



Аржников А.К., [Галанин М.П.](#),
[Феоктистова А.В.](#)

Математическая модель для
расчета электрофизических
свойств нанокompозита с
туннельной
электропроводностью и ее
численная реализация

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Аржников А.К., Галанин М.П., Феоктистова А.В. Математическая модель для расчета электрофизических свойств нанокompозита с туннельной электропроводностью и ее численная реализация // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2013. № 96. 30 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-96>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской академии наук**

А.К. Аржников, М.П. Галанин, А.В. Феокистова

**Математическая модель для расчета
электрофизических свойств нанокompозита
с туннельной электропроводностью
и ее численная реализация**

Москва — 2013

А.К. Аржников, М.П. Галанин, А.В. Феокистова

Математическая модель для расчета электрофизических свойств нанокompозита с туннельной электропроводностью и ее численная реализация

Выполнены математическое моделирование распределения потенциала и напряженности электрического поля, а также расчет электрофизических свойств нанокompозита металл–изолятор. Рассмотрен магнитный нанокompозит, в котором ферромагнитные гранулы с размером, близким к однодоменному, хаотически расположены в диэлектрической матрице. Нанокompозит разделен на ячейки, представляющие собой включения некоторого числа металлических гранул в ячейке, заполненной диэлектриком. В рамках модели возможно рассчитать распределения потенциала и напряженности электрического поля, а также эффективную емкость и сопротивление ячейки. Расчет проведен на основе стационарных уравнений Максвелла. Для численного решения использован метод конечных элементов. В результате серии расчетов получены распределения электрического потенциала и напряженности электрического поля для различных конфигураций включений в ячейке нанокompозита, относительной объемной плотности металлических включений и их радиусов. Это позволило вычислить соответствующие электрическую емкость и сопротивление ячеек нанокompозита в зависимости от концентрации металлических гранул–включений в ней.

Ключевые слова: нанокompозит, металл, диэлектрик, туннельная электропроводность, математическое моделирование, метод конечных элементов, емкость, сопротивление

A.K. Arzhnikov, M.P. Galanin, A.V. Feoktistova

Mathematical model for calculation of the electrophysical properties of nanocomposite with tunnel conductivity and its numerical realization

Mathematical modeling of distribution of the electric field potential and strength, and also calculation of the electrophysical properties of nanocomposite metal-insulator is created. Magnetic nanocomposite with ferromagnetic single domain granules chaotically located in a dielectric matrix is considered. Nanocomposite is divided into cells filled with dielectric where a number of metal granules is located. The distribution of the electric field potential and strength and the effective capacity and resistance of a cell may be calculated within the framework of the model. Calculation was carried out on the basis of the stationary Maxwell equations. The finite elements method is used for the numerical solution. Distribution of the electric field potential and strength for different configurations of metal inclusions in the cell of nanocomposite is obtained as a result of calculations. These results aid to calculate the appropriate electrical capacity and resistance of cells of the nanocomposite depending on the concentration of metal granules – inclusions.

Key words: nanocomposite, metal, dielectric, tunnel conductivity, mathematical modeling, finite element method, capacity, resistance.

Введение

Работа посвящена математическому моделированию электрических свойств магнитных нанокompозитов типа металл–диэлектрик.

Магнитные нанокompозиты, в которых ферромагнитные гранулы с размером, близким к однодоменному размеру, хаотически расположены в диэлектрической матрице, представляют собой класс наноструктурных магнитных материалов с необычными и перспективными для практических приложений свойствами. На рис. 1 показана условная схема нанокompозита типа металл–диэлектрик. Наличие в таких системах гигантского [1] и туннельного [1] магнитосопротивления, гигантского аномального эффекта Холла [2], большой магнитооптической активности [3], аномального оптического поглощения [4] и др. представляет как фундаментальный, так и практический интерес.

Магнитные гранулированные сплавы находят применение в средах для магнитной записи, в том числе с магнитооптическим считыванием информации. Они используются как высокочувствительные магниторезистивные датчики и миниатюрные магнитосчитывающие головки [1], селективные усилители и модуляторы света [5], приемники теплового излучения [6] и электрохромные дисплеи [7].

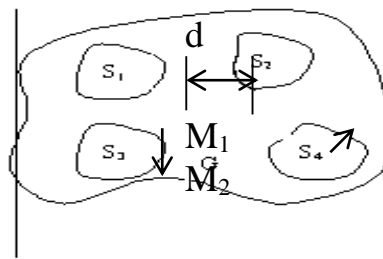


Рис. 1. Магнитный нанокompозит

В качестве примера нанокompозитов такого рода можно указать металлокерамические тонкие пленки, используемые для создания поверхностей-фильтров для преобразования фото-тепловой энергии. Такие пленки изготавливаются путем комбинации металла (например, Cr, Au, Pt, Co) и диэлектрика (Cr_2O_3 , Al_2O_3 , SiO_2 , ...).

Наряду с трехмерными нанокompозитами металл–диэлектрик, большой интерес представляют трехмерные системы ферромагнитный металл–немагнитный полупроводник и ферромагнитный металл–антиферромагнетик, а также квазидвумерные гибридные мультислои, в которых ультратонкие слои нанокompозитов разделены диэлектрическими прослойками.

Принципиальным отличием данных нанокompозитов от гранулированных систем металл–металл является наличие перехода металл–диэлектрик при определенной концентрации металла, называемого порогом перколяции.

Вблизи этого перехода кардинально меняются свойства нанокompозитов. Наличие туннельных контактов вблизи порога перколяции, классического и квантового размерного эффекта приводят к многообразию наблюдаемых эффектов. Взаимосвязь между микроструктурой и оптическими и проводящими свойствами является одним из наиболее интересных и важных аспектов физики нанокompозитных материалов.

К настоящему времени, несмотря на значительное число экспериментальных данных, отсутствуют надежные теоретические подходы. Обычно для описания электромагнитных свойств нанокompозитов физики используют различные феноменологические методы, разработанные еще в начале XX века [8] (приближение Максвелла - Гарнетта, Бруггемана). К сожалению, указанные методы не всегда дают количественные, а иногда и качественные результаты, согласующиеся с экспериментальными данными. Это объясняется грубыми масштабами усреднения, которые превышают характерные размеры областей формирования физических свойств. В связи с трудностями исследований аналитическими методами в последние годы осуществляются попытки математического моделирования свойств нанокompозитов. Математическое моделирование оказывается эффективным для интерпретации экспериментальных результатов, для поиска новых материалов, для разработки методов спектроскопии неоднородных материалов, а также в связи с общей задачей описания взаимодействия электромагнитного излучения с неоднородными средами.

Целью данной работы является первый этап численного моделирования свойств нанокompозитов металл-диэлектрик – расчет распределения электрических полей, проводимости и емкости элементарной ячейки таких материалов.

§ 1. Постановка задачи

1.1. Физическая постановка задачи

В работе выполнено математическое моделирование распределения потенциала электрического поля нанокompозита в пространственно двумерном приближении, и на его основе определены электрические свойства материала.

Рассмотрен нанокompозит, в котором металлические гранулы с размерами порядка нанометров хаотически расположены в диэлектрической матрице. Нанокompозит разделен на элементарные квадратные ячейки. Каждая ячейка заполнена диэлектриком, в котором находится определенное количество металлических гранул.

Принята следующая схема. Между двумя квадратными металлическими пластинами (расположенными на нижней и верхней границах ячейки) находится диэлектрик, в который помещено определенное количество металлических шариков радиусом R . Размер металлических гранул-включений составляет величину порядка 10^{-9} м (т.е. нанометры). Расстояние между

расположенными хаотически гранулами в диэлектрике имеет тот же порядок. Чаще всего будет принято, что в направлении x система является периодической с элементарной ячейкой $l_x * l_y$.

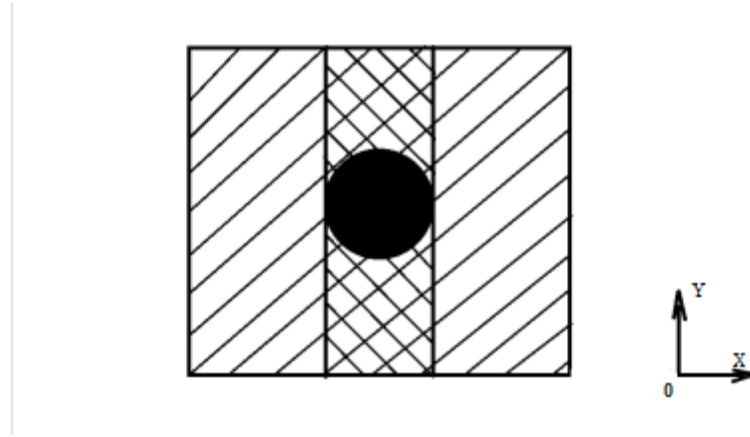


Рис. 2. Схема элементарной квадратной ячейки нанокompозита

На пластины ($y=0, y=l_y$) подана разность электрического потенциала U (далее – единичная). Вследствие малости расстояний между металлическими гранулами, гранулами и контактами (порядка нанометров) в диэлектрике возникает туннельный ток. Проводниками туннельного тока являются цилиндрические подобласти (в двумерном случае – полосы) радиусом R , опирающиеся на металлические гранулы или на одну из пластин и одну гранулу. Движение зарядов происходит вдоль осей таких цилиндров-носителей. При этом туннельное сопротивление обратно пропорционально экспоненте в степени, равной расстоянию между стоком и истоком (с коэффициентом), и для каждого отдельного носителя (цилиндра) может быть принято в первом приближении за константу:

$$\sigma = e^{-\alpha h}, \quad (1)$$

где σ – электропроводность в данном цилиндре, h – высота цилиндра, α – константа, значение которой может варьироваться (в зависимости от материала).

В совокупности все цилиндры-носители электрического тока и металлические гранулы образуют проводящую подобласть в диэлектрической ячейке. Вне этой подобласти ток отсутствует. При моделировании считались заданными высокая электропроводность металлического шарика и диэлектрическая проницаемость непроводящей подобласти.

В работе рассчитаны распределения электрического потенциала и напряженности электрического поля в ячейке нанокompозита, а также ее эффективные электрическая емкость и сопротивление для достаточно произвольных конфигураций и чисел включений металлических гранул. Получены зависимости значений эффективных электрических характеристик от

относительной концентрации металлических включений в ячейке нанокompозита.

