

УДК 517.968.73, 519.642.2
doi: 10.21685/2072-3040-2024-4-6

О резонансах неоднородного диэлектрического шара, покрытого графеном

О. С. Скворцов

Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

ghj.ghh.13@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Цель работы – разработка, программная реализация и апробация алгоритмов, предназначенных для нахождения резонансных частот в неоднородном диэлектрическом шаре, покрытом графеном. Актуальность задачи обусловлена широким применением графена в технической сфере благодаря его уникальным свойствам. *Материалы и методы.* Применен метод Галеркина для дискретизации векторного интегро-дифференциального уравнения, определены базисные кусочно-постоянные вектор-функции на объемном теле и на его поверхности, а также разработан параллельный алгоритм решения задачи с использованием библиотеки MSMPI. *Результаты.* Подтверждена эффективность параллельного алгоритма, который позволяет обнаружить искомые резонансы при заданных условиях. *Выводы.* Создан эффективный параллельный алгоритм для дискретизации интегро-дифференциального уравнения, нахождения определителя матрицы и поиска резонансных частот.

Ключевые слова: резонансная частота, неоднородное диэлектрическое тело, графеновое покрытие, сингулярное интегро-дифференциальное уравнение, базисные функции, метод Галеркина, диэлектрический шар, параллельный алгоритм

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 20-11-20087).

Для цитирования: Скворцов О. С. О резонансах неоднородного диэлектрического шара, покрытого графеном // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2024. № 4. С. 67–78. doi: 10.21685/2072-3040-2024-4-6

On the resonances of an inhomogeneous dielectric ball, coated with graphene

O.S. Skvortsov

Penza State University, Penza, Russia

ghj.ghh.13@mail.ru

Abstract. *Background.* The purpose of the work is the development, software implementation and testing of algorithms designed to find resonant frequencies in an inhomogeneous dielectric ball coated with graphene. The relevance of the task is due to the widespread use of graphene in the technical field due to its unique properties. *Materials and methods.* The Galerkin method is applied to discretize a vector integro-differential equation, piecewise constant basic vector functions on a three-dimensional body and on its surface are determined, and a parallel algorithm for solving the problem using the MSMPI library is developed. *Results.* The effectiveness of the parallel algorithm, which makes it possible to detect the desired resonances under specified conditions, has been confirmed. *Conclusions.* An ef-

fective parallel algorithm has been created for discretization of the integro-differential equation, finding the determinant of the matrix and searching for resonant frequencies.

Keywords: resonance search, inhomogeneous bulk body, graphene coating, singular integro-differential equation, basic functions, Galerkin method, dielectric ball, parallel algorithm

Financing: the research was financed by the RSF within the research project No. 20-11-20087).

For citation: Skvortsov O.S. On the resonances of an inhomogeneous dielectric ball, coated with graphene. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2024;(4):67–78. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2024-4-6

Введение

Графен представляет собой одноатомный слой углерода, обладающий уникальными физическими и химическими свойствами, которые вызывают значительный интерес в научном сообществе.

Актуальность исследования резонансных явлений в диэлектриках, покрытых графеном, определяется как уникальными свойствами самого графена, так и перспективами его применения в различных областях науки и техники.

Одним из основных направлений исследований графена является его использование в электронике. Благодаря высокой подвижности электронов графен может стать основой для создания новых электронных устройств, таких как транзисторы, диоды и интегральные схемы, что может привести к созданию более быстрых и энергоэффективных электронных устройств.

Проводится детальное исследование электромагнитных свойств структур, включающих слои графена. Многие аспекты таких структур были достаточно глубоко изучены и нашли широкое применение на практике [1–6].

В данной статье рассматривается вопрос о нахождении резонансных частот в диэлектрическом шаре, покрытом графеном. Предлагается численный метод поиска резонансов и его параллельная реализация.

1. Постановка задачи

Рассмотрим рассеяние электромагнитной волны неоднородным диэлектрическим телом Q , расположенным в \mathbb{R}^3 , как показано на рис. 1. Здесь $(\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0) = (\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0)e^{-i\omega t}$ – падающая монохроматическая электромагнитная волна с гармонической зависимостью от времени, распространяющаяся вдоль оси x_1 ; $\omega > 0$ – круговая частота; $\varepsilon(x)$ – относительная диэлектрическая проницаемость внутри тела Q ; ε_0, μ_0 – диэлектрическая и магнитная проницаемости свободного пространства соответственно; $x = (x_1, x_2, x_3)$. Поверхность шара Q покрыта слоем графена.

