

MÔ PHỎNG, TÍNH TOÁN ĐỘ DÀY TỐI ƯU CỦA VẬT LIỆU TỔ HỢP CẤU TRÚC NANO HẤP THỤ NĂNG LƯỢNG SÓNG ĐIỆN TỬ

Nguyễn Đăng Cơ, Trần Văn Hiệp, Trần Đức Huy, Đồng Quốc Việt,
Lê Việt Cường, Phạm Đức Thắng, Bùi Đình Tú*

Khoa Vật lý kỹ thuật và Công nghệ nano, Trường Đại học Công nghệ, Đại học Quốc gia
Hà Nội, Nhà E4, 144 Xuân Thủy, Cầu Giấy, Hà Nội.

*Email: buidinhthu@mail.com

Tóm tắt

Nghiên cứu tối ưu hóa khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện tử trong các vật liệu tổ hợp điện môi - từ đang được quan tâm nhiều trong những năm vừa qua. Trong báo cáo này, chúng tôi trình bày một số kết quả nghiên cứu ban đầu về mô phỏng, tính toán để xác định độ dày tối ưu cho một số vật liệu tổ hợp có cấu trúc nano khác nhau. Chương trình tính được xây dựng trên cơ sở các biểu thức tính toán và các phương trình liên quan đến đặc trưng hấp thụ sóng điện tử của hệ vật liệu tổ hợp và phần mềm lập trình Matlab. Các thông số về hằng số điện môi, độ từ thẩm của các vật liệu và tần số/bước sóng cần hấp thụ cũng sẽ được sử dụng. Việc mô phỏng đã được tính toán cho 3 hệ vật liệu tổ hợp gồm các hạt nano CoFe_2O_4 , ZnFe_2O_4 , $\text{Zn}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ với chất nền polymer Cellwax plus với tỉ lệ pha trộn là 50% về thể tích. Kết quả cho thấy các vật liệu tổ hợp trên sẽ hấp thụ tối ưu với các chiều dày 2,5; 2,75 và 2 mm tương ứng. Bên cạnh đó, phần mềm với giao diện thân thiện và tiện ích còn có thể phát triển thêm để ứng dụng trong nghiên cứu và sản xuất vật liệu hấp thụ năng lượng sóng điện tử nhằm phục vụ các lĩnh vực y-sinh học, bảo vệ môi trường và khoa học kỹ thuật quân sự.

Từ khóa: Vật liệu tổ hợp, cấu trúc nano, hấp thụ sóng điện tử.

GIỚI THIỆU

Trong những năm gần đây, cùng với sự phát triển mạnh mẽ và không ngừng của ngành công nghệ nano, các loại vật liệu tổ hợp cấu trúc nano (nanocomposite) trên cơ sở sự pha trộn của graphit với nhựa tổng hợp hay các polyme dẫn điện như polyanilin, polypyrol, paraffin... đã và đang nhận được sự quan tâm nghiên cứu của rất nhiều nhà khoa học trong cũng như ngoài nước. Với những ưu điểm đặc biệt như khả năng hấp thụ lớn hơn 90% năng lượng sóng điện tử trong dải tần rộng từ 2 – 18 GHz, chống chịu tốt các tác nhân ảnh hưởng của môi trường, độ dày mỏng chỉ cỡ vài micromet, trọng lượng nhẹ, độ bền cơ học cao... thì vật liệu này đã được nghiên cứu sâu rộng và có nhiều ứng dụng trong kỹ thuật hàng không, hàng hải, viễn thông, thông tin vệ tinh, khoa học kỹ thuật quân sự... [1-4].

