намагничивания для магнитной наноструктуры из нанопроволок различных диаметров при одинаковой плотности упаковки.

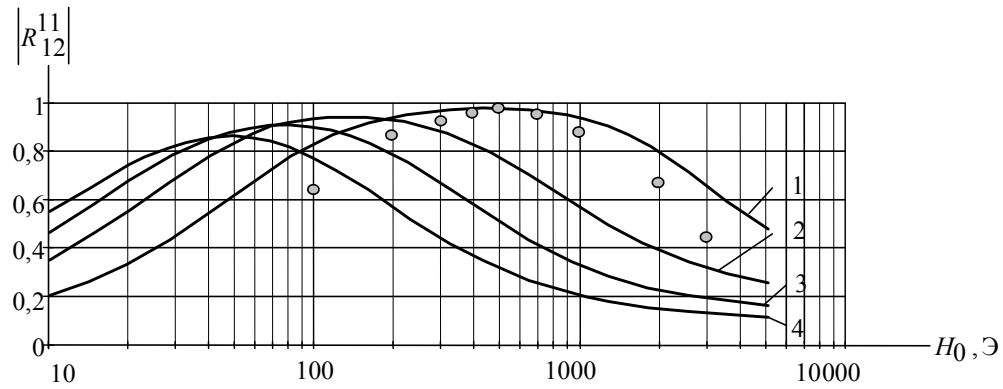


Рис. 2 Зависимость коэффициента прохождения от напряженности постоянного поля намагничивания

Вычислительный эксперимент проводился при условиях: $f = 30$ ТГц – частота падающей волны; $l = 300$ нм – длина нанопроволоки в базовом элементе; $c = 2r$, $b = 1,25l$, $a = 3,5r$ – размеры базового элемента в зависимости от размеров нанопроволоки (радиуса и длины).

Зависимости на рис. 2 представлены для нанопроволок четырех диаметров: $2r = 10$ нм (кривая 1); $2r = 15$ нм (кривая 2); $2r = 20$ нм (кривая 3); $2r = 25$ нм (кривая 4). На рис. 2 нанесены также дискретные значения результатов экспериментальных исследований [5].

Из анализа зависимостей видно, что для нанопроволок диаметром 10 нм (кривая 1) имеется совпадение результатов расчета с имеющимися экспериментальными данными: полное – по локализации экстремума, удовлетворительное – по характеру кривой в окрестностях экстремума (для нанопроволок других диаметров результаты экспериментальных исследований в работе [5] не приведены).

Совпадение теоретических и экспериментальных результатов позволяет применять разработанные модели для наноструктур из нанопроволок различных диаметров в терагерцовом диапазоне частот.

Структурная схема модели параметрического усилителя на основе магнитной наноструктуры (рис. 3) содержит проводники связанной полосковой линии 1–4, резонатор 5, нелинейное наномагнитное включение 6, подложку 7 ($\epsilon = 9$, $\mu = 1$). Наблюдение магнитного поля (математические расчеты) проведем внутри наномагнитного включения (точка 8 показана условно).

Области полосковой структуры и наномагнитного включения представим базовыми элементами в виде прямоугольных параллелепипедов с виртуальными каналами Флоке на гранях, причем базовые элементы наноматериала будут содержать нановключения в виде наносфер.

Дескрипторы области пространства полосковой структуры – матрицы рассеяния, наноматериала – системы нелинейных уравнений, связывающие амплитуды падающих и отраженных волн.

Цель математического моделирования – наблюдение точки бифуркации: перехода из режима усиления в режим генерации, а также сравнение ре-

зультатов расчетов по двум моделям между собой и с экспериментальными данными.

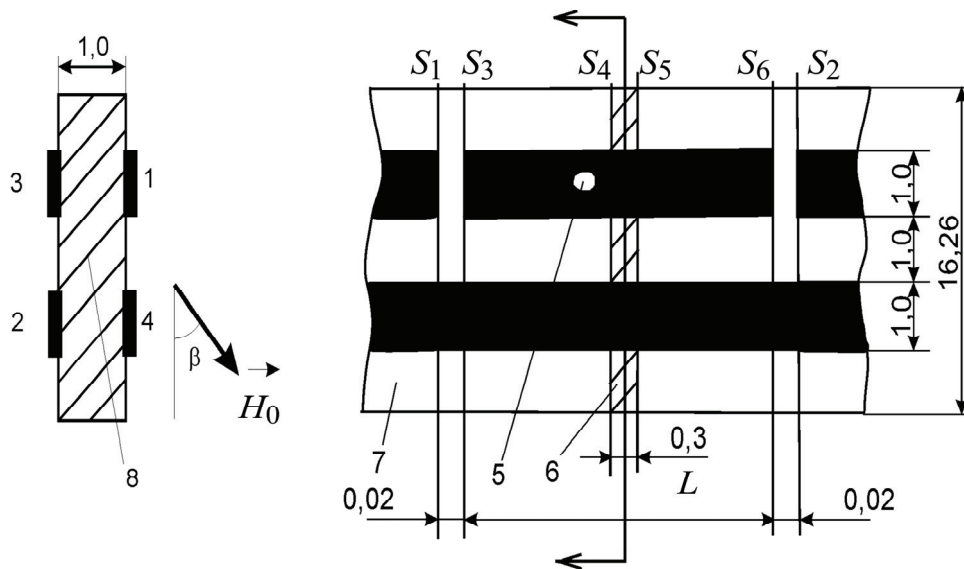


Рис. 3 Интегральная полосковая структура параметрического усилителя на основе магнитной наноструктуры

Расчеты проведем по двум моделям: «точной», включающей в себя моделирование резонансной и периодической структуры материала, и «грубой»*, в которой дескрипторы автономных блоков определяются на основе эффективных значений параметров магнитного материала.