2. Интегро-дифференциальные уравнения

Задача дифракции сводится к гибриднему интегро-дифференциальному уравнению [7]:

$$\mathbf{E}(x) = \mathbf{E}_0(x) + (k_0^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{E}(y) dy -$$

$$-\frac{i}{\omega\epsilon_0}(k_0^2 + \text{grad div}) \int_{\partial Q} \sigma_g G(x, y) \mathbf{E}_\tau(y) dy, \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{Q}, \quad (1)$$

где $k_0 = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ – волновое число; $G(x, y) = \frac{e^{ik_0|x-y|}}{4\pi|x-y|}$; σ_g – функция проводимости графена; \mathbf{E}_τ – касательное поле.

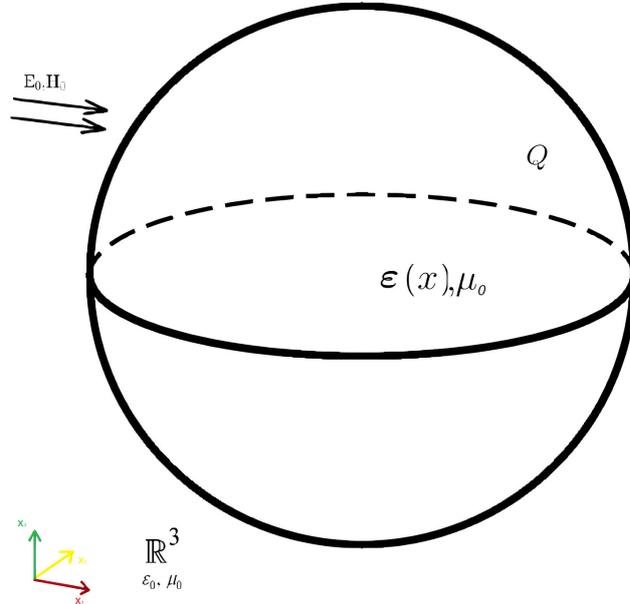


Рис. 1. Рассеяние электромагнитной волны телом Q

В случае постоянной σ_g получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x) - (k_0^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \left[\frac{\epsilon(y)}{\epsilon_0} - 1 \right] \mathbf{E}(y) dy + \\ + \frac{i\sigma_g}{\omega\epsilon_0} (k_0^2 + \text{grad div}) \int_{\partial Q} G(x, y) \mathbf{E}_\tau(y) dy = \mathbf{E}_0(x), \quad x \in Q. \end{aligned} \quad (2)$$

Уравнение (2) используется для решения задачи рассеяния электромагнитной волны телом Q .

3. Дискретизация задачи

Для дискретизации интегро-дифференциального уравнения (2) методом Галеркина необходимо построить расчетную сетку на Q .

Зададим наборы параллелепипедов Π_{j_1, j_2, j_3} и введем трехиндексную нумерацию $j = (j_1, j_2, j_3)$ на $Q = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times [a_3, b_3]$, где

$$\Pi_j := \Pi_{j_1, j_2, j_3} = [x_{1, j_1}; x_{1, j_1+1}] \times [x_{2, j_2}; x_{2, j_2+1}] \times [x_{3, j_3}; x_{3, j_3+1}],$$

а $j_1 = \overline{0, n-1}, j_2 = \overline{0, n-1}, j_3 = \overline{0, n-1}, x_{k, j_k} = a_k + j_k h_k, h_k = \frac{b_k - a_k}{n}, k = 1, 2, 3.$

Будем рассматривать только те наборы параллелепипедов, для которых выполняется следующее условие [8]:

$$\pi_j := \Pi_j \cap Q, \quad \text{vol}(\pi_j) > \text{vol}_0, \quad (3)$$

где $\text{vol}(\pi_j)$ – объем носителя π_j ; vol_0 – минимально допустимый объем носителя, является заранее заданным числом. Например, π_j может выглядеть следующим образом (рис. 2).