1.2. Математическая постановка задачи

В качестве базовой математической модели для нахождения распределения электрического потенциала принята система уравнений Максвелла [9] для стационарного случая:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} = \vec{0}, \\ \operatorname{div} \vec{D} = 4\pi\rho_\varepsilon, \\ \operatorname{div} \vec{B} = 0, \end{cases} \quad (2)$$

где \vec{E} и \vec{H} – напряженности электрического и магнитного полей, \vec{D} и \vec{B} – электрическая и магнитная индукции, c – скорость света, \vec{j} – плотность тока, ρ_ε – плотность свободного электрического заряда. Далее будет использована σ – электропроводность.

Система уравнений (2) рассматривается в области G (элементарная квадратная ячейка нанокompозита).

К (2) добавляются следующие определяющие соотношения:

- закон Ома:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad (3)$$

- связь магнитных полей:

$$\vec{B} = \mu \vec{H},$$

- аналогичная связь электрических полей:

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}.$$

Внутри проводящей подобласти элементарной ячейки (то есть внутри цилиндров-носителей и металлических шариков) достаточно использовать только уравнение неразрывности и закон Ома. Уравнение неразрывности для заряда в нашем случае имеет вид:

$$\operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (4)$$

Из второго уравнения системы (2) следует существование скалярного электрического потенциала φ , а из (4) и (3) – уравнение типа Лапласа для его определения:

$$\vec{E} = \operatorname{grad} \varphi, \quad (5)$$

$$\operatorname{div}(\sigma \operatorname{grad} \varphi) = 0.$$

В диэлектрической непроводящей подобласти (внешней по отношению к проводящей подобласти элементарной ячейки) для определения электрического потенциала достаточно решить третье уравнение системы (2). Плотность распределения свободных зарядов во внешней подобласти диэлектрика равна нулю. После подстановки в него (5) получим уравнение

$$\operatorname{div}(\varepsilon \operatorname{grad} \varphi) = 0. \quad (6)$$

Для корректной постановки задачи необходимы граничные условия для электрического потенциала φ . На границах элементарной ячейки, соответствующих металлическим пластинам, заданы условия первого рода для электрического потенциала (значения потенциала). На остальных границах квадратной ячейки возможны два варианта условий: 1) условие второго рода $\frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = 0$, т.е. симметрия решения; 2) периодические граничные условия.

Следствием уравнения (4) является непрерывность нормальной составляющей плотности тока (в том числе и на общей границе проводящей и непроводящей подобластей), поэтому имеет место внутреннее (со стороны проводящей подобласти) граничное условие $\frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = 0$ на границе всех цилиндрических носителей электрического тока (условие непротекания тока).

Заключительной частью моделирования является нахождение эффективных электрических свойств элементарной ячейки (ее емкости и сопротивления) на основе полученного распределения электрического потенциала. Обе характеристики являются интегральными.

Для нахождения электрической емкости ячейки будем использовать выражение для электростатической энергии:

$$W = \frac{1}{8\pi} \iint_S \vec{E} \vec{D} dS = \frac{1}{8\pi} \iint_S \varepsilon \vec{E}^2 dS, \quad (7)$$

где интегрирование ведется по площади элементарной ячейки S .

После вычисления полной электростатической энергии элементарной ячейки ее эффективная электрическая емкость может быть найдена из стандартной формулы:

$$W = \frac{CU^2}{2}, \quad (8)$$

где C – искомая емкость системы, U – разность потенциалов между металлическими пластинами.

Для нахождения электрического сопротивления ячейки достаточно использовать равенство:

$$R = \frac{U}{I_y}, \quad (9)$$

где U – разность потенциалов между металлическими пластинами, I_y – полный туннельный ток, проходящий через элементарную ячейку перпендикулярно металлическим пластинам. В нашем случае полный ток равен:

$$I_y = \int_L \sigma E_y dL, \quad (10)$$

где интегрирование ведется вдоль границы на пересечении проводящей подобласти элементарной ячейки с одной из металлических пластин.

§ 2. Алгоритм численного решения задачи

2.1. Численное решение задачи

Для решения применен метод конечных элементов (МКЭ) [9–13]. Формально при этом задача решается в двух подобластях: уравнение (5) – в проводящей подобласти (металлические гранулы и цилиндры-носители), а уравнение (6) – в непроводящей подобласти диэлектрика. При этом должны быть учтены граничные условия, сформулированные выше. Далее вычисляются интегральные электрические характеристики композита (емкость и сопротивление). Результатом работы программы являются также распределения электрического потенциала внутри элементарной квадратной ячейки. Для численного решения задачи создана программа на языке программирования C++.

2.2. Задание конфигурации элементарной ячейки нанокompозита

Первый этап при решении задачи и в работе рассматриваемой программы - этап задания конфигурации ячейки нанокompозита. Задание конфигурации осуществлялось описанным ниже способом. Количество металлических включений, их радиус, а также размер ячейки заданы пользователем в виде констант перед запуском программы. Вся квадратная ячейка поделена на n^2 вложенных непересекающихся квадратов (где $n \in \mathbb{N}$). Длины сторон всех квадратов одинаковы и равны $2R$ (где R – радиус каждой из металлических гранул-включений). Затем случайным образом программа разбрасывает гранулы-включения среди вложенных квадратов. Для этого в программе сгенерировано случайное натуральное число $n_{square}, n_{square} \in [1, n^2]$, которое служит порядковым номером одного из квадратов. Результатом является принадлежность гранулы соответствующему квадрату, причем центр гранулы (центр круга) совпадает с центром квадрата. В каждый из квадратов может попасть не более одной гранулы, поэтому если порядковый номер одного квадрата случайным образом сгенерирован второй раз, то генератор случайных чисел запускается повторно. После завершения процесса конфигурация ячейки полностью задана. Таким образом, каждая гранула задается положением центра $C(x_1, x_2)$ и значением радиуса R .

2.3. Разбиение области на конечные элементы

Для триангуляции области решения задачи (ячейки нанокompозита) использован генератор сеток Gridder2D [14]. При тестировании для более удобного сравнения результатов использована процедура разбиения области на простейшие треугольные конечные элементы (КЭ): прямоугольные треугольники одинаковой площади.

При решении общей задачи использованы конечные элементы первого или второго порядка, т.е. в качестве базовых КЭ взяты два типа треугольников:

- 1) с тремя контрольными узлами в вершинах;
- 2) с шестью контрольными узлами: в каждом треугольнике 3 узла расположены в вершинах и еще 3 – в центрах каждой из сторон.

Для каждого КЭ программным образом определено, к какой подобласти он принадлежит (металлическим гранулам, цилиндрам-носителям или же непроводящей диэлектрической подобласти). На основе этого количественно заданы электрические характеристики каждого конечного элемента (тензор электропроводности или значение диэлектрической проницаемости для элемента).

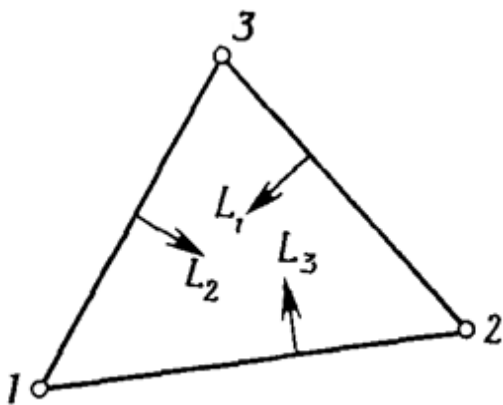


Рис. 3. Треугольный конечный элемент первого порядка

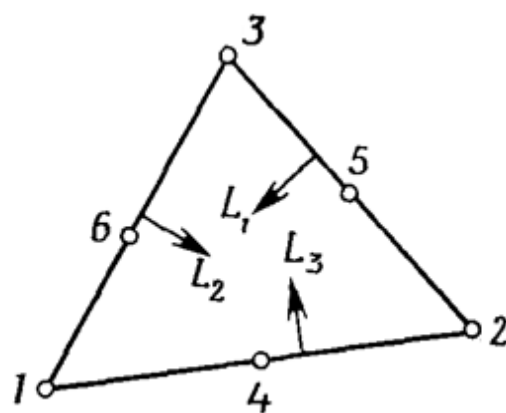


Рис. 4. Треугольный конечный элемент второго порядка

2.4. Алгоритм программного определения тензора электропроводности для каждого КЭ

Конечно-элементная сетка строится на первом этапе решения путем разбиения области на конечные элементы (треугольники) без явного выделения отдельных физических подобластей. Под ними понимаются:

- металлические гранулы-включения (характеризуются диагональным тензором электропроводности σ_{ij} второго ранга, записанным в глобальной системе координат и полученным путем умножения диагонального единичного тензора второго ранга на высокое значение σ в гранулах);
- цилиндры-носители туннельного тока (характеризуются тензором электропроводности σ_{ij} второго ранга, записанным в глобальной системе координат);
- непроводящая диэлектрическая подобласть (характеризуется величиной диэлектрической проницаемости ε).

Для задания координат узлов и центров треугольников, векторов и тензоров использованы системы координат двух типов. Глобальная декартовая

система координат Ox введена изначально и жестко привязана к левому нижнему углу элементарной ячейки. Ее оси идут вдоль сторон ячейки. Помимо глобальной системы координат при рассмотрении каждого из цилиндров - носителей тока необходимо определить локальную декартовую систему координат $Ox'y'$, связанную с рассматриваемым цилиндром. Начало O' каждой такой локальной системы расположено в центре одной из торцевых окружностей соответствующего ей цилиндра (в центре отрезка, в который вырождается окружность в двумерном случае), а ось y' параллельна его оси.

После разбиения области на конечные элементы без явного выделения отдельных физических подобластей необходимо программным образом определить, к какой из них относится тот или иной конечный элемент (то есть задать тензор электропроводности, если он попадает в проводящую подобласть ячейки, или же значение диэлектрической проницаемости, если он попадает в непроводящую подобласть).

На первом этапе проверяется принадлежность конечных элементов металлическим гранулам-включениям по координатам центра треугольника. Если центр конечного элемента попадает в металлическую гранулу, то данному треугольнику задается соответствующий диагональный тензор электропроводности, его электрические характеристики задаются полностью, так что он исключается из дальнейшего рассмотрения. Это определяется высоким значением электропроводности σ в гранулах, много большим задаваемой (1).

На втором этапе треугольники, не попавшие ни в одну из металлических гранул, рассматриваются на предмет принадлежности каждому из цилиндров-носителей электрического тока. Алгоритм данного этапа схож с предыдущим.

Сначала проводится проверка на принадлежность конечных элементов цилиндрам, опирающимся с двух сторон на две гранулы.