Trên thực tế, sóng điện tử đều bị hấp thụ năng lượng bởi bất kỳ một loại vật liệu nào khi sóng truyền qua chúng. Các vật liệu hấp thụ năng lượng sóng điện tử ít hoặc nhiều tùy theo cơ chế hấp thụ khác nhau và còn phụ thuộc vào đặc tính của từng vật liệu. Đối với vật liệu tổ hợp cấu trúc nano được thiết kế dựa trên 3 cơ chế hấp thụ cơ bản đó là: tổn hao điện môi, tổn hao từ và tổn hao xoáy. Khi đặt vật liệu trong môi trường sóng

điện từ sẽ xuất hiện hiện tượng đốt nóng điện môi (tổn hao điện môi), đốt nóng từ (tổn hao từ) do các dipole lưỡng cực điện và các momen spin bị phân cực ở tần số cao hay sự chuyển đổi năng lượng của dòng Foucault thành nhiệt năng (tổn hao xoáy) vì vậy năng lượng sóng điện tử được hấp thụ và chuyển hóa sinh nhiệt [2].

Các tính năng kỹ thuật của vật liệu tổ hợp và chỉ tiêu chất lượng hấp thụ năng lượng sóng điện tử thể hiện qua hệ số phản hồi (Reflection loss-RL) phụ thuộc vào nhiều yếu tố như: hằng số điện môi, độ từ thẩm, tần số sóng tới cũng như là chiều dày lớp hấp thụ.

Bài báo này trình bày một số kết quả nghiên cứu mô phỏng, tính toán để xác định độ dày tối ưu cho 3 hệ vật liệu tổ hợp gồm các hạt nano CoFe_2O_4 , ZnFe_2O_4 , $\text{Zn}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ với chất nền polymer Cellwax plus với tỉ lệ pha trộn là 50% về thể tích qua đó tìm ra độ dày tối ưu cho từng vật liệu này để có thể giảm bớt trọng lượng, cho khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện tử tốt nhất, giúp tiết kiệm đáng kể thời gian cũng như chi phí nghiên cứu, sản xuất vật liệu hấp thụ năng lượng sóng điện tử. Ngoài ra, một giao diện mô phỏng thân thiện, đơn giản và dễ sử dụng thiết kế rất tiện lợi cho người dùng cũng sẽ được chúng tôi giới thiệu.

THỰC NGHIỆM

Chương trình code mô phỏng được xây dựng dựa trên những biểu thức tính toán và phương trình liên quan đến đặc trưng hấp thụ năng lượng sóng điện từ của hệ vật liệu tổ hợp cấu trúc nano được viết dưới ngôn ngữ lập trình Matlab.

Để xác định khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện từ của vật liệu nào đó chúng ta phải xét đến hệ số hấp thụ sóng điện từ của vật liệu ấy và được cho bởi công thức [2, 4].

$$RL(dB) = -20\log\left|\frac{Z - Z_0}{Z + Z_0}\right|$$

Với $Z = \eta \cdot \tanh \gamma \cdot d$; $Z_0 \approx 377\Omega$; $\eta = \eta_0 \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$;

$$\gamma = j \cdot 2\pi f \sqrt{\mu \cdot \epsilon} = j \cdot 2\pi f \sqrt{\mu_0 \cdot \epsilon_0 \cdot \mu_r \cdot \epsilon_r};$$

$$\epsilon_r = \epsilon_r' - j\epsilon_r''; \mu_r = \mu_r' - j\mu_r''; j = \sqrt{-1}$$

$$\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ F/m và } \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H/m,}$$

Trong đó: Z là trở kháng nội tại của vật liệu, Z_0 là trở kháng nội tại của không gian tự do, η là giá trị đặc trưng của môi trường tới (môi trường tới bất kỳ hoặc không khí). Còn $\epsilon_r', \epsilon_r'', \mu_r', \mu_r''$ và d tương ứng lần lượt là phần thực, phần ảo của hằng số điện môi, độ từ thẩm và độ dày của vật liệu.

Từ những biểu thức tính toán và phương trình trên kết hợp sử dụng ngôn ngữ lập trình Matlab ta có thể có một chương trình code mô phỏng tính toán khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện từ của vật liệu tổ hợp cấu trúc nano như hình 1.

Matlab tỏ ra ưu việt khi cũng có các công cụ hỗ trợ việc thiết kế vẽ kỹ thuật bằng thư viện Guide thuận tiện. Hình 2 là một giao diện mô phỏng được chúng tôi thiết kế một cách hết sức đơn giản và dễ nhìn.

