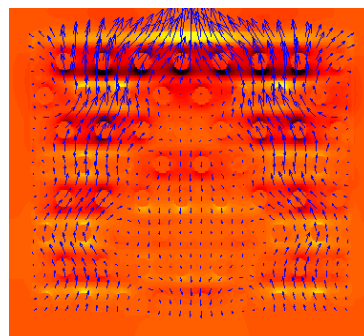
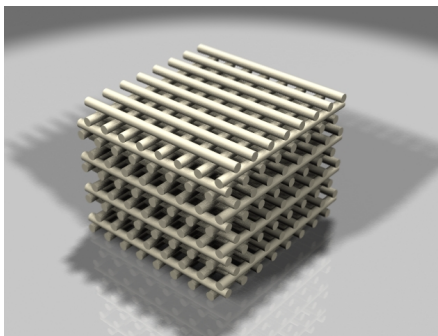
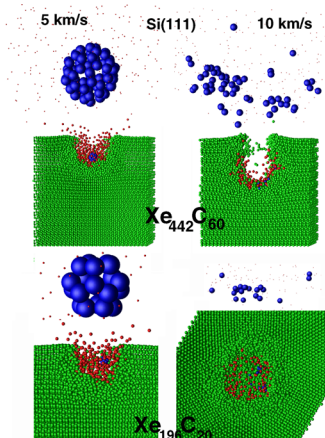
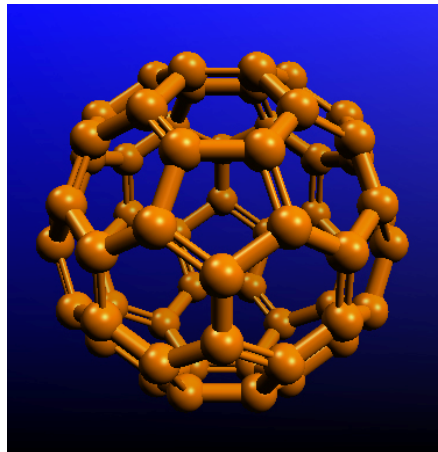


Jan Fagerström, Hans Kariis, Steven Savage, Hans Strifors, Anna Pohl och
Niklas Wellander

Möjligheter med materialmodellering



TOTALFÖRSVARETS FORSKNING SINSTITUT

Sensorteknik
Box 1165
581 11 Linköping

FOI-R--0479--SE

Maj 2002

ISSN 1650-1942

Metodrapport

Jan Fagerström, Hans Kariis, Steven Savage, Hans Strifors, Anna Pohl och
Niklas Wellander

Möjligheter med materialmodellering

Utgivare Totalförsvarets Forskningsinstitut - FOI Sensorteknik Box 1165 581 11 Linköping	Rapportnummer, ISRN FOI-R--0479--SE	Klassificering Metodrapport
	Forskningsområde 6. Telekrig	
	Månad, år Maj 2002	Projektnummer I0104
	Verksamhetsgren 5. Uppdragsfinansierad verksamhet	
	Delområde 62 Signaturanpassning	
	Författare/redaktör Jan Fagerström Hans Kariis Steven Savage Hans Strifors Anna Pohl Niklas Wellander	Projektledare Jan Fagerström
Godkänd av		
Uppdragsgivare/kundbeteckning		
Tekniskt och/eller vetenskapligt ansvarig Jan Fagerström		
Rapportens titel Möjligheter med materialmodellering		
Sammanfattning (högst 200 ord) Modellering av material, dvs formulering, implementering och tillämpning av teoretiska modeller i materialforskningen är ett kraftigt växande forskningsområde. Denna rapport ger en överblick över området med syftet att definiera vad som menas med materialmodellering, och att visa hur materialmodellering kan stärka forskningen vid FOI, särskilt forskningen inriktad mot sensortillämpningar. Efter en introduktion och allmän bakgrund presenteras några försvarstillämpningar och hur forskningen kring dessa kan stärkas av materialmodellering. Därefter ges en kort översikt över nuvarande forskning inom materialmodellering dels internationellt, och dels inom FOI. Ett urval av viktiga metoder inom materialmodellering som är av stort intresse för sensortillämpningar beskrivs relativt ingående. Slutligen presenteras en vision för hur en framtida verksamhet inom materialmodellering kan se ut vid avdelningen för Sensorteknik, samt några generiska projektförslag.		
Nyckelord Materialmodellering, material, teori, beräkningar, sensorer, elektromagnetiska egenskaper, optiska egenskaper, signaturanpassning		
Övriga bibliografiska uppgifter	Språk Svenska	
ISSN 1650-1942	Antal sidor: 39 s.	
Distribution enligt missiv	Pris: Enligt prislista Sekretess	

Issuing organization FOI – Swedish Defence Research Agency Sensor Technology P.O. Box 1165 SE-581 11 Linköping	Report number, ISRN FOI-R--0479—SE	Report type Methodology Report
	Research area code 6. Electronic Warfare	
	Month year May 2002	Project no. I0104
	Customers code 5. Commissioned Research	
	Sub area code 62 Low Observables	
Author/s (editor/s) Jan Fagerström Hans Kariis Steven Savage Hans Strifors Anna Pohl Niklas Wellander	Project manager Jan Fagerström	
	Approved by	
	Sponsoring agency	
	Scientifically and technically responsible Jan Fagerström	
Report title (In translation) Opportunities in computational materials modelling		
Abstract (not more than 200 words) <p>Materials modelling, i.e., formulation, implementation and application of theoretical models in materials research is a research area undergoing rapid development. This report gives a birds eye view of this area, with the purpose to define the term materials modelling, and to show how the research at FOI, especially research in the area of sensor applications, can be strengthened by the use of materials modelling.</p> <p>An introduction and general background to materials modelling is followed by a presentation of a few specific defence applications and how research related to these can be reinforced by the use of materials modelling. A brief overview of current materials modelling research, both internationally and within FOI, is given. A few selected materials modelling methods which are of great interest for sensor applications are described at some length. Finally, a vision for future materials modelling research at the division of Sensor Technology is presented, along with a few generic project proposals.</p>		
Keywords Materials modelling, material, theory, computation, sensor, electromagnetic properties, optical properties, signature management, low observable, stealth		
Further bibliographic information	Language Swedish	
ISSN 1650-1942	Pages 39 p.	
	Price acc. to pricelist Security classification	

Innehåll

Innehåll	5
Förord	7
1 Introduktion	9
2 Försvarstillämpningar	13
3 Nuvarande forskning inom materialmodellering.....	15
4 Arbeten inom materialmodellering vid FOA, FFA och FOI fram till oktober 2001	18
5 Beskrivning av materialmodellering	19
5.1 Kvantkemi	19
5.1.1 Tillämpningar	19
5.1.2 Hartree-Fock och Density Functional Theory	21
5.2 Homogenisering	23
5.3 Elektromagnetiska egenskaper hos fotonbandgaps-material	24
5.3.1 FDTD	26
5.3.2 Planvågsutvecklingsmetoden	27
5.3.3 "Transfer matrix" metoden.....	27
5.4 Modellering av nanostrukturella material.....	29
5.4.1 Några exempel på modellering av olika egenskaper hos nanomaterial	29
5.5 Effektiva impedansrandvillkor för komplexa material	30
5.5.1 Radarsignaturer och signaturkontroll	30
5.5.2 Numerisk beräkning av radarsignaturer	31
5.5.3 Impedansrandvillkor på dielektrisk ytbeläggning	31
5.5.4 Bakgrunden till impedansrandvillkor	31
5.5.5 Sammanfattning impedansrandvillkor.....	32
5.5.6 Litteratur som behandlar impedansrandvillkor	32
6 Sammanfattning och vision	34
Referenser.....	37

Förord

Denna rapport är resultatet av projektet ”Materialmodellering”, en förstudie utförd under år 2001 på avdelningen för Sensorteknik. Flera personer har bidragit till rapporten. De huvudsakliga projektdeltagarna har varit Jan Fagerström, Hans Kariis, Steven Savage och Hans Strifors som alla har arbetat med att skriva och sammanställa rapportens olika delar. Vi bär också huvudansvaret för rapportens innehåll. Anna Pohl och Niklas Wellander har bidragit med var sitt avsnitt, 5.1 (Kvantkemi) respektive 5.2 (Homogenisering).

1 **Introduktion**

Om man antar att kolatomer är sfäriska med diametern 1.48 Å, har atommassan 12.01 u, och bildar olika faser genom att ”packa” atomerna (sfärerna) i olika kristallstrukturer, så kan man beräkna densiteten för diamant (som har diamantstruktur) till 3.98 g/cm³, och grafit (som har grafitstruktur) till 2.08 g/cm³. Beräkningen verifierar det välkända faktum att grafit har lägre densitet än diamant, och är ett (mycket enkelt) exempel på materialmodellering. Noggrannheten i det här speciella exemplet är inte hög – de experimentella värdena [Weast 1980] är 3.52 g/cm³ respektive 2.27 g/cm³, vilket motsvarar felen 13.1% respektive 8.4% – men exemplet har åtminstone några egenskaper som är typiska för teoretisk modellering:

- Exemplet visar hur man utifrån en modell av ett materials struktur (som t ex atom- och kristallstrukturen) kan beräkna en egenskap på en annan ”nivå” hos materialet (som t ex den makroskopiska densiteten). Även det omvända är ibland möjligt: att utifrån information om materialets makroskopiska egenskaper, via en materialmodell, beräkna materialets mikroskopiska egenskaper.
- Modeller och mätningar berikar varandra: Avvikelserna från experimentella data ger anledning till förbättring av materialstrukturen i modellen, och därigenom en ökad kunskap om materialens egenskaper. (I exemplet beror avvikelserna mellan beräknade och experimentella densiteter på att diametern 1.48 Å inte stämmer med de verkliga bindningsavstånden, som är olika i diamant respektive grafit.)
- Om man har tillgång till bra modeller är det ofta enklare att beräkna, än att mäta en viss materialegenskap.

Den här rapporten handlar om materialmodellering. Syftet är att ”definiera” området och ge exempel på hur materialmodellering kan bidra till att stärka forskningen på FOI. Vad menas med materialmodellering? En möjlig definition är följande:

Materialmodellering innebär att en teoretisk modell av ett material formuleras, implementeras (som datorprogram), och används för att beräkna egenskaper hos materialet.