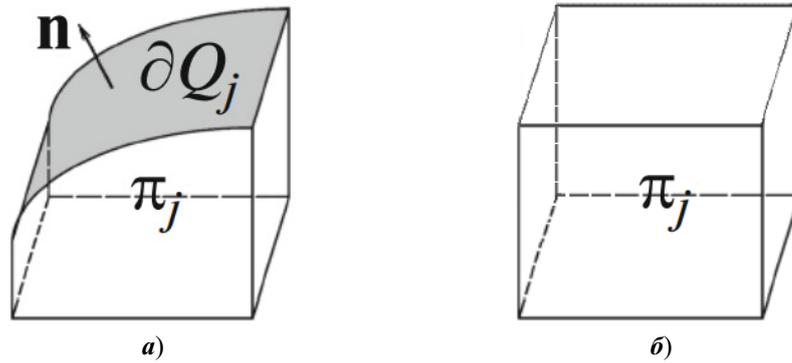


Рис. 2. Носитель базисной функции при $\pi_j \cap \partial Q \neq \emptyset$ (а), при $\pi_j \subset Q$ (б)

Далее введем финитные кусочно-постоянные функции:

$$\chi_{j_1, j_2, j_3}(x) = \begin{cases} 1, & x \in \Pi_{j_1, j_2, j_3}, \\ 0, & x \notin \Pi_{j_1, j_2, j_3}, \end{cases}$$

определим базисные вектор-функции на теле по формулам:

$$\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^1(x) = (\chi_{j_1, j_2, j_3}(x), 0, 0);$$

$$\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^2(x) = (0, \chi_{j_1, j_2, j_3}(x), 0);$$

$$\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^3(x) = (0, 0, \chi_{j_1, j_2, j_3}(x));$$

запишем расширенную матрицу системы линейных алгебраических уравнений в следующем виде:

$$\widehat{\mathbf{S}} = [\mathbf{S} | \mathbf{f}] = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{11} & \mathbf{S}^{12} & \mathbf{S}^{13} & \mathbf{f}^1 \\ \mathbf{S}^{21} & \mathbf{S}^{22} & \mathbf{S}^{23} & \mathbf{f}^2 \\ \mathbf{S}^{31} & \mathbf{S}^{32} & \mathbf{S}^{33} & \mathbf{f}^3 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Элементы правой части уравнения (2) вычисляются по формулам:

$$[f^n]_i = \int_Q \mathbf{E}_0(x) \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx = \int_{D_{i_1, i_2, i_3}} \mathbf{E}_0(x) \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx. \quad (5)$$

Элементы матрицы, соответствующие базисным и тестовым функциям на теле, получаются путем вычисления трехкратных, шестикратных и пятикратных интегралов:

$$\begin{aligned} s_{ij} = [S^{kl}]_{ij} = & \int_Q \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(x) dx - \\ & - \int_Q \left[(k_0^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) dy \right] \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx + \\ & + \int_Q \left[\frac{i\sigma_g}{\omega\varepsilon_0} (k_0^2 + \text{grad div}) \int_{\partial Q} G(x, y) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy \right] \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx, \quad x \in Q, \quad (6) \end{aligned}$$

где $k, l = 1, 2, 3$ – верхние индексы в формуле (4).

Раскроем скобки в равенстве (6):

$$\begin{aligned} s_{ij} = [S^{kl}]_{ij} = & \int_Q \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(x) dx - \\ & - \int_Q k_0^2 \int_Q G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx - \\ & - \int_Q \text{grad div} \int_Q G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx + \\ & + \int_Q \frac{i\sigma_g}{\omega\varepsilon_0} k_0^2 \int_{\partial Q} G(x, y) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx + \\ & + \int_Q \frac{i\sigma_g}{\omega\varepsilon_0} \text{grad div} \int_{\partial Q} G(x, y) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx, \quad x \in Q. \quad (7) \end{aligned}$$

