

МЕТОДЫ РАСЧЕТА ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

В.И. Каневский, В.М. Розенбаум

*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйка Национальной академии наук Украины
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, vikanex@hotmail.com*

*Рассмотрена методика расчета оптических свойств материалов на основе многослойных углеродных нанотрубок. Дан обзор методов получения тензора диэлектрической проницаемости таких нанотрубок: модель Друде – Лоренца, методы гомогенизации и *ab initio* – расчеты. Описан конечно-элементный подход для расчета рассеяния плоской волны на многослойных углеродных трубках.*

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) были открыты в 1991 году [1]. С тех пор они нашли применение в различных областях науки и техники благодаря своим уникальным механическим, электрическим, тепловым, магнитным и оптическим свойствам. Это высокопрочные материалы [2], источники эмиссии электронов [3], полевые транзисторы [4], электрические контакты [5], антенны в оптическом диапазоне [6], многофункциональные устройства [7]. Область применения УНТ охватывает молекулярную электронику, многофункциональные композитные материалы, высокопрочные сверхлегкие материалы, нанометрологию, технологию плоских дисплеев и многое другое.

УНТ можно разделить на однослойные (ОСУНТ) и многослойные (МСУНТ), имеющие один или много (больше десяти) соосных цилиндров, полученных из графеновых листов [8]. Взаимная ориентация гексагональной сетки графена и продольной оси ОСУНТ определяет важную структурную характеристику нанотрубки – хиральность. Современные технологии позволяют создавать ОСУНТ с диаметром порядка нанометра, а МСУНТ – порядка сотен нанометров [9], что сравнимо с длиной волны в оптическом диапазоне. Типичные длины УНТ – порядка сотен микрометров. ОСУНТ и МСУНТ имеют свои преимущества и недостатки, например, МСУНТ являются более жестким материалом, могут быть получены с помощью большего количества технологических процессов, чем ОСУНТ, однако для их создания практически очень сложно применить эпитаксиальный процесс. С другой стороны, большие значения диаметра МСУНТ позволяют использовать их во многих оптических приложениях – в солнечных батареях [10], метаматериалах, фотонных кристаллах.

Рассмотрим механические, тепловые, электрические, магнитные и оптические свойства УНТ, благодаря которым, а также, форме и весу, углеродные нанотрубки (в качестве примесной добавки) позволяют улучшить свойства различных материалов.

Механические свойства. УНТ в 50–100 раз прочнее стали, имеют в шесть раз меньшую плотность. Модуль Юнга у УНТ в два раза больше чем у обычных углеродных волокон. УНТ не только прочные, но и гибкие. Под действием механических напряжений, превосходящих критические, УНТ не рвутся и не ломаются, просто перестраиваются [11]. Однако практическая реализация столь высоких прочностных свойств возможна лишь в результате перехода от индивидуальных УНТ к макроскопическим объектам на их основе. Добавление в нейлон 1% ОСУНТ привело к увеличению его жесткости на 160 %, а вязкость нейлона увеличилась на 140 %. Подобные наноконпоненты в будущем могут

произвести революционные сдвиги в текстильной, аэрокосмической и строительной промышленности.

Механические и электрические свойства УНТ взаимосвязаны. Известно, что вольтамперная характеристика УНТ изменяется под действием механической нагрузки. Такое свойство положено в основу различных устройств, преобразующих механическое усилие в электрический сигнал и обратно. Подобные устройства относятся к классу наноэлектромеханических систем (НЭМС), разработка которых составляет одно из главных направлений развития нанотехнологий. Многофункциональность свойств МСУНТ описана в работе [7]: изучается влияние продольного переменного магнитного поля на собственные колебания решетки МСУНТ в резонансном и нерезонансном режимах.

Связь между механическими и электрическими характеристиками УНТ обусловлена изменениями в их электронной структуре, возникающих под воздействием механической нагрузки и приводящих к изменению таких параметров УНТ, как положение уровня Ферми, ширина запрещенной зоны, концентрация носителей и т.п. Это, в свою очередь, отражается на макроскопических параметрах УНТ, таких как максимально достижимый ток через УНТ, электрическое сопротивление, т.е. структурные дефекты, примеси определяют как электрические характеристики, так и прочностные характеристики УНТ. С другой стороны, пьезоэлектрические свойства УНТ, позволяющие преобразовывать электрический сигнал в механический и наоборот, характерны не только для самих нанотрубок, но и для композитов на их основе. Обнаружено, что добавление УНТ к поливинилиденфториду позволяет создать пьезоэлектрическую пластмассу – материал, который генерирует напряжение, если на него нажать или разогреть. Использование такой пластмассы, например, в качестве стелек для обуви, позволяет питать аккумуляторы мобильных телефонов, что очень важно для людей находящихся в длительных экспедициях.

Электрические свойства. Как известно, ОСУНТ напоминают пчелиные соты, свернутые в крошечные цилиндры. От того, как расположена линия, соединяющая графеновый лист в УНТ, зависят электрические свойства цилиндра. Если она расположена вдоль цилиндра, то ОСУНТ будет проводить электрический ток, а если перпендикулярно, то имеем полупроводник. В случае МСУНТ соседние слои имеют различную хиральность, причем при переходе от одного слоя к другому хиральность изменяется случайным образом. Сравнительно большое расстояние между слоями, приблизительно равное расстоянию между слоями графита, влечет их слабую связь. Электронный транспорт носителей в ОСУНТ можно приближенно описать с помощью электрического сопротивления, которое получают при измерении вольтамперной характеристики [12],

$$R = \frac{h}{4e^2} \left(1 + \frac{L}{l_e} \right) + R_c,$$

где h – постоянная Планка, e – заряд электрона, l_e – длина свободного пробега при упругом рассеянии, L – длина ОСУНТ, R_c – сопротивление контакта между омическим проводником и ОСУНТ. Первый член в данном соотношении описывает транспорт носителей в нанотрубке как одномерный, причем в квантовой структуре, второй – связан с рассеянием носителей, третий – является вкладом макроконтраста к ОСУНТ. Транспорт носителей в МСУНТ рассматривается как одномерный баллистический, когда $l_e \leq d_t$, где d_t – диаметр нанотрубки, и диффузионный в противном случае. В работе [13] показано, что в МСУНТ наблюдается многослойный (т.е. вдоль каждого из слоев) квазибаллистический транспорт носителей. ОСУНТ-проводники пропускают

электрический ток лучше, чем медь, и вполне могут заменить тонкие проводники в компьютерах. ОСУНТ-полупроводники не хуже кремниевых. Чтобы конструировать транзисторы на основе УНТ, нужны радикальные меры, т.е. соединить нанотрубки-полупроводники с нанотрубками-проводниками. Практической реализацией данной идеи может быть следующий подход. Чтобы не выращивать два материала, а потом их «сшивать», необходимо в процессе роста нанотрубки создать в ней структурный дефект (например, заменить один из углеродных шестиугольников пятиугольником), тогда одна часть трубки будет обладать металлическими свойствами, а другая – полупроводниковыми. Разработаны схематические модели различных элементов (транзисторов, диодов, линий задержки), позволяющие осуществлять расчет электронных схем на основе УНТ [14].

Тепловые свойства. Тепло УНТ проводят лучше алмаза – самого эффективного проводника тепла. Поэтому, если покрыть микросхему оболочкой из УНТ, то риск перегрева элементов будет минимальным. Уникальность нанотрубок заключается в том, что ток протекает по ним практически без выделения тепла [15].

Одним из интересных *магнитных свойств* УНТ является наличие в них большой величины релаксации спина, что объясняется слабым спин-орбитальным взаимодействием и большой скоростью электронов в нанотрубках. На этой основе было предложено и разработано устройство (спиновый клапан), которое открывает пути создания совершенно другой архитектуры устройств магнитной (спиновой) памяти [16].