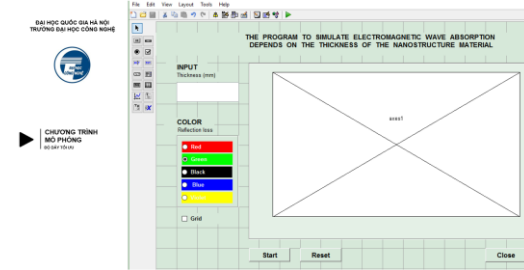
```

24 % Relative complex permittivity and relative complex permeability
25 E = NaNData(1, 1)(DataNumber);
26 mu_r = NaNData(2, 1)(DataNumber);
27 mu_im = NaNData(3, 1)(DataNumber);
28 mu_r = NaNData(4, 1)(DataNumber);
29 mu_im = NaNData(5, 1)(DataNumber);
30 mu_r = NaNData(6, 1)(DataNumber);
31 mu_im = NaNData(7, 1)(DataNumber);
32 % Complex permittivity and permeability
33 mu_complex = complex(mu_r, mu_im);
34 % Relative permeability and permeability
35 mu_r = NaNData(8, 1)(DataNumber);
36 mu_im = NaNData(9, 1)(DataNumber);
37 mu_r = NaNData(10, 1)(DataNumber);
38 mu_im = NaNData(11, 1)(DataNumber);
39 mu_r = NaNData(12, 1)(DataNumber);
40 mu_im = NaNData(13, 1)(DataNumber);
41 % Complex permeability and permeability
42 mu_complex = complex(mu_r, mu_im);
43 % Relative permeability and permeability
44 mu_r = NaNData(14, 1)(DataNumber);
45 mu_im = NaNData(15, 1)(DataNumber);
46 mu_r = NaNData(16, 1)(DataNumber);
47 mu_im = NaNData(17, 1)(DataNumber);
48 % Complex permeability and permeability
49 mu_complex = complex(mu_r, mu_im);
50 % Input impedance at the surface of absorber must be 1
51 Zin = 1/tanh(alpha*d);
52 % Reflection coefficient and absorption in dB
53 R = (Zin - Z0)/(Zin + Z0);
54 R = abs(R)^2;
55 % Print(OutputSize, 'E %\n', E);
56 % Print(OutputSize, 'R %\n', R);
57 % Print(OutputSize, 'RL %\n', RL);
58 % Print(OutputSize, 'RL %\n', RL);
59 % Print(OutputSize, 'RL %\n', RL);
60 % Print(OutputSize, 'RL %\n', RL);
61 % Print(OutputSize, 'RL %\n', RL);
62 % Print(OutputSize, 'RL %\n', RL);
    
```

Hình 1: Chương trình code mô phỏng ứng với công thức đã xây dựng.

Thiết kế một biểu đồ lớn tại trung tâm giao diện giúp người dùng có thể quan sát trực quan kết quả ghi nhận một cách rõ ràng nhất. Người dùng

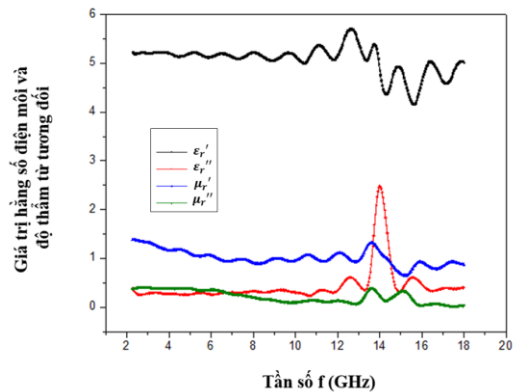
chỉ việc nhập thông số đầu vào như độ dày cần khảo sát ở ô “Thickness”, tích chọn một trong 5 màu trong phần “COLOR” để chọn màu cho đồ thị hay lựa chọn hiển thị đường lưới khi kích chọn “Grid”. Và cuối cùng là các nút “Start” và “Close” để vẽ đồ thị hay đóng lại chương trình có kèm theo lời nhắc nhở.