Далее распишем grad div и вынесем константы за знак интеграла в формуле (7):

$$\begin{aligned} s_{ij} = [S^{kl}]_{ij} = & \int_Q \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(x) dx - \\ & - k_0^2 \iint_{QQ} G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \int_Q \operatorname{grad} \int_Q \operatorname{grad}(G(x, y)) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx + \\
 & + \frac{i\sigma_g}{\omega\varepsilon_0} k_0^2 \int_Q \int_{\partial Q} G(x, y) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx + \\
 & + \frac{i\sigma_g}{\omega\varepsilon_0} \int_Q \operatorname{grad} \int_Q \operatorname{grad}(G(x, y)) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dx, \quad x \in Q. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Внесем под знак интегрирования функцию, которая не зависит от переменной интегрирования в уравнении (8) и перепишем внешние grad в иной форме:

$$\begin{aligned}
 s_{ij} = [S^{kl}]_{ij} = & \int_Q \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(x) dx - \\
 & - k_0^2 \int_Q \int_Q G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dy dx - \\
 & - \int_Q \frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] dy dx + \\
 & + \frac{i\sigma_g}{\omega\varepsilon_0} k_0^2 \int_Q \int_{\partial Q} G(x, y) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dy dx + \\
 & + \frac{i\sigma_g}{\omega\varepsilon_0} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_k} \int_{\partial Q} \operatorname{grad}(G(x, y)) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy dx, \quad x \in Q. \quad (9)
 \end{aligned}$$

4. Постановка задачи поиска резонансов

Для выявления резонансных состояний в задаче, представленной на рис. 1, необходимо составить матрицу системы линейных алгебраических уравнений \mathbf{S} , аналогичную той, что представлена в выражении (4).

Далее необходимо построить кривые α и β согласно уравнениям

$$\alpha(\omega) = \operatorname{Re}(\det[\mathbf{S}(\omega)]) = 0, \quad \beta(\omega) = \operatorname{Im}(\det[\mathbf{S}(\omega)]) = 0. \quad (10)$$

При $\omega = \omega_1 + i\omega_2$ α и β могут выглядеть как показано на рис. 3.

Кривые изображают множества решений уравнений $\operatorname{Re}(\det[\mathbf{S}(\omega)]) = 0$ и $\operatorname{Im}(\det[\mathbf{S}(\omega)]) = 0$ на координатной плоскости (ω_1, ω_2) . Точка пересечения α и β указывает на присутствие резонанса в данной координате.

Таким образом, для определения резонансных состояний задачи на рис. 1 достаточно воспользоваться формулой (9), вычислить определители

полученной матрицы \mathbf{S} системы линейных алгебраических уравнений (\mathbf{f} можно взять любым), определить значения (ω_1, ω_2) , при которых определители равны нулю, и построить соответствующие кривые α и β .

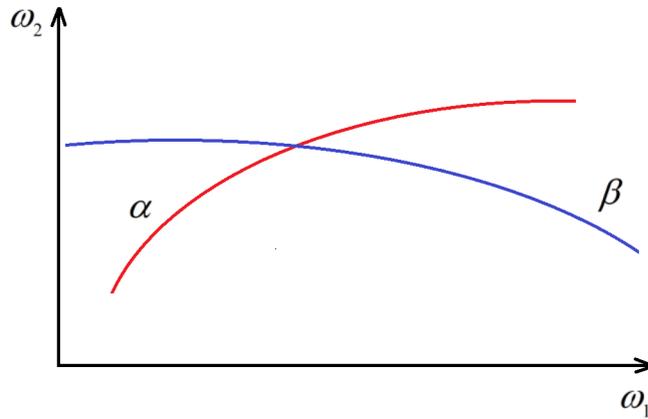


Рис. 3. Пример построения α (красная кривая) и β (синяя кривая)

5. Вычисление проводимости

Получение значений проводимости графена описано, например, в [9, 10]. Будем использовать следующее представление проводимости σ_g :

$$\sigma_g = i \operatorname{Im} \sigma_{\text{intra}} + \sigma^{(3)} |\mathbf{E}^2|.$$

Второе слагаемое обращается в ноль в силу того, что мы рассматриваем линейный случай. В результате мы приходим к следующему определению σ_g :

$$\sigma_g = i \operatorname{Im} \sigma_{\text{intra}}. \quad (11)$$

Линейная часть проводимости вычисляется по следующей формуле:

$$\sigma_{\text{intra}} = \frac{2ie^2 k_b T}{\pi \hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})} \cdot \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\mu_c}{2k_b T} \right) \right), \quad (12)$$

где e – заряд электрона; k_b – постоянная Больцмана; $T = 300$ К – температура; \hbar – приведенная постоянная Планка; τ^{-1} – частота столкновений частиц в графене; μ_c – химический потенциал.