Простейшим алгоритмом проверки принадлежности конечного элемента цилиндру-носителю являются пересчет координат центра треугольника $C(x_c, y_c)$ из глобальной системы координат в локальную $C'(x'_c, y'_c)$ и последующая проверка выполнения соответствующих условий. В случае их выполнения считается, что данный треугольник принадлежит рассматриваемому цилиндру-носителю, и к его тензору электропроводности добавляется значение этого тензора в точках данного цилиндра. Как указано в п.1 §1, тензор электропроводности внутри каждого из цилиндров-носителей постоянен. В локальных координатах, связанных с конкретным цилиндром, он имеет вид:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & e^{-\alpha h} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Вид тензора объясняется тем, что туннельный ток в каждом из цилиндров распространяется строго в направлении оси цилиндра (в направлении оси y'), его электропроводность задана формулой (1).

Перед тем, как добавить к тензору электропроводности конечного элемента тензор электропроводности цилиндра-носителя, которому принадлежит рассматриваемый треугольник, необходимо определить тензор в глобальной системе координат.

Все тензоры, векторы и координаты точек в программе преобразуются из локальной системы координат, связанной с цилиндром, в единую глобальную систему с помощью матрицы преобразований A , задающей связь ортогональных базисов в глобальной и локальной системах координат. В общем виде матрица A может быть записана в виде:

$$A = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix},$$

где φ – угол поворота векторов глобального базиса, необходимый для совмещения их направлений с направлениями репера локальной системы координат. Используя матрицу A , можно легко записать связь между координатами центра треугольника в глобальной системе координат $C(x_c, y_c)$ и локальной $C'(x'_c, y'_c)$, связанной с цилиндром-носителем:

$$\begin{pmatrix} x'_c \\ y'_c \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_c - O'_x \\ y_c - O'_y \end{pmatrix},$$

где O'_x, O'_y – координаты точки O' (начала локальной системы координат) в глобальной системе координат.

Также можно записать выражение для тензора электропроводности цилиндра-носителя туннельного тока в глобальной системе координат:

$$\sigma_{ij} = A^T \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & e^{-\alpha h} \end{pmatrix} A.$$

Далее проводится проверка на принадлежность конечных элементов цилиндрам, опирающимся с одной стороны на металлическую пластину, а с другой – на гранулу. Для каждой гранулы есть два таких цилиндра. При попадании центра треугольника в цилиндр к его тензору электропроводности добавляется тензор электропроводности цилиндра-носителя (11). В данном случае не требуется перевода из локальной системы координат в глобальную, т.к. поворот базиса при переходе к локальным координатам не происходит (все подобные цилиндры расположены вертикально).

Результатом второго этапа процесса ассоциирования каждого конечного элемента с конкретной физической подобластью ячейки является определение тензора электропроводности для каждого треугольника, принадлежащего какому-то из цилиндров-носителей. При этом в случае обнаружения цилиндра-носителя, которому принадлежит рассматриваемый конечный элемент, не происходит переход к рассмотрению следующего треугольника, а выполняется проверка всех остальных цилиндров на предмет его принадлежности к последним. В итоге конечное значение тензора электропроводности в

рассматриваемом элементе есть сумма его значений в каждом из цилиндрических носителей туннельного тока, которым данный треугольник принадлежит.

На третьем этапе все оставшиеся конечные элементы, которые не отнесены ни к одному из цилиндрических носителей или ни к одной из гранул включений, ассоциируются с непроводящей диэлектрической подобластью области, и для каждого из них задается значение диэлектрической проницаемости.

2.5. Алгоритм задания внутренней и внешней границ элементарной ячейки нанокompозита

Для корректной работы программы создана необходимая процедура определения внутренней и внешней границ элементарной ячейки нанокompозита. Внешнюю границу представляют собой две грани ячейки, соответствующие металлическим пластинам с заданным значением электрического потенциала, и две боковые грани. Внутренняя граница представляет собой границу проводящей и непроводящей подобластей внутри ячейки. На всей внутренней границе задано внутреннее (со стороны проводника) граничное условие, поэтому ее необходимо определить до начала работы основной части программы.

2.6. Реализация алгоритма МКЭ в данной задаче

В программе использованы элементы первого и второго порядка. Общий алгоритм основан на методе Галеркина. Перед началом работы программы пользователь может выбрать любой из двух вариантов элементов.

Рассмотрим систему независимых базисных функций φ_n (функций формы КЭ), где $n \in 1 \dots N$ (N – число узлов сетки). Каждая функция φ_n соответствует своему узлу сетки. В этом узле ее значение равно единице, а в остальных узлах треугольников, имеющих данную точку своей вершиной или лежащей на общей стороне треугольников в случае элементов второго порядка, – нулю. Вне этих элементов φ_n тождественно равна нулю. Искомое решение представляем в виде линейной комбинации базисных функций:

$$\varphi(x, y) = \sum_{n=1}^N a_n \varphi_n(x, y), \quad (12)$$

где a_n – неизвестные коэффициенты (значение потенциала в точке n).

Для вычисления функций формы элементов удобна так называемая естественная система координат [9 – 13], определяемая тремя относительными координатами L_1, L_2 и L_3 , изображенными на рис. 4,а. Каждая координата для данного треугольного элемента представляет собой отношение расстояния от выбранной точки до одной из сторон s треугольника к высоте h , опущенной на эту сторону из противоположной вершины (рис. 4,б). Величина L_1 изменяется в пределах от нуля до единицы ($0 \leq L_1 \leq 1$), как и L_2, L_3 . На рис. 4,в показаны

линии, вдоль которых координата L_1 постоянна. Каждая из линий параллельна стороне, от которой измерена L_1 .

Описанные координаты называются L -координатами. Эти три величины не являются независимыми и связаны соотношением $L_1 + L_2 + L_3 = 1$.

С помощью приведенной естественной системы координат легко получить, например, функции формы для квадратичного треугольного элемента:

$$\varphi_1 = L_1(2L_1 - 1);$$

$$\varphi_2 = L_2(2L_2 - 1);$$

$$\varphi_3 = L_3(2L_3 - 1);$$

$$\varphi_4 = 4L_1L_2;$$

$$\varphi_5 = 4L_2L_3;$$

$$\varphi_6 = 4L_1L_3.$$

В [9 - 13] приведены формулы перехода от L_1, L_2, L_3 к (x, y) и обратно.

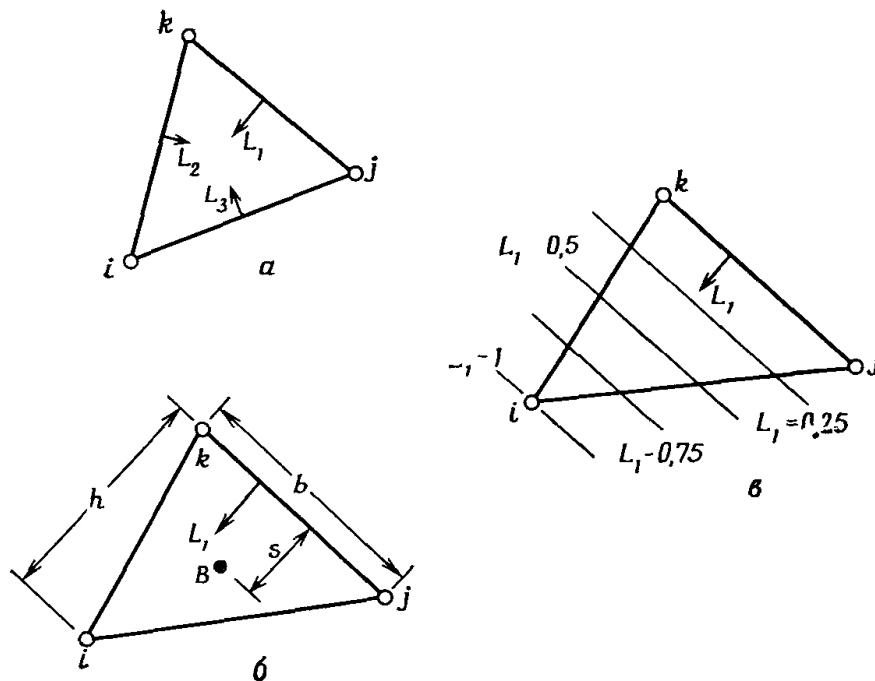


Рис. 5. Естественная система координат для треугольного элемента

Еще одним преимуществом использования L -координат является существование интегральных формул [9 - 13], которые упрощают вычисление интегралов вдоль сторон элемента и по его площади:

$$\int_L L_1^a L_2^b dL = \frac{a!b!}{(a+b+1)!} L, \quad (13)$$

$$\int_L L_1^a L_2^b L_3^c dS = \frac{a!b!c!}{(a+b+c+2)!} 2S, \quad (14)$$

где L – отрезок, соединяющий два узла рассматриваемой стороны элемента (его длина – в правой части), S – область, занимаемая соответствующим элементом (его площадь – в правой части).

После того, как заданы электрофизические свойства каждого из конечных элементов, можно непосредственно реализовать МКЭ и найти распределение потенциала φ в ячейке нанокompозита.

Как отмечено в п.2 §1, необходимо решить два уравнения типа Лапласа в разных физических подобластях, имеющих общую границу. В проводящей подобласти ячейки нанокompозита решается уравнение (5), где $\sigma = \sigma_{ij}$ – тензор электропроводности второго ранга. В непроводящей подобласти элементарной ячейки нанокompозита решается уравнение (6), где ε – величина диэлектрической проницаемости диэлектрика. Процедура решения облегчается тем, что уравнения (5) и (6) могут быть заменены одним уравнением:

$$\operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} \varphi) = 0, \quad (15)$$

рассматриваемым на всей ячейке, где $\lambda = \lambda_{ij}$ – тензор второго рода. Значение λ_{ij} в точках проводящей подобласти совпадает со значением $\sigma = \sigma_{ij}$ в тех же точках. Значение λ_{ij} в точках непроводящей подобласти:

$$\lambda_{ij} = \operatorname{const} = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}.$$

Далее решается уравнение (15) с помощью МКЭ с учетом всех внешних и внутренних граничных условий на электрический потенциал.

Рассмотрим предварительно отдельно проводящую и непроводящую подобласти.

Внешняя граница проводящей подобласти является кусочно-гладкой замкнутой (вообще говоря, многосвязной) кривой с заданными условиями:

- на части границы, соответствующей металлическим пластинам, задано значение электрического потенциала φ ;

- на боковых границах ячейки нанокompозита задано граничное условие второго рода $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$ или периодическое граничное условие. В

последнем случае принято, что боковые границы соприкасаются, поэтому с точки зрения процедуры решения считалось, что они лежат внутри рассматриваемой подобласти;

- на части границы, соответствующей внутренней границе ячейки, т.е. на части общей кривой проводящей и непроводящей подобластей, задано условие второго рода $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$, т.е. нулевая компонента плотности тока.