На графиках (рис. 4) показаны результаты расчета амплитуды отраженной волны сигнала $c_{1(2)}^-(\omega_1)$ в зависимости от амплитуды падающей волны накачки $c_{2(1)}^+(\omega_2)$, полученные при помощи «точной» (кривые 1 и 2) и «грубой» (кривые 3 и 4) моделей. Сравнение результатов показывает их удовлетворительное совпадение.

Сравнение основных характеристик параметрических усилителей на основе магнитных гетерогенных наноструктур с характеристиками параметрических усилителей на основе традиционных ферритов показывает, что амплитуда волны накачки для параметрического усилителя на основе магнитной наноструктуры (0,005 А/мм) на два порядка меньше, чем для параметрического усилителя на основе феррита (0,1 А/мм).

Достоинство «грубой» модели – сокращение времени расчета по сравнению с «точной» моделью примерно на три порядка. Основной недостаток – ограниченность области применения. Так, использование «грубой» модели эффективно для магнитных наноструктур из наносфер, но неэффективно для нанопроволок из-за сильной пространственной анизотропии.

* Название модели использовано в том смысле, в котором понимается «грубость», например, такой фундаментальной модели, как «материальная точка» – при моделировании учитывают только некоторые свойства объекта, остальными пренебрегают ввиду их незначительного влияния на результаты расчетов.

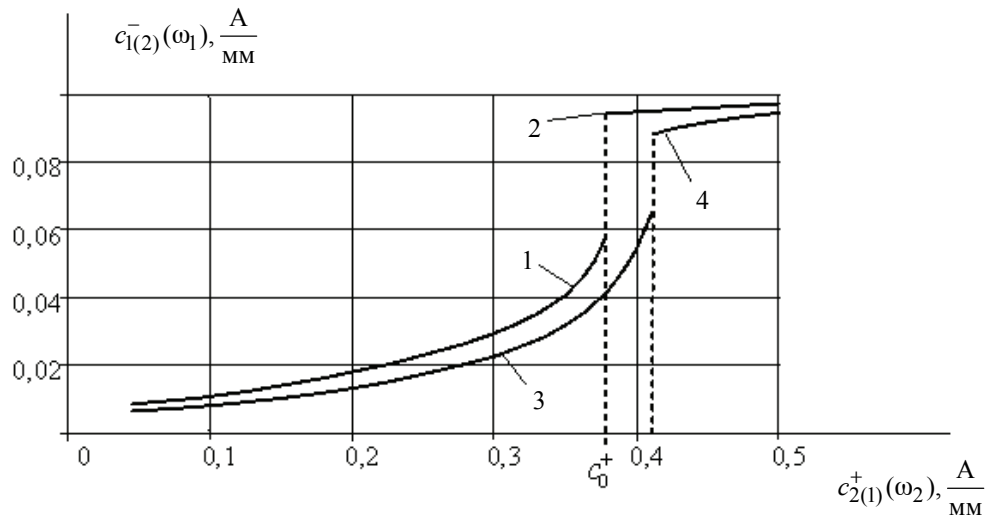


Рис. 4 Параметрическое усиление (кривые 1, 3) и генерация (кривые 2, 4)

Заключение

Математическая модель гетерогенной магнитной наноструктуры, включающая уравнения Максвелла и уравнение движения вектора намагниченности в форме Ландау – Лифшица с учетом поля обменного взаимодействия, позволила провести моделирование функционирования устройств в терагерцовом диапазоне частот.

Список литературы

1. Голованов, О. А. Проекционный метод решения задач дифракции / О. А. Голованов, В. В. Смогунов, М. В. Савченкова // Динамика гетерогенных структур : научно-технический сборник статей. – Вып. 3. – Пенза : Изд-во ПензГУ, 2008. – С. 34–41.
2. Голованов, О. А. Математическое моделирование гиромангнитных наноструктур методом автономных блоков с виртуальными каналами Флоке / О. А. Голованов, В. В. Смогунов, М. В. Савченкова // Межвузовский сборник научных трудов Пермского ГУ. – Вып. 40. – Пермь, 2008. – С. 12–21.
3. Голованов, О. А. Математические модели глушителей со звукопоглощающими включениями / О. А. Голованов, В. В. Смогунов, М. В. Савченкова // Динамика гетерогенных структур : научно-технический сборник статей. – Вып. 2. – Пенза : Изд-во ПензГУ, 2008. – С. 45–51.
4. Голованов, О. А. Математическое моделирование волновых процессов в неограниченной среде от глушителей звука / О. А. Голованов, В. В. Смогунов, М. В. Савченкова // Проблемы механики и управления : межвузовский сборник научных трудов. – Вып. 40. – Пермь, 2008. – С. 12–20.
5. Encinas, A. Tunable remanent state resonance frequency in arrays of magnetic nanowires / A. Encinas, M. Demand, L. Piraux, I. Huynen // Applied Physics Letters. – 2007. – V. 81. – P. 2032–2034.

Савченкова Мира Викторовна

аспирант, Пензенский
государственный университет

E-mail: mira1965@mail.ru

Savchenkova Mira Viktorovna

Postgraduate student,
Penza State University

Вдовикина Ольга Анатольевна

кандидат технических наук, доцент,
кафедра технической и прикладной
механики, Пензенский государственный
университет

E-mail: pnzgu.tmt@inbox.ru

Vdovikina Olga Anatolyevna

Candidate of engineering sciences,
associate professor, sub-department
of engineering and applied mechanics,
Penza State University

УДК 629.113.57

Савченкова, М. В.

Математическое моделирование волновой динамики в системах с гетерогенными структурами / М. В. Савченкова, О. А. Вдовикина // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Технические науки. – 2009. – № 4 (12). – С. 140–149.