Med teoretisk modell menas en beskrivning av materialets struktur (t ex dess atom- och kristallstruktur, eller strukturen hos komponenterna i ett kompositmaterial) tillsammans med lagar för växelverkan i materialet och med omgivningen. Ett exempel är kristallstruktur och bindningsavstånd hos kristallina material, tillsammans med potentialen för bindningarna, vilket kan användas för att beräkna t ex kompressibiliteten, eller den mekaniska hållfastheten. Ett annat exempel är strukturen

hos ett kompositmaterial, tillsammans med de dielektriska egenskaperna hos komponenterna i kompositen, vilket kan användas för att beräkna de effektiva dielektriska egenskaperna hos kompositmaterialet. Ytterligare ett exempel är den molekylära strukturen hos en polymer, samt lagar som styr växelverkan mellan polymersegment och växelverkan mellan ljus och elektronerna i polymeren, vilket kan användas för att beräkna polymerens optiska egenskaper.

Vad som omfattas av ordet material bör även tydliggöras. Definitionen ovan sätter egentligen inga begränsningar. Och för försvarstillämpningar, som ligger i fokus i denna rapport, är många olika materialtyper aktuella. Några exempel är metaller och halvledare i kristallin eller amorf fas, keramer, molekylära material och polymerer. Dessutom kan material bestå av flera komponenter, t ex komposit och fiberförstärkt polymer som är ett vanligt förekommande exempel på denna typ av material. Ett annat exempel är mikrovågsabsorbenter, populärt kallade "stealth" material, som består av en komplex blandning av t ex polymerer och magnetiska partiklar. Det bör poängteras att på den mikrostrukturella nivån kan de flesta material betraktas som komposit, eftersom det består av olika faser eller komponenter med vitt skilda egenskaper.

Materialmodellering syftar alltså till att beskriva en eller flera egenskaper hos ett material på ett matematiskt sätt. Det kan gälla mycket grundläggande egenskaper som dess atom- eller kristallstruktur, eller mer sammansatta egenskaper såsom hållfasthet, magnetiska eller optiska egenskaper, som är beroende av den atomära strukturen eller av bearbetning, värmebehandling mm, som påverkar den makroskopiska strukturen hos materialet. Materialmodellering omfattar även att beskriva hur ett material beter sig under extern påverkan, t ex under bestrålning med synligt ljus eller mikrovågor (reflektion, absorption, mm), eller under mekaniska påverkan (hur ett material deformeras på grund av belastning).

Definitionen av materialmodellering ovan inkluderar alltså många olika områden och egenskaper – fler än nödvändigt för att visa hur användningen av materialmodellering kan stärka forskningen vid avdelningen för Sensorteknik, FOI. Rapporten är därför avgränsad till modellering av i första hand materialegenskaper som är av intresse för elektrooptiska sensortillämpningar (elektromagnetiska och optiska materialegenskaper), och endast i andra hand övriga materialegenskaper. Rapporten behandlar ändå ett ganska brett område, eftersom intressanta försvarstillämpningar inom sensorteknik inkluderar ett stort antal olika material med ett brett spektrum av egenskaper. Det ska noteras att materialmodellering inom andra områden görs inom FOI, t ex på avdelningen för Vapen och skydd. Det gäller t ex modellering av hur material uppträder under mekanisk påverkan, som görs på institutionen för Skydd och material, institutionen för Skydd och verkan, institutionen för Framdrivning och stridsdelar, och även på avdelningen för Flygteknik, institutionen för Struktur- och materialteknik. Det gäller också modellering av förbrännings- och detonationsprocesser som är relevant i energetiska material för sprängämnen och raketbränsle. Dessa studeras på institutionen för Energetiska material.

Materialforskningen vid FOI är av tradition stark inom mätning och materialkaraktärisering. Samtidigt kan man konstatera att internationellt utvecklas materialforskningen mycket snabbt, inte minst inom modellering av material. För att

behålla styrkan i ett internationellt perspektiv är det därför nödvändigt att ha en stark verksamhet även inom modellering av material. Till exempel har amerikanska Office of Naval Research (ONR) definierat området som en av dess fyra "Grand Challenges" [ONR] som ska lösas inom en tidshorisont av 20 till 50 år. Och i den nyligen genomförda internationella utvärderingen av Avdelningen för Sensorteknik[Nilsson 2000] konstateras att "The need for expanding into computational materials science is unquestionable[...]".

Det finns många skäl till att utnyttja materialmodellering som en del i forskningen:

1. **Kunskap.** Modellerna ger kunskap om de fenomen som bestämmer materialens egenskaper, en kunskap som kan utnyttjas som vägledning vid utformning av nya material, eller vid tolkning av mätresultat. En kombination av modellering och experiment är nödvändig för att i grunden förstå materialens egenskaper.
2. **Utformning.** Matematiska modeller, oftast implementerade som datorprogram, ger en möjlighet att utforma materialegenskaperna efter önskemål eller de krav som finns, innan materialet tillverkas. Ett par exempel är optimering av blandningsproportioner och struktur hos signaturmaterial. Utformning med modellering öppnar också möjligheter att upptäcka t ex ovanliga materialkombinationer med helt nya egenskaper eller egenskapskombinationer.
3. **Effektivisering.** Modellering kan leda till snabbare och effektivare utveckling av nya material, genom att olika materialförslag kan "prövas" före tillverkning. På så sätt kan antalet material som tillverkas reduceras till de mest lovande. Detta innebär också att utvecklingen blir mer kostnadseffektiv.
4. **Undersökning.** Beräkningar gör det möjligt att undersöka material som inte finns tillgängliga, t ex sådana material som inte än är tillverkade, som är placerade där mätningar inte kan utföras, eller som inte finns i landet. Ett exempel är bedömning av nya material och forskningsidéer.
5. **Visualisering.** Beräkningar ger möjlighet till visualisering och uppskattning av viktiga storheter och fenomen, även sådana som är mycket svåra att mäta. Ett exempel är de elektromagnetiska fälten inuti materialen.
6. **Indata till simuleringar.** Egenskaper som beräknas på materialnivå kan (i många fall) användas som indata i simuleringar på högre nivå. Ett exempel är beskrivningen av olika ytors egenskaper vid simulering av system (flygplan, fordon, etc) eller systemkomplex (flera fordon och sensorer i bakgrundsmiljö) genom att använda

effektiva randvillkor. Modellering kan i detta sammanhang ge en bas för systemsimuleringen, genom att ge tillgång till effektiva egenskaper för olika material.

Rapporten är disponerad på följande sätt. I avsnitt 2 ges exempel på några olika försvarstillämpningar, och deras koppling till materialtyper och materialmodeller. Avsnitten 3 och 4 ger två korta översikter över nuvarande forskning inom materialmodellering internationellt respektive inom FOI. I avsnitt 5 ges en utförlig presentation av olika typer av materialmodellering av intresse för försvarsforskningen. Slutligen diskuteras rapportens slutsatser i avsnitt 6.

2 Försvarstillämpningar

Tabell 1 innehåller några exempel på olika försvarstillämpningar, samt kopplingen mellan tillämpning – komponenter eller funktioner – material – materialmodell eller beräkningsmetod. Syftet är att ge exempel på kopplingen mellan materialmodelleringsmetoder och specifika försvarstillämpningar.

Tabell 1. Några exempel på kopplingen mellan beräkningsmetoder, materialtyp, komponenter och tillämpningar.

Modell eller beräkningsmetod	Material (exempel)	Komponent eller funktion	Försvarstillämpning
Kvantmekaniska metoder	Halvledare (organiska och oorganiska)	Molekylär opto-elektronik. Solceller och lysdioder. Elektro-optiska egenskaper hos material för sensorer.	El-generering t ex för marksensorer och UAV:er. Optiska sensorer.
Kvantkemiska metoder	Metall-organiska föreningar	Linjära och icke-linjära optiska egenskaper.	Optiska filter. Skydd mot laser.
Kvantmekaniska metoder	Kemiska stridsmedel.	Nedbrytning av organoklor- och organobrom-föreningar	Sanering av kemiska stridsmedel med hjälp av ljus
Spridningsmodeller	Partiklar i atmosfären	Vågutbredning och spridning av strålning i atmosfären – atmosfärstransmission.	Spaning, styrning av stridsdelar
Spridningsmodeller för oordnade, heterogena material. Vågutbredning i komplexa materialstrukturer. Kvantmekaniska metoder.	Färger. Konstruktionsmaterial	Kontroll av emission och absorption. Spridning i bulk och mot ytor med struktur. Egenskaper hos färger. Växelverkan mellan strålning och materialstrukturer (t ex tunna skikt).	Optisk och IR signaturanpassning.
Varierande modeller beroende på materialstruktur. Vågutbredning i komplexa material.	”Left-handed materials”, konstgjorda kirala material.	Artificiella dielektrika. Substrat för antenner. Linser.	Antennsystem. Optiska system.
Numeriska metoder. Vågutbredning i komplexa material.	Cellvävnad	Påverkan av biologisk vävnad av mikrovågor (t ex radar, mobiltelefoner)	Skydd mot mikrovågor.

Modell eller beräkningsmetod	Material (exempel)	Komponent eller funktion	Försvarstillämpning
Numeriska metoder för periodiska strukturer. Kvantmekaniska metoder.	Halvledare	Design av optiska komponenter (fibrer, kretsar med fotonkristaller)	Optiska sensorer och system.
Homogenisering	Kompositer och materialblandningar. Aktivt material i matrismaterial.	Beräkning av effektiva elektromagnetiska egenskaper hos materialblandningar.	Signaturmaterial i optiska och mikrovågsområdet. Radomer för antenner.
Numeriska metoder	Plasma	Växelverkan elektromagnetisk strålning med plasma för signaturanpassning	Förbättrad radarsignatur
Kvantmekaniska metoder	Halvledare (organiska och oorganiska). Ledande polymerer. Foto- och elektrokroma material.	Optiskt och elektriskt styrbara komponenter (styr transmission)	Radomer. Filter. Signaturanpassning.
Spridningsmodeller för strukturella material. Vågutbredning i komplexa materialstrukturer.	Förlustmaterial i matris. Multilagerstrukturer. Frekvensselektiva ytor.	Radarabsorbent. Absorptionsmekanismer och spridning i radarabsorberande material och materialstrukturer.	Signaturanpassning i radarområdet. Lastbärande multifunktionella material.
Numeriska metoder. Modeller för periodiska material.	Fotoniska kristaller.	Antenner: styrning av antennegenskaper med hjälp av designade material, och materialstrukturer (t ex fotonkristaller som substrat). Optiska kretsar och fibrer.	Antennsystem. Optiska system. Dielektriska speglar och filter. Uni-direktionella speglar. Signaturanpassning.
Kvantmekaniska modeller.	Halvledare. Molekyler.	Kvantprickar. Optisk informationslagring och signalbehandling.	Media för datalagring. Optiska datorer.