Оптические свойства углеродных нанотрубок характеризуются высокой абсорбционной способностью электромагнитных волн, которая используется в лазерах [17], в болометрах [18]. Использование этого свойства, например, в астрофизике позволяет существенно улучшить чувствительность оптических приборов. Много интересных приложений в этом диапазоне проявляют фотонные кристаллы [19] на основе нанотрубок. Это локализация света [20], оптические волноводы [21], суперлинзы [22], метаматериалы [23]. Ионное легирование тонких пленок на основе УНТ позволяет изменять их оптические свойства [24]. Наличие кластеров кобальта внутри УНТ существенно трансформирует зонную структуру нанотрубок [25], наделяет их ферромагнитными свойствами [12]. Абсорбция молекул нанотрубками изменяет их оптические спектры, являясь основой для создания наносенсоров [26]. В инфракрасном и оптическом диапазонах УНТ, длина которых кратна полуволне падающего излучения, ведут себя как дипольная антенна [27]. На этой основе был создан радиоприемник, состоящий из одной нанотрубки и включающий в себя антенну, полосовой фильтр, усилитель и демодулятор. Еще одно интересное свойство, которым обладают УНТ, – это люминесценция. Известно, что производимые сегодня методами нанотрубки представляют собой смесь УНТ, среди которых есть полупроводниковые (ярко светящиеся, тусклые), металлические (не обладающие люминесцентными свойствами) в близком инфракрасном диапазоне [28]. Выделение фракции ярко светящихся УНТ позволяет, в частности, применять их в терапии раковых опухолей. Здесь люминесцентные трубки, которые могут прийти на смену нанокластерам золота, могут облегчить задачу их локации.

Представленный выше эскиз различных свойств углеродных нанотрубок позволяет увидеть взаимосвязь этих свойств в необычном сочетании и помочь правильно поставить цели дальнейших исследований по созданию устройств с использованием УНТ.

Благодаря своим уникальным свойствам, форме и весу УНТ (в качестве примесной добавки) позволяют существенно улучшить свойства различных материалов. Особенно это касается оптических свойств МСУНТ, в частности их высокой абсорбционной способности: суммарное отражение от массива нанотрубок в несколько

раз меньше чем когда-либо заявленное от любого материала ($\leq 0.045\%$) [29], что выдвигает композитные материалы на основе МСУНТ на первое место, как наиболее поглощающие в оптическом диапазоне.

Целью данной работы является: а) обзор методов получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ, б) описание конечно-элементного подхода для расчета рассеяния плоской электромагнитной волны на МСУНТ в оптическом диапазоне. Поэтому дальнейшее изложение материала структурировано в двух основных разделах, первый из которых описывает методы расчета тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ, а второй использует данный тензор как внешний параметр для построения вычислительной схемы расчета рассеяния плоской волны на данных углеродных трубках. Заключение содержится в разделе «Выводы».

Отметим, что изложенная во втором основном разделе вычислительная схема позволяет рассчитать коэффициенты отражения, прохождения и поглощения падающего электромагнитного излучения на массив из нанотрубок в зависимости от расстояния между МСУНТ, длины/диаметра нанотрубок, от угла падения, диэлектрической проницаемости основы композитного материала и поляризации электрического поля падающего излучения.

Методы получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ

Непосредственный расчет рассеяния плоской электромагнитной волны на МСУНТ (или на ансамбле из МСУНТ) невозможен, так как плоская волна является классическим объектом, а МСУНТ – квантовым. Чтобы рассчитать коэффициенты отражения/прохождения и поглощения средствами макроэлектродинамики, т.е. с помощью классических уравнений Максвелла, необходимо МСУНТ представить как классический объект, т.е. описать материал МСУНТ в терминах диэлектрической проницаемости (магнитные свойства мы не рассматриваем). В таком случае тонкая структура электромагнитных колебаний в МСУНТ (т.е. внутризонные и межзонные переходы) будет «спрятана» в частотной зависимости диэлектрической проницаемости, а сама МСУНТ будет рассматриваться как классический объект, в котором происходят вынужденные электромагнитные колебания (как в сплошной среде) и который переизлучает данные колебания во внешнее пространство в виде переотраженных волн.

Такой подход справедлив в том случае, когда диаметр МСУНТ гораздо больше межатомных расстояний, пространственный период изменения внешних электрических полей в МСУНТ гораздо больше пространственного периода внутриатомных процессов в МСУНТ.

Оптические свойства многослойной углеродной нанотрубки, как макрообъекта, зависят, прежде всего, от ее диэлектрической проницаемости и геометрии. Известно, что МСУНТ имеет цилиндрическую форму и проявляет анизотропные свойства в оптическом диапазоне [30]. Установлено, что наличие больше чем десяти графеновых слоев в МСУНТ позволяет использовать тензор диэлектрической проницаемости графита для описания оптических свойств МСУНТ [31].

Графит, являясь кристаллической аллотропной формой углерода, проявляет свойства полуметалла. Атомы углерода располагаются в почти параллельных слоях, причем расстояние между данными слоями и ближайшими атомами внутри слоя различаются приблизительно в 2,7 раза, что является основной причиной анизотропии графита в механических, электрических и оптических свойствах. Оптические анизотропные свойства графита можно описать с помощью тензора диэлектрической проницаемости

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\parallel}$ – диэлектрические проницаемости графита, которые соответствуют двум направлениям напряженности электрического поля E . Более точно, $E \perp C$ соответствует обыкновенному лучу, $E \parallel C$ – необыкновенному лучу, где C – нормаль к основным (графеновым) плоскостям графита.

Элементы тензора диэлектрической проницаемости графита $\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\parallel}$, могут быть представлены с помощью феноменологической модели Друде–Лоренца [32]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{(f)}(\omega) + \varepsilon^{(b)}(\omega), \quad (2)$$

где $\varepsilon^{(f)}(\omega)$ – диэлектрическая проницаемость, соответствующая внутризонным переходам (обычно связана с движением свободных электронов), $\varepsilon^{(b)}(\omega)$ – соответствует межзонным переходам (движению связанных электронов).

Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon^{(f)}(\omega)$ описывается с помощью модели Друде [33]

$$\varepsilon^{(f)}(\omega) = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega(\omega + j\Gamma_0)}, \quad (3)$$

где $\Omega_p = \sqrt{f_0} \omega_p$ – плазменная частота внутризонных переходов с интенсивностью осциллятора f_0 , Γ_0 – постоянная затухания, j – мнимая единица.

Межзонные переходы, которым соответствует диэлектрическая функция $\varepsilon^{(b)}(\omega)$, описывается с помощью модели Лоренца [34]

$$\varepsilon^{(b)}(\omega) = \sum_{m=1}^M \frac{f_m \omega_p^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - j\omega\Gamma_m}. \quad (4)$$

Эта модель приписывает осцилляторы к главным критическим точкам плотности состояний графита, которые соответствуют межзонным переходам с энергиями $\hbar\omega_m$ между критическими точками. Каждый осциллятор описывается интенсивностью f_m , постоянной затухания Γ_m и частотой ω_m . Количество осцилляторов равно M . Чтобы точнее описать процессы поглощения в [35] была предложена небольшая модификация, предполагающая замену ширины линий Лоренца Γ_m в соотношении (4) на Γ'_m

$$\Gamma'_m = \Gamma_m \exp \left[-\alpha_m \left(\frac{\hbar\omega - \hbar\omega_m}{\Gamma_m} \right)^2 \right], \quad (5)$$

где α_m – параметр формы.

Модифицированная феноменологическая модель Друде–Лоренца для описания элементов тензора диэлектрической проницаемости (1) с учетом (2) – (5), имеет вид [36]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{r,\infty} - \frac{f_0 \omega_p^2}{\omega(\omega + j\Gamma_0)} + \sum_{m=1}^M \frac{f_m \omega_p^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - j\omega\Gamma'_m}, \quad (6)$$

где $\varepsilon_{r,\infty}$ – относительная диэлектрическая проницаемость графита на частотах значительно больших чем ω_m , ω_p – плазменная частота.