Hình 2: Thiết kế giao diện chương trình mô phỏng.

KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Để chạy chương trình mô phỏng ta phải cung cấp một bộ 5 thông số đầu vào quan trọng đó là $(f, \epsilon_r', \epsilon_r'', \mu_r', \mu_r'')$ tần số kích thích, phần thực, phần ảo của hằng số điện môi và độ từ thẩm của vật liệu.

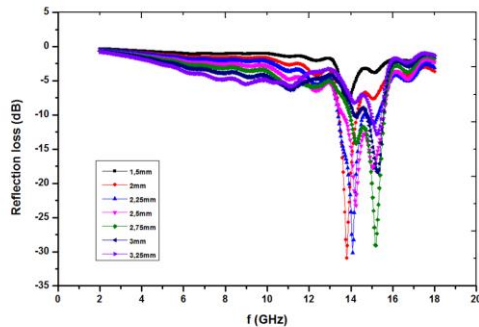


Hình 3: Độ thông số đầu vào của mẫu Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe₂O₄.

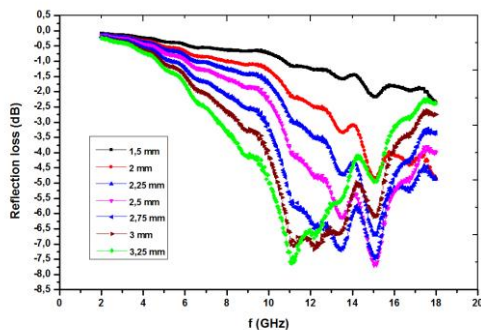
Chương trình mô phỏng này, chúng tôi sử dụng bộ 5 này của 3 hệ vật liệu tổ hợp gồm các hạt nano CoFe₂O₄, ZnFe₂O₄, Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe₂O₄ với chất nền polymer Cellwax plus với tỉ lệ pha trộn là 50% được chế tạo bởi phương pháp trộn hợp nóng chảy, thực hiện nghiên cứu và chế tạo bởi nhóm nghiên cứu: Đồng Quốc Việt và cộng sự tại Trường Đại học Chungnam, Hàn Quốc vào tháng 7 năm 2016. Bộ 5 thông số của hệ vật liệu Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe₂O₄ được thể hiện như hình 3.

Khoảng khảo sát là liên tục nhưng chúng tôi chỉ trình bày ở đây những ghi nhận tại các độ dày

xác định lần lượt là: 1,5; 2; 2,25; 2,5; 2,75; 3 và 3,25 mm. Kết quả khi chạy chương trình mô phỏng khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện từ của 3 hệ mẫu đã cho phụ thuộc vào độ dày được thể hiện qua các hình 4,5 và 6.

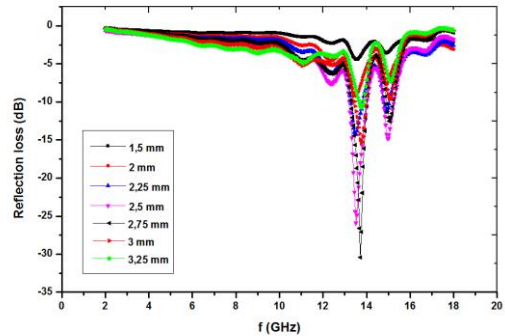


Hình 4: Khả năng hấp thụ sóng điện từ của $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ ở các độ dày khác nhau trong dải tần (2-18 GHz).



Hình 5: Khả năng hấp thụ sóng điện từ của $CoFe_2O_4$ ở các độ dày khác nhau trong dải tần (2-18 GHz).

