УДК 001.891.573
DOI: 10.26102/2310-6018/2024.45.2.006

Математическое моделирование электрофизических свойств темпоральных нанокомпозитов со сложной структурой

С.А. Корчагин✉

Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, Москва, Российская Федерация

Резюме. В ходе исследований был разработан новый метод моделирования, который позволяет адаптировать электромагнитный отклик среды спонтанно упорядоченного нанокомпозита во времени, используя концепцию временно эффективной среды, которая может быть использована для создания новых наноструктурированных материалов с заданными электрофизическими свойствами. При помощи компьютерных технологий и математических методов было проведено моделирование диэлектрической проницаемости темпоральных нанокомпозитов с сложной структурой. Представлена математическая модель, разработанная для описания диэлектрической проницаемости темпоральных нанокомпозитов. В модели учитываются различные факторы, такие как геометрические параметры наночастиц, их концентрация, ориентация и характеристики диэлектрической матрицы. С использованием предложенной модели проведены численные эксперименты для оценки влияния структурных особенностей на диэлектрическую проницаемость темпоральных нанокомпозитов. В работе изучено распределение электрического поля во временной области для нанокомпозитов сложных конфигураций и обладающих диэлектрической проницаемостью, меняющейся во времени периодически. В ходе исследования показана возможность применения модели эффективной среды в задачах проектирования темпоральных нанокомпозитов сложных конфигураций. Результаты исследований могут быть использованы в практико-ориентированных задачах, связанных с проектировкой метаматериалов с заданными электрофизическими свойствами.

Ключевые слова: математическое моделирование, программное обеспечение, материалы из нанокомпозитов, вычислительное исследование, диэлектрическая проницаемость.

Для цитирования: Корчагин С.А. Математическое моделирование электрофизических свойств темпоральных нанокомпозитов со сложной структурой. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии.* 2024;12(2). URL: https://moitvivt.ru/ru/journal/pdf?id=1534 DOI: 10.26102/2310-6018/2024.45.2.006

Mathematical modeling of the electrical properties of temporal nanocomposites with a complex structure

S.A. Korchagin✉

Financial University under the Government of the Russian Federation, Moscow, the Russian Federation

Abstract. During the research, a new modeling method was developed that makes it possible to adapt the electromagnetic response of the environment of a spontaneously ordered nanocomposite in time, using the concept of a temporarily effective environment, which can be used to create new nanostructured materials with specified electrical properties. Using computer technology and mathematical methods, modeling of the dielectric constant of temporal nanocomposites with a complex structure was carried out. A mathematical model developed to describe the dielectric constant of temporal nanocomposites is presented. The model takes into account various factors, such as the geometric parameters of nanoparticles, their concentration, orientation and characteristics of the dielectric matrix. Using the proposed model, numerical experiments were carried out to evaluate the

© Корчагин С.А., 2024

influence of structural features on the dielectric constant of temporal nanocomposites. The work studied the distribution of the electric field in the time domain for nanocomposites with complex configurations and having a dielectric constant that varies periodically with time. The study demonstrated the possibility of using the effective medium model in problems of designing temporal nanocomposites of complex configurations. The research results can be used in practice-oriented problems related to the design of metamaterials with specified electrical properties.

Keywords: mathematical modeling, software, materials made of nanocomposites, computational research, permittivity.

For citation: Korchagin S.A. Mathematical modeling of the electrical properties of temporal nanocomposites with a complex structure. *Modeling, Optimization and Information Technology*. 2024;12(2). URL: https://moitvivt.ru/ru/journal/pdf?id=1534 DOI: 10.26102/2310-6018/2024.45.2.006 (In Russ.).

Введение

Управление взаимодействием электромагнитных волн с веществом с помощью пространственного проектирования электромагнитных свойств среды на протяжении нескольких десятилетий вызывает большой интерес в научном сообществе [1]. Активно проводятся исследования взаимодействия материалов с электромагнитным полем в терагерцовом и оптическом диапазонах [2]. Исследованы возможности достижения экстремальных параметров диэлектрической проницаемости материалов, например, околонулевой или отрицательный [3]. Метаматериалы открыли новые возможности управления распространением волн, что повлекло за собой создание ряда новых электронных устройств с улучшенными характеристиками, например, датчики [4], антенны [5], генераторы нового поколения [6] и пр. С момента своего появления метаматериалы и метаповерхности в основном изучались в рамках гармонического времени (частотная область). Как правило, при моделировании и проектировании таких материалов используется трехмерная система координат (x, y, z). Исследования последних лет показывают, что для дальнейшего более эффективного управления распространением волны используется дополнительное измерение – время (t), которым можно манипулировать в дополнение к этим трем измерениям. Нанокомпозиты, управление волной в которых происходит в координатах пространства-времени, называются темпоральными (в некоторых источниках, например, [7], временными) и используются в различных практических приложениях, таких как обратная призма [8], преобразователи частоты [9] и пр. Экспериментальное исследование таких материалов является трудоемким и дорогостоящим. Эффективным методом исследования метаматериалов является математическое и компьютерное моделирование [10]. В исследовании предлагается метод моделирования эффективной диэлектрической проницаемости с использованием временных метаматериалов. Проверяется гипотеза о том, что нанокомпозиты с эффективной диэлектрической проницаемостью могут быть созданы путем чередования субволновых слоев разных материалов периодически. Вариант такого пространственного многослойного метаматериала рассматривается путем модуляции диэлектрической проницаемости. Как и в пространственном случае, многоступенчатая временная эффективная среда спроектирована путем изменения диэлектрической проницаемости нанокомпозита во времени от ε_1 до ε_2. Влияние периодичности и рабочего цикла на диэлектрическую проницаемость для темпоральной версии многослойного нанокомпозита также оценивается, демонстрируя результирующую эффективную диэлектрическую проницаемость, которая может быть адаптирована при изменении рабочего цикла.