3 Nuvarande forskning inom materialmodellering

Detta avsnitt ger några utvalda exempel på forskning och tillämpningsområden inom materialmodellering. Sammanställningen baseras på uppgifterna från ett antal översiktsartiklar och böcker.[Hafner 1999, MRS Bulletin 2001, Ohno 1999, Sihvola 1999] Syftet är att ge ett intryck från pågående forskning, tillämpningar och möjligheter inom materialmodellering.

De flesta studier av materialegenskaper behandlar strukturella egenskaper hos material, t ex kristallstruktur, geometri och defekter hos materialen. Det är också vanligt med modellering av egenskaper med nära anknytning till struktur, t ex hållfasthet, kemiska reaktioner, vibrationspektra, eller dynamiska förlopp i materialen. Det finns flera orsaker till detta. En är tradition: struktur är den främsta egenskap som traditionellt förknippas med ”materialegenskap”. Modeller för struktur är också de som utvecklats under längst tid. En konsekvens är att ett flertal generella mycket avancerade programpaket för materialstruktur finns utvecklade. Även modellering av elektroniska egenskaper är mycket långt utvecklat för många materialtyper. Några exempel på detta är beräkning av elektroniska bandstrukturer hos kristallina material (t ex halvledare), och beräkning av elektronorbitaler och laddningsfördelningar hos molekyler. De flesta sådana beräkningar är baserade på densitetsfunktionalteori (DFT), molekylodynamik (MD), eller Hartree-Fock (HF)-teori (se sektion 5.1.2).

I [Hafner 1999] ges en mängd exempel på framförallt strukturella och elektroniska egenskaper som kan modelleras på atomär nivå med mycket goda resultat idag. Några exempel är:

- Struktur och faser hos lågviktslegeringar och ultrahårda material (DFT).
- Struktur och fasövergångar hos SiO₂ (DFT).
- Struktur och katalys i zeoliter (DFT).
- Vibrationer och geometrier hos ”floppy” molekyler (*ab-initio* Monte Carlo)
- Förändringar av geometri och egenskaper vid adsorption av färgämnen på ytor (*ab-initio* MD)
- Struktur och stabilitet hos kisel/metall gränssnitt (DFT).
- Struktur och elektroniska egenskaper vid molekyl (t ex gas)/ytväxelverkan (DFT).
- Struktur och formation av katalysatorer baserade på t ex Au+Ni, samt Pt, och katalys av CO+O→CO₂ på dessa ytor (DFT).

En annan växande trend är materialmodellering på flera olika skalor, ”multi scale simulations”. Syftet med denna typ av beräkningar är att modellera makroskopiska egenskaper och hur de påverkas av materialens mikroskopiska struktur. Detta görs genom att koppla modeller på flera längd- (från elektroner och atomer till kontinuum) och tidsskalor (från 10^{-15} s till 1 s), något som än så länge är omöjligt att göra med en enda modell. Några exempel på sådana simuleringar återfinns i [MRS Bulletin 2001]. Här presenteras modellering av t ex deposition av Al på Si-substrat (relevant för tillverkning av integrerade kretsar), där modeller på atomär nivå kopplas till kontinuummodeller för tillväxt av tunna skikt. Ett annat exempel som presenteras i [MRS Bulletin 2001] är utbredningen av sprickor i Al, där modeller på olika längdskala används i olika delar av materialet, från en atomär beskrivning vid sprickans spets, till en kontinuummodell baserad på finita elementmetoden långt från sprickan. Det är kopplingen mellan brutna kemiska bindningar vid sprickans spets, till makroskopiska krafter i materialet som gör denna koppling nödvändig.

Det är av stort intresse att kunna modellera funktionella makroskopiska materialegenskaper. Med funktionella egenskaper avses här egenskaper som bara indirekt är kopplade till materialens struktur, t ex optiska, elektromagnetiska och magnetiska egenskaper. Det är möjligt sedan ganska lång tid att modellera t ex effektiva dielektriska och magnetiska egenskaper hos material med hjälp av fenomenologiska eller halvempiriska modeller. En modern utmärkt bok som beskriver teori, modeller och tillämpningar av homogenisering och blandningsformler för elektromagnetiska egenskaper hos material är [Sihvola 1999]. Sihvola visar hur olika homogeniseringsmetoder kan användas för att modellera effektiva dielektriska egenskaper hos olika typer av materialblandningar, även t ex kirala, anisotropa och icke-linjära material. Han visar också hur metoderna framgångsrikt kan tillämpas på några viktiga naturliga material, som t ex vatten, snö, is, mineraler, trä och biologisk vävnad. En modern utveckling inom homogenisering av elektromagnetiska materialegenskaper är att beräkna effektiva elektromagnetiska egenskaper genom matematisk homogenisering av de grundläggande differentialekvationerna. Forskning inom detta område beskrivs i sektion 5.2.

Med hjälp av homogenisering kan man beräkna effektiva, makroskopiska elektromagnetiska egenskaper hos en heterogen materialblandning, utifrån komponenternas makroskopiska egenskaper. Mycket forskning pågår också inom modellering av elektromagnetiska och optiska egenskaper baserat på atomära (eller molekylära eller kristallina) modeller av materialen. Det kan gälla dielektricitetsfunktionen hos metaller, halvledare och keramer, samt optisk absorption och icke-linjära optiska egenskaper hos organiska molekyler och polymerer. Det finns en mycket stor mängd vetenskapliga arbeten publicerade om detta. Ett exempel är [Åstrand 2000] där de optiska egenskaperna hos 16 olika azobensen färgämnen beräknats med kvantkemiska metoder. Studien visar hur modellen kan användas för att med hög noggrannhet beräkna optiska spektra för en uppsättning olika material, och sortera ut de lämpligaste kandidaterna för tillämpning inom optisk datalagring. Ett par andra exempel är [Holm 1999] och [Skoroduma 2001]. Dessa studier är inriktade på struktur och optiska egenskaper hos ceriumoxider (CeO_2 , Ce_2O_3) med tillämpningar som katalysatorer och i elektroniska kretsar, respektive olika faser av keramen

aluminiumoxid (Al_2O_3). Båda studierna använder sig av densitetsfunktionalteori (DFT). Resultaten jämförs med experiment och visar hur modellerna ger mycket god överensstämmelse vid beräkning av dielektricitetsfunktionerna för materialen.

Till sist bör nämnas att många typer av modeller för att beräkna olika materialegenskaper (struktur och funktionella egenskaper) är mycket beräkningskrävande. Den snabba datorutvecklingen, och utvecklingen av nya beräkningsalgoritmer, innebär dock att fler och fler realistiska material och egenskaper blir möjliga att modellera med de mest exakta metoderna. Utmaningarna är ofta mycket stora, men intrycket är att området materialmodellering står inför ett genombrott vad gäller användbarhet vid vetenskaplig och teknologisk utveckling av nya material.

4 Arbeten inom materialmodellering vid FOA, FFA och FOI fram till oktober 2001

Relativt lite forskning vid FOA och FOI använder materialmodellering i betydelsen att beräkna funktionella materialegenskaper utifrån struktur och komponenternas (partiklar, atomer, molekyler etcetera) materialegenskaper. De flesta arbetena behandlar mekanisk modellering av material, t ex vid explosioner och penetration av projektiler, samt beräkningar av egenskaper hos explosiva material och drivmedel.

Sökning efter rapporter som behandlar eller använder olika typer av materialmodellering i FOIRAPP-databasen har utförts. Sökningar med följande sökord utfördes, och aktuella rapporter sorterades ut genom granskning av titel och nyckelord:

- SER=(FOA ELLER FOI) OCH NYCK=#material#
- SER=(FOA ELLER FOI) OCH NYCK=#material# OCH
(NYCK=#model# ELLER NYCK=#theor# ELLER
NYCK=#comput# ELLER NYCK=#calculat# ELLER
NYCK=#simul#)
- SER=(FOA ELLER FOI) OCH NYCK=#quantum#

Dessutom utfördes sökning i litteraturdatabasen Libra III vid FOI avdelning 8 (fd FFA) med motsvarande sökord.

En sammanställning av sökresultaten ges i Tabell 2. Rapporterna kan delas in i fem grupper som är inriktade mot olika egenskaper, se Tabell 2. Termen ”material” är starkt förknippad med konstruktionsmaterial av olika typer. Vi är dock främst intresserade av modellering av material och egenskaper som är intressanta för tillämpningar i sensorsammanhang, t ex sensormaterial, skydd mot strålning, signaturmaterial etc. I Tabell 2 återfinns endast två rapporter inom detta område, se [Ousbäck 2000, Forssell 2000]. Eventuellt finns det ytterligare någon FOI-rapport som behandlar modellering av material för sensortillämpningar, som inte fångats upp av denna litteratursökning.

Tabell 2. Antal FOI-rapporter som behandlar eller använder olika typer av materialmodellering, inom olika tillämpningsområden.