Với mẫu vật liệu $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ (hình 4), tại dải tần số quét thấp từ 2-10 GHz, khi tăng độ dày của mẫu từ 1,5 mm đến 3,25 mm thì các giá trị RL tương ứng giảm dần trong khoảng từ 0 dB đến -5 dB thể hiện sự hấp thụ năng lượng sóng điện từ tốt khi tăng độ dày nhưng giá trị hấp thụ này đạt ở mức thấp. Tại dải tần số kích thích cao hơn, 10 - 18 GHz thì đã có sự hấp thụ năng lượng sóng điện từ lớn khi thay đổi độ dày mẫu. Các mẫu vật liệu có độ dày nhỏ hơn 1,5 mm sự hấp thụ sóng điện từ còn thấp chỉ đạt -7,98 dB nhưng tại giá trị độ dày $d = 2$ mm, khả năng hấp thụ lên tới hơn 99,9 % năng lượng sóng điện từ, giá trị tốt nhất được ghi nhận -30,93 dB ở tần số kích thích $f = 13,8$ GHz. Mối quan hệ giữa hệ số mất phản xạ (hệ số hấp thụ) và năng lượng hấp thụ được cho bởi bảng 1.



Hình 6: Khả năng hấp thụ sóng điện từ của $ZnFe_2O_4$ ở các độ dày khác nhau trong dải tần (2-18 GHz).

Bảng 1: Mối quan hệ giữa hệ số mất phản xạ và năng lượng hấp thụ [5].

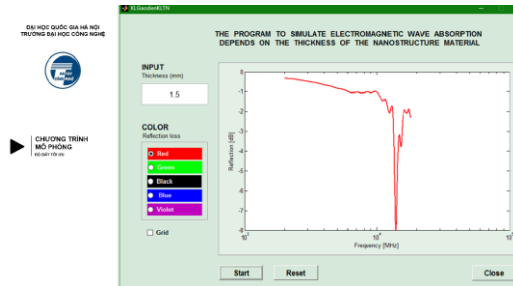
Hệ số mất phản xạ (dB)	Năng lượng hấp thụ (%)
0	0
-3	50
-10	90
-15	96,9
-20	99
-30	99,9
-40	99,99

Tiếp tục tăng độ dày thì khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện từ của $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ đã giảm xuống một chút nhưng hệ số hấp thụ vẫn ở mức cao. Khả năng hấp thụ đạt tới 99% tại độ dày $d = 2,25$ mm tại tần số kích thích 14,08 GHz giá trị thu được là -30,13 dB và tại $d = 2,75$ mm ứng với tần số kích thích 15,2 GHz thì giá trị hệ số hấp thụ vẫn đạt -29,08 dB. Khi chiều dày tăng tới $d = 3,25$ mm thì khả năng hấp thụ giảm hẳn chỉ đạt -12,85 dB tại tần số $f = 15,28$ GHz. Vậy độ dày tối ưu cho vật liệu $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ cho khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện từ tốt nhất là $d = 2$ mm.

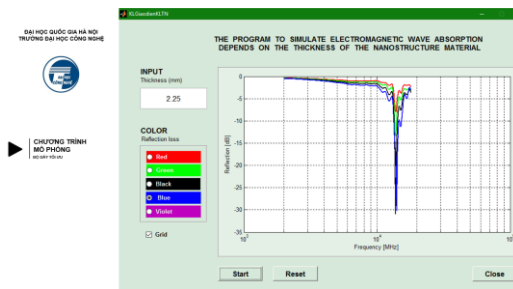
Tương tự ứng với hai vật liệu còn lại ta cũng xác định được độ dày tối ưu khi sử dụng phần mềm mô phỏng. Đối với vật liệu $CoFe_2O_4$ (hình 5) giá trị tốt nhất thu được là -7,70 dB tại $f = 15,04$ GHz ứng với độ dày tối ưu $d = 2,5$ mm hấp thụ thấp hơn 90 % năng lượng. Còn vật liệu $ZnFe_2O_4$ (hình 6) có độ dày tối ưu $d = 2,75$ mm với khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện từ lớn hơn 99,9 % khi có hệ số hấp thụ -31,02 dB

tại tần số $f = 13,80$ GHz. Đây cũng được xem là vật liệu có khả năng hấp thụ tốt nhất trong 3 mẫu thử nghiệm sau đó tới $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ và cuối cùng là $CoFe_2O_4$.