Расчеты σ_g проведем в математическом пакете Maple для получения точных значений проводимости и построения графиков σ_{intra} .

На рис. 4 представлены графики функции σ_{intra} при $\tau = 10 \cdot 10^{-12}$ с, $\mu_c = 0.15 \cdot 10^{-3}$ эВ (ср. с [11]). Наибольшее значение функции достигается при наименьших значениях (ω_1, ω_2) , в значение вещественной части наибольший вклад вносит ω_1 , а в значение мнимой – ω_2 .

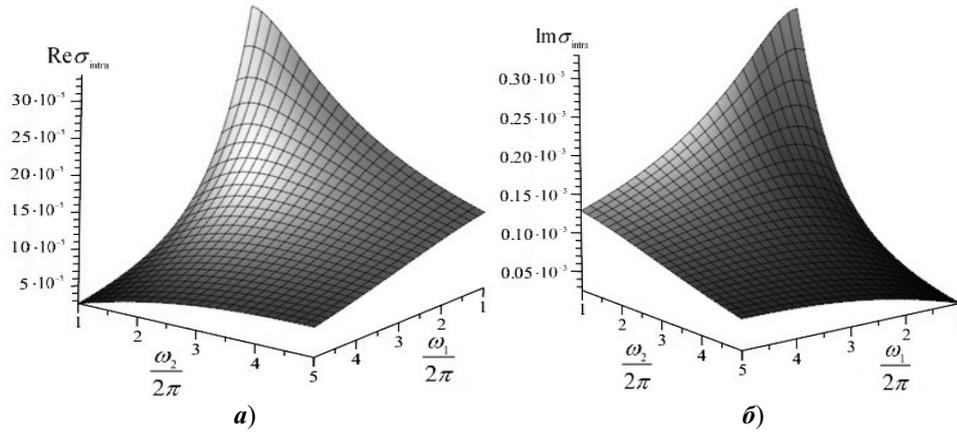


Рис. 4. Графики вещественной (а) и мнимой (б) частей функции $\sigma_{\text{intra}}(\omega_1, \omega_2)$

6. Параллельный алгоритм

Для решения поставленной задачи разработан параллельный алгоритм, реализованный на языке программирования C++ с использованием библиотеки MPI (MSMPI) [12] на персональном компьютере, оснащенный процессором i9-12900 с 16 ядрами и 24 потоками, а также с объемом оперативной памяти в 64 Гб, доступным для вычислений.

Вычисление определителя матрицы осуществляется методом Гаусса. Хранение матрицы системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) производится на различных процессах в ленточном виде, как показано на рис. 5.

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} & S_{17} & S_{18} & S_{19} & f_1 \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} & S_{27} & S_{28} & S_{29} & f_2 \\ \hline S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} & S_{37} & S_{38} & S_{39} & f_3 \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} & S_{47} & S_{48} & S_{49} & f_4 \\ \hline S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} & S_{57} & S_{58} & S_{59} & f_5 \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} & S_{67} & S_{68} & S_{69} & f_6 \\ \hline S_{71} & S_{72} & S_{73} & S_{74} & S_{75} & S_{76} & S_{77} & S_{78} & S_{79} & f_7 \\ S_{81} & S_{82} & S_{83} & S_{84} & S_{85} & S_{86} & S_{87} & S_{88} & S_{89} & f_8 \\ S_{91} & S_{92} & S_{93} & S_{94} & S_{95} & S_{96} & S_{97} & S_{98} & S_{99} & f_9 \end{pmatrix}.$$

Рис. 5. Пример хранения матрицы в ленточном виде на 4 процессах

Эффективность работы параллельного алгоритма отображена на графиках зависимости времени работы программы от количества процессов (рис. 6).

Оба графика отражают уменьшение времени вычислений, что свидетельствует об успешной параллельной реализации алгоритма.