В работах [37, 38], используя частотные зависимости графита в оптическом диапазоне, полученные из эксперимента (электронная спектроскопия спектров поглощения, EELS) и специально разработанную оптимизационную процедуру, были получены величины оптимизируемых параметров $\varepsilon_{r,\infty}, f_0, f_m, \omega_p, \Gamma_0, M, \Gamma'_m, \alpha$ модифицированной модели Друде–Лоренца, значения которых позволяют на основе соотношения (6) рассчитать зависимости $\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\parallel}$ в следующем виде:

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{1\perp} + j\varepsilon_{2\perp}, \quad \varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{1\parallel} + j\varepsilon_{2\parallel}. \quad (7)$$

Определив тензор диэлектрической проницаемости графита, можно получить элементы аналогичного тензора для МСУНТ. В работе [39] показано, что тензор диэлектрической проницаемости МСУНТ в цилиндрической системе координат имеет вид:

$$\varepsilon(\hat{r}, \hat{\phi}, \hat{z}) = \varepsilon_{\parallel} \hat{r}\hat{r} + \varepsilon_{\perp} (\hat{z}\hat{z} + \hat{\phi}\hat{\phi}), \quad (8)$$

где $\hat{r}, \hat{\phi}, \hat{z}$ – базовые векторы цилиндрической системы координат, $\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\parallel}$ – компоненты тензора диэлектрической проницаемости графита. В декартовой системе координат с осью Z, совпадающей с осью Z цилиндрической системы, данный тензор можно представить в виде [39]:

$$\hat{\varepsilon}(x, y, z) = \begin{pmatrix} \frac{x^2}{r^2} \varepsilon_{\parallel} + \frac{y^2}{r^2} \varepsilon_{\perp} & \frac{xy}{r^2} (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) & 0 \\ \frac{xy}{r^2} (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) & \frac{x^2}{r^2} \varepsilon_{\parallel} + \frac{y^2}{r^2} \varepsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\perp} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Использование соотношения (9) для расчета оптических свойств МСУНТ с помощью метода конечных элементов довольно трудоемко. Поэтому целесообразно воспользоваться ВМ-теорией, описанной в работе [40]. Согласно подходу, если МСУНТ рассматривать как пустотелый цилиндр, то компоненты МСУНТ примут вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\parallel}^{CNT} &= \varepsilon_{\perp} \\ \varepsilon_{\perp}^{CNT} &= \sqrt{\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}} \end{aligned} \quad (10)$$

где $\varepsilon_{\parallel}^{CNT}, \varepsilon_{\perp}^{CNT}$ – компоненты тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ, параллельные и перпендикулярные оси нанотрубки.

Заметим, что значения $\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\parallel}$ для графита можно получить не только с помощью феноменологической модели Друде–Лоренца, но и используя точные расчеты. В работе [41] на основе разработанной трехмерной модели зонной структуры графита показано,

что основной вклад в оптические свойства графита дают области вблизи $H - K - M - L$ точек на краю зоны Бриллюэна. На основе данной модели рассчитаны элементы тензора диэлектрической проницаемости графита $\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\parallel}$. В оптическом диапазоне указанные элементы совпадают с соотношениями (7), полученными на основе параметров, рассчитанных в [37]. В работе [42] на основе трехмерной модели зонной структуры графита и используя матричные элементы, входящие в выражения для ε_{\perp} и ε_{\parallel} , было показано, что в оптическом диапазоне работают в основном $\pi - \pi^*$ -переходы, причем анизотропия диэлектрической проницаемости графита является следствием того, что внутрислоистые связи гораздо сильнее, чем межслоистые. Как следствие, в случае, когда $E \perp C$, разрешены $\pi - \pi^*$ -переходы, а когда $E \parallel C$, разрешены $\pi - \sigma^*$ -переходы, которые в оптическом диапазоне не работают. Аналогичные результаты представлены в работах [30, 43, 44]. Именно эти факты объясняют анизотропию диэлектрической проницаемости графита и являются доминирующими при объяснении анизотропии спектров поглощения композитов на основе ансамбля из МСУНТ. В работе [42] рассчитаны элементы тензора диэлектрической проницаемости графита $\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\parallel}$, причем в оптическом диапазоне получено хорошее совпадение с результатами работы [41]. В работе [45] на основе трехмерной модели зонной структуры графита (вариационный метод [46]) рассчитана плотность состояний носителей, распределение которой объясняет работу феноменологической модели Друде–Лоренца (6). В работе [47] показано, что МСУНТ можно рассматривать как пустотелые графитовые цилиндры, имеющие внутренний и внешний диаметры, хотя и с некоторыми ограничениями. В случае, когда число слоев МСУНТ меньше 10, при расчете $\varepsilon_{\parallel}^{CNT}, \varepsilon_{\perp}^{CNT}$ необходимо использовать точные расчеты или методы гомогенизации.

Другим способом получить компоненты тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\parallel}^{CNT}, \varepsilon_{\perp}^{CNT}$ являются различные методы гомогенизации. Указанные подходы (справедливые как для МСУНТ, так и для ОСУНТ) предполагают измерение эффективных компонент тензора композитного материала, содержащего ансамбль из нанотрубок, выбора модели гомогенизации и, в конечном итоге, получения искомого компонент $\varepsilon_{\parallel}^{CNT}, \varepsilon_{\perp}^{CNT}$. Существует много вариантов решения данного подхода. Рассмотрим два из них: модель Максвелла–Гарнетта (МГ) и модель Бруггемана (БМ) [48]. Согласно МГ-модели эффективная диэлектрическая проницаемость композитного материала, содержащего в качестве включений УНТ, имеет вид

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_i \frac{\{N + f(1 - N)\} \varepsilon_m + (1 - N)(1 - f) \varepsilon_i}{N(1 - N) \varepsilon_m + (fN + 1 - N) \varepsilon_i}, \quad (11)$$

где N – геометрический фактор, значение которого равно 0,5 в случае, если электрическое поле перпендикулярно оси УНТ, и равно нулю, в случае, если поле параллельно оси УНТ (предполагается, что нанотрубки расположены в выбранном направлении до измерения ε_{eff}); f – параметр наполнения; ε_m – диэлектрическая проницаемость УНТ; ε_i – диэлектрическая проницаемость основы композитного материала. Когда $f \geq 0.9$, справедлива БМ-модель. В этом случае осуществляется учет взаимодействия не только между УНТ и основой, но и между самими УНТ.

Интересной разновидностью метода гомогенизации является измерение сечений поглощения массива нанотрубок, на основе которого можно получить сечения

поглощения самих нанотрубок [49]. Полученные значения могут быть сравнены с расчетными значениями.

Таким образом, приведенные выше три подхода получения элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ (модель Друде–Лоренца, методы гомогенизации и ab initio расчеты) позволяют представить МСУНТ, которая по своей природе является квантовым объектом, как классический. Это, в свою очередь, позволяет осуществить расчет рассеяния плоской электромагнитной волны на МСУНТ.

Рассеяние плоской волны на МСУНТ: конечно-элементный подход

Будем считать, что МСУНТ расположены в свободном пространстве, причем источник энергии находится вне МСУНТ. В частном случае в качестве такого источника может быть плоская падающая волна.

Заметим, что при расчете элементов тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ предпочтение отдается частотному подходу (а не временному), т.к. прежде всего представляет интерес пространственное изменение полей на заданной частоте; хотя оба способа описания эквивалентны, но не взаимозаменяемы.

Распределение электрического поля \vec{E} в МСУНТ и в окружающем пространстве в заданном диапазоне частот (внутреннее поле дифракции и поле рассеяния вне МСУНТ) находятся путем решения неоднородного векторного уравнения Гельмгольца [50].

$$\vec{\nabla} \times [\mu^{-1} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E})] - \vec{\kappa}_0^2 \varepsilon \cdot \vec{E} = -j \vec{\kappa}_0 Z_0 \vec{J}_s, \quad (12)$$

где \vec{J}_s – плотности внешних источников электрического тока, Z_0 – волновое сопротивление свободного пространства, $\vec{\kappa}_0$ – волновой вектор в вакууме, ε, μ – скаляры, или тензоры второго порядка диэлектрической и магнитной проницаемостей.

Уравнение (12) справедливо, когда напряженность падающей плоской волны вызывает линейную реакцию вектора поляризации обыкновенного и необыкновенного лучей МСУНТ [61].