Ämnesområde	Antal
Egenskaper hos explosiva material och framdrivningsmedel.	3
Mekaniska egenskaper vid explosioner och projektilpenetration.	11
Mekaniska egenskaper hos konstruktionsmaterial (främst kompositmaterial för flygplan)	5
Egenskaper hos signaturmaterial i mikrovågsområdet.	1 [Ousbäck 2000]
Egenskaper hos signaturmaterial i optiska området.	1 [Forssell 2000]

5 *Beskrivning av materialmodellering*

5.1 **Kvantkemi**

1998 års Nobelpris i kemi röntade en del förvåning i forskarkretsar. Detta delades nämligen av John Pople, professor i kemi och Walter Kohn, professor i fysik. Dessa två personer representerade två olika skolor inom beräkningskemi/fysik: mer traditionell kvantkemi eller Hartree-Fock (HF) och ”Density Functional Theory” (DFT). Det hade länge pågått en fejd mellan de två skolorna, något som lätt blir fallet då personer ägnar kanske flera decennier till att utveckla just sin metod. Som yngre forskare kunde man tycka att det var som att jämföra äpplen med päron, båda metoderna var bra – varför jämföra?

När man studerar system på molekylnivå räcker den klassiska (Newtonianska) mekaniken inte till utan man måste använda sig av kvantmekanik. Man får oerhört komplicerade ekvationssystem som måste lösas numeriskt. Detta hade i princip varit omöjligt om det inte samtidigt skett en enorm utveckling på datorsidan. Men samtidigt som datorerna utvecklats har forskarna blivit mer och mer krävande både vad det gäller att man vill studera större och större system och att man vill göra beräkningarna noggrannare och noggrannare.

I följande sektion presenteras några exempel på tillämpningar av kvantkemiska beräkningar. Därefter ges en mycket kort introduktion till kvantkemiska beräkningsmetoder (HF och DFT), med referenser till vidare läsning.

5.1.1 **Tillämpningar**

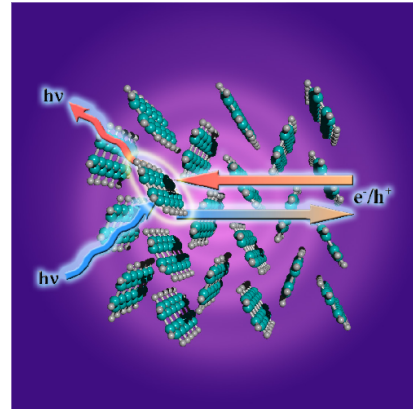
Vad kan man ha för praktisk användning av kvantkemin? Ett grundläggande användningsområde är att bestämma geometrin hos molekyler: vinklar, bindningsavstånd och bindningsenergies. Optiska egenskaper kan också studeras. Genom att beräkna övergångar mellan olika energinivåer för elektronerna i molekyler kan man simulera optiska spektrum som direkt kan jämföras med experiment. Även icke-linjära optiska effekter studeras med framgång. Kvantkemin kan också användas för att studera andra egenskaper än optiska. Man kan t ex studera adsorbat på ytor och räkna ut desorptionsenergin, dvs den energi som krävs för att avlägsna molekylen från ytan. Detta är viktig information för att förstå hur olika material växelverkar med varandra. Med molekylärdynamik baserad på kvantkemi kan man dessutom studera kemiska reaktioner. Kort sagt, med kvantkemi kan man studera kemisk bindning i alla dess former.

Vi ska här nedan ge några exempel på vad man kan använda kvantkemin till. Tre olika tillämpningar av det senast på forskningsfronten visas. Vi har fått tillstånd att använda material från Professor Hai-Ping Cheng, University of Florida, USA och Dr Jérôme Cornil, Université de Mons-Hainaut, Belgien.

Exempel 1: Optisk emission och absorption i pentacen.

Detta exempel är en studie av de optiska egenskaperna hos ett material baserat på pentacen-molekyler. Studien beskrivs utförligt i [Cornil 2001].

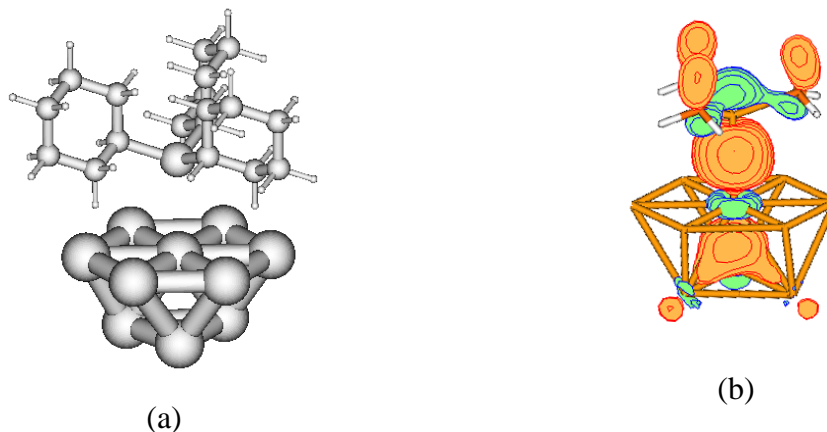
Figur 1. Schematisk beskrivning av strukturen hos kristallint pentacen samt växelverkan mellan ljus (fotoner) och laddningar (elektroner) i materialet.



Dr. Jérôme Cornil och hans medarbetare vid Université de Mons-Hainaut har gjort beräkningar där man studerar hur ljus antingen emitteras eller absorberas och omfördelar laddningar i pentacen. Med hjälp av kvantkemiska beräkningar visar de hur fotoner (ljus) och elektroner växelverkar i materialet. Infallande ljus exciterar elektronerna i molekylerna till högre energitillstånd. Omvänt, så uppstår ljus då en elektron ”ramlar ner” från ett högre, exciterat energitillstånd till sitt grundtillstånd. Geometrin för de system som studerats, och principen för de optiska processer som studeras illustreras i Figur 1. Genom beräkningar har man kommit fram till att i packade strukturer, som de i Figur 1, sker en växelverkan *mellan* pentacenmolekylerna dvs. intermolekylär växelverkan, vilket har en avgörande betydelse för materialets funktion.

Exempel 2: Tricyclohexylfosfin på rodiumyta.

Detta exempel är hämtat från ett forskningsprojekt utfört av Dr. Anna Pohl och Dr. Kajsa Uvdal. (Resultaten är inskickade för publikation i Chem. Phys. Lett.)



Figur 2. Schematisk illustration av växelverkan mellan tricyclohexylfosfin och ett rodiumkluster. (a) Geometri; (b) Geometri med elektronorbitaler (elektronfördelning) hos strukturen.

Fosfiner används inom gruvnäringen för anrikning av metaller. Rodium är en metall ur platinagruppen som används t.ex. i katalysatorer. I detta exempel studeras

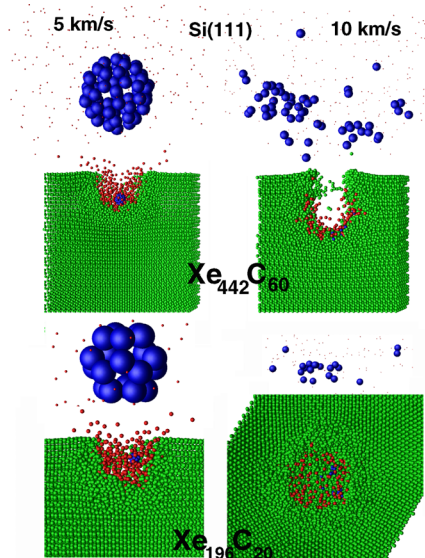
hur tricyclohexylfosfin binder till ett rodiumkluster. Geometrin för det system som studeras illustreras i Figur 2a. Figur 2b illustrerar hur molekylerna binder till klustret genom sina molekylorbitaler. Här syns tydligt att även de undre lagrens metallatomer verkar spela en betydande roll i bindningen. Man kan även räkna ut desorptionsenergin, dvs. den energi som krävs för att bryta bindningen mellan molekylerna och metallklustret. Detta kan åstadkommas experimentellt genom uppvärmning av metallen. Det beräknade värdet för desorptionsenergin stämmer väl överens med det uppmätta. Beräkningen har gjorts med en hybrid metod, B3LYP (se Sektion 5.1.2).

Exempel 3: Mjuklandning av C_{60} och C_{20} på kiselytor

Detta exempel är hämtat från Prof. Hai-Ping Cheng och medarbetare, genom privat kommunikation. Ibland kan man vara intresserad av att föra in en sorts molekyl i ett material utan att molekylerna själva går sönder under processens gång. Detta fick professor Hai-Ping Cheng vid University of Florida att studera mjuklandning av molekyler på ytor med hjälp av molekylodynamik-beräkningar.

Man var intresserad av att göra en mjuklandning av Buckminsterfullerene, den så kallade "fotbollsmolekylen" C_{60} , på en kiselyta och därför omger man molekylerna med ett skyddande lager av xenonatomer. För en ingångshastighet av 5 km/s ser vi överst till vänster i Figur 3 att molekylerna skyddas av de omgivande Xe-atomerna. För en hastighet av 10 km/s däremot splittras molekylerna (överst till höger i Figur 3). Samma resultat fås även för en mindre "kol-fotboll" C_{20} (undre bilderna i Figur 3).

Figur 3. Schematisk illustration av resultatet efter en kollision mellan C_{60} (övre bilderna) respektive C_{20} (undre bilderna) med en kiselyta, vid två olika hastigheter: 5 km/s (vänstra bilderna) respektive 10 km/s (högra bilderna).



5.1.2 Hartree-Fock och Density Functional Theory

I denna sektion ges en mycket kort introduktion till kvantkemiska beräkningsmetoder som använts till exempel för exemplen i Sektion 5.1.1. När man studerar fenomen på molekylnivå gäller inte längre den klassiska (Newtonianska) mekaniken

utan man måste i stället vända sig till kvantmekaniken. Centralt för kvantmekaniken är att man löser Schrödingerekvationen:

$$H\Phi = E\Phi$$

där H är Hamiltonianen för systemet, E energi-egenvärdet för systemet, och Φ är vågfunktionen som beskriver tillståndet. Kvantmekaniken har tillämpats med framgång och utan den vore det omöjligt att studera fenomen på molekylnivå.

Hamiltonianen är en operator och beskriver vad men kan göra med vågfunktionen. Hamiltonianen för en elektron i ett mångpartikelsystem kan skrivas som

$$H^{el} = \frac{1}{2} \sum_i^N \nabla_i^2 + \sum_{A,B}^{M,M} \frac{Z_A Z_B}{R_{A,B}} + \sum_{i,j}^{N,N} \frac{1}{r_{i,j}} - \sum_{i,A}^{N,M} \frac{Z_A}{r_{i,A}}$$

där vi använt oss av Born-Oppenheimer approximationen dvs att elektronerna rör sig så snabbt i förhållande till atomkärnorna att de senare kan betraktas som stillastående. Den första termen ger bidraget till den kinetiska energin, den andra beskriver kärnkärn växelverkan, den tredje elektron-elektron-växelverkan och slutligen den fjärde växelverkan mellan kärna och elektron.