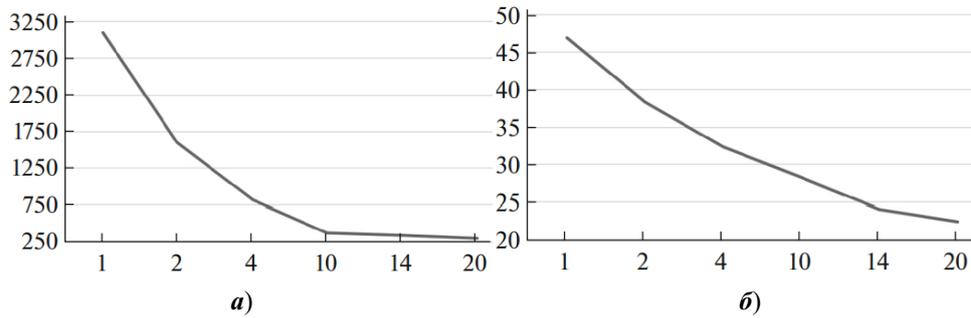


Рис. 6. Зависимость времени работы (с) заполнения матрицы (а) и метода Гаусса (б) от количества процессов

7. Результаты вычислительных экспериментов

Расчет α и β выполнен на прямоугольнике с шагом $h = 0,1$ в терагерцовом диапазоне. Так как отыскание точных значений (ω_1, ω_2) , при которых определитель $\det[\mathbf{S}(\omega)]$ равен нулю, является сложной задачей, будем отбирать такие близкие пары (ω'_1, ω'_2) и (ω''_1, ω''_2) , при которых детерминант меняет знак. Искомую пару пересечений кривых α и β будем определять с помощью полилинейной аппроксимации.

Пусть $R = 0,15$ м – радиус шара. Неоднородность имеет вид $\varepsilon(x) = \frac{1}{1+r(x)}$, где $r(x)$ – расстояние до центра сферы. На рис. 7 показаны пересечения нулей вещественной и мнимой части определителя матрицы \mathbf{S} . Резонансные частоты для шара без графенового покрытия совпадают с изображенными на рис. 7 с графической точностью. Это показывает незначительное смещение резонансной частоты для шара с графеновым покрытием.

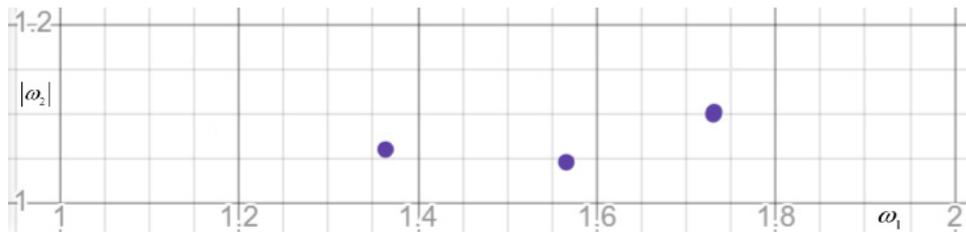


Рис. 7. Пересечения $\text{Re}(\det[\mathbf{S}(\omega)]) = 0$ и $\text{Im}(\det[\mathbf{S}(\omega)]) = 0$

8. Нелинейный случай

Рассмотрим численный метод для решения нелинейной задачи. Выражение (11) превратится в

$$\sigma_g = i \text{Im} \sigma_{\text{intra}} - \frac{i 3 e^4 v_F^2}{32 \cdot \omega^3 \hbar^2 \mu_c} |\mathbf{E}^2|. \quad (13)$$

Таким образом, в операторном виде линейная задача $\mathbf{A}(\omega)\mathbf{E} = 0$ превратится в следующую $\mathbf{A}(\omega, \mathbf{E})\mathbf{E} = 0$. Формула (9) примет вид

$$\begin{aligned}
 s_{ij} = [S^{kl}]_{ij} = & \int_Q \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(x) dx - \\
 & - k_0^2 \iint_{QQ} G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dy dx - \\
 & - \int_Q \frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] dy dx + \\
 & + \frac{i}{\omega \varepsilon_0} k_0^2 \iint_{Q \partial Q} \sigma_g \cdot G(x, y) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dy dx + \\
 & + \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_k} \int_{\partial Q} \sigma_g \cdot \text{grad}(G(x, y)) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy dx, \quad x \in Q. \quad (14)
 \end{aligned}$$