В качестве граничных условий для поля \vec{E} в открытом пространстве используется условие излучения Зоммерфельда [51]

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left(\frac{\partial \vec{E}}{\partial r} + j \vec{\kappa}_0 \vec{E} \right) = 0, \quad (13)$$

где j – мнимая единица, r – расстояние между точкой излучения и точкой наблюдения, расположенной в дальней зоне. Уравнению (13) удовлетворяют бегущие волны, уходящие на бесконечность.

Рассмотрим конечно-элементный подход для численного решения уравнения (12) и основные методы реализации граничных условий (13).

Конечно-элементный подход. Существует два основных подхода решения уравнения (12) с помощью метода конечных элементов: вариационный подход и метод взвешенных невязок.

Метод взвешенных невязок: метод Галеркина, метод конечных элементов. Вычислительная процедура методов взвешенных невязок заключается в следующем. Пусть задано неоднородное уравнение $Lu = f$, где L – линейный оператор, f – известная функция. Рассмотрим тождественно равную нулю функцию $Lu - f = 0$. Разлагая ее в ряд Фурье по полной ортогональной системе функций $\{w_n\}$ (известны как

весовые или тестовые функции), следует положить все коэффициенты Фурье равными нулю:

$$(Lu - f, w_k) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, \infty. \quad (14)$$

Приближенное решение задачи (14) будем искать в виде

$$u^N = \sum_{n=1}^N a_n^N u_n, \quad (15)$$

где a_n^N – неизвестные коэффициенты, N – число базисных функций $\{u_n\}_{n=1}^N$. Подстановка разложения (15) в (14) приводит к соотношению, которое выражает ортогональность невязки к весовым функциям:

$$\left(\sum_{n=1}^N a_n^N Lu_n - f, w_k \right) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (16)$$

В зависимости от выбора весовой функции различают различные реализации метода взвешенных невязок [54]: моментов, коллокаций, подобластей, наименьших квадратов и Галеркина. Остановимся более детально на описании метода Галеркина [55], как на одном из методов, наиболее часто встречающихся при решении задач электродинамики.

Пусть задана двумерная область Ω с границей Γ , причем n – внешняя нормаль области Ω , в которой выполняется уравнение

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + k^2 \phi = 0, \quad (17)$$

где k – волновой вектор, являющийся функцией распределения диэлектрической проницаемости среды в области Ω , ϕ – искомая функция. Уравнение (17) является частным случаем уравнения (12), описывает лишь собственные колебания внутри области Ω , однако позволяет описать выбранный конечно-элементный подход.

Зная только приближенное решение $\bar{\phi}$ и подставляя его в уравнение (17), имеем

$$\frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial y^2} + k^2 \bar{\phi} = R, \quad (18)$$

где R – невязка. Уменьшить различие между точным и приближенным решениями можно с помощью взвешенного усреднения и сведения к нулю невязки R во всей области решения, т.е.

$$\iint_{\Omega} \psi \left\{ \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial y^2} + k^2 \bar{\phi} \right\} dx dy = 0, \quad (19)$$

где ψ – весовая функция. Если учесть определение скалярного произведения $(\phi, \psi) = \int_{\Omega} \phi \cdot \psi d\Omega$, которое лежит в основе обобщенного вариационного принципа [53], то при $N \rightarrow \infty$ соотношения (16) и (19) будут идентичны.

Интегрирование по частям первых двух членов в скобках в уравнении (19) позволяет исключить вторые производные и преобразовать его к следующему виду [51,53,55]:

$$\left[\int_{\Gamma} \psi \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial n} d\Gamma \right] - \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} \right) dx dy + \iint_{\Omega} \psi k^2 \bar{\phi} dx dy = 0. \quad (20)$$

Это так называемая слабая интегральная форма исходного уравнения (17), которая включает в себя как само уравнение (17), так и его граничные условия.

Метод Галеркина, как один из представляющих метод, взвешенных невязок, получается путем использования одного и того же разложения по собственным функциям как для приближенного решения $\bar{\phi}$, так и для весовой функции ψ . С учетом того, что $\bar{\phi} = \psi$, сведем интегральное уравнение (20) к алгебраическому и решим матричное уравнение для всей области Ω .

Используя метод конечных элементов для решения уравнения (20), разделим исходную область Ω на конечные элементы и применим к каждому из них метод Галеркина с последующим суммированием результатов, полученных для каждой ячейки.

Учитывая, что уравнение (20) для конечного элемента e имеет вид

$$\left[\int_{\Gamma_e} \psi_e \frac{\partial \bar{\phi}_e}{\partial n} d\Gamma \right] - \iint_{\Omega_e} \left(\frac{\partial \psi_e}{\partial x} \frac{\partial \bar{\phi}_e}{\partial x} + \frac{\partial \psi_e}{\partial y} \frac{\partial \bar{\phi}_e}{\partial y} \right) dx dy + \iint_{\Omega_e} \psi_e k^2 \bar{\phi}_e dx dy = 0, \quad (21)$$

представим весовую функцию ψ_e и приближенное решение $\bar{\phi}_e$ как разложения

$$\bar{\phi}_e = \sum_{i=1}^{M_e} N_i \phi_{ei} = [N_e]^T \{ \phi_e \}, \quad \psi_e = \sum_{i=1}^{M_e} N_i \phi_{ei} = [N_e]^T \{ \phi_e \}, \quad (22)$$

причем $[N_e] = [N_1 \ N_2 \ N_3 \ \dots \ N_{M_e}]$, $\{ \phi_e \} = (\phi_1 \ \phi_2 \ \phi_3 \ \dots \ \phi_{M_e})^T$, где M_e – число узлов в конечном элементе e ; N_i – базисные функции (функции формы, интерполяционные функции) в пределах одного конечного элемента e ; ϕ_{ei} – коэффициенты разложения волновой функции конечного элемента e , T – оператор транспонирования.

Подставим соотношения (22) в уравнение (21) и (за исключением первого члена) получим уравнение для одного элемента e [55]

$$\{ \phi_e \}^T \left([A_e] - k^2 [B_e] \right) \{ \phi_e \} - \int_{\Gamma_e} \bar{\phi}_e \frac{\partial \bar{\phi}_e}{\partial n} d\Gamma = 0, \quad (23)$$

где $[A_e] = \iint_{\Omega_e} \frac{\partial [N_e]}{\partial x} \frac{\partial [N_e]^T}{\partial x} + \frac{\partial [N_e]}{\partial y} \frac{\partial [N_e]^T}{\partial y} dx dy$, $[B_e] = \iint_{\Omega_e} [N_e] [N_e]^T dx dy$.

Чтобы учесть вклад всех конечных элементов расчетной области Ω , перепишем уравнение (23) в виде

$$\{ \phi \}^T \left([A] - k^2 [B] \right) \{ \phi \} - \sum_e \left[\int_{\Gamma_e} \bar{\phi}_e \frac{\partial \bar{\phi}_e}{\partial n} d\Gamma \right] = 0, \quad (24)$$

где $\{\phi\} = \sum_e \{\phi_e\}$, $[A] = \sum_e [A_e]$, $[B] = \sum_e [B_e]$.

Второй член в соотношении (24) преобразуем следующим образом:

$$\sum_e \int_{\Gamma_e} \bar{\phi}_e \frac{\partial \bar{\phi}_e}{\partial n} d\Gamma = \oint_{\Gamma} \bar{\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial n} d\Gamma. \quad (25)$$

Тогда уравнение (24), имеет вид

$$\{\phi\}^T ([A] - k^2[B])\{\phi\} - \oint_{\Gamma} \bar{\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial n} d\Gamma = 0. \quad (26)$$

В случае, когда на границе расчетной области заданы однородные граничные условия Дирихле ($\phi = 0$) или Неймана ($\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$), уравнение (26) можно записать так:

$$\{\phi\}^T ([A] - k^2[B])\{\phi\} = 0. \quad (27)$$

Решением уравнения (27) будет матричное уравнение [55]

$$([A] - k^2[B])\{\phi\} = 0, \quad (28)$$

которое позволяет осуществить расчет собственных функций и собственных колебаний уравнения (18). Процедура использования метода конечных элементов на основе метода Галеркина для решения задач рассеяния и излучения электромагнитных волн представлена в работах [50, 52].