Tyvärr går det bara att lösa Schrödingerekvationen exakt för denna Hamiltonian i ett enda fall, nämligen för väteatomen. Det blir m.a.o. nödvändigt att införa approximationer. Det är här de två metoderna Hartree-Fock (HF) och densitetsfunktionalteori (DFT) skiljer sig åt. Man ska också ha klart för sig att metoderna uppstod i två skilda miljöer.

Kemisterna ville ha noggranna beräkningar men nöjde sig med att studera små system. De gick vägen via Hartree-Fock ekvationerna (HF) som leder till Coulomb- och växelverkans- integralerna.[Szabo 1989] Det som modellen inte tar hänsyn till kallar man korrelationseffekter. Programvara som innehåller HF är t.ex. Gaussian[Frisch 1998] och Dalton.[Helgaaker 1997]

Materialfysikerna å andra sidan ville studera stora system, framförallt metaller. De utgick från Kohns bevis från 1964 där han säger att elektrondensiteten är den avgörande parametern för att bestämma systemets energi [Hohenberg 1964, Kohn 1965]. Rent praktiskt så bortser man från växelverkans-integralen och ersätter denna med en lösning för problemet med en fri elektrongas och tar på så sätt hänsyn till både växelverkan och korrelationseffekter. Denna metod kallas densitetsfunktionalteori ("Density Functional Theory", DFT). Exempel på DFT-baserade metoder (program) är LMTO och Dgauss[Springborg 1987, Godbout 1992] och en mängd andra metoder.[Parr 1999] DFT-metoderna har använts framgångsrikt, framförallt då man studerar metaller. Däremot har man problem att behandla exciterade tillstånd med DFT. Här använder man i stället med framgång en utveckling av HF som kallas "Configuration Interaction", CI.

Det existerar ytterligare en kategori av metoder. Dessa kallas semi-empiriska och kommer ursprungligen från HF, men man har infört experimentella parametrar för att snabba upp metoden. Exempel på dessa är ZINDO och AM1. [Zerner 1980, Dewar 1985]

I modernare tid har det uppstått sk hybridmetoder mellan HF och DFT t ex B3LYP. [Lee 1988] Man har än så länge inte lyckats förena de två metoderna. Det finns m.a.o. ingen klar teori för hur man går från den ena teorin över till den andra, men det pågår en febril aktivitet inom området. Resultaten av denna aktivitet kommer att leda till bättre beräkningsmetoder, samtidigt som man får en ökad förståelse för den bakomliggande fysiken.

5.2 Homogenisering

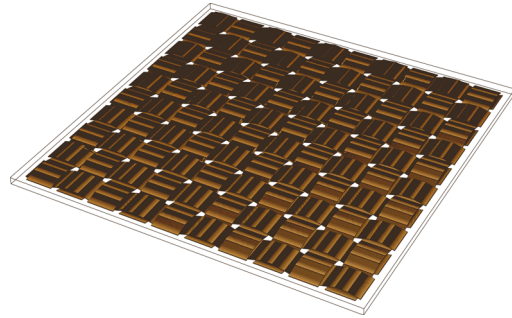
Heterogena material med många skalor, t ex kolfiberkompositer, keramiska material, supergitter etc, kan inte modelleras med ”vanliga” numeriska verktyg. Anledningen till detta är att om de fina strukturerna skall lösas upp i ett numeriskt nät så får man ekvationssystem som är för stora för dagens datorsystem: man kommer utan vidare upp i miljarder obekanta.

Ett sätt att komma runt problemet med de fina skalorna är att homogenisera problemet. Homogenisering innebär att man ersätter modellen av det heterogena materialet med en modell av ett homogent material som har samma makroskopiska egenskaper som det heterogena materialet. Om finheten i det heterogena materialet är tillräckligt liten så kommer lösningarna till det homogena problemet att vara mycket goda approximationer till det heterogena problemets lösningar. I praktiken så löser man en partiell differentialekvation med periodiska randdata på en enhetscell som representerar de fina strukturer som finns i problemet. Lösningarna till detta lokala problem används sedan för att beräkna nya konstitutiva samband för det homogena materialet.

Metoden att homogenisera heterogena material har använts med stor framgång på mekaniska problem, t ex för att beräkna elasticitetsmodulen (Johan Byström, Luleå Tekniska Universitet). Elektromagnetisk modellering av heterogena material har gjorts för FOI som ett examensarbete vid Luleå Tekniska Universitet [Isaksson 2000] för tillämpningar där våglängden hos ett infallande elektromagnetiskt fält är mycket längre än den fina skalan i en fiberkomposit. Prof. Gerhard Kristensson vid Lunds Tekniska Högskola har använt homogenisering för att beräkna de effektiva dielektriska egenskaperna hos dielektriska material armerade med glasfiberväv. Ett exempel på strukturen för ett sådant material visas i Figur 4. Material som används t ex för radomer är ofta uppbyggda med en sådan struktur. Från en teoretisk synpunkt finns det ingen anledning till att man inte även skulle kunna modellera elektromagnetiskt resonanta problem, vilket gör metoden högtintressant för att modellera radarabsorberande material, artificiella dielektrika som ”left-handed materials” (material med negativ permittivitet och permeabilitet) och periodiska heterogena halvledarmaterial. I [Wellander 2000, Wellander 2001] studerades homogenisering av både linjära och icke-linjära elektromagnetiska problem.

Periodiska material är enklast att homogenisera, men det finns även metoder för att lösa stokastiska heterogena problem.

Figur 4. *Ett exempel på struktur vars effektiva dielektriska egenskaper kan beräknas med homogenisering. Strukturen visar ett dielektriskt bulkmaterial (t ex epoxy) armerat med väv (t ex glasfiber), och är hämtat från en studie av Prof. Gerhard Kristensson et al., Lunds Tekniska Högskola.*



På längre sikt har homogeniseringsmetoden potential att revolutionera beräkningen av de makroskopiska elektromagnetiska egenskaperna, utgående från de kvantmekaniska metoderna nämnda i Sektion 5.1.

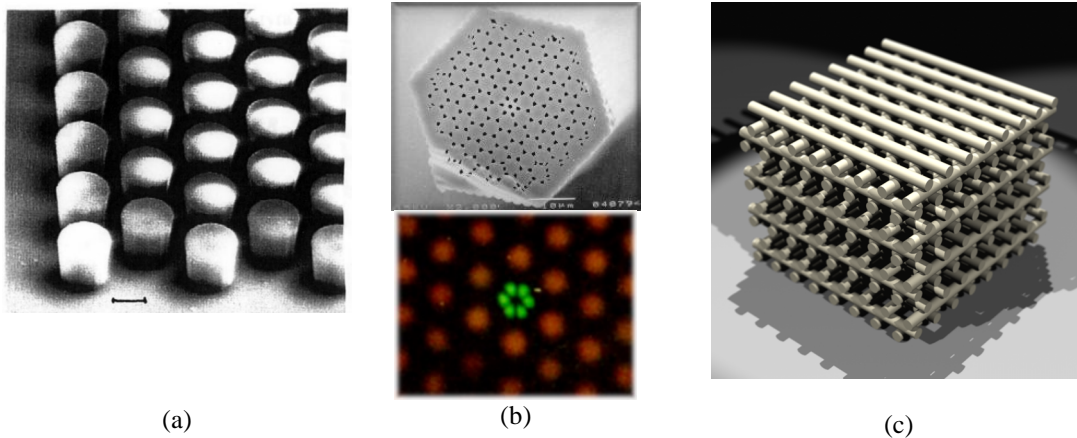
En enkel introduktion till homogeniseringsmetoden är [Persson 1993], som dock inte har några elektromagnetiska tillämpningar.

Det bör nämnas att det också finns andra metoder att studera effektiva elektromagnetiska egenskaper hos heterogena material, med olika typer av blandningsmodeller. Forskning inom detta område görs bl a i Prof. Ari Sihvolas grupp vid Helsingfors Tekniska Universitet i Finland.[Sihvola 1999]

5.3 Elektromagnetiska egenskaper hos fotonbandgaps-material

Det är nästan en truism att utbredningen av elektromagnetiska vågor påverkas av egenskaperna hos materialet där utbredningen äger rum. Ofta tänker man på materialens elektromagnetiska egenskaper som något inneboende i materialen. Man förändrar egenskaperna genom att byta material eller materialblandning. Det är dock välkänt att man också kan påverka de elektromagnetiska egenskaperna hos ett material genom materialets *geometriska* struktur. I t ex dielektriska speglar och Fabry-Perot interferometer-filter utnyttjas periodiska multilagarskikt för att uppnå hög reflektivitet och smalbandiga transmissionsegenskaper.

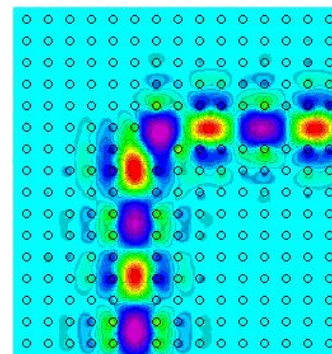
Under den senaste tioårsperioden har forskningen kring periodiska material revolutionerats av upptäckten att det existerar, och är möjligt att tillverka, två- och tredimensionella periodiska strukturer, som uppvisar dessa elektromagnetiska egenskaper i *flera* dimensioner. Dessa periodiska materialstrukturer går under flera namn, bl a fotonbandgapsmaterial, fotoniska bandgapskristaller och elektromagnetiska kristaller. Fotonbandgapsmaterial har öppnat vägen för helt nya tillämpningar inom mikrovågsteknik och optik, såväl som nya lösningar på gamla tekniska problem. Redan idag existerar hundratals patent på högteknologiska komponenter och lösningar som bygger på periodiska materialstrukturer.