Решение такой задачи определяется однозначно, оно дает распределение электрического потенциала в проводящей подобласти ячейки.

Аналогичной является и внешняя граница непроводящей подобласти. На ней заданы условия, повторяющие первые из двух условий, приведенных выше для проводящей подобласти. В третьем есть отличие:

- на части границы, соответствующей внутренней границе ячейки, т.е. части границ проводящей и непроводящей подобластей, значение потенциала φ известно из решения задачи в проводящей подобласти в силу его непрерывности при переходе через границу.

Таким образом, на всей внешней границе непроводящей диэлектрической подобласти заданы граничные условия первого рода, поэтому решение такой задачи определяется однозначно.

Для реализации метода конечных элементов необходима слабая постановка задачи, которая может быть получена стандартным методом [9 - 13] применительно к уравнению (15):

$$0 = \iint_S v \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} \varphi) dS = \int_L \lambda v \frac{\partial \varphi}{\partial n} dL - \iint_S \lambda(\Delta v, \Delta \varphi) dS = - \iint_S \lambda(\Delta v, \Delta \varphi) dS,$$

где v – произвольная функция, равная нулю на той части границы, на которой задано граничное условие первого рода, L – внешняя боковая граница области, \vec{n} – вектор нормали к этой границе. Интеграл по границе подобласти равен нулю в силу свойств функций v и φ .

Далее обычным образом получим систему линейных алгебраических уравнений метода конечных элементов (в форме Бубнова–Галеркина). Для этого в слабую постановку подставим представление решения (12), а в качестве функции v возьмем произвольную φ_k , соответствующую узлу сетки, не принадлежащему двум внешним металлическим пластинам с заданным электрическим потенциалом.

Окончательно получим выражение:

$$\iint_S \lambda \operatorname{grad} \left(\sum_{n=1}^N a_n \varphi_n(x, y) \right) \operatorname{grad}(\varphi_k) dS = 0, \quad (16)$$

которое задает систему линейных алгебраических уравнений с неизвестными a_n . В результате ее решения представление (12) определяется однозначно, так что распределение потенциала во всей ячейке нанокompозита найдено.

С математической точки зрения можно объединить эти две системы линейных алгебраических уравнений в одну систему вида (16) и решать только ее. Этот подход и реализован в разработанной программе.

Опишем вид системы линейных алгебраических уравнений после применения алгоритма Галеркина. Размерность указанной системы – $K \times N$, где N – общее число базисных функций (точек сетки), а K – число базисных функций, которые соответствуют узлам сетки, не принадлежащим двум внешним граням–пластинам с заданным потенциалом. Правая часть данной системы линейных алгебраических уравнений нулевая. Каждый коэффициент c_{kn} системы соответствует паре узлов конечно-элементной сетки с номерами n и

k в глобальной нумерации, где $n \in [1, N]$, а $k \in [1, K]$. Коэффициент c_{kn} может быть ненулевым только в случае, когда узлы соседние, т.е. принадлежат одному треугольнику. Если оба узла с номерами n и k одновременно расположены внутри одной из подобластей: проводящей, непроводящей или же на общей границе проводящей и непроводящей подобластей, на которой задано условие $\frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = 0$ со стороны проводящей части, – то соответствующий коэффициент имеет вид:

$$c_{kn} = \iint_S (\lambda \text{grad}(\varphi_k)) \text{grad}(\varphi_n) dS. \quad (17)$$

По этой же формуле определен коэффициент для двух узлов, если узел k принадлежит непроводящей подобласти, а узел n – общей границе проводящей и непроводящей подобластей. Симметричный же коэффициент равен нулю.

Если узел n попадает на часть внешней границы, соответствующей пластинам с заданным потенциалом, то коэффициент также вычисляется по (17). Учитывалось, что значение коэффициента a_n системы задано (значение потенциала в узле n), следовательно, можно перенести все слагаемые системы такого вида (произведение заданного в узле n потенциала на соответствующий ему коэффициент c_{kn}) в правую часть. В итоге получается искомая система линейных алгебраических уравнений размера $K \times K$ с ненулевой правой частью

$$Au = b, \quad (18)$$

где $u = [u_1, u_2, \dots, u_k]^T$ – вектор-столбец потенциалов в тех узлах, где потенциал не задан граничными условиями и требует определения.

Теперь для нахождения решения φ достаточно решить полученную систему линейных алгебраических уравнений и получить значения электрического потенциала во всех узлах ячейки. Для решения системы линейных алгебраических уравнений использован пакет «t90» В.И. Турчанинова, предназначенный для решения систем линейных алгебраических уравнений с несимметричной разреженной матрицей коэффициентов. Комплекс «t90» включает в себя две основные операции:

- 1) нахождение грубого, но дешевого LU -разложения матрицы A :
 $A \approx LU$;
- 2) итерационное решение уравнения $Ax = b$ методом простой итерации с регуляризатором LU (т.е. по двухслойной схеме $LU(x_{n+1} - x_n) + Ax_n = b$).

Описанный пакет многократно тестировался и использовался в различных исследованиях, поэтому достаточно было только проверить правильность обмена данными программы с пакетом и согласование формата этих данных.

Следует отметить, что матрица A всегда несимметрична, так как для некоторых пар узлов (один из которых принадлежит границе проводящей и непроводящей подобластей) с номерами n и k в глобальной нумерации

коэффициент c_{kn} не равен коэффициенту c_{nk} . Это вытекает из изложенного алгоритма вычисления коэффициентов в зависимости от положения узлов n и k .

2.7. Особенности программной реализации МКЭ

Для реализации описанного алгоритма удобным способом в программе созданы вспомогательные векторы и матрица, позволяющие описать структуру сетки и расположение проводящей и непроводящей подобластей. После составления вспомогательных матриц и векторов реализован алгоритм Бубнова–Галеркина. Матрица системы (18) сильно разрежена, поэтому в памяти хранились только ненулевые элементы. Для этого использован так называемый Йельский формат [15].

2.8. Вычисление эффективных электрических характеристик нанокompозита

В результате решения системы (18) можно определить значение электрического потенциала в любой точке сетки. Далее необходимо найти среднюю эффективную электрическую емкость и сопротивление ячейки нанокompозита для заданной конфигурации и числа металлических включений в ней.

В зависимости от выбранного пользователем порядка конечных элементов дальнейшие вычисления в программе различны. При использовании метода первого порядка вектор напряженности электрического поля \vec{E} постоянен для каждого треугольника. Если же используются конечные элементы второго порядка, то вектор напряженности электрического поля изменяется линейным образом внутри каждого элемента. Из (6) и (12) следует представление для вектора напряженности электрического поля в элементарной ячейке:

$$\vec{E} = \sum_{n=1}^N a_n \text{grad} \varphi_n.$$

Электрическая емкость вычисляется при помощи (7), (8) и (9) для суммарной электростатической энергии. В проводящей подобласти элементарной ячейки диэлектрическая проницаемость считалась равной единице, а в непроводящей ее значение задано как для диэлектрика. В программе интеграл (9b) вычислен по формуле:

$$W = \frac{1}{8\pi} \iint_S \varepsilon \vec{E}^2 dS = \frac{1}{8\pi} \sum_{i=1}^M \varepsilon_i \iint_{S_i} \vec{E}^2 dS, \quad (19)$$

где M – общее число элементов. При использовании конечных элементов первого порядка, благодаря тому, что вектор напряженности поля постоянен для каждого конечного элемента, формула (19) может быть упрощена.

При вычислении интегралов использована формула (14), которая сильно упростила вычисления. После вычисления суммарной электростатической

энергии ячейки нанокompозита программа вычисляла среднюю эффективную электрическую емкость по формуле (8).

Электрическое сопротивление ячейки вычислялось с помощью (9) и (10). Сначала выбиралась одна из металлических пластин, через нее рассчитывался суммарный ток по формуле (10), имевшей в данном случае вид:

$$\vec{I} = \int_L \sigma \vec{E} dL = \sum_{i=1}^K \sigma_i \int_{L_i} \vec{E}_i dL, \quad (21)$$

где K – число выбираемых конечных элементов, L – ребро i -го конечного элемента, принадлежащего поверхности пластины. В случае использования элементов первого порядка (21) может быть упрощена.

При вычислении интегралов (21) и (22) в программе использована формула (13). После описанных вычислений можно посчитать эффективное среднее электрическое сопротивление по (9).

§ 3. Результаты и их анализ

3.1. Тестирование работы программы

Для тестирования программы выполнен ряд стандартных тестов.

При построении зависимостей эффективного электрического сопротивления и емкости ячейки проведена проверка сходимости решения на различных сетках и при задании различных значений используемых постоянных. Проверена ограниченность графика емкости сверху значением емкости для ячейки, полностью заполненной диэлектриком с заданным значением диэлектрической постоянной. Учтено, что оба графика (емкости и сопротивления) должны асимптотически стремиться к нулю при увеличении относительной концентрации металлических гранул в ячейке.

Кроме описанных выше проведены различные проверки правильности работы всех компонент программы. Основным же тестом для всей программы в целом является проверка правильности решения уравнения Лапласа. Для этого выбрано тестовое решение $\omega = \text{Re}((x+iy)^5)$.

Уравнение Лапласа решено в квадратной ячейке с единичной стороной, на всех четырех границах заданы граничные условия первого рода, соответствующие точному решению. Для всех расчетов использована стандартная сетка из прямоугольных треугольников, генерируемая внутри программы. Вся область разделена на равные квадраты, которые далее поделены диагоналями (параллельными друг другу) на прямоугольные треугольники.

Для проверки правильности решения уравнения Лапласа в программе проведены расчеты описанной задачи на различных сетках. После проведения вычислений полученный результат сравнивался с точным решением с помощью равномерной и квадратичной норм. Точное и приближенное решения

сравнивались в центрах конечных элементов (в центре масс каждого треугольника).

Для более тщательного тестирования работы программы проверено не только точное решение, но и значение градиента во всех элементах. Проведены сравнения значений численного и точного решений в центре каждого элемента (в центре масс каждого треугольника) в тех же нормах, что и само решение. Для каждой компоненты градиента (x и y) ошибка посчитана отдельно.

Результаты тестов показали, что при дроблении сетки решение (и его производная) сходится к точному решению во всех использованных нормах.