Конечные элементы: скалярные, векторные. Важной особенностью метода конечных элементов является то, что его вычислительная процедура не зависит от типа конкретного элемента. Это позволяет рассматривать различные сложные структуры, не изменяя существенно самой процедуры расчета.

Скалярные конечные элементы. Под скалярным элементом будем понимать фрагмент области решения Ω , в пределах которого ищется неизвестная скалярная функция $\phi_e(x, y)$ в виде полинома, вид которого зависит от типа и порядка элемента [51]. Однако прежде чем рассматривать конкретный элемент, который определяется функцией $\phi_e(x, y)$, вкратце классифицируем скалярные конечные элементы, используемые в электродинамике [53]. В двумерном пространстве наиболее часто используются треугольные, прямоугольные, четырехугольные элементы первого и более высоких порядков. В трехмерном пространстве наиболее часто используются тетрагональные элементы, элементы в виде прямоугольного параллелепипеда, шестигранные элементы, элементы в виде треугольной призмы, среди которых также применяются элементы как первого, так и более высоких порядков.

Разделим исследуемый объект на «небольшие» фрагменты (конечные элементы), в пределах которых искомая функция ϕ_e удовлетворяет соотношению (23), причем базисные функции N_i определяются при выборе типа конечного элемента. Выбранный тип элемента и уравнение (23) позволяют получить матрицу жесткости данного элемента, которая выражается через матрицы $[A_e], [B_e]$, определяя свойства исследуемого объекта [56]. Заметим, что не существует унифицированной процедуры вычисления коэффициентов матриц $[A_e], [B_e]$: в одних случаях их возможно рассчитать

аналитически, в других – используя численные методы, например, интерполяционные многочлены Гаусса–Лежандра.

Как пример, рассмотрим более детально скалярный двумерный элемент первого порядка (например, двумерный симплекс-элемент), позволяющий аналитически рассчитать матрицы $[A_e], [B_e]$ [56]. Двумерный симплекс-элемент представляет собой треугольник с (i, j, k) -узлами, по одному в каждой вершине. Выберем последовательную нумерацию узлов против часовой стрелки, начиная с некоторого i -го узла, который выбирается произвольно. Обозначим узловые значения скалярной величины $\phi(x, y)$ рассматриваемого элемента как ϕ_i, ϕ_j, ϕ_k , а координатные пары трех узлов – через $(X_i, Y_i), (X_j, Y_j), (X_k, Y_k)$. Интерполяционный полином внутри элемента задается в виде

$$\phi = N_i \phi_i + N_j \phi_j + N_k \phi_k, \quad (29)$$

где N_i, N_j, N_k – базисные функции определены, например в [53,56].

При использовании треугольного элемента наиболее распространенной системой координат будет система, определяемая тремя относительными координатами L_1, L_2, L_3 [51,56]. Каждая L -координата представляет собой отношение расстояния s от выбранной внутри треугольного элемента точки p до одной из его сторон к высоте h , опущенной на эту сторону из противоположающей вершины. Очевидно, что величина L изменяется от нуля до единицы. Считаем, что каждой из (i, j, k) -вершин отвечают координаты L_1, L_2, L_3 соответственно. Данные координаты равны базисным функциям треугольного симплекс-элемента [55]:

$$L_1 = N_i, \quad L_2 = N_j, \quad L_3 = N_k. \quad (30)$$

Преимуществом использования L -координат является существование соотношений, которые упрощают вычисление интегралов по площади конечного элемента [55]:

$$\int_A L_1^a L_2^b L_3^c dA = \frac{a!b!c!}{(a+b+c+2)!} 2A, \quad (31)$$

где a, b, c – целые числа. Используя соотношения (30) и (31), находим элементы матриц $[A_e], [B_e]$ [53]:

$$A_{ij} = \frac{1}{4A} (b_i b_j + c_i c_j), \quad B_{ij} = \frac{A}{12} (1 + \delta_{ij}), \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (32)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера. Полученные значения элементов матриц $[A_e], [B_e]$ для симплекс-элемента позволяют сформировать глобальные матрицы $[A], [B]$, правила получения которых описаны в работах [51, 54]. Учет граничных условий описан в работах [51, 56].

Векторные конечные элементы. Анализ решений уравнения Гельмгольца показал, что, кроме истинных решений существуют и ложные [57]. Как оказалось, причиной появления ложных решений является то, что полученное решение не удовлетворяет условию нулевой дивергенции электрического и магнитного полей в

областях, где отсутствуют источники: $\nabla \cdot (\varepsilon E) = 0$, $\nabla \cdot (\mu H) = 0$, т.е. не обеспечивается непрерывность тангенциальных составляющих поля при переходе от одного конечного элемента к другому. Указанная причина является следствием того, что искомые функции, удовлетворяющие уравнению Гельмгольца, должны быть дважды дифференцируемыми. Однако при конечно-элементном решении обеспечивается только непрерывность интерполируемых функций.

Наиболее эффективным подходом решения данной проблемы является использование векторных конечных элементов. Классификация указанных элементов практически совпадает с классификацией скалярных векторных элементов. Как и в случае скалярных конечных элементов под векторными элементами будем понимать фрагменты области решения Ω , в пределах которых неизвестную функцию (в нашем случае напряженность электрического поля) представляют в виде полинома, вид которого зависит от типа и порядка элемента. Отличительной чертой векторных конечных элементов по сравнению со скалярными элементами является то, что они обеспечивают непрерывность тангенциальных составляющих поля при переходе от одного конечного элемента к другому.

Как пример, рассмотрим более детально векторный двумерный симплекс-элемент первого порядка, который фактически является продолжением аналогичного скалярного конечного симплекс-элемента первого порядка [51, 53]. В области, занимаемой данным элементом, считается неизвестная векторная функция (электрическое поле). В этом случае в качестве базисных функций уже применяются векторные функции, причем в качестве коэффициентов разложения выступают значения электрических полей вдоль граней треугольника.

Снова возьмем треугольник с прямолинейными сторонами и тремя узлами, по одному в каждой вершине. Выберем последовательную нумерацию узлов против часовой стрелки, начиная с некоторого i -го узла, который выбирается произвольно. Также воспользуемся системой координат, определяемой относительными координатами L_1, L_2, L_3 . Рассмотрим векторную функцию, направленную от узла 1 к узлу 2 [53]:

$$\vec{W}_{12} = L_1^e \vec{\nabla} L_2^e - L_2^e \vec{\nabla} L_1^e. \quad (33)$$

Можно показать, что дивергенция данной функции внутри рассматриваемого элемента равна нулю $\vec{\nabla} \cdot \vec{W}_{12} = 0$, а ротор – некоторой константе $\vec{\nabla} \times \vec{W}_{12} = 2 \vec{\nabla} L_1^e \times \vec{\nabla} L_2^e$. С другой стороны: $\vec{e}_1 \cdot \vec{W}_{12} = 1/l_1^e$, где \vec{e}_1 – орт, направленный от вершины 1 к вершине 2, l_1^e – расстояние между вершинами 1 и 2, т.е. вектор \vec{W}_{12} имеет постоянную тангенциальную составляющую вдоль стороны треугольника между вершинами 1 и 2. Можно также показать, что вектор \vec{W}_{12} не имеет тангенциальных составляющих вдоль других ребер. Таким образом, вектор \vec{W}_{12} имеет все необходимые свойства, чтобы быть векторной базисной функцией стороны треугольника между вершинами 1 и 2. Чтобы получить безразмерную векторную базисную функцию рассматриваемой стороны треугольника, зададим ее следующим образом:

$$\vec{N}_1^e = \vec{W}_{12} l_1^e = (L_1^e \vec{\nabla} L_2^e - L_2^e \vec{\nabla} L_1^e) l_1^e. \quad (34)$$