Математическое и компьютерное моделирование диэлектрической проницаемости темпоральных нанокомпозитов

Темпоральные нанокомпозиты представляют собой класс наноматериалов, в которых одна или несколько размерных осей наноструктур имеют временную зависимость или изменяются во времени. Это может быть изменение размера, формы, ориентации или состава наночастиц во времени. Такие нанокомпозиты могут обладать уникальными свойствами и находить применение в различных практических приложениях. В отличие от статических нанокомпозитов, темпоральные нанокомпозиты обладают временной изменчивостью и могут адаптироваться к изменяющимся условиям в окружающей среде. Это может быть полезно, например, для создания сенсоров или устройств, которые должны реагировать на изменения внешних условий. Одним из ключевых преимуществ темпоральных нанокомпозитов является возможность управления их временной изменчивостью. Это позволяет настраивать и оптимизировать их свойства под конкретные требования приложений. Временная изменчивость может привести к появлению уникальных свойств в темпоральных нанокомпозитах. Например, могут возникать эффекты квантовой интерференции, изменения оптических или электрических характеристик, а также динамические эффекты, такие как резонансные явления. Темпоральные нанокомпозиты могут найти применение в различных областях, включая электронику, оптику, сенсорику, энергетику и медицину. Они могут использоваться для создания интеллектуальных материалов, устройств с адаптивными свойствами, динамических сенсоров и актуаторов, а также для разработки новых методов диагностики и терапии. Темпоральные нанокомпозиты представляют собой активно исследуемую область научных исследований и разработок. Ученые и инженеры постоянно ищут новые способы контроля и использования временной изменчивости в наноструктурированных материалах с целью создания новых технологий и улучшения существующих. В целом, темпоральные нанокомпозиты открывают новые перспективы для разработки инновационных материалов и устройств с уникальными свойствами, которые могут применяться в широком спектре областей науки и техники. Их дальнейшее изучение и разработка могут привести к созданию новых технологий и решений для различных сфер человеческой деятельности.

Математическая модель диэлектрической проницаемости темпорального нанокомпозита может быть довольно сложной из-за его временной изменчивости. Для начала рассмотрим простую модель для описания такого нанокомпозита. Рассматриваем одномерный случай и имеем нанокомпозит, состоящий из двух материалов: матрицы (с индексом 1) и наночастиц (с индексом 2), причем характеристики каждого из этих материалов могут изменяться во времени. Пусть диэлектрическая проницаемость материала 1 в момент времени t обозначается как $\varepsilon_1(t)$, а диэлектрическая проницаемость материала 2 в момент времени t обозначается как $\varepsilon_2(t)$.

Предположим также, что объемная доля наночастиц в нанокомпозите изменяется во времени и обозначается как $\varphi(t)$. Тогда эффективная диэлектрическая проницаемость темпорального нанокомпозита может быть описана моделью теории эффективной среды [11], например, моделью Бругемана. Модель Бругемана для эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{eff}(t)$ такого нанокомпозита может быть записана как:

$$\varepsilon_{eff}(t) = \varepsilon_1(t) \cdot \big(1 - \varphi(t)\big) + \varepsilon_2(t) \cdot \varphi(t). \quad (1)$$

Это упрощенная модель, которая предполагает, что наночастицы распределены однородно в матрице и что поля внутри композита линейны. В реальности

диэлектрическая проницаемость может зависеть не только от времени, но и от частоты, температуры, давления и других факторов.

Для более точного описания диэлектрических свойств темпоральных нанокомпозитов может потребоваться использование более сложных моделей, учитывающих временную зависимость и множество других факторов. Такие модели могут быть основаны на численных методах, теории случайных сред или кинетических уравнениях для описания динамики наночастиц в матрице.

Для описания напряженности электрического поля E в темпоральных нанокомпозитах можно использовать уравнения Максвелла с учетом эффективных средних параметров композита. Пусть у нас есть одномерный нанокомпозит, состоящий из матрицы и наночастиц, и предположим, что мы рассматриваем стационарный случай (без учета временной зависимости). Тогда, для напряженности электрического поля E внутри такого композита можем использовать следующее уравнение:

$$\nabla \cdot \varepsilon_{eff}(x) \cdot E(x) = 0, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{eff}(x)$ – эффективная диэлектрическая проницаемость в точке x, которая зависит от координаты x из-за изменчивости диэлектрических свойств нанокомпозита.

В общем случае, для многомерных случаев или случая с временной зависимостью, уравнение может иметь более сложный вид и требовать дополнительных условий, включая граничные условия. Уравнение, указанное выше, является стационарным уравнением для электрического поля и описывает его распределение внутри композита. Для его решения в конкретном случае потребуется дополнительная информация о геометрии и свойствах материалов, а также о граничных условиях.

Для описания напряженности электрического поля E в темпоральных нанокомпозитах в нестационарном случае можно использовать уравнение Максвелла во временно-пространственной форме. Рассмотрим уравнение Максвелла для электрического поля:

$$\nabla \cdot D = \rho, \quad (3)$$

где D – плотность дисперсии, ρ – объемная плотность зарядов. Плотность дисперсии связана с электрическим полем E и диэлектрической проницаемостью ε следующим образом:

$$D = \varepsilon E. \quad (4)$$

Теперь введем понятие временного изменения эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(t)$ в темпоральном нанокомпозите. Учитывая временную и пространственную зависимость диэлектрической проницаемости, уравнение Максвелла можно записать в виде:

$$\nabla \cdot (\varepsilon(t) \cdot E) = \rho. \quad (5)$$

Теперь введем также понятие временной зависимости плотности зарядов $\rho(t)$ в композите. Тогда, учитывая как пространственную, так и временную зависимость, уравнение Максвелла примет следующий вид:

$$\nabla \cdot (\varepsilon(t,r) \cdot E(t,r) = \rho(t,r). \quad (6)$$

Это уравнение описывает электрическое поле в темпоральном нанокомпозите в нестационарном случае. Для его решения используется метод конечных элементов. Предложенная модель является более сложной и учитывает как пространственную, так и временную изменчивость параметров композита.