Figur 5. Några exempel på fotonbandgapsmaterial. (a) Tvådimensionellt fotonbandgapsmaterial belagt på yta avsett för att uppnå låg IR-signatur. Skalstrecket är $10\ \mu\text{m}$. (Figuren producerad av C-G Ribbing och Andreas Rung, Ångströmlaboratoriet, Uppsala Universitet.) (b) Optisk fotonbandgaps-fiber av glas, och grönt ljus som passerar genom fibern. Fibern är ca $40\ \mu\text{m}$ i diameter. (Figurerna publicerade med tillstånd av the Optoelectronics Group, University of Bath, UK). (c) Rendering av fotonbandgapsmaterial avsett för mikrovågsområdet eller optiska området. (Rendering utförd av Patric Ljung.)

Några exempel på fotonbandgapsmaterial och tillämpningar visas i Figur 5. Figur 5a visar en yta med låg IR-signatur. Låg emission har uppnåtts genom att belägga ytan med ett tvådimensionellt fotonbandgapsmaterial uppbyggt av polymeren SU-8. Figur 5b visar en optisk fiber tillverkad av glas med fotonbandgapsstruktur, samt grönt ljus som passerar genom fibern. Slutligen Figur 5c visar en tredimensionell fotonkristall avsedd för mikrovågsområdet eller optiska området, beroende på dess dimensioner. Sådana kristaller kan tillverkas av t ex aluminiumoxid, och användas som antennisubstrat för antenner i mikrovågsområdet, vilket leder till avsevärt förbättrade antennegenskaper.

Figur 6. Exempel på FDTD-beräkning på fotonbandgapsmaterial. En elektromagnetisk våg transmitteras genom en vågledare konstruerad av fotonbandgapsmaterial. Färgen anger fältstyrkan hos det elektriska fältet polariserat vinkelrätt mot papperets plan. (Figuren publicerad med tillstånd av Prof. John D. Joannopoulos, MIT.)

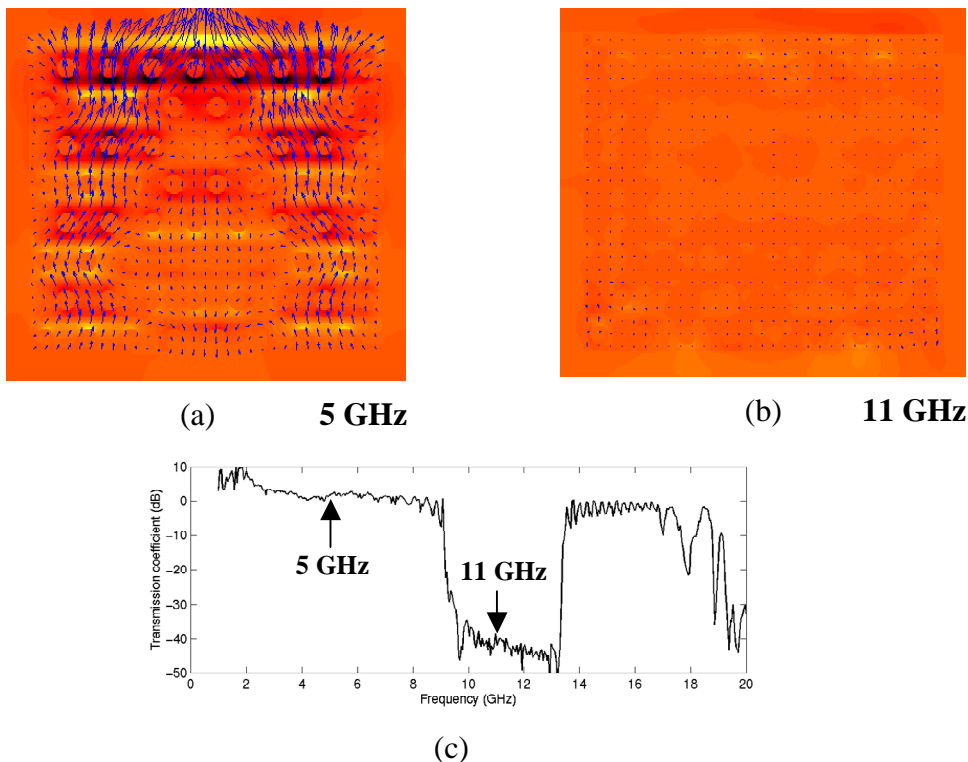


När det gäller modellering och beräkningar av egenskaper är det framförallt fotonbandgapsmaterialens dispersionsrelation (dvs hur våglängden beror av frekvensen), transmissions/reflektionssegenskaper samt de elektromagnetiska vågornas uppträdande i materialen som är av intresse. Det finns flera metoder som kan användas

för att modellera detta. Nedan presenteras tre olika metoder: FDTD, planvågsutvecklingar samt ”transfer matrix”-metoden. Vilken metod man väljer beror till viss del vilken egenskap man är intresserad av. Några exempel på olika sorters modelleringsresultat ges nedan.

5.3.1 FDTD

FDTD (finita differensmetoden i tidsdomän) är en generell och vanlig metod för att lösa Maxwells ekvationer numeriskt. Med metoden kan man t ex modellera utbredning av elektromagnetiska vågor i olika materialstrukturer, om de elektromagnetiska egenskaperna hos de ingående materialen är givna. Metoden är därför mycket användbar för att studera fotonbandgapsmaterial.



Figur 7. *Figurerna (a) och (b) visar det beräknade flödet av elektromagnetisk effekt på ett snitt genom fotonbandgaps-kristallen i Figur 5c, vid två olika frekvenser: 5 respektive 11 GHz. Beräkningarna i (a) och (b) kan jämföras med det uppmätta transmissionsspektrumet i figur (c). Mätningen i (c) är utförd på ett fotonbandgapsmaterial med samma struktur som i Figur 5c. Observera hur högt respektive lågt elektromagnetisk flöde i beräkningarna motsvaras av hög respektive låg transmission i mätningarna.*

Ett par exempel på beräkningar där FDTD använts för att simulera utbredning av elektromagnetiska vågor i fotonbandgapsmaterial ges i Figur 6 och Figur 7. Figur 6 visar en simulering av utbredningen av en elektromagnetisk våg genom en vågledare i

ett fotonbandgapsmaterial.[Mekis 1996] Fotonbandgapskristallen är i detta fall tvådimensionell. Cirklarna i figuren motsvarar pelare av dielektriska material som sticker ut ur papprets plan. Genom att avlägsna pelarna längs en ”kanal” genom materialet skapas en ledare för elektromagnetiska vågor. Sådana tvådimensionella komponenter kan tillverkas av flera typer av material, t ex kisel och kiseldioxid eller polymerer. Vågledare i fotonbandgapsmaterial kan användas för att bygga integrerade optiska kretsar och komponenter, t ex vågledare, korsningar och olika typer av frekvensfilter[Fan 1998]. Beräkningar visar hur kretsarna ska utformas, graden av transmission etc. Observera att fenomenet är oberoende av våglängd. Man kan visa att principen är densamma för mikrovågor och optiska våglängder, om periodiciteten hos fotonbandgapsmaterialet anpassas till respektive våglängd.

Figur 7 visar hur den elektromagnetiska energin hos en infallande planvåg fördelas inuti en fotonbandgapskristall, samt den uppmätta transmissionen genom kristallen. Kristallen har en så kallad ”layer-by-layer wood-pile” struktur,[Ho 1994, Fagerström 2000] och figurerna (a) och (b) visar den elektromagnetiska energin (Poyntings vektor) på ett plant snitt genom centrum av kristallen vid två olika frekvenser. Detaljer om beräkningen återfinns i Referens [Fagerström 2000]. Beräkningen visar hur den transmitterade elektromagnetiska energin vid 5 GHz (figur a) är lokaliserad till materialets yttre delar, och att en stor del transmitteras. Vid frekvensen 11 GHz (figur b) däremot visar beräkningen att i stort sett ingen energi transmitteras. Beräkningarna kan jämföras med den uppmätta transmissionen genom kristallen (figur c), som visar att materialet har ett stopp-band mellan ca 9—13 GHz där den transmitterade strålningen dämpas kraftigt. Beräkningar och mätningar stämmer alltså väl överens.

5.3.2 Planvågsutvecklingsmetoden

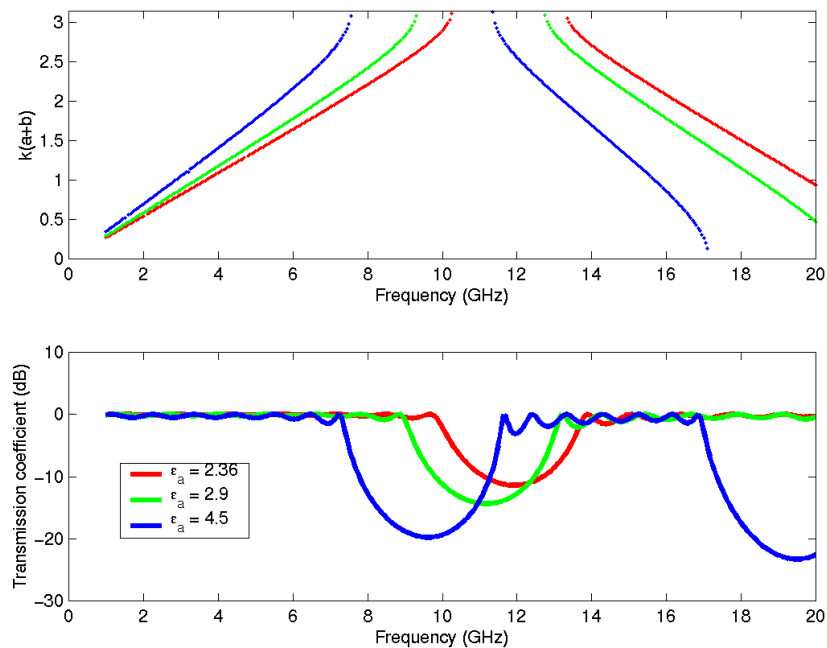
Fotonbandgapsmaterial karakteriseras av att de är periodiska. När man beräknar de elektromagnetiska egenskaperna för fotonbandgapsmaterialet kan periodiciteten utnyttjas. Med hjälp av det så kallade Blochs teorem (se t ex [Sakoda 2001]) kan det elektromagnetiska fältet uttryckas som en summa av plana vågor. Detta leder till den så kallade planvågsutvecklingsmetoden.[Sakoda 2001]

Planvågsutvecklingsmetoden är särskilt lämplig för beräkning av bandstrukturen, eller dispersionsrelationen, hos fotonbandgapsmaterialet. Det är dispersionsrelationen som bestämmer hur den elektromagnetiska strålningens våglängd i materialet varierar med frekvensen. Det existerar flera kostnadsfria beräkningsprogram som baseras på planvågsutvecklingsmetoden, se t ex ”MIT Photonic Bands Package.”[MIT Photonic Bands]

5.3.3 ”Transfer matrix” metoden

”Transfer matrix” metoden (ung. överföringsmatris metoden) är en metod som kan användas dels för att beräkna bandstruktur (dispersionsrelationen) för ett fotonbandgapsmaterial, dels transmission genom och reflektion från ett lager av fotonbandgapsmaterialet. På så sätt erhålls både de elektromagnetiska egenskaperna för materialet, och materialets prestanda t ex som filter och reflektor för

elektromagnetiska vågor. Mjukvara som bygger på ”transfer matrix” metoden finns tillgänglig gratis via Internet, se t ex [Bell 1995, Reynolds].