Подставляя σ_g и раскрывая скобки, получаем:

$$\begin{aligned}
 s_{ij} = [S^{kl}]_{ij} = & \int_Q \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(x) dx - \\
 & - k_0^2 \iint_{QQ} G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dy dx - \\
 & - \int_Q \frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G(x, y) \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] dy dx + \\
 & - \frac{1}{\omega \varepsilon_0} k_0^2 \iint_{Q \partial Q} \text{Im} \sigma_{\text{intra}} \cdot G(x, y) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dy dx + \\
 & + \frac{3e^4 v_F^2}{32 \cdot \omega^4 \hbar^2 \mu_c \varepsilon_0} k_0^2 \iint_{Q \partial Q} G(x, y) \left| \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right|^2 \left[\left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} \right] \mathbf{m}_{i_1, i_2, i_3}^k(x) dy dx - \\
 & - \frac{1}{\omega \varepsilon_0} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_k} \int_{\partial Q} \text{Im} \sigma_{\text{intra}} \cdot \text{grad}(G(x, y)) \left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} dy dx + \\
 & + \frac{3e^4 v_F^2}{32 \cdot \omega^4 \hbar^2 \mu_c \varepsilon_0} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_k} \int_{\partial Q} \text{grad}(G(x, y)) \left| \mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right|^2 \left[\left[\mathbf{m}_{j_1, j_2, j_3}^l(y) \right]_{\tau} \right] dy dx, \quad x \in Q.
 \end{aligned}$$

Для решения нелинейной задачи рассмотрим следующий итерационный алгоритм:

• Из уравнения $\mathbf{A}(\omega^{(0)})\mathbf{E}^{(0)} = 0$ найдем $\omega^{(0)}$ и $\mathbf{E}^{(0)}$ (как описано в разд. 3, 4).

• Подставим для $n \geq 1$ $\mathbf{E}^{(n-1)}$ в выражение $\mathbf{A}(\omega^{(n)}, \mathbf{E}^{(n-1)})\mathbf{E}^{(n)} = 0$ и найдем значение $\mathbf{E}^{(n)}, \omega^{(n)}$.

Таким образом мы получим последовательность приближенных решений нелинейной задачи $\mathbf{E}^{(n)}, \omega^{(n)}$ при $n = 1, 2, \dots$. При малых значениях нелинейности можно считать сходимость приближенных решений к точным:

$$\omega^{(n)} \rightarrow \omega^*, \mathbf{E}^{(n)} \rightarrow \mathbf{E}^*.$$

Заключение

В рамках данного исследования рассмотрена математическая модель неоднородного диэлектрического шара, поверхность которого покрыта графеном. Разработан алгоритм, позволяющий определить частоты, на которых происходят резонансные колебания для данной модели. Данный алгоритм был реализован с использованием библиотеки MSMPI; проведенные тесты продемонстрировали его эффективность. В ходе вычислительных экспериментов были получены приближенные значения резонансных комплексных частот.

Список литературы

1. Thang Phan Nguyen, Dang Le Tri Nguyen, Van-Huy Nguyen, Thu-Ha Le, DaiViet N. Vo, Quang Viet Ly, Soo Young Kim and Quyet Van Le. Recent Progress in Carbon-Based Buffer Layers for Polymer Solar Cells // *Polymers*. 2019. Vol. 11 (11). P. 1858. doi: 10.3390/polym11111858
2. Avouris P. Graphene: Electronic and photonic properties and devices // *Nano Letters*. 2010. Vol. 10 (11). P 4285–4294.
3. Geim A. K. Graphene: Status and Prospects // *Science*. 2009. Vol. 324. P. 1530–1534.
4. Lee C., Wei X. D., Kysar J. W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science*. 2008. Vol. 321 (5887). P. 385–388.
5. Yang L., Phua S. L., Toh C. L., Zhang L., Ling H., Chang M., Zhou D., Dong Y., Lu X. Polydopamine-coated graphene as multifunctional nanofillers in polyurethane // *RSC Adv*. 2013. Vol. 3 (18). P. 6377–6385.
6. Naushad Mu. A New Generation Material Graphene: Applications in Water Technology – Photocatalytic Degradation of Pharmaceuticals Using Graphene Based Materials. 2019. Chapter 7. P. 187–208. doi: 10.1007/978-3-319-75484-0_7
7. Цупак А. А. Метод интегральных уравнений в задаче распространения электромагнитной волны в пространстве, заполненном локально неоднородной средой, со слоем графена на границе области неоднородности // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. 2024. № 1. С. 96–106. doi: 10.21685/2072-3040-2024-1-8
8. Skvortsov O. S., Tsupak A. A. Galerkin Method and Parallel Algorithm for Solving the Problem of EM-Wave Propagation in a Locally Inhomogeneous Medium with a Graphene Layer at the Boundary of the Inhomogeneity Domain // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2024. Vol. 45, № 7. doi: 10.1134/S1995080224603813
9. Mikhailov S. A. Quantum theory of the third-order nonlinear electrodynamic effects of graphene // *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93, № 8. P. 085403
10. Hanson G. W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene // *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103, № 6. P. 0643.