В работе предлагается метод моделирования на основе теории временно эффективной среды. Моделирование диэлектрической проницаемости на основе временно эффективной среды – это метод, который позволяет описывать поведение диэлектрических материалов в зависимости от изменения времени. Концепция предлагаемого метода заключается в использовании временно эффективной среды, в которой диэлектрическая проницаемость зависит от временной частоты. Данный метод позволяет описывать не только статическое поведение материала (например, его диэлектрическую проницаемость при постоянном электрическом поле), но и динамическое поведение в зависимости от изменения времени, включая влияние переменного электрического поля на материал. Для моделирования диэлектрической проницаемости на основе временно эффективной среды необходимо определить функциональную зависимость между эффективной диэлектрической проницаемостью и временным параметром. Эта зависимость может быть экспериментально получена или рассчитана с использованием теоретических моделей.

В качестве примера исследуется объект, который представляет собой нанокомпозит сложной конфигурации, изображенный на Рисунке 1.

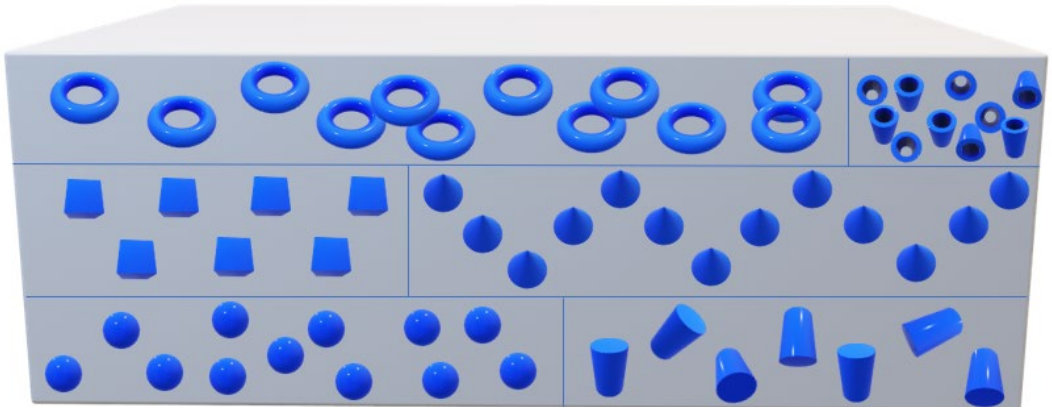

Рисунок 1 – Нанокомпозит сложной конфигурации
Figure 1 – Nanocomposite with a complex configuration

Нанокомпозит состоит из чередующихся слоев с положительной диэлектрической проницаемостью ε_1 и ε_2. Электромагнитная волна распространяется вдоль слоев.

Модель эффективной среды основана на предположении, что диэлектрический материал является однородной и изотропной средой. Анализ проводится на макроскопическом уровне, пренебрегая микроскопическими деталями. Эффективная диэлектрическая проницаемость определяется исходной структурой материала и взаимодействием между электромагнитным полем и этой структурой.

Модель эффективной среды может быть построена на основе разных подходов, включая:

1. Среда с эффективными параметрами: в этом подходе исходный материал заменяется на среду с искусственными параметрами, такими как эффективная диэлектрическая проницаемость и эффективная магнитная проницаемость. Эти параметры определяются с помощью электромагнитных экспериментов или рассчитываются с использованием теоретических моделей, таких как теория смешанных эффективных сред или теория черных тел.

2. Среда с репрезентативным объемом: в этом подходе структура диэлектрического материала разбивается на множество микроскопических элементов,

называемых ячейками или узлами. Каждая ячейка имеет собственную диэлектрическую проницаемость и взаимодействует с окружающими элементами. Затем свойства всей структуры определяются усреднением свойств всех ячеек.

3. Среда с гомогенизацией: в этом подходе сложная микроскопическая структура материала усредняется на макроскопическом уровне. Это достигается путем рассмотрения мешающих функций или средних полей, которые учтены в эффективной диэлектрической проницаемости. Этот подход основан на аналитических или численных методах гомогенизации.

Все эти подходы имеют свои преимущества и ограничения, и выбор подхода зависит от цели моделирования и особенностей исследуемого диэлектрического материала.

В нашем исследовании предлагается использовать первый подход (среда с эффективными параметрами).

Для простейшей слоистой структуры формула, описывающая эффективную диэлектрическую проницаемость, имеет вид:

$$\varepsilon_{effxx} = \varepsilon_{effxx} = \varepsilon_1(1 - \Delta_{z2}) + \Delta_{z2}\varepsilon_2, \quad (7)$$

$$\varepsilon_{effzz} = \frac{\varepsilon_1\varepsilon_2}{\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2(1-\Delta_{z2})}, \quad (8)$$

где $\Delta_{z1} = 1 - \Delta_{z2}$ и Δ_{z2} – коэффициент заполнения для каждого слоя с диэлектрической проницаемостью ε_1 и ε_2. Таким образом, эти отношения можно определить как соотношение абсолютных толщин каждого слоя к общей толщине одного пространственного периода: $\Delta_{z1} = d_{z1,2}/(d_{z1} + d_{z2})$.

Для материалов с многослойной структурой и сферическими включениями (Рисунок 2), модель описания диэлектрической проницаемости будет представлена следующим образом:

$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_1\left[\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_1-\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2\Delta_{z2}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2\Delta_{z2}}\right] + \varepsilon_2[1 + \frac{2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2\Delta_{z2}}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{2\varepsilon_1[\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2\Delta_{z2}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_1\Delta_{z2}-\varepsilon_2\Delta_{z2}}]\varepsilon_2[1+\frac{2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2\Delta_{z2}}]}{\mathrm{e}1[\frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2\Delta_{z2}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_1\Delta_{z2}-\varepsilon_2\Delta_{z2}}]+\varepsilon_2[1+\frac{2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_1\Delta_{z2}+\varepsilon_2\Delta_{z2}}]}, \quad (10)$$

где $\varepsilon_{\parallel}$ и $\varepsilon_{\perp}$ – значение диэлектрической проницаемости нанокомпозита, которое изменяется под воздействием электромагнитного поля в направлении вдоль слоев и параллельно слоям.