Аналогично можно показать, что векторные базисные функции сторон между вершинами 2 – 3 и 3 – 1 имеют вид

$$\vec{N}_2^e = \vec{W}_{23} l_2^e = (L_2^e \vec{\nabla} L_3^e - L_3^e \vec{\nabla} L_2^e) l_2^e, \quad (35)$$

$$\vec{N}_3^e = \vec{W}_{31} l_3^e = (L_3^e \vec{\nabla} L_1^e - L_1^e \vec{\nabla} L_3^e) l_3^e. \quad (36)$$

Тогда векторное поле внутри треугольного векторного элемента можно представить в виде [53]

$$\vec{E}^e = \sum_{e=1}^3 \vec{N}_i^e E_i^e, \quad (37)$$

где E_i^e – тангенциальная составляющая поля вдоль i -го ребра треугольника. Таким образом, в случае использования двумерных векторных конечных симплекс-элементов обеспечивается непрерывность тангенциальных составляющих электрического поля при переходе от одного конечного элемента к другому. Аналогичная ситуация имеет место в случае использования векторных конечных элементов других типов и порядков. В случае же использования скалярных двумерных элементов обеспечивается непрерывность неизвестной функции только в совпадающих узлах. С формальной точки зрения в данных конечных элементах изменились только базисные функции, что подтверждает универсальность вычислительной процедуры метода конечных элементов. Процедура расчета элементов матриц $[A_e], [B_e]$ в случае использования рассматриваемого векторного элемента аналогична процедуре скалярного элемента. Результаты расчета данных матриц представлены в [51, 58].

Описанная выше вычислительная процедура расчета полей рассеяния плоской волны на МСУНТ, описываемых уравнением (12), может быть успешно осуществлена при наличии эффективной (с точки зрения вычислительной электродинамики) реализации граничных условий (13).

Численная реализация условий излучения Зоммерфельда. С формальной точки зрения возможен расчет рассеяния плоской волны на МСУНТ (или ансамбле из МСУНТ) в неограниченном пространстве с помощью решения уравнения Гельмгольца и граничных условий излучения на бесконечности. Однако с точки зрения реализации указанной вычислительной процедуры возникает необходимость трансформировать условия излучения, обеспечив конечные размеры расчетной области, причем в волновой зоне должна существовать только уходящая волна, амплитуда которой убывает обратно пропорционально расстоянию до МСУНТ.

Существует два подхода при трансформации условий излучения: локальный и нелокальный. Отличительной особенностью локального подхода является то, что каждая точка границы, на которой реализуются условия излучения, связана только со своими ближайшими соседями. Представителями локального подхода являются АПС -метод [52] и метод абсолютно поглощающих слоев (АПС) [51]. Напротив, нелокальный подход обладает тем свойством, что каждая точка некоторой фиктивной границы, которая связывает поля во внешних и внутренних расчетных областях, соединена со всеми точками данной границы. Представителями данного подхода являются VI-метод [50] и EE-метод [53]. Рассмотрим АПС -метод как один из наиболее подходящих для расчета рассеяния плоской волны на МСУНТ.

Граничные условия: АПШ-метод. Рассматриваемый метод локальный. Впервые данный подход был предложен при моделировании условий поглощения волн на стенках безэховой камеры [51]. Несмотря на то, что идея была великолепна, с вычислительной точки зрения она имела существенный недостаток: поглощающие стенки имели большую электрическую длину, что существенно ухудшает быстродействие

вычислительной процедуры. Чтобы преодолеть этот недостаток, в работе [52] были предложены искусственные (нереальные) тонкие однородные поглощающие слои, нанесенные на внутреннюю часть замкнутой трехмерной металлической поверхности, внутри которой находился исследуемый объект. Эти слои позволяли поглощать произвольно поляризованные падающие плоские волны различных частот, причем падающие под произвольным углом. Параметры этих слоев были получены аналитически. Реализация данной концепции была названа АПС-методом. Рассмотрим две интерпретации АПС-метода [59,60], которые позволяют получить практически используемый вариант.

В работе [59] использована идея масштабирования координатных осей: уравнения Максвелла в поглощающих слоях представлены в виде

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}_s \times \vec{E} &= -j\omega\mu\vec{H}, \\ \vec{\nabla}_s \times \vec{H} &= j\omega\varepsilon\vec{E}, \\ \vec{\nabla}_s \cdot (\varepsilon\vec{E}) &= 0, \\ \vec{\nabla}_s \cdot (\mu\vec{H}) &= 0,\end{aligned}\tag{38}$$

где

$$\vec{\nabla}_s = \hat{x} \frac{1}{s_x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{1}{s_y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{1}{s_z} \frac{\partial}{\partial z},\tag{39}$$

а $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ – единичные орты, s_x, s_y, s_z – масштабные коэффициенты в декартовой системе координат. В [59] показано, что для получения нулевых коэффициентов отражения TE, TH -волн от поглощающей поверхности, необходимо, чтобы коэффициенты пропорциональности s_x, s_y, s_z имели следующий вид для замкнутой трехмерной металлической поверхности:

$$s_x = s' - js'', \quad s_y = s_z = 1\tag{40}$$

для АП-слоев, перпендикулярных оси x ;

$$s_y = s' - js'', \quad s_x = s_z = 1\tag{41}$$

для АПС-слоев, перпендикулярных оси y ;

$$s_z = s' - js'', \quad s_y = s_x = 1\tag{42}$$

для АПС-слоев, перпендикулярных оси z ;

$$s_x = s_y = s' - js'', \quad s_z = 1\tag{43}$$

для одной из двенадцати АПС-граней, например полученной пересечением плоскостей $x = a, y = b$, где a, b, c – размеры металлического ящика, на внутренней части которого расположены тонкие поглощающие слои;

$$s_z = s_x = s_y = s' - js''\tag{44}$$

для одного из восьми PML-углов, полученного, например, пересечением плоскостей $x = a$, $y = b$, $z = c$, причем для соотношений (40)–(44) имеют место соотношения:

$$s' \geq 1, \quad s'' \geq 0, \quad (45)$$

обеспечивающие быстрое затухание и поглощение волн в AP-слоях. Описанный подход может быть выполнен в декартовой, цилиндрической и в сферической системах координат [53].

Во второй интерпретации АПС-метода [60] использована идея представления поглощающих слоев виде анизотропных материалов, электромагнитные процессы в которых описываются уравнениями Максвелла в следующем виде:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -j\omega\bar{\mu}\vec{H}, \\ \vec{\nabla} \times \vec{H} &= j\omega\bar{\varepsilon}\vec{E}, \\ \vec{\nabla} \cdot (\bar{\varepsilon}\vec{E}) &= 0, \\ \vec{\nabla} \cdot (\bar{\mu}\vec{H}) &= 0, \end{aligned} \quad (46)$$

где $\bar{\varepsilon}$, $\bar{\mu}$ – тензоры диэлектрической и магнитной проницаемостей PML-слоев:

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix}.$$

Первая интерпретация АПС-слоев неудобна при конечно-элементном моделировании внешних задач электродинамики из-за наличия оператора (39). Вторая интерпретация АПС-слоев может быть использована при конечно-элементном моделировании внешних задач электродинамики. Сравнение этих подходов позволяет выразить элементы тензоров $\bar{\varepsilon}$, $\bar{\mu}$ через масштабные коэффициенты s_x, s_y, s_z . В работе [60] показано, что если связать поля в первой и во второй интерпретации следующим образом:

$$\vec{E}^a = \begin{pmatrix} s_x & 0 & 0 \\ 0 & s_y & 0 \\ 0 & 0 & s_z \end{pmatrix} \cdot \vec{E}^c, \quad \vec{H}^a = \begin{pmatrix} s_x & 0 & 0 \\ 0 & s_y & 0 \\ 0 & 0 & s_z \end{pmatrix} \cdot \vec{H}^c, \quad (47)$$

где \vec{E}^a, \vec{H}^a – электромагнитные поля в анизотропных поглощающих PML-слоях; \vec{E}^c, \vec{H}^c – электромагнитные поля в поглощающих AP-слоях с масштабируемыми коэффициентами, то система уравнений Максвелла принимает вид:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{E}^a &= -j\omega\bar{\mu}\vec{H}^a \\ \vec{\nabla} \times \vec{H}^a &= j\omega\bar{\varepsilon}\vec{E}^a \\ \vec{\nabla} \cdot (\bar{\varepsilon}\vec{E}^a) &= 0 \\ \vec{\nabla} \cdot (\bar{\mu}\vec{H}^a) &= 0 \end{aligned} \quad (48)$$

$$\text{где } \bar{\Lambda} = \begin{pmatrix} \frac{s_y s_z}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_z s_x}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{s_x s_y}{s_z} \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Уравнения Максвелла (48), (49) описывают волновые процессы внутри объема, ограниченного поглощающими анизотропными PML-слоями при условии, что $s_x = s_y = s_z = 1$. Внутри слоев уравнения (48), (49) (без указанного условия) не отображают реальные физические процессы, но описывают искусственную анизотропную среду, которая является поглощающей для падающих на нее плоских волн любой поляризации и частоты, причем при произвольном угле падения.