Figur 8. Exempel på utformning av ett endimensionellt fotonbandgapsmaterial med hjälp av ”transfer matrix” metoden. Materialet är en multilagerstruktur med 5 mm tjocka skikt med omväxlande dielektricitetskonstanter ϵ_a och $\epsilon_b=1.0$. Den övre figuren visar bandstrukturerna (dispersionsrelationerna) för tre olika värden på ϵ_a . Den undre figuren visar motsvarande transmissionsspektra för en 16 lager (80 mm) tjock struktur.

Ett enkelt exempel på hur ”Transfer matrix” metoden kan användas för att utforma ett endimensionellt fotonbandgapsmaterial ges i Figur 8. I Figur 8 har metoden använts för att studera de elektromagnetiska egenskaperna hos en struktur med 16 stycken 5 mm tjocka lager. Lagren har omväxlande dielektricitetskonstanterna ϵ_a och ϵ_b . Figur 8 visar hur bandstrukturen och transmissionsegenskaperna varierar för tre olika värden på ϵ_a , då $\epsilon_b = 1$ (vilket motsvarar luft). Värdena på ϵ_a motsvarar tre olika typer av polymerbaserade laminat.[Ousbäck 2000] Ur Figur 8 är det möjligt att välja det material som bäst motsvarar de önskade transmissionsegenskaperna. Det är även möjligt att optimera tjocklekarna hos de olika lagren, eller antalet lager för att på bästa sätt anpassa de elektromagnetiska egenskaperna hos fotonbandgapsmaterialet till den aktuella tillämpningen. På detta sätt kan man alltså utforma, ”designa”, materialet med hjälp av beräkningar. Exemplet är utfört i mikrovågsområdet, men fungerar lika bra i optiska området, för utformning av optiska material. ”Transfer matrix” metoden kan också användas för två- och tredimensionella fotonbandgapsmaterial.

5.4 Modellering av nanostrukturella material

Det finns många anledningar till varför modellering av egenskaperna hos nanostrukturella material (nanomaterial) är av stor betydelse. Man har iakttagit via empiriska mätningar att nanomaterial uppvisar många teknologisk användbara egenskaper såsom förbättrad hållfasthet, nya magnetiska egenskaper, nya kemiska egenskaper och icke-linjär optiska egenskaper. Dessa egenskaper hos nanomaterial förutspås leda till många nya tillämpningar, inte minst inom försvaret. Man har sett hur materialegenskaper blir storleksberoende när partikelstorleken, kornstorleken eller skiktjockleken närmar sig några tiotals nanometer eller mindre.

Ytterligare en anledning att modellera egenskaperna hos nanomaterial är att det ofta är förhållandevis enkelt att utveckla realistiska modeller för ändamålet. De ”byggstenar” som nanomaterial består av är oftast partiklar eller korn som är några nanometer i storlek, innehållande ett förhållandevis lite antal atomer, jämfört vanliga material. De innehåller därför nästan inga defekter såsom dislokationer, subkorngränser och tvillingar. Sådana defekter gör modelleringsarbetet mycket svårare. Dessutom, partiklarna i nanomaterial är så små att antalet atomer som måste tas med i beräkningen inte är omöjligt stort, som är fallet i många vanliga material, och kan i vissa fall hanteras med dagens modeller och datorer.

5.4.1 Några exempel på modellering av olika egenskaper hos nanomaterial

Aabloo *et al.* [Aabloo 1999] har använt molekylärdynamisk modellering för att undersöka strukturen i gränssytan mellan oorganisk vanadinoxid (V_2O_5) och en organisk polymer (polyetylenoxid). Frågan är av stor betydelsen i utvecklingen av litiumjonbatterier, för att optimera elektrod/elektrolyt-systemet, men gränssytan mellan oorganiska och organiska material är av mycket stor vikt i många andra tillämpningar, t.ex. fiberförstärkta kompositer.

Modellering av kompositpartiklar bestående av en kärna och skal med olika kemiska sammansättningar är mycket lovande för att öka förståelsen för dessa material, och för att kunna framställa material med designade egenskaper. Att det finns en gränssyta mellan kärnan och skalet gör modellering mer krävande. Steeman och Maurer [Steeman 1990] har utvecklat en ”interlayer model” d.v.s. ett analytiskt uttryck för att beskriva gränssytans inverkan på partikelns egenskaper. För en kompositpartikel bestående av bara dielektriska komponenter är beskrivningarna av de statiska och dynamiska elektriska fälten lika, men när ledande komponenter används måste de komplexa dielektriska konstanterna ersättas med generaliserade, komplexa dielektricitetskonstanter. I det hypotetiska fallet med en kompositpartikel med enbart dielektriska komponenter och utan en gränssyta kan man reducera ekvationen till en klassisk Rayleigh-ekvation. Arbetet är av värde t ex för att studera hur vatten på gränssytan påverkar egenskaperna, och man har lyckats att på ett kvalitativt sätt simulera förhållandet mellan dielektriska förluster och vattenhalt i kompositen.

Kelly *et al.* [Kelly 2001] har använt sig av ”computational electrodynamics”, och ett antal exakta numeriska metoder för att simulera de elektromagnetiska egenskaperna hos metallisk nanopartiklar i ett försök att beräkna och förklara de

speciella optiska egenskaper sådana nanopartiklar uppvisar. Egenskaper hos enstaka nanopartiklar (även som är icke likaxliga, som t ex stavformade partiklar) kan modelleras med hjälp av t ex den så kallade "discrete dipole approximation" (DDA); "multiple multipole methods" (MMP); finita differensmetoden i tidsdomän (FDTD) och T-matris metoder för att lösa Maxwells ekvationer. För samlingar av nanopartiklar, som växelverkar med elektromagnetisk strålning och med varandra är modelleringsarbetet svårare. Författarna har dock i detta fall minskat kraven på datorberäkningskapaciteten med hjälp av "coupled dipole" förenklingar. Viss framgång har uppnåtts, men det noteras att beräkningen av de elektromagnetiska fälten kring partiklarna är bristfällig.

Schiötz [Schiötz 2001] har skrivit en översikt av vad som kan åstadkommas med hjälp av molekylärdynamisk simulering och energiminimering av strukturerna som tros förekomma i enkla nanokristallina metaller, och hur sådana metaller deformeras med pålagda laster. Det har tidigare föreslagits olika strukturer i korngränsområden, allt från en struktur med ganska låg densitet, ungefär som i en gas, till en mer "normal" struktur liknande korngränserna i ett vanligt material. Frågan är av betydelse om man ska kunna förklara sambandet mellan töjning och spänning i materialet under deformation. Med hjälp av modellen har man kunnat förklara bl.a. varför en s.k. omvänt Petch-Hall effekt uppstår, d.v.s att – i motsats till vad som har hittills förväntats – metallen bli mjukare med minskande kornstorlek, vilket sker under en viss kritisk kornstorlek (som är materialberoende).

Sammanfattningsvis kan man konstatera att det inte finns några generella "standardmetoder" för att modellera nanomaterial. Detta beror på att nanomaterialen är uppbyggda av partiklar vars egenskaper ligger på gränsen mellan atomära och bulkegenskaper, ett område som är förhållandevis lite utforskat. Området är dock under kraftig uppbyggnad, och som vi ger exempel på ovan, finns det flera olika metoder som kan användas för att modellera specifika egenskaper hos nanomaterial.

5.5 Effektiva impedansrandvillkor för komplexa material

5.5.1 Radarsignaturer och signaturkontroll

Icke-metalliska material och kompositer är vanligt förekommande i moderna fordon och farkoster. Intresset för elektromagnetisk spridning från komplexa objekt kan för den skull inte längre inskränkas till metalliska begränsningsytor. Lyckligtvis har behovet av att numeriskt beräkna vågspridning och andra elektromagnetiska fenomen i närvaro av materialstrukturer lett till utvecklingen av nya simulerings- och lösningsmetoder. Dessa metoder är särskilt viktiga för smygtekniktillämpningar.

Den mest uppenbara praktiska tillämpningen av elektromagnetisk signaturkontroll är design av potentiella radarmål. I detta fall belyses ett objekt av en elektromagnetisk våg, vilken sprids och tas emot av antingen den sändande antennen (monostatisk radar) eller av en antenn med en annan placering (bistatisk radar). Syftet är att designa objektet på ett sådant sätt att den spridda energin minimeras i utvalda riktningar, vanligen återspridningen i hotsektorer. Detta uppnås genom lämplig geometrisk utformning och applicering av (dielektrisk) radarabsorberande ytbelägg-

ning på valda delar av objektet. Båda dessa åtgärder förutsätter tillförlitlig beräkning av radarmålytor, bistatiskt såväl som monostatiskt. Jämfört med ett helt metalliskt objekt ökar komplexiteten hos spridningsproblem i hög grad när en del av objektets yta är belagd med absorptionsmaterial. Detta medför att den numeriska lösningen av spridningsproblem blir avsevärt mer beräkningsintensiv, också i denna tid av superdatorer.