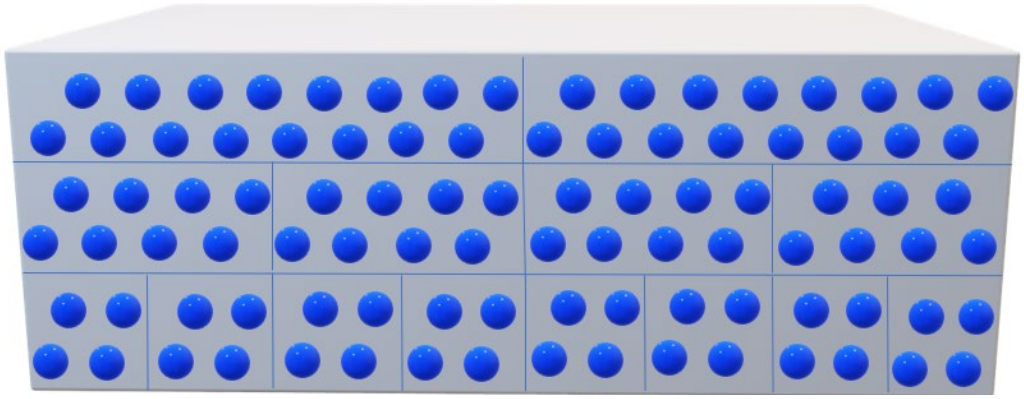

Рисунок 2 – Спонтанно упорядоченный слоистый нанокомпозит с шарообразными включениями

Figure 2 – Illustrates a spontaneously arranged layered nanocomposite with spherical inclusions

Для нанокомпозитов с цилиндрическими включениями, которые обладают слоистой спонтанной упорядоченностью (Рисунок 3), будет использоваться модель для описания диэлектрической проницаемости.

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{1}{2}\varepsilon_1[1 + \frac{6(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{3(\varepsilon_1+\varepsilon_2)+(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(-6+\pi)\Delta_{z2}}]\varepsilon_2[1 + \frac{6(-\varepsilon_1+\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{3(\varepsilon_1+\varepsilon_2)+(-\varepsilon_1+\varepsilon_2)(-6+\pi)\Delta_{z2}}, \quad (11)$$

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{2\varepsilon_1[1+\frac{6(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{3(\varepsilon_1+\varepsilon_2)+(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(-6+\pi)\Delta_{z2}}]\varepsilon_2[1+\frac{6(-\varepsilon_1+\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{3(\varepsilon_1+\varepsilon_2)+(-\varepsilon_1+\varepsilon_2)(-6+\pi)\Delta_{z2}}]}{a[1+\frac{6(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{3(\varepsilon_1+\varepsilon_2)+(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(-6+\pi)\Delta_{z2}}]+\varepsilon_2[1+\frac{6(-\varepsilon_1+\varepsilon_2)\Delta_{z2}}{3(\varepsilon_1+\varepsilon_2)+(-\varepsilon_1+\varepsilon_2)(-6+\pi)\Delta_{z2}}]}. \quad (12)$$

Рисунок 3 – Спонтанно упорядоченный слоистый нанокомпозит с цилиндрическими включениями

Figure 3 – Depicts a spontaneously organized layered nanocomposite featuring cylindrical inclusions

В работе рассмотрен вопрос о возможности применения методов теории эффективной среды для разработки нанокомпозитов со сложной структурой во временной области. Для временного случая рассматривается монохроматическая волна, распространяющаяся в неограниченной пространственной среде с определенной проницаемостью $\mu=1$, с диэлектрической проницаемостью, изменяющейся в зависимости от времени $\varepsilon(t)$ (Рисунок 4).

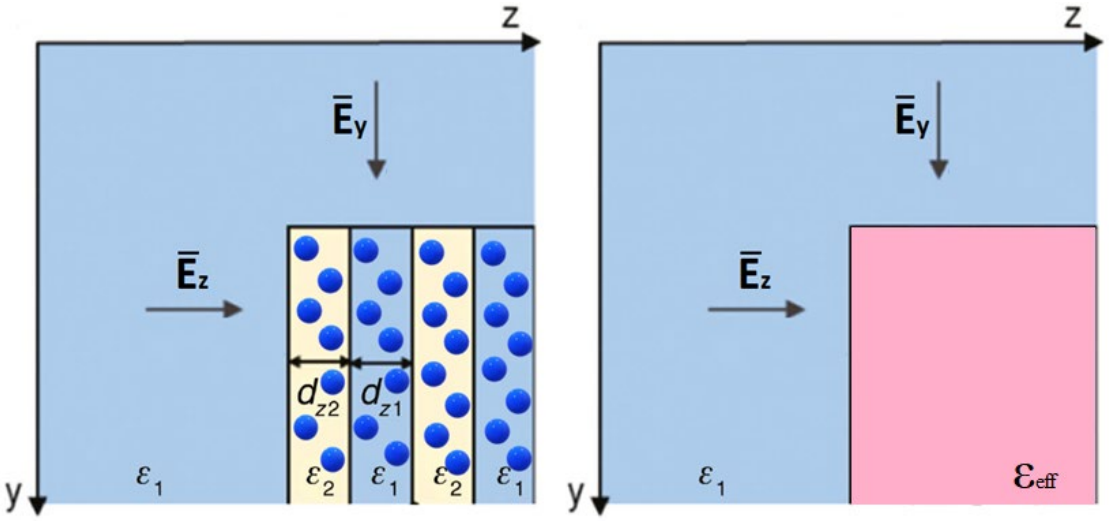

Рисунок 4 – Многослойный спонтанно упорядоченный нанокомпозит и соответствующая ему эффективная среда

Figure 4 – Multilayer nanocomposite with spontaneous ordering, along with its corresponding effective medium

Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(t)$ изменяется во времени между ε_1 и ε_2. Таким образом, мы получаем электрофизическую характеристику, описываемую функцией, зависящей от времени, а также от частоты электромагнитной волны (Рисунок 5).