3.2. Результаты расчетов

Результатом проведенных расчетов является распределение электрического потенциала в каждой точке сетки области.

А) Приведем наиболее наглядные графические изображения потенциального поля в элементарной ячейке нанокompозита для различного числа металлических включений и их конфигураций.

Представим решение задачи, полученное с помощью конечных элементов первого порядка. При этом на боковых границах области брались граничные условия $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$. Основные параметры при решении задачи заданы следующими:

- длина стороны ячейки берется единичной,
- шаг сетки: $h = 0.01$,
- электропроводность металлических включений: $\sigma = 100$,
- диэлектрическая проницаемость: $\varepsilon = 20$,
- разность потенциалов на пластинах равна единице (на нижней пластине потенциал равен нулю, а на верхней – единице),
- $\alpha = 1$ (коэффициент в формуле (1)).

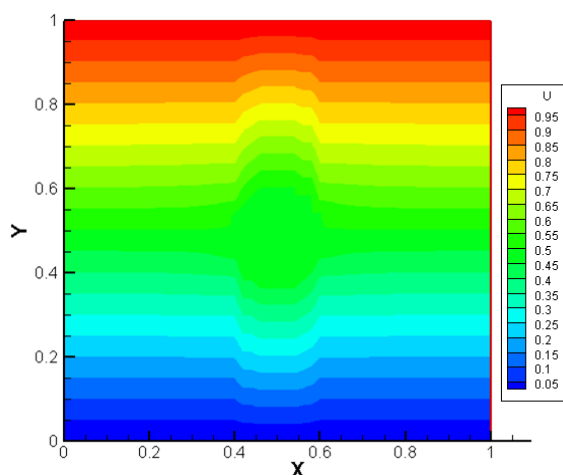


Рис. 6. Одно включение, $R=0.1$

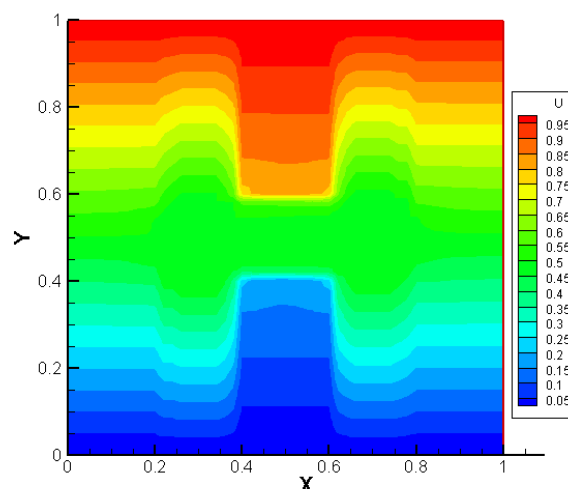
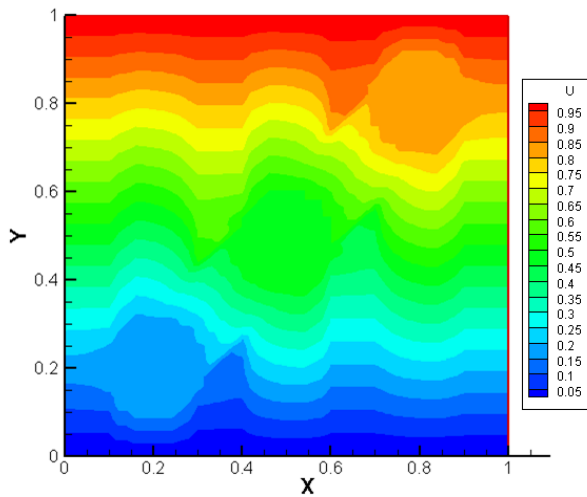
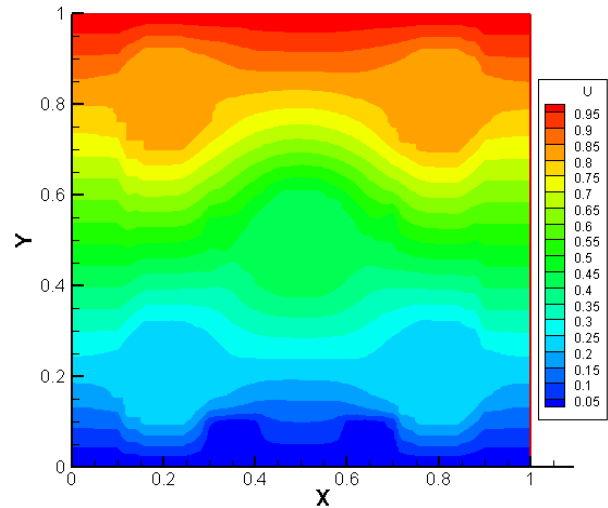
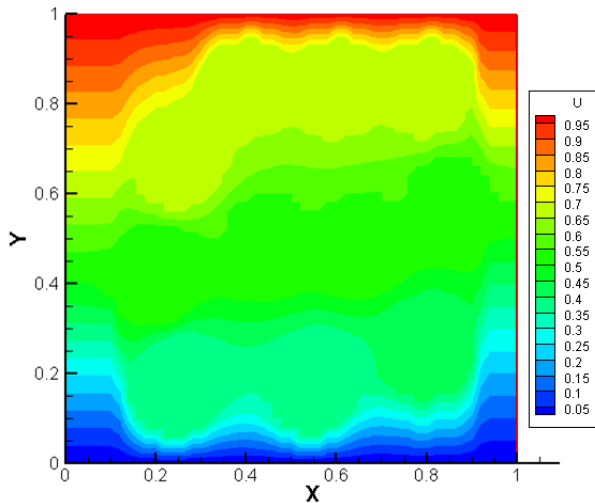
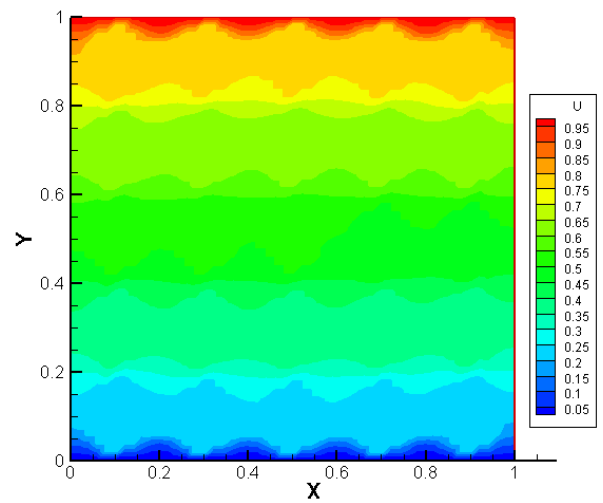


Рис. 7. Два включения, $R=0.1$

Рис. 8. Три включения, $R=0.1$ Рис. 9. Пять включений, $R=0.1$ Рис. 10. Одиннадцать включений, $R=0.1$ Рис. 11. Двадцать пять включений, $R=0.1$

Рассмотрим далее полученные поля потенциала в ячейке нанокompозита для различного числа металлических включений и их конфигураций в случае конечных элементов второго порядка.

В программе возможны два варианта задания граничных условий на боковых границах элементарной ячейки: 1) условие $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$, 2) периодические условия. Расчеты проведены для обоих вариантов, для удобства и наглядности сравнения результаты приведены для случая одинакового числа металлических включений и их конфигураций, но различных граничных условий.

Основные параметры при решении задачи заданы такими же, как в случае элементов первого порядка, со следующими изменениями:

- шаг сетки: $h = 0.02$,
- электропроводность металлических включений: $\sigma = 1000$,
- диэлектрическая проницаемость: $\varepsilon = 100$.