Анализ коэффициента отражения волн, падающих на поглощающие слои, позволяет выделить следующие особенности:

– частотная независимость данного коэффициента наблюдается, когда мнимая часть масштабных коэффициентов имеет вид:

$$s'' = \frac{\sigma}{\omega \varepsilon}, \quad (50)$$

где σ – удельная проводимость AP-слоев; – так как действительная часть масштабных коэффициентов не влияет на распространение волн в поглощающих слоях, то имеет смысл представить ее в виде:

$$s' = 1; \quad (51)$$

– уровень поглощения пропорциональный толщине поглощающего слоя;

– так как AP-слои поглощают падающие волны наилучшим образом при нормальном падении, то для нивелирования нефизического отражения при больших углах падения необходимо, чтобы минимальное расстояние между исследуемым объектом и поглощающей границей было не менее половины длины волны.

Таким образом, конечно-элементный подход решения уравнения (12) и АПС-метод реализации условий излучения Зоммерфельда (13) позволяют осуществить расчет коэффициентов отражения, прохождения и поглощения падающего электромагнитного излучения на МСУНТ или ансамбль из нанотрубок в зависимости от физико-топологических параметров композитного материала. Рассмотрим структуру расчетной области, в которой осуществляется расчет указанных коэффициентов.

Расчетная область (в данном случае может иметь форму куба) включает в себя МСУНТ или ансамбль из нанотрубок и внешний источник (например, плоская волна). Передняя и задняя части куба покрыты AP-слоями; боковые стороны удовлетворяют периодическим граничным условиям (если рассматривается ансамбль из нанотрубок) или покрыты PML-слоями (если исследуется одна МСУНТ).

Выводы

Системный подход при рассмотрении свойств углеродных нанотрубок позволяет создать новые композитные материалы на основе МСУНТ.

Расчет рассеяния плоской электромагнитной волны на МСУНТ с помощью классических уравнений Максвелла возможен, если материал МСУНТ описывать с

помощью тензора диэлектрической проницаемости. Данный подход справедлив в том случае, когда диаметр МСУНТ гораздо больше межатомных расстояний, пространственный период изменения электрических полей в МСУНТ гораздо больше пространственного периода внутриатомных процессов в МСУНТ.

Дан обзор методов получения тензора диэлектрической проницаемости МСУНТ в оптическом диапазоне: модель Друде–Лоренца, методы гомогенизации и *ab initio* расчеты.

Конечно-элементный подход (совместное использование метода Галеркина и метода конечных элементов) позволяет осуществить расчет коэффициентов отражения, прохождения и поглощения падающего электромагнитного излучения на ансамбль из нанотрубок в зависимости от расстояния между МСУНТ, длины/диаметра нанотрубок, угла падения, диэлектрической проницаемости основы композитного материала и поляризации электрического поля падающего излучения.

Конечно-элементный подход справедлив, когда напряженность падающей плоской волны вызывает линейную реакцию вектора поляризации обыкновенного и необыкновенного лучей МСУНТ.

Литература

1. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature*. – 1991. – V. 354. – P.56–58.
2. Treacy M., Ebbesen T.W., Gibson J.M. Experimentally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes // *Nature*. – 1996. – V. 381. – P. 678–680.
3. Zhang J., Yang G., Cheng Y. Stationary scanning X-ray source based on carbon nanotube field emitters // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 86. – P. 376–379.
4. LeMieux M. C., Roberts M., Barman S., Jin Y.W., Kim J.M., Bao Z. Self-Sorted, Aligned Nanotube Networks for Thin-Film Transistors // *Science*. – 2008. – V. 321. – P. 101–104.
5. Nikolic B.K., Saha K.K., Markussen T., First-principles quantum transport modeling of thermoelectricity in single-molecule nanojunctions with graphene nanoribbon electrodes // *J. Comput. Electron.* – 2012. – V. 11. – P. 78–92.
6. Ying L., Baoqing Z., Properties of carbon nanotube optical antennae // *International Journal of Infrared and millimeter Waves*. – 2008. – V. 29. – P. 990–996.
7. Murmu T.,McCarthy M.A., Adhikari S., Vibration response of double-walled carbon nanotubes subjected to an externally applied longitudinal magnetic field: A nonlocal elasticity approach // *J. Sound and Vibration*. – 2012. – V. 331. – P. 5069–5086.
8. Merkulov V.I., Lowndes D.H., Wei Y.Y., Eres G. Patterned Growth of Individual and Multiple Vertically Aligned Carbon Nanofibers // *Appl. Phys. Lett.* – 2000. – V. 76. – P. 3555–3557.
9. Melechko A.V., Merkulov V.I., McKnight T.E., Guillorn M.A. Vertically Aligned Carbon Nanofibers and Related Structures: Controlled Synthesis and Directed Assembly // *J. Appl. Phys.* – 2005. – V. 97. – P. 041301–041310.
10. But H., Dai Q., Wilkinson T.D., Photonic crystals and metamaterial filters based on 2D arrays of silicon nanopillars // *Progr. Electromagn. Res.* – 2011. – V. 113. – P. 179–194.
11. Falvo M.R., Clary G.J., Taylor R.,M., Chi V. Bending and buckling of carbon nanotubes under large strain // *Nature*. – 1997. – V. 389. – P. 582–584.
12. Bandaru P.R. Electrical properties and applications of carbon nanotube structures // *Nanosci. Nanotechnol.* – 2007. – V. 7. – P. 1–29.
13. Li H.J., Lu W.G., Li J.J., Bai X.D, Gu C.Z. Multichannel ballistic transport in multiwall carbon nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 95. – P. 086601–086605.
14. Xu H.Q. Nanotubes: the logical choice for electronics // *Nat. Mater.* – 2005. – V.4 – P. 649–650.