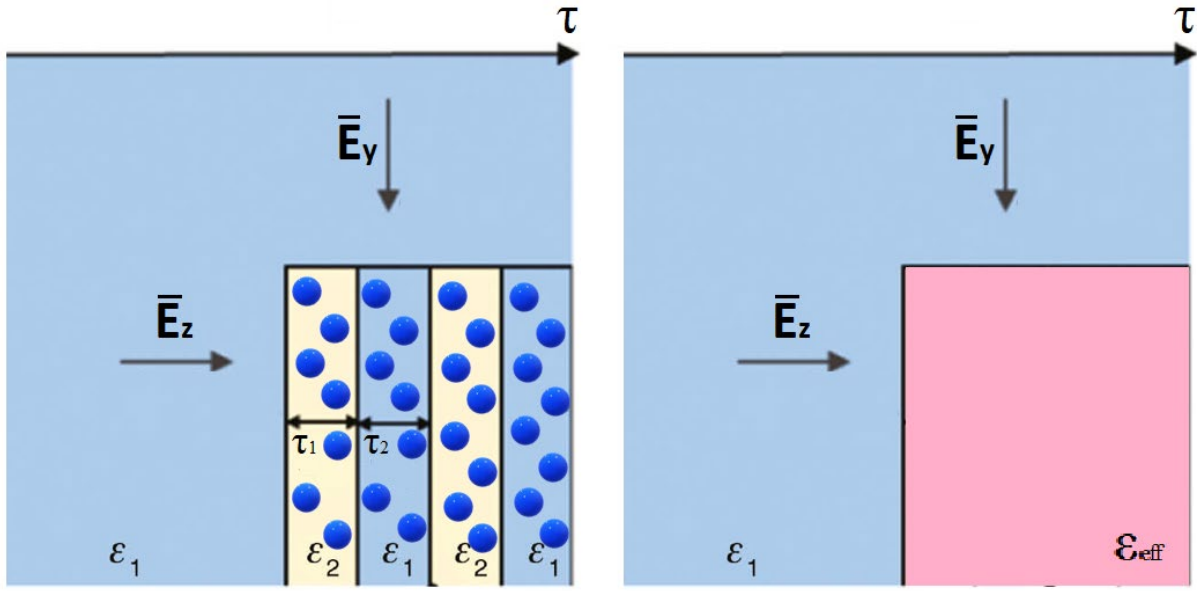

Рисунок 5 – Темпоральный многослойный спонтанно упорядоченный нанокомпозит и соответствующая ему эффективная среда

Figure 5 – Illustrates a temporal multilayer nanocomposite that spontaneously organizes itself, along with the effective medium it represents

В то время как для пространственного случая ожидается изменение длины волны и неизменная частота (сохранение длины волны), в случае временного сценария частота изменяется, но длина волны остается постоянной, в то время как для пространственного сценария частота остается неизменной, но длина волны меняется.

Разработка программного комплекса моделирования

В рамках исследования разработан практико-ориентированный программный комплекс моделирования электрофизических свойств темпоральных нанокомпозитов. Программный комплекс позволяет проводить вычислительные эксперименты и моделировать свойства темпоральных нанокомпозитов для их эффективного исследования и прогноза электрофизических характеристик при различных условиях. Такие эксперименты могут быть полезны для оптимизации свойств материалов в промышленных и научных приложениях [12].

Программный комплекс обладает следующим функционалом:

1. Моделирование структуры нанокомпозитов. Программный комплекс позволяет создавать виртуальные модели нанокомпозитов, определяя типы и расположение наночастиц в матрице.

2. Определение физических параметров. Пользователь может задавать электрофизические параметры материалов (например, диэлектрическую проницаемость, и проводимость), а также свойства наночастиц для дальнейшего анализа.

3. Моделирование электрофизических характеристик. Программный комплекс проводит численное моделирование диэлектрической проницаемости нанокомпозитов в соответствии с методами, изложенными в предыдущем разделе.

4. Анализ результатов. Полученные данные могут быть визуализированы и проанализированы пользователем для понимания влияния различных параметров на электрофизические свойства нанокомпозитов.

Для разработки программного комплекса использовался язык программирования Python. Были использованы следующие библиотеки: NumPy, SciPy – для научных вычислений, работы с массивами данных и численного решения уравнений; Matplotlib, Plotly – для визуализации данных и результатов моделирования; PyQt, Tkinter – для создания графического пользовательского интерфейса программного комплекса.

В программном комплексе также использовались вычислительные методы: метод конечных элементов – для моделирования структуры нанокомпозитов и их электрофизических свойств; метод Монте-Карло – для моделирования статистических распределений параметров нанокомпозитов и проведения вероятностного анализа.

Параметры материалов и результаты моделирования хранятся в базе данных PostgreSQL. Для интерактивного анализа данных и результатов моделирования использовался Jupyter Notebook.

Блок-схема работы программного комплекса представлена на Рисунке 6. В начале данные загружаются, затем происходит их подготовка. Далее выполняется моделирование электрофизических свойств, а затем анализ результатов. Результаты визуализируются для лучшего понимания и после этого они могут быть сохранены. После завершения всех шагов программа завершает свою работу.