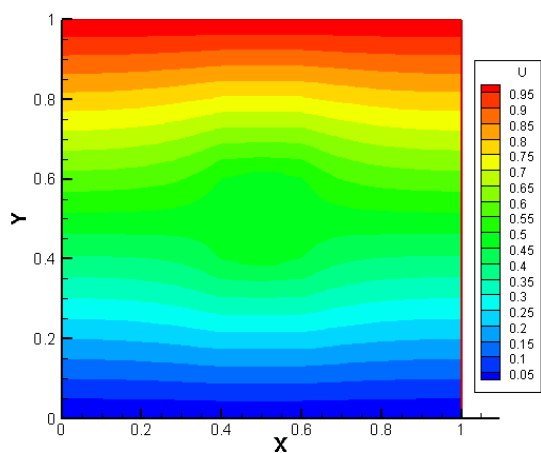


Рис. 12. Одно включение, $R=0.1$, ГУ: $\frac{\partial \varphi}{\partial n}=0$

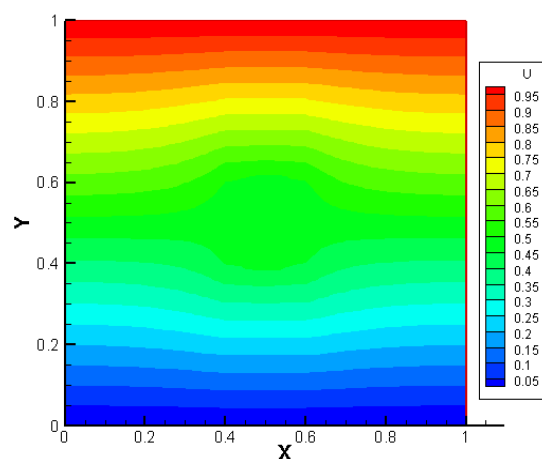


Рис. 13. Одно включение, $R=0.1$, ГУ: периодические

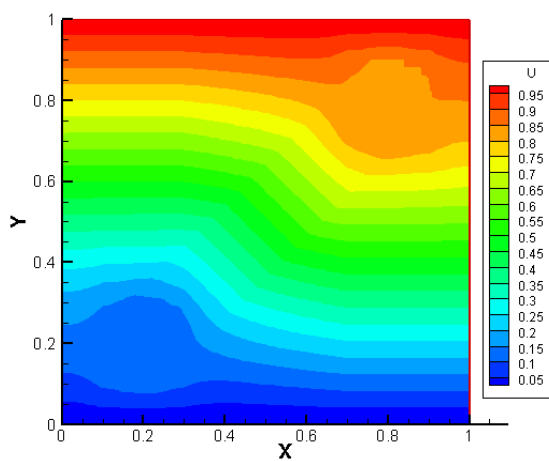


Рис. 14. Два включения, $R=0.1$, ГУ: $\frac{\partial \varphi}{\partial n}=0$

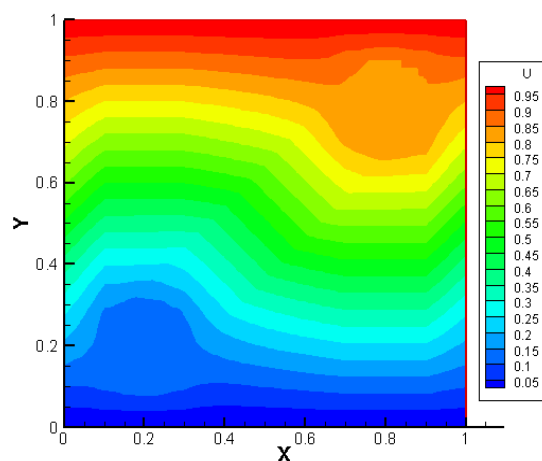


Рис. 15. Два включения, $R=0.1$, ГУ: периодические

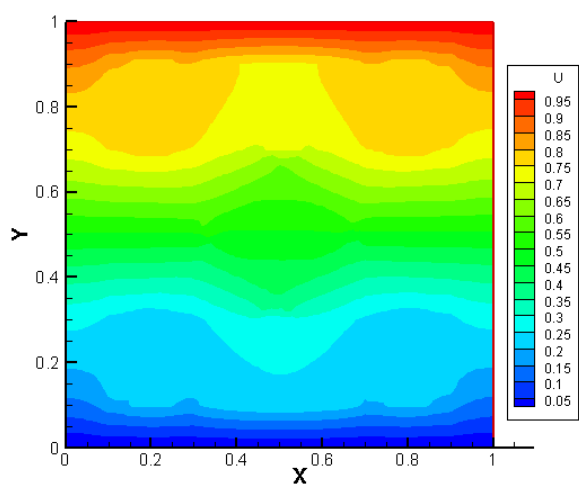


Рис. 16. Четыре включения, $R=0.1$, ГУ: $\frac{\partial \varphi}{\partial n}=0$

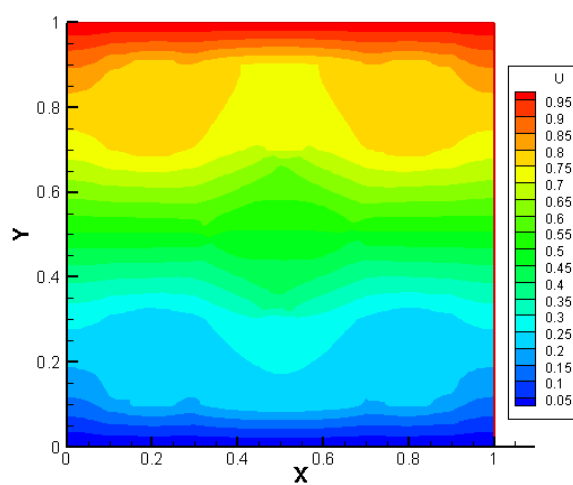


Рис. 17. Четыре включения, $R=0.1$, ГУ: периодические

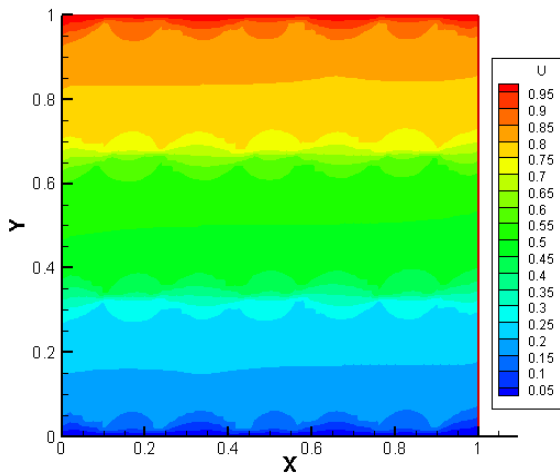


Рис. 18. Девять включений, $R = 0.16$, ГУ: $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$

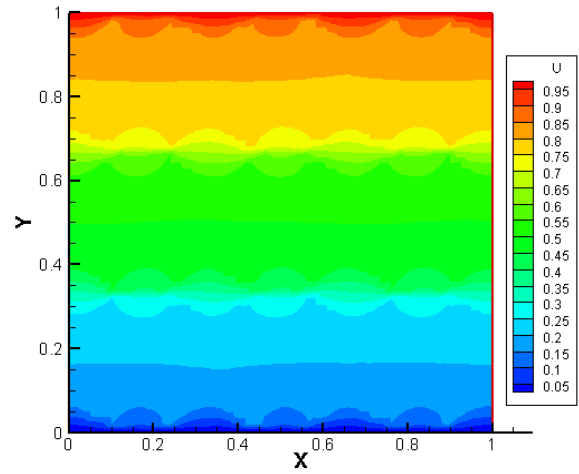


Рис. 19. Девять включений, $R = 0.16$, ГУ: периодические

Из проведенных расчетов видно, что при изменении коэффициента в формуле (1) характер распределения потенциала в ячейке не меняется. Задание различных граничных условий на боковых границах ячейки не меняет характера распределения потенциала в центре ячейки, но может сильно менять его на самих границах. При увеличении количества металлических гранул-включений и уменьшении их радиуса (т.е. при увеличении относительной концентрации металлических гранул в ячейке) значения потенциала вдоль одной горизонтали становятся все более близки друг к другу.

Б) После вычисления потенциала φ во всех точках ячейки возможен расчет эффективного электрического сопротивления и емкости по (19) и (20).

Эффективное электрическое сопротивление и емкость ячейки рассчитаны в зависимости от относительной концентрации металлических гранул ro , которая определена выражением

$$ro = \frac{s_{sum}}{S}, \quad (22)$$

где s_{sum} – суммарная площадь гранул, а S – площадь ячейки:

$$s_{sum} = \sum_{i=1}^z s_i,$$

s_i – площадь i -ой металлической гранулы, z – количество гранул в ячейке.

Ниже приведены графики емкости и сопротивления в зависимости от относительной концентрации гранул для различных конфигураций ячейки.

Для начала рассмотрены все графики в случае использования элементов первого порядка. Для всех графиков в этом случае электропроводность включений $\sigma = 100$, а диэлектрическая проницаемость $\varepsilon = 20$. Значение коэффициента α для каждого графика приведено отдельно.

На всех графиках приняты следующие обозначения:

- R – сопротивление ячейки,

- C – емкость ячейки,
- ro – относительная концентрация гранул (34),
- r – радиус гранул (одинаковый для гранул в рассматриваемой конфигурации; взято иное обозначение, чтобы не было путаницы с сопротивлением).

Расчеты проведены с использованием различных сеток: при уменьшении радиуса гранул взята более подробная сетка.

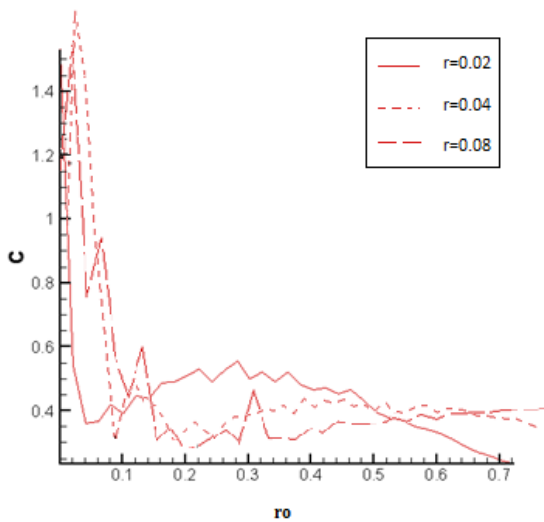


Рис. 20. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

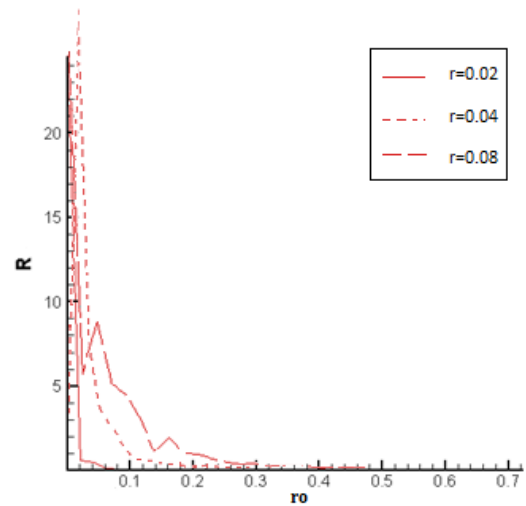


Рис. 21. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

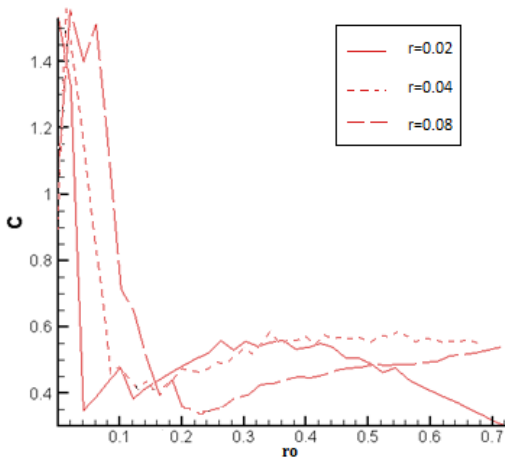


Рис. 22. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 1$

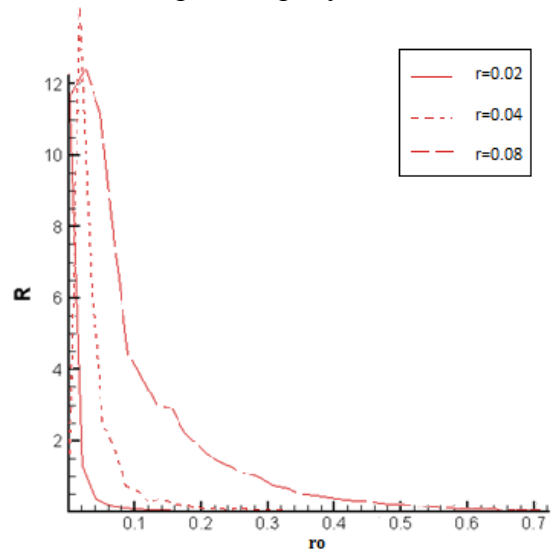


Рис. 23. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 1$

Как видно из приведенных графиков, при использовании элементов первого порядка электрическая емкость растет при увеличении относительной концентрации, начиная с какого-то значения последней, что не соответствует

физике задачи. Для получения более точных и физически обоснованных результатов использованы элементы второго порядка.