11. Otsuji T., Boubanga Tombet S. A. Satou A., Fukidome H., Suemitsu M., Sano E., Popov V., Ryzhii V., Ryzhii V. Graphene-based devices in terahertz science and technology // *J. Phys. D Appl. Phys.* 2012. Vol. 45. P. 303001. doi: 10.1088/0022-3727/45/30/303001
12. Microsoft MPI. URL: [https://msdn.microsoft.com/en-us/library/ bb524831\(v=vs.85\).aspx](https://msdn.microsoft.com/en-us/library/ bb524831(v=vs.85).aspx)

References

1. Thang Phan Nguyen, Dang Le Tri Nguyen, Van-Huy Nguyen, Thu-Ha Le, DaiViet N. Vo, Quang Viet Ly, Soo Young Kim and Quyet Van Le. Recent Progress in Carbon-Based Buffer Layers for Polymer Solar Cells. *Polymers*. 2019;11(11):1858. doi: 10.3390/polym11111858
2. Avouris P. Graphene: Electronic and photonic properties and devices. *Nano Letters*. 2010;10(11):4285–4294.
3. Geim A.K. Graphene: Status and Prospects. *Science*. 2009;324:1530–1534.
4. Lee C., Wei X.D., Kysar J.W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*. 2008;321(5887):385–388.
5. Yang L., Phua S.L., Toh C.L., Zhang L., Ling H., Chang M., Zhou D., Dong Y., Lu X. Polydopamine-coated graphene as multifunctional nanofillers in polyurethane. *RSC Adv*. 2013;3(18):6377–6385.
6. Naushad Mu. *A New Generation Material Graphene: Applications in Water Technology – Photocatalytic Degradation of Pharmaceuticals Using Graphene Based Materials*. 2019;7:187–208. doi: 10.1007/978-3-319-75484-0_7
7. Tsupak A.A. An integral adjustment method for the problem of distributing an electromagnetic wave in a space filled with a local heterogeneous medium, with a graphite layer on a granite area of heterogeneity. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskiye nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2024;(1):96–106. doi: 10.21685/2072-3040-2024-1-8
8. Skvortsov O.S., Tsupak A.A. Galerkin Method and Parallel Algorithm for Solving the Problem of EM-Wave Propagation in a Locally Inhomogeneous Medium with a Graphene Layer at the Boundary of the Inhomogeneity Domain. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2024;45(7). doi: 10.1134/S1995080224603813
9. Mikhailov S.A. Quantum theory of the third-order nonlinear electrodynamic effects of graphene. *Phys. Rev. B*. 2016;93(8):085403
10. Hanson G.W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. *Journal of Applied Physics*. 2008;103(6):0643.
11. Otsuji T., Boubanga Tombet S.A. Satou A., Fukidome H., Suemitsu M., Sano E., Popov V., Ryzhii V., Ryzhii V. Graphene-based devices in terahertz science and technology. *J. Phys. D Appl. Phys.* 2012;45:303001. doi: 10.1088/0022-3727/45/30/303001
12. *Microsoft MPI*. Available at: [https://msdn.microsoft.com/en-us/library/ bb524831\(v=vs.85\).aspx](https://msdn.microsoft.com/en-us/library/ bb524831(v=vs.85).aspx)

Информация об авторах / Information about the authors

Олег Сергеевич Скворцов
аспирант, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

Oleg S. Skvortsov
Postgraduate student, Penza State
University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

E-mail: ghj.ghh.13@mail.ru

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 17.10.2024

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 25.11.2024

Принята к публикации / Accepted 05.12.2024