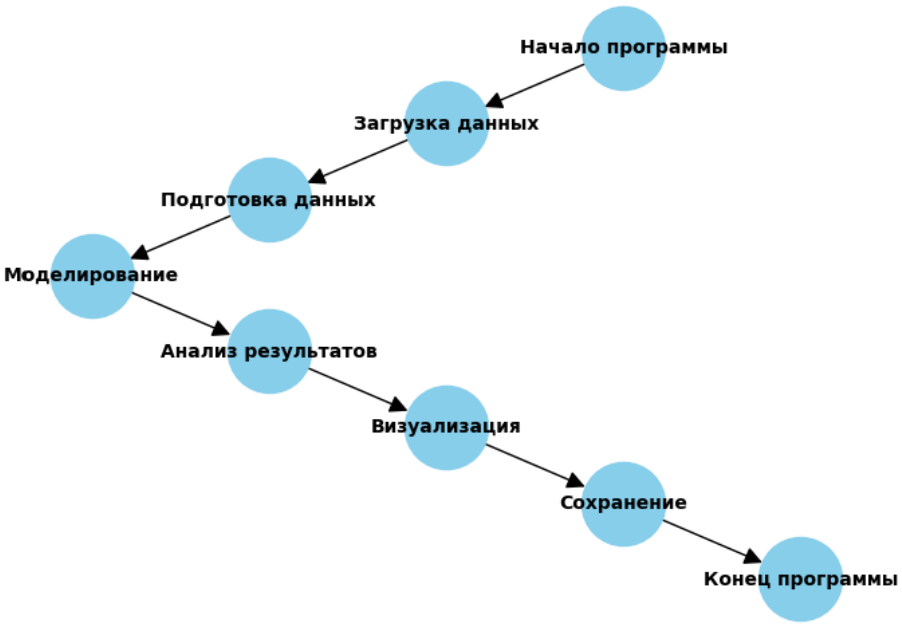

Рисунок 6 – Блок-схема работы программного комплекса
Figure 5 – Block diagram of the software package

Программный комплекс моделирования электрофизических свойств темпоральных нанокомпозитов может найти широкое применение в различных областях. Ученые могут использовать такие программные комплексы для изучения влияния различных параметров наноструктурных материалов на их электрофизические свойства. Это может помочь в понимании основных принципов взаимодействия наночастиц и матрицы материала, а также в разработке новых материалов с улучшенными характеристиками. В промышленности такие программные комплексы могут использоваться для проектирования и оптимизации наноструктурных материалов

с заданными электрофизическими свойствами. Например, они могут применяться при разработке новых материалов для электроники, энергетики, авиации и других отраслей. Инженеры могут использовать такие программные комплексы для оптимизации дизайна и производства устройств, использующих наноструктурные материалы, таких как солнечные батареи, сенсоры, аккумуляторы и т. д. Моделирование электрофизических свойств помогает предсказать их работоспособность и эффективность. Предложенный программный комплекс может быть использован в учебных целях для обучения студентов основам моделирования наноматериалов и их электрофизических свойств. Это может помочь будущим специалистам получить практические навыки в области нанотехнологий и разработки материалов. В некоторых случаях наноструктурные материалы используются в медицине и биологии, например, для создания наночастиц для доставки лекарств или разработки биосенсоров.

Результаты моделирования и обсуждение

В исследовании в качестве примера приводится нанокомопозит на основе Ga-As. Диэлектрическая проницаемость нанокомпозита Ga-As зависит от его структуры, состава и процессов изготовления. Диэлектрическая проницаемость такого нанокомпозита может быть сложной функцией и изменяться в зависимости от размера, формы и концентрации наночастиц, а также от структуры матрицы. Это связано с тем, что диэлектрические свойства наноматериалов могут сильно отличаться от их макроскопических аналогов из-за квантовых и поверхностных эффектов.

Нанокомпозиты Ga-As используются для создания полупроводниковых приборов, таких как лазеры, фотодиоды, транзисторы и интегральные схемы. Диэлектрическая проницаемость нанокомпозита быстро меняется во времени от значения $\varepsilon_1 = 10{,}75$ до величины $\varepsilon_2 = 11{,}07$.

На Рисунке 7 показаны результаты вычислительного эксперимента по расчету электрического поля для линейной волны в пространственном положении (Рисунок 7 – A, B) и в пространственно неограниченной среде (Рисунок 7 – C, D). Рисунку 7A и 7C соответствует темпоральный нанокомпозит с периодом изменения диэлектрической проницаемостью 0,1T. Рисунку 7B и 7C соответствует темпоральный нанокомпозит с периодом изменения диэлектрической проницаемости 0,05 T.

В проведенных исследованиях были использованы границы моделирования в диапазоне длин волн от 350 до 100 нм. Показано, что зеленая кривая представляет собой изменение периода сигнала после изменения диэлектрической проницаемости (значение 1,11T), отличающегося от значения до изменения (T). Это происходит из-за изменения частоты, возникающего на временной границе. Следует отметить, что амплитуда электрического поля после изменения диэлектрической проницаемости уменьшается с 1,1 до приблизительно 0,77. При моделировании было учтено только распределение поля для прямой волны, однако следует помнить, что обратная волна также возникает при временной границе и может оказывать дополнительное воздействие. Поэтому, при незначительных изменениях диэлектрической проницаемости можно не учитывать обратную волну, но при значительных изменениях она может существенно влиять на электрофизические характеристики и это нужно учитывать при проведении численных расчетов.