Далее приведены графики электрической емкости и сопротивления при использовании конечных элементов второго порядка. Для всех случаев электропроводность включений $\sigma=1000$, а диэлектрическая проницаемость $\varepsilon=100$. Значение коэффициента α для каждого графика приведено отдельно.

Все обозначения на графиках остались прежними.

Расчеты проведены с использованием различных сеток: при уменьшении радиуса гранул взята более подробная сетка.

Сначала приведены графики емкости и сопротивления, которые получены в случае задания на боковых границах ячейки условия $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$.

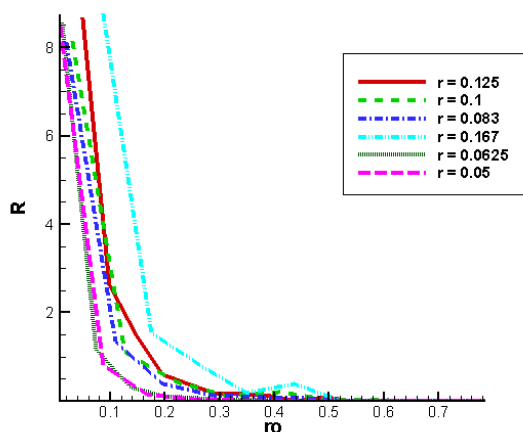


Рис. 24. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 1$

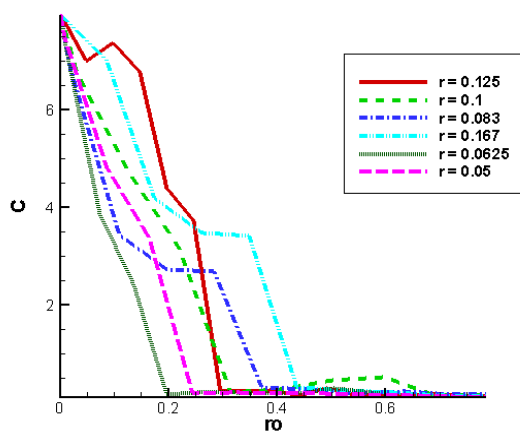


Рис. 25. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 1$

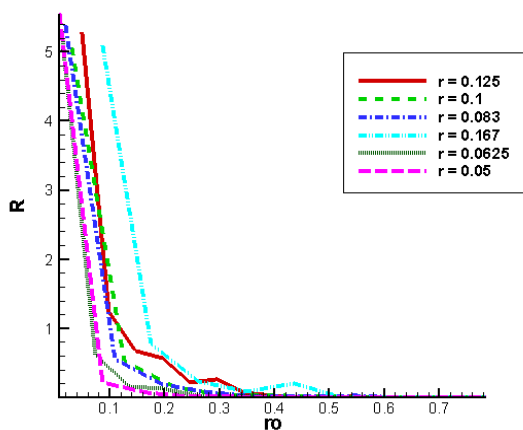


Рис. 26. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

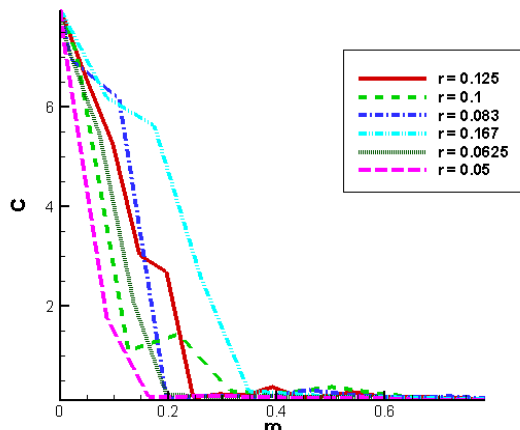


Рис. 27. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

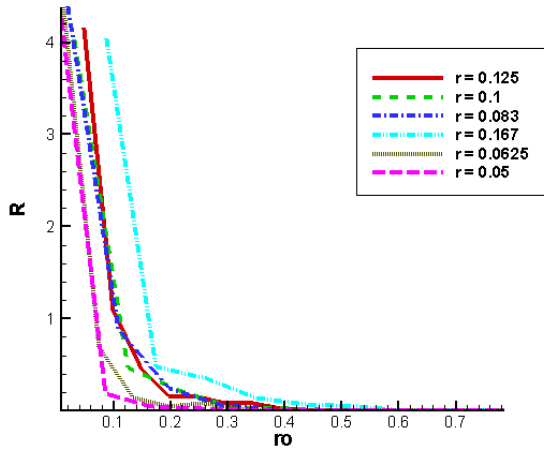


Рис. 28. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 0.0001$

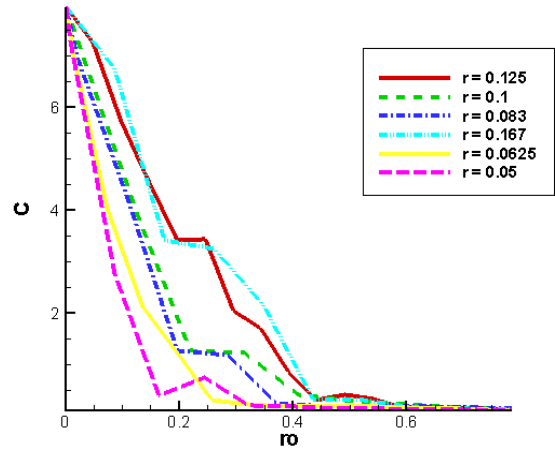


Рис. 29. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 0.0001$

Далее приведены графики емкости и сопротивления при задании на боковых границах ячейки периодических граничных условий.

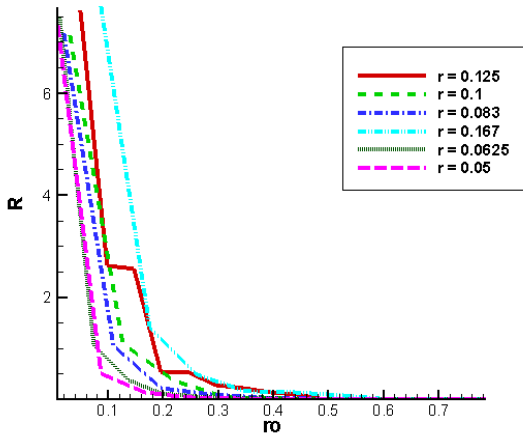


Рис. 30. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 1$

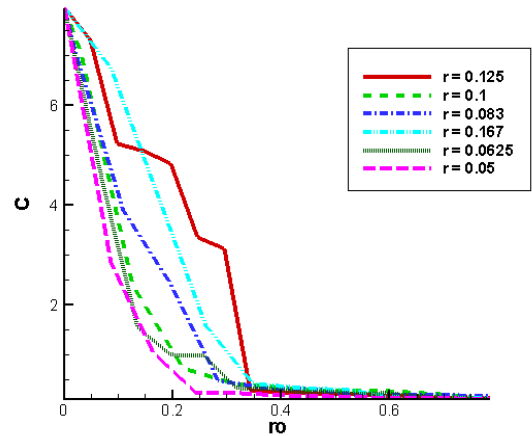


Рис. 31. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 1$

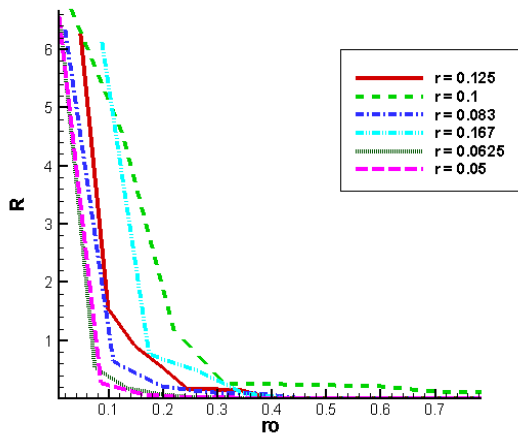


Рис. 32. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

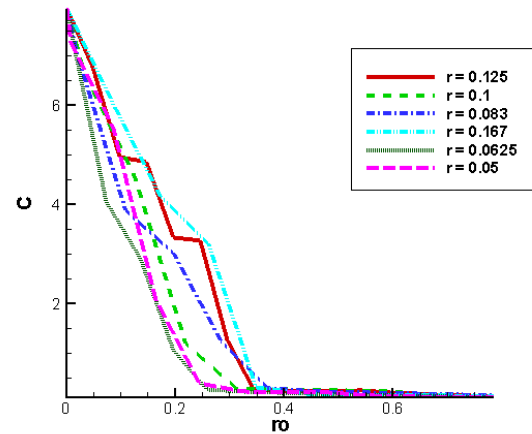


Рис. 33. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

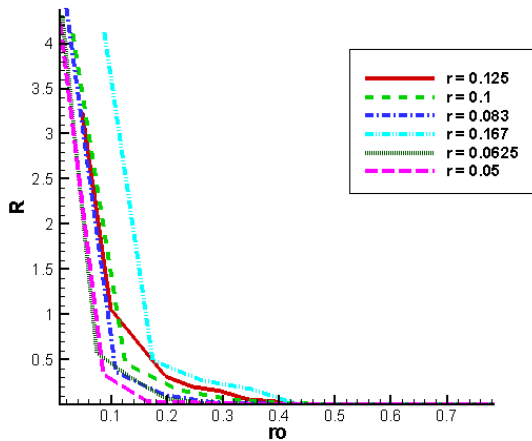


Рис. 34. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 0.0001$

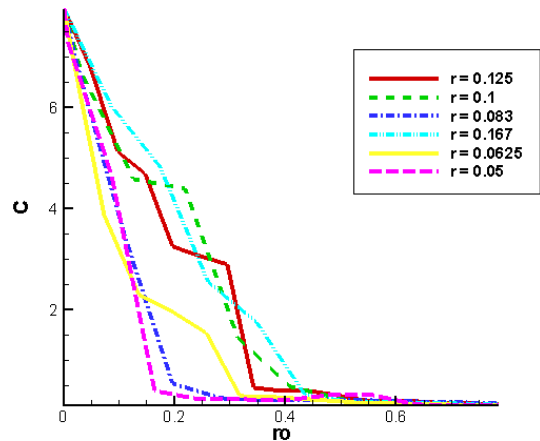


Рис. 35. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 0.0001$

Для проверки зависимости решения от сетки зафиксирован радиус гранул, в расчетах меняется только расчетная сетка. Для всех расчетов использована сетка из прямоугольных треугольников: сначала вся элементарная ячейка разделена на одинаковые непересекающиеся квадраты, затем каждый квадрат поделен диагональю на прямоугольный треугольник (при этом диагонали параллельны друг другу). В результате сетки подобны и различаются только размерами треугольников.