15. Berber S., Kwon Y.K., Tomanek D. Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 4613–4617.
16. Zutic, I. Spintronics: Fundamentals and applications // *Rev. Mod. Phys.* – 2004. – V. 76. – P. 323–410.
17. Sun Z., Rozhin A.G., Wang F., Ferrari A.C. L–Band Ultrafast Fiber Laser Mode Locked by Carbon Nanotubes // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – V. 93. – P. 061114-061115.
18. Itkis M.E., Borondics F., Yu A., Haddon R.C. Bolometric Infrared Photo-response of Suspended Single-Wall Carbon Nanotube Films // *Science.* – 2006. – V. 312. – P. 413–416.
19. Lopez C. Materials Aspects of Photonic Crystals // *Adv. Mater.* – 2003. – V. 15. – P. 1679–1704.
20. John S. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – V. 58. – P. 2486–2489.
21. Johnson G.S., Mekis A., Fan S.H., Joannopoulos J.D. Modeling the Flow of Light // *Comput. Sci. Eng.* – 2001. – V. 3. – P. 38–47.
22. Luo C., Johnson S.G., Joannopoulos J.D., Pendry J.B. All-angle Negative Refraction without Negative Effective Index // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 65. – P. 201104–201114.
23. Soukoulis C.M., Linden S., Wegener M. Negative Refractive Index at Optical Wavelengths // *Science.* – 2007. – V. 315. – P. 47–49.
24. Ishaq A., Yan L., Husnain G., Lu Bo, Khalid A. Tuning the optical properties of multiwall carbon nanotube thin films by N^+ ion beams irradiation // *ACS Nano.* – 2011. – V. 6. – P. 357–365.
25. Soldano K., Rossella F., Bellani V., Gludicatti S., Kar S. Cobalt nanocluster filled carbon nanotube arrays : engineering photonic bandgap and optical reflectivity // *ACS Nano.* – 2010. – V. 4. – P. 6573–6578.
26. Ishaq A., Yan L., Husnain G., Lu Bo, Arshad M., Tuning the optical properties of multiwall carbon nanotube thin films by N^+ ion beams irradiation // *Nano.* – 2011. – V. 6. – P. 357.
27. Hao J, Hanson G.W. Infrared and optical properties of carbon nanotube dipole antennas // *IEEE Tans. On Nanotechnology.* – 2006. – V. 5. – P. 766–771.
28. Pederson T.G. Variational approach to excitons in carbon nanotubes // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 67. – P. 073401–073405.
29. Vang Zu-Po, Ci L., Bur J.,A.,Lin Shawn-Yu , Ajaean P.,M. Experimental Observation of an Extremely Dark Material Made By a Low-Density Nanotube Array // *Nano Lett.* – 2008. – V. 8. – P. 446–451.
30. Guo G., Chu K., Wang D.S., Duan S.G. Linear and Nonlinear Optical Properties of Carbon Nanotubes from First-Principals Calculations *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 69. – P. 205416–205429.
31. Partoens B., Peeters F.M. From Graphene to Graphite: Electronic Structure around the K Point // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 74. – P. 205416–205429.
32. Wooten F. Optical properties of solids. – Academic Press: New York, 1972. – 260 p.
33. Markovic M.I., Rackis D. Determination of the reflections of laser light of wavelengths $\lambda \in (0.22\mu m, 200\mu m)$ from the surface of aluminum using the Drude-Lorentz model // *Appl. Opt.* – 1990. – V.29. – P. 3479–3483.
34. Markovic M.I., Rackis D. Determination of optical properties of aluminum including electron reradiation in the Lorentz-Drude Model // *Opt. Laser Technol.* – 1990. – V.22. – P. 394–398.
35. Kim C.C., Garland J.W, Abad H., Racciah P.M. Modeling the optical dielectric function of semiconductors: Extension of the critical-point parabolic-band approximation // *Phys Rev. B.* – 1992. – V.45. – P.11749–11767.
36. Lidorakis E., Ferrari A.C. Photonics with multiwall carbon nanotube arrays // *ACS Nano.* – 2009. – V. 3. – 1238–1248.

37. Djurisic A.B., Li E.H. Optical properties of graphite // *J. Appl. Phys.* – 1999. – V.85. – P.7 404–7410.
38. Djurisic A.B., Rakic A.D., Elazar J.M. Modeling the optical constants of solids using acceptance-probability-controlled simulated annealing with an adaptive move generation procedure // *Phys. Rev. E.* – 1997. – V.55. – P. 4797–4803.
39. Garcia-Vidal F.J., Pitarke J.M., Pendry J.B. Effective medium theory of the optical properties of aligned carbon nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – V. 78. – P. 4289–4292.
40. Lu W., Dong J., Li Zhen-Ya Optical properties of aligned carbon nanotube systems studied by effective-medium approximation method // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 63. – P.033401–033404.
41. Johnson L.G., Dresselhaus G. Optical properties of Graphite // *Phys. Rev. B.* – 1973. – V. 7. – P. 2275–2285.
42. Ahuja R., Auluck S., Wills J.M., Alouani M., Johansson B., Eriksson O. Optical properties of graphite from first-principles calculations // *Phys. Rev. B.* – 1997. – V. 55. – P. 4999–5005
43. Painter G.S., Ellis D.E. Electronic band Structure and optical properties of graphite from a variational approach // *Phys. Rev. B.* – 1970. – V. 1. – P. 4747–4752.
44. Greenaway D.L, Harbeke G. Anisotropy of optical constants and the band structure graphite // *Phys. Rev.* – 1969. – V. 178. – P. 1340–1348.
45. Willis R.F., Fitton B. Secondary-electron emission spectroscopy and observation of high-energy excited states in graphite: theory and experiment // *Phys. Rev. B.* – 1999. – V.9. – P. 1926–1937.
46. Ellis D.E. Painter G.S., Discrete variational method for the energy-band problem with general crystal potentials // *Phys. Rev. B.* – 1970. – V. 2. – P. 2887–2898.
47. Stephan O., Taverna D., Kociak M., Suenaga K., Henrard L., Colliex C. Discretic response of isolated carbon nanotubes investigated by spatially resolved electron energy-loss spectroscopy: From multi-walled to single-walled nanotubes // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 66. – P. 155422-155433.
48. Tanaka K., Yamabe T., Fukui K. *The Science and Technology of Carbon Nanotubes.* – New York: Elsevier, 1999. – 199 p.
49. Ni C., Bandaru F. Enhanced optical absorption cross-section characteristics of multi-wall carbon nanotubes // *Carbon.* – 2009. – V. 47. – P. 2898–2903.
50. Baylis A., Gunzburger M., Turkel M. Boundary Conditions for the Numerical Solutions of Elliptic Equations in Exterior regions // *SIAM J. Appl. Math.* – 1980. – V.1. – P. 371–385.
51. Volakis J.L., Cbatterjee A., Kempel L.C. *Finite Element Method for Electromagnetics.* – IEEE Press, 1998. – 344 p.
52. Berenger J.P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // *J. Comput.Phys.* – 1994. – V. 114. – P. 185–200.
53. Jin J. *The Finite Element Method in Electromagnetics.* Second Edition. – New York: Wiley, 2002. – 753 p.
54. Sadiku M. *Numerical Techniques in Electromagnetics* – CRC Press, 2001. – 750 p.
55. Kawano K., Kitoh T. *Introduction to optical waveguide analysis: solving Maxwell's equations and the Schrödinger equation* – John Wiley & Sons, Inc., 2001.
56. Segerlind L.J, *Applied Finite Element Analysis.* Second Edition. – New York: Wiley, 1984. – 428 p.
57. Ise K., Inoue K., Koshiba M. Three-dimensional finite-element solution of dielectric scattering obstacles in rectangular waveguide // *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* – 1990.– V. 38. – P. 1352–1359.
58. G. Pelosi, R. Coccioli, S. Selleri, *Quick Finite Elements for Electromagnetic Waves,* – Artech House, 2009. – 289 p.

59. Chew W.C., Weedon W.C. A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates // *Microwave Opt. Tech. Lett.* – 1994. – V.7. – P. 599–604.
60. Sacks Z.S., Kingsland D.M., Lee R., Lee J.F. A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition // *IEEE Trans. Antennas Propagat.* – 1995. – V. 43. – P. 1460–1463.
61. Матвеев А.Н. Оптика. – Москва: Высш. шк., 1985. – 342 с.

МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ ОПТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ БАГАТОШАРОВІХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК

В.І. Канєвський, В.М. Розенбаум

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна*

Обговорено методику розрахунку оптичних властивостей матеріалів на основі багатошарових вуглецевих нанотрубок. Наведено огляд методів розрахунку тензора діелектричної проникності вказаних нанотрубок: модель Друде–Лоренца, методи гомогенізації, а також ab initio розрахунки. Розглянуто кінцево-елементний підхід для розрахунку розсіювання плоскої хвилі на багатошарових вуглецевих нанотрубках.

CALCULATION METHODS OF OPTICAL PROPERTIES OF MATERIALS ON THE BASE OF MULTIWALL CARBON NANOTUBES

V.I. Kanyevskyy, V.M. Rozenbaum

*Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine*

Calculation methods of optical properties of materials are considered on the base of multiwall carbon nanotubes (MWCNTs). A review of methods of permittivity tensor calculations for MWCNTs is given: Drude-Lorentz model, homogenization and ab initio methods. A finite-element approach for modeling plane wave scattering on MWCNTs is described.