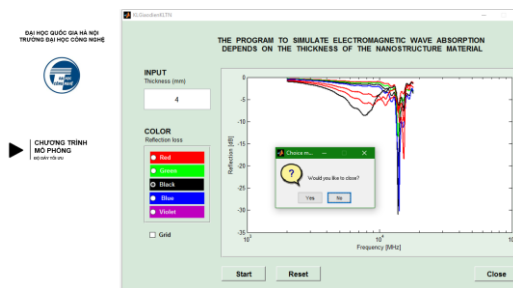
Kết quả giao diện chương trình mô phỏng cũng được chúng tôi trình bày dưới đây hình 7- 9.



Hình 7: Giao diện chương trình mô phỏng thử nghiệm với $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ ở độ dày $d = 1,5$ mm.



Hình 8: Giao diện chương trình mô phỏng thử nghiệm với $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ ở độ dày $d = 2,25$ mm.



Hình 9: Giao diện chương trình mô phỏng thử nghiệm với $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ ở độ dày $d = 4$ mm.

Sau khi có bộ 5 thông số đầu vào cho chương trình, người dùng chỉ cần nhập độ dày khảo sát, tích chọn màu đồ thị hoặc hiển thị lưới phân chia và chạy chương trình ta sẽ thu được đường biểu thị khả năng hấp thụ năng lượng sóng điện từ của mẫu vật liệu trong dải tần số 2-18 GHz.

KẾT LUẬN

Bài báo đã trình bày kết quả nghiên cứu ban đầu sử dụng các công thức tính toán và phương trình vật lý đặc trưng cho sự phản xạ và phân mềm Matlab, để mô phỏng và tính toán cho 3 hệ vật liệu tổ hợp gồm các hạt nano $CoFe_2O_4$, $ZnFe_2O_4$, $Zn_{0,5}Co_{0,5}Fe_2O_4$ với chất nền polymer Cellwax plus với tỉ lệ pha trộn là 50% về thể tích. Theo đó, các vật liệu tổ hợp trên sẽ hấp thụ năng lượng sóng điện từ tối ưu với các chiều dày lần lượt tương ứng là 2,5; 2,75 và 2 mm. Kết quả này sẽ tạo tiền đề cho các nghiên cứu mô phỏng tiếp theo với các loại vật liệu tổ hợp cấu trúc nano khác nữa nhằm rút ngắn thời gian nghiên cứu, sản xuất vật liệu tổ hợp cấu trúc nano hấp thụ năng lượng sóng điện từ, tiết kiệm đáng kể chi phí nghiên cứu.

Lời cảm ơn

Công trình này được thực hiện tại khoa VLKT&CNN, trường Đại học Công Nghệ-ĐHQGHN, PTN trọng điểm Micro&Nano-ĐHQGHN, Trường Đại học ChungNam Hàn Quốc, Học viện kỹ thuật quân sự và hỗ trợ kinh phí từ đề tài cấp ĐHQG Mã số QG 16.26

Tài liệu tham khảo

1. Ngô Cao Long, Nghiên cứu chế tạo vật liệu nanocomposit có khả năng hấp thụ sóng điện từ và chống đạn, Luận án tiến sĩ, Viện Hóa học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam (2015).
2. Đoàn Mạnh Quang, Nghiên cứu chế tạo vật liệu hấp thụ sóng vi ba trên nền vật liệu gốm từ và điện môi, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội (2014).
3. Đỗ Quốc Hùng, Nguyễn Trần Hà, và Nguyễn Vũ Tùng (2011), “Nghiên cứu phổ hấp thụ sóng radar băng X của vật liệu composit chứa hạt nano ferrite Barium-Cobalt”, *Tuyển tập Hội nghị Vật lý Chất rắn Toàn quốc*, A37.
4. C. K. Yuzcelik, Radar Absorbing Materials Design (2003), Systems Engineering, Naval Postgraduate School, Monterey.
5. F.Mohd. Idris et al. / Journal of Magnetic Material 405 (2016) 197- 208.