На приведенных ниже графиках n – длина катетов треугольников, на которые разбита область (одинакова для всех треугольников данного разбиения).

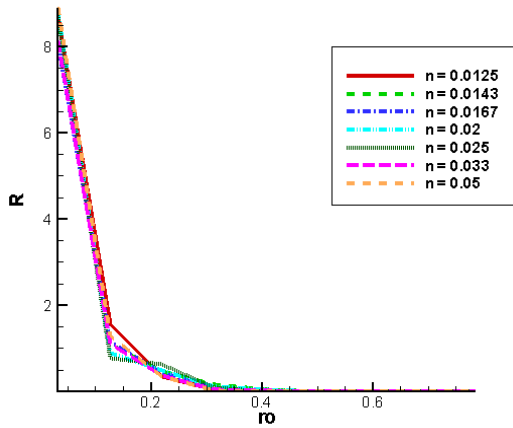


Рис. 36. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 1$

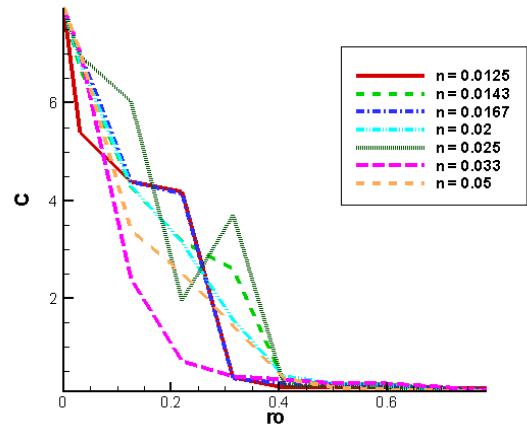


Рис. 37. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 1$

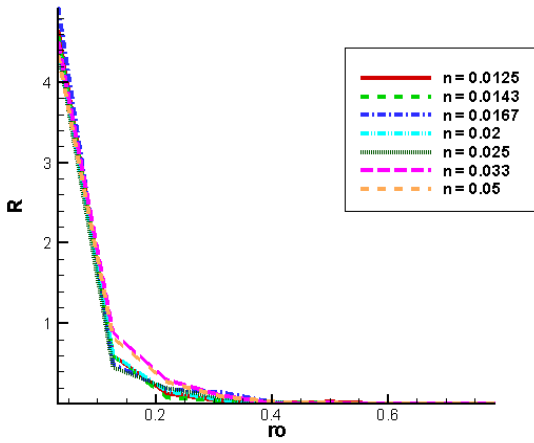


Рис. 38. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 0.1$

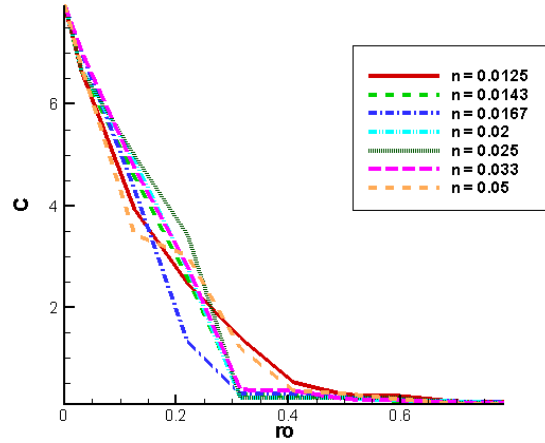


Рис. 39. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 0.1$

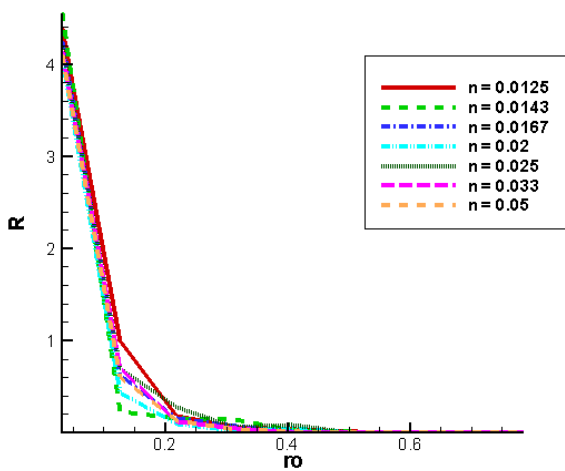


Рис.40. Зависимость сопротивления от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

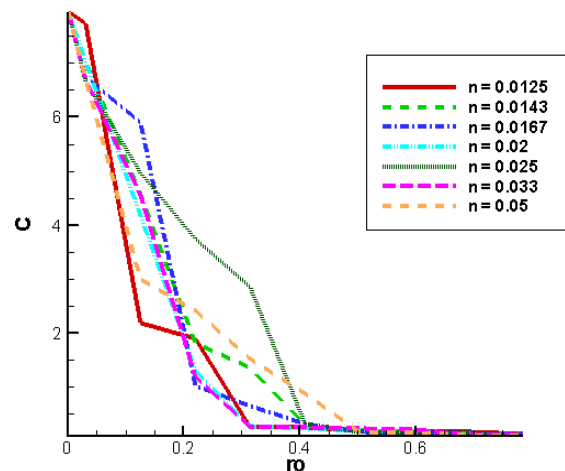


Рис. 41. Зависимость емкости от концентрации гранул, $\alpha = 0.01$

Все приведенные графики асимптотически стремятся к нулю при увеличении относительной концентрации металлических гранул в ячейке. Все графики емкости ограничены сверху значением емкости для ячейки, полностью заполненной диэлектриком с соответствующим значением диэлектрической постоянной. Видно, что при изменении размера используемых конечных элементов (треугольников) характер зависимостей не изменяется. Порог перколяции системы зависит от коэффициента в формуле (1), следовательно, с помощью этого параметра можно регулировать переход свойств системы от изолятора к проводнику.

Заключение

Выполнено математическое моделирование магнитного нанокompозита. Разработана программа для нахождения распределения электрического потенциала в элементарной ячейке нанокompозита и вычисления электрических характеристик нанокompозита: эффективного электрического сопротивления и эффективной электрической емкости. При решении использованы методы конечных элементов первого или второго порядков. Исследовано влияние на решение выбранного метода. Тестирования программы показало, что для получения распределения потенциала достаточно использовать конечные элементы первого порядка. Однако для получения зависимостей электрического сопротивления и электрической емкости, соответствующих экспериментальным, необходимо использование конечных элементов второго порядка. Такой вывод объясняется тем, что при вычислении электрической емкости и сопротивления используются производные полученного решения (т.е. распределения электрического потенциала в ячейке), а элементы второго порядка аппроксимируют производные решения с первым порядком точности в отличие от элементов первого порядка, которые формально не аппроксимируют производные решения. С помощью полученных в ходе выполнения работы зависимостей эффективного электрического сопротивления и емкости ячейки от относительной концентрации металлических гранул в ней сделан вывод, что характер данных зависимостей не зависит от радиуса металлических гранул в ячейке, что подтверждает свойства нанокompозитов металл-диэлектрик [1], [2], [9 - 13], [16], [17].

Список литературы

1. Ведяев А., Грановский А. Природа. 8 (1995) 72.
2. Khan H., Granovsky A., Brouers F. и др., JMMM. 183 (1997) 127.
3. Драченко А., Юрасов А., Быков И. и др. Физика Твёрдого Тела 45 (2001) 897.
4. Tokarski R., Marton J. J. Vac. Sci. And Technol. 12 (1975) 643.
5. Harris L., McGinnes R., Sigel B., J. Opt. Soc. Amer. 38 (1948) 582.
6. Sichel E., Gittleman J., Zelez J. Appl. Phys. Lett. 31 (1977) 109.

7. Brouers F. Percolation threshold and conductivity in metal-insulator composite mean-field theories. *J. Phys. C: Solid State Phys*, № 19, 1986.
8. Тамм И. Основы теории электричества. – М.: Физматлит, 2003.
9. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975.
10. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов.– М.: Мир, 1979.
11. Сильвестр П., Феррари Р. Метод конечных элементов для радиоинженеров и инженеров-электриков. – М.: Мир, 1986.
12. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. – М.: Мир, 1984.
13. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. – М.: Мир, 1986.
14. Галанин М., Савенков Е. Методы численного анализа математических моделей. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010.
15. Юрасов А. Магниторефрактивный эффект и магнитооптические спектры нанокompозитов в видимой и ИК области света // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Москва, 2003.
16. Miller A., Gerber A. *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 475.
17. Марчук Г., Агошков В. Введение в проекционно-сеточные методы. – М.: Наука, 1981.
18. Круглински Д., Уингоу С., Шеферд Д. Программирование на Microsoft Visual C++ 6.0. Пер. с англ. – М.: Русская редакция, 2002.
19. Шайдуров В. Многосеточные методы конечных элементов. – М.: Наука, 1989.
20. Норри Д., Ж. де Фриз. Введение в метод конечных элементов. – М.: Мир, 1981.
21. Виноградов А. Электродинамика композитных материалов. – М.: Эдиториал УРСС, 2001.
22. Бате К., Вилсон Е. Численные методы анализа и метод конечных элементов. – М.: Стройиздат, 1982.
23. Бенерджи П., Баттерфилд Р. Методы граничных элементов в прикладных науках. – М.: Мир, 1984.
24. Баландин М., Шурина Э. Векторный метод конечных элементов. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2001.
25. Щеглов И. Программа для триангуляции сложных двумерных областей Gridder2D // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 2008. № 60. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2008-60>

Оглавление

Введение	3
§ 1. Постановка задачи.....	4
1.1. Физическая постановка задачи	4
1.2. Математическая постановка задачи	6
§ 2. Алгоритм численного решения задачи	8
2.1. Численное решение задачи	8
2.2. Задание конфигурации элементарной ячейки нанокompозита	8
2.3. Разбиение области на конечные элементы.....	8
2.4. Алгоритм программного определения тензора электропроводности для каждого КЭ	9
2.5. Алгоритм задания внутренней и внешней границ элементарной ячейки нанокompозита	12
2.6. Реализация алгоритма МКЭ в данной задаче	12
2.7. Особенности программной реализации МКЭ.....	17
2.8. Вычисление эффективных электрических характеристик нанокompозита.....	17
§ 3. Результаты и их анализ.....	18
3.1. Тестирование работы программы.....	18
3.2. Результаты расчетов	19
Заключение.....	28
Список литературы.....	28