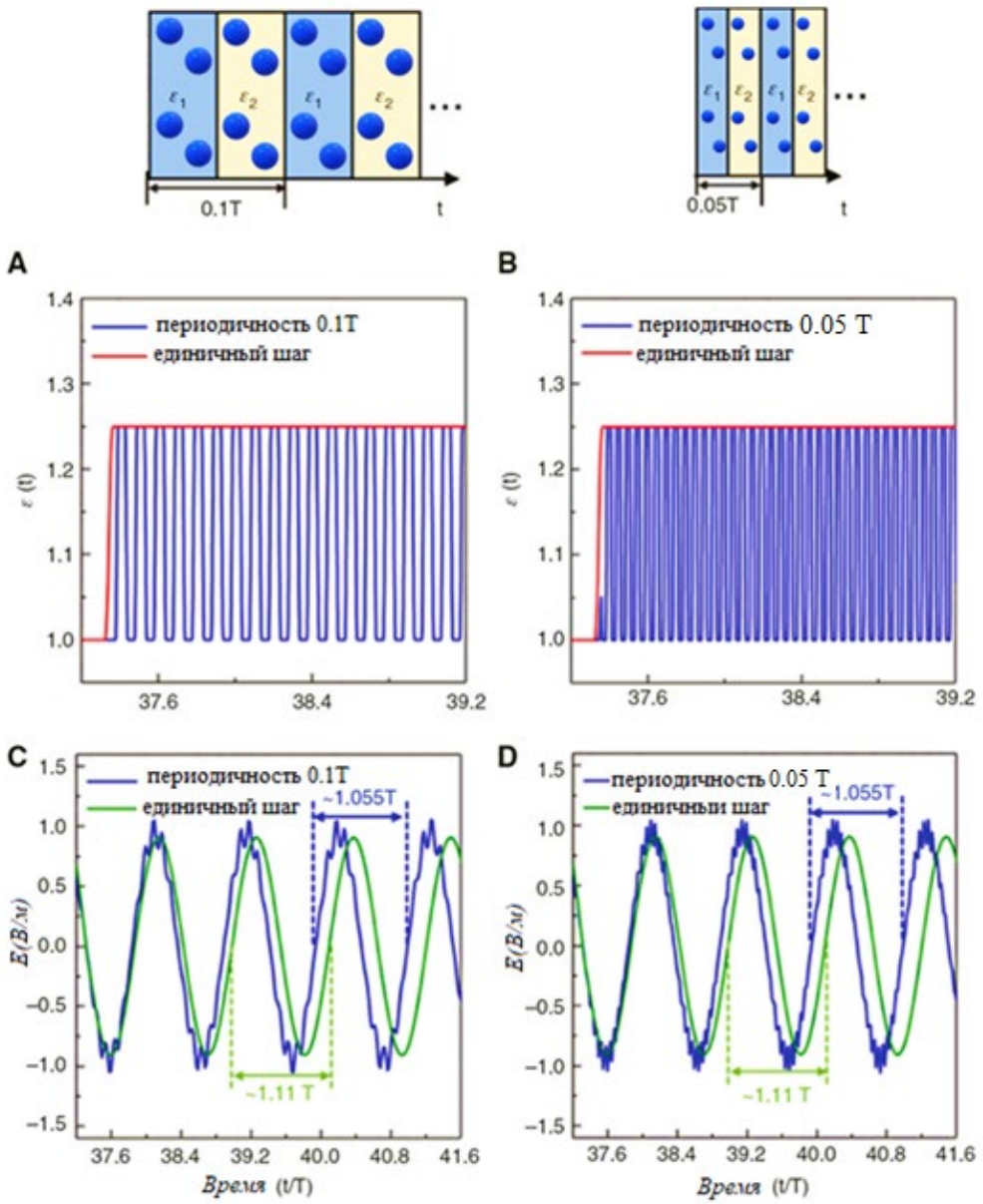

Рисунок 7 – Зависимости диэлектрической проницаемости и напряженности электрического поля от времени для темпорального нанокомпозита сложной конфигурации
Figure 7 – Dependences of dielectric constant and electric field strength on time for a temporal nanocomposite of complex configuration

Заключение

Приведенные в качестве примера темпоральные нанокомпозиты Ga-As могут быть использованы в различных областях, например:

– Электроника: нанокомпозиты GaAS могут использоваться в электронных устройствах, таких как полупроводниковые лазеры, транзисторы и фотодетекторы. Изменение диэлектрической проницаемости может влиять на электрические и оптические свойства этих устройств.

– Оптика: GaAs нанокомпозиты могут использоваться в оптических системах, включая инфракрасные датчики и оптоэлектронику. Изменение диэлектрической проницаемости может влиять на пропускание и рассеяние света в этих системах.

– Солнечные элементы: нанокомпозиты могут применяться в солнечных элементах для улучшения их эффективности за счет изменения оптических и электрических свойств.

– Микроэлектромеханические системы (МЭМС): GaAs нанокомпозиты могут использоваться в микроэлектромеханических системах для создания датчиков, актуаторов и других устройств.

– Нанотехнологии: GaAs нанокомпозиты могут использоваться в нанотехнологиях для создания наноструктурных материалов с уникальными свойствами, такими как квантовые точки и нанопроволоки.

Темпоральные нанокомпозиты обладают потенциалом для широкого спектра применения в электронике, оптике, энергетике и других областях благодаря их уникальным свойствам и возможности тонкой настройки диэлектрической проницаемости.

Моделирование показало, что концепция временных многоступенчатых метаматериалов может быть успешно применена не только на микроволновых частотах, но и на более высоких частотах. Полученные результаты могут быть полезны для создания метаматериалов с улучшенными свойствами. Программный комплекс может использоваться исследователями и инженерами в области наноматериалов для проектирования новых материалов с оптимальными электрофизическими свойствами. Также его можно применять в образовательных целях для обучения студентов и специалистов в области нанотехнологий.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ / REFERENCES

1. Сухоносов В.Я. Классическая модель ридберговского вещества со слабой нелинейностью и диссипацией. *Вестник науки*. 2023;2(3):249–263.
   Sukhonosov V.Ya. The classical model of matter with weak nonlinearity and dissipation. *Vestnik nauki.* 2023;2(3):249–263. (In Russ.).
2. Стрельцов О.В. Анализ особенностей прогнозирования характеристик электромагнитных волн. *Моделирование, оптимизация и информационные технологии*. 2013;1(1). URL: https://moitvivt.ru/ru/journal/article?id=46.
   Streltsov O.V. Analysis of features of prediction the characteristics of electromagnetic waves. *Modelirovanie, optimizatsiya i informatsionnye tekhnologii = Modeling, Optimization and Information Technology.* 2013;1(1). (In Russ.). URL: https://moitvivt.ru/ru/journal/article?id=46.
3. Ерофеев В.И., Павлов И.С. Метаматериалы: технологические приложения и математическое моделирование. *Машиностроение и инженерное образование*. 2021;(1-2):28–45.
   Erofeev V.I., Pavlov I.S. Metamaterials: engineering applications and mathematical modelling. *Mashinostroenie i inzhenernoe obrazovanie = Mechanical Engineering and Engineering Education.* 2021;(1-2):28–45. (In Russ.).
4. Pacheco-Peña V., Engheta N. Effective medium concept in temporal metamaterials. *Nanophotonics*. 2020;9(2):379–391. https://doi.org/10.1515/nanoph-2019-0305.
5. Рязанцев Р.О., Саломатов Ю.П., Поленга С.В. Радиопоглощающий метаматериал и экран антенны на его основе. *Письма в Журнал технической физики*. 2021;47(23):19–21. https://doi.org/10.21883/PJTF.2021.23.51778.18947.
   Ryazantsev R.O., Salomatov Y.P., Polenga S.V. Metamaterial absorber and antenna ground plane. *Pis'ma v Zhurnal tekhnicheskoi fiziki = Technical Physics Letters.* 2021;47(23):19–21. (In Russ.). https://doi.org/10.21883/TPL.2022.15.53812.18947.

6. Zheng X., Zhang X., Chen T.-T., Watanabe I. Deep Learning in Mechanical Metamaterials: From Prediction and Generation to Inverse Design. *Advanced Materials*. 2023;35(45):e2302530. https://doi.org/10.1002/adma.202302530.
7. Choi S., Choi J., Landig R., et al. Observation of discrete time-crystalline order in a disordered dipolar many-body system. *Nature*. 2017;543(7644):221–225. https://doi.org/10.1038/nature21426.
8. Долгаль А.С., Петросян Р.Н. Решение обратной задачи гравиразведки для 2D призматических тел методом статистических испытаний. *Вестник Пермского университета. Геология*. 2021;20(4):334–343. https://doi.org/10.17072/psu.geol.20.4.334.
   Dolgal A.S., Petrosyan R.N. Solution of the Inverse Problem of Gravity Exploration for 2D Prismatic Bodies by the Statistical Tests Method. *Vestnik Permskogo universiteta. Geologiya = Bulletin of Perm University. Geology.* 2021;20(4):334–343. (In Russ.). https://doi.org/10.17072/psu.geol.20.4.334.
9. Корчагин С.А., Терин Д.В. Метод моделирования диэлектрической проницаемости анизотропного иерархически построенного нанокомпозита с периодической структурой. *Письма в Журнал технической физики*. 2021;47(16):3–5. https://doi.org/10.21883/PJTF.2021.16.51318.18822.
   Korchagin S.A., Terin D.V. A Method for Modeling the Dielectric Constant of an Anisotropic Hierarchically Constructed Nanocomposite with a Periodic Structure. *Pis'ma v Zhurnal tekhnicheskoi fiziki = Technical Physics Letters.* 2021;47(16):3–5. https://doi.org/10.1134/S1063785021080198.
10. Ташкинов М.А., Добрыднева А.Д., Матвеенко В.П., Зильбершмидт В.В. Моделирование эффективных электропроводящих свойств полимерных нанокомпозитов со случайным расположением частиц оксида графена. *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2021;(2):167–180. https://doi.org/10.15593/perm.mech/2021.2.15.
    Tashkinov M.A., Dobrydneva A.D., Matveenko V.P., Silberschmidt V.V. Modeling the effective conductive properties of polymer nanocomposites with a random arrangement of graphene oxide particles. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika = PNRPU Mechanics Bulletin.* 2021;(2):167–180. (In Russ.). https://doi.org/10.15593/perm.mech/2021.2.15.
11. Мухутдинова М.А., Юрасов А.Н. Моделирование магниторефрактивного эффекта в нанокомпозитах CO-Al2O3 в рамках приближения Бруггемана. В сборнике: *Перспективные материалы и технологии (ПМТ-2023): Сборник докладов Национальной научно-технической конференции «Перспективные материалы и технологии» с международным участием Института перспективных технологий и индустриального программирования РТУ МИРЭА, 10-15 апреля 2023 года, Москва, Россия*. Москва: МИРЭА – Российский технологический университет, 2023. С. 100–109.
    Mukhutdinova M.A., Yurasov A.N. Modeling of the magnetorefractive effect in CO-Al2O3 nanocomposites in the framework of the Bruggeman approximation. In: *Perspektivnye materialy i tekhnologii (PMT-2023): Sbornik dokladov Natsional'noi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii «Perspektivnye materialy i tekhnologii» s mezhdunarodnym uchastiem Instituta perspektivnykh tekhnologii i industrial'nogo programmirovaniya RTU MIREA, 10-15 April 2023, Moscow, Russia.* Moscow: MIREA – Russian Technological University, 2023. P. 100–109. (In Russ.).
12. Koutserimpas T.T., Fleury R. Electromagnetic Waves in a Time Periodic Medium With Step-Varying Refractive Index. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* 2018;66(10):5300–5307. https://doi.org/10.1109/TAP.2018.2858200.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ / INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Корчагин Сергей Алексеевич, кандидат физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник Института цифровых технологий, Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, Москва, Российская Федерация.
e-mail: sakorchagin@fa.ru
ORCID: 0000-0001-8042-4089

Sergey A. Korchagin, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher Institute of Digital Technologies, Financial University under the Government of the Russian Federation, Moscow, the Russian Federation.

Статья поступила в редакцию 31.03.2024; одобрена после рецензирования 13.04.2024; принята к публикации 22.04.2024.

The article was submitted 31.03.2024; approved after reviewing 13.04.2024; accepted for publication 22.04.2024.