5.5.2 Numerisk beräkning av radarsignaturer

Approximativa randvillkor, ofta kallade impedansrandvillkor eller effektivrandvillkor, erbjuder en framgångsrik väg att eliminera den väsentligt större komplexiteten hos spridningsproblem för ytbelagda objekt. Eftersom randvillkoren i sig själva är approximativa, kan endast approximativa lösningar till spridningsproblem erhållas. I många fall kan emellertid acceptabel noggrannhet uppnås och lösningar erhållas till spridningsproblem som annars vore olösbara. Så kan, till exempel, ett ytbelagt objekt simuleras av en yta som satisfierar randvillkoret för den exakta lösningen för en cirkulär cylinder med samma slags ytbeläggning.

Det enklaste och oftast använda approximativa randvillkoret är *standard impedance boundary condition*. Eftersom begreppsmässigt enkelt är detta randvillkor helt tillfyllest i många situationer. Speciellt är det en utomordentlig approximation när reflektionen vid objektets yta väsentligen är densamma för alla infallsriktningar. Detta förhållande gäller för mycket tunna ytbeläggningar och beläggningar med signifikanta energiförluster. För beläggningar där reflektionen beror starkt av infallsvinkeln misslyckas standard-impedansrandvillkoret med att generera noggranna resultat. För detta fall, och andra situationer där större noggrannhet krävs, har diverse generaliserade impedansrandvillkor introducerats.

5.5.3 Impedansrandvillkor på dielektrisk ytbeläggning

Vid numerisk beräkning av radarsignaturer hos ett objekt försett med radarabsorberande ytbeläggning kan impedansrandvillkor ersätta en rigorös elektromagnetisk analys av beläggningens ofta komplexa materialstruktur. Det ursprungliga spridningsproblemet reduceras till ett problem som är lika möjligt att beräkningsmässigt hantera som vore objektet helt metalliskt. Det (approximativa) impedansrandvillkoret självt kan bestämmas ur mycket enklare spridningsproblem för vilka analytiska lösningar existerar, till exempel spridning från plana ytor eller cirkulära cylindrar. Detta gör impedansrandvillkor till den naturliga länken mellan komplexa radarabsorbenter och numeriska algoritmer för beräkning av monostatisk eller bistatisk radarmålyta. De utgör också den naturliga kommunikationslänken mellan de som utvecklar radarabsorbenter och de som utför numeriska beräkningar av radarmålytor. Vidare utgör impedansrandvillkor sedan flera decennier ett eget forskningsområde som syftar till att klarlägga de möjligheter och begränsningar som karakteriserar olika slag av impedansrandvillkor i varierande situationer.

5.5.4 Bakgrunden till impedansrandvillkor

Begreppet impedans (av verbet *impede*) introducerades av Heaviside under det sena 1800-talet som en generalisering av begreppet resistans (av *resist*). Några

decennier senare fick motsvarande begrepp stor betydelse inom akustiken. Här kom det att utnyttjas för att skapa ett randvillkor för en begränsningsyta som under inflytande av ett tryck varken är helt eftergivlig (Dirichlet-villkor) eller helt stel (Neumann-villkor) utan ger efter litet grand (impedansvillkor). De klassiska randvillkoren formulerade av Dirichlet och Neumann gäller för respektive tangential- och normalkomponenterna av det elektriska fältet och det magnetiska fältet vid perfekt ledande begränsningsytor. Elektromagnetiska impedansrandvillkor, analoga med det akustiska, utvecklades av Rytov, Grünberg, Leontovich med flera vid Lebedevs Fysikaliska Institut i Ryssland under 1940-talet. Dessa randvillkor utgör exempel på ett första ordningens impedansrandvillkor, ovan benämnt *standard impedance boundary condition*. Tillämpat på spridningsproblem för elektriskt ledande kroppar leder detta randvillkor till en första ordningens korrektion av lösningar för perfekt ledande kroppar. Av det sagda framgår, att randvillkor i allmänhet speglar ett materials svar på belastning (akustisk, mekanisk, elektromagnetisk). Det är denna utmärkande egenskap man utnyttjar, när man ersätter materialstrukturer med approximativa randvillkor i randvärdesproblem.

Ett annat betydelsefullt ändamål med approximativa randvillkor är att skapa en begränsningsyta som inte alls stör ett infallande fält – i själva verket, att simulera en yta som egentligen inte finns där. Det resulterande villkoret kan betraktas som ett impedansrandvillkor för icke-reflekterande ytor, och benämnes vanligen absorptionsrandvillkor. Huvudsakligen används det för att avsluta beräkningsområdet vid numerisk beräkning med finita element. Det första användbara absorptionsrandvillkoret utvecklades på 1970-talet.

5.5.5 Sammanfattning impedansrandvillkor

En väsentlig egenskap hos impedansrandvillkor är deras förmåga att reducera komplexiteten hos ett givet problemområde, i detta fall spridning av elektromagnetiska vågor. De inneboende mekanismer i ett material eller en materialstruktur som ger upphov till växelverkan med elektromagnetiska vågor kan vara otillräckligt förstådda eller beskrivna, eller leda till olösliga randvärdesproblem. Genom att introducera approximativa randvillkor i ett spridningsproblem kan man emellertid bortse från dessa mekanismer och därigenom hantera det primära problemet. Från en materialvetenskaplig utgångspunkt kan för den skull approximativa randvillkor i spridningsproblem ses som ett högnivå-exempel på materialmodellering.

5.5.6 Litteratur som behandlar impedansrandvillkor

Det följande är en lista på litteratur som behandlar effektiva impedansrandvillkor ur olika aspekter:

- I. Akduman & A. Yapar, "Surface impedance determination of a planar boundary by the use of scattering data," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 49, pp. 304–307, 2001.

- H. Ammari & S. He, "Effective impedance boundary conditions for an inhomogeneous thin layer on a curved metallic surface," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 46, pp. 710–715, 1998.
- R. Cicchetti, "A class of exact and higher-order surface boundary conditions for layered structures," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 44, pp. 249–259, 1996.
- R. Cicchetti & A. Faraone, "Exact surface impedance/admittance boundary conditions for complex geometries: Theory and applications," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 48, pp. 223–230, 2000.
- N. Farahat, S. Yuferev, & N. Ida, "High order surface impedance boundary conditions for the FDTD method," *IEEE Trans. Magnetics*, vol. 37, pp. 3242–3245, 2001.
- C. L. Holloway & E. F. Kuester, "Impedance-type boundary conditions for a periodic interface between a dielectric and a highly conducting medium," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 48, pp. 1660–1672, 2000.
- D. J. Hoppe & Y. Rahmat-Samii, *Impedance Boundary Conditions in Electromagnetics*. Washington, D.C.: Taylor & Francis, 1995.
- B. Engquist & A. Majda, "Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves," *Math. Comput.*, vol. 31, pp. 629–651, 1977.
- P. E. Hussar, "A uniform GTD treatment of surface diffraction by impedance and coated cylinders," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 46, pp. 998–1008, 1998.
- O. Marceaux & B. Stupfel, "High-order impedance boundary conditions for multilayer coated 3-D objects," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 48, pp. 429–436, 2000.
- J. A. Roden & S. D. Gedney, "The efficient implementation of the surface impedance boundary condition in general curvilinear coordinates," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. 47, pp. 1954–1963, 1999.
- T. B. A. Senior & J. L. Volakis, *Approximate Boundary Conditions in Electromagnetics*. London, U.K.: The Institution of Electrical Engineers, 1995.
- J. D. Shumpert & T. B. A. Senior, "Impedance boundary conditions in ultrasonics," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 48, pp. 1653–1659, 2000.
- T. Su & H. Ling, "Determining the equivalent impedance boundary condition for corrugated coatings based on the genetic algorithm," *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 48, pp. 374–382, 2000.
- S. Yuferev & N. Ida, "Selection of the surface impedance boundary conditions for a given problem," *IEEE Trans. Magnetics*, vol. 35, pp. 1486–1489, 1999.
- S. Yuferev & L. Kettunen, "Implementation of high order surface impedance boundary conditions using vector approximating functions," *IEEE Trans. Magnetics*, vol. 36, pp. 1606–1609, 2000.
- S. Yuferev, L. Proekt, & N. Ida, "Surface impedance boundary conditions near corners and edges: Rigorous consideration," *IEEE Trans. Magnetics*, vol. 37, 2001.

6 Sammanfattning och vision

Vi har i den här rapporten givit en kort introduktion till området materialmodellering, och några exempel på hur olika typer av materialmodellering används inom några intressanta tillämpningsområden. Vi har särskilt fokuserat på sådana metoder och exempel som vi bedömer är av intresse för försvarsforskning.

De viktigaste *möjligheterna med materialmodellering* inom försvarsforskningen kan sammanfattas:

1. **Effektivare utveckling.** Materialmodellering ger möjlighet till effektivare materialutveckling. Det finns flera orsaker till detta: Modellering kompletterar den experimentella forskningen, ger ökad kunskap om materialegenskaper, och tillgång till data som är svår att mäta. Genom modellering och beräkning av materialegenskaper kan många materialalternativ jämföras och sållas på ett snabbt sätt och nya material upptäckas. Därmed kan också utvecklingskostnaderna sänkas. Genom modellering kan material utformas för specifika tillämpningar och ge indata till systemsimuleringar. Med en verksamhet både inom mätning och modellering ökar möjligheterna till externa samarbeten och tillgången på information.
2. **Bättre material.** Flera av fördelarna med materialmodellering som angivits under första punkten leder också till bättre material: fler material kan jämföras, nya material upptäckas, och material utformas med optimala egenskaper och anpassas till de system där de ska användas.
3. **Billigare material.** Materialmodellering leder också till billigare material: förutom ekonomiska vinster genom effektivare utveckling, ger modellering möjlighet att jämföra ett stort antal alternativ och identifiera de billigaste materialen. Modellering ger också möjlighet att optimera materialegenskaperna, och därmed maximera funktionen hos billiga materialalternativ.

Ökad verksamhet inom materialmodellering skulle stärka forskningen vid FOI! Detta gäller den rena materialforskningen, och även systeminriktad forskning där avancerade material ingår. FOI är redan starkt inom den experimentellt inriktade materialforskningen. I kombination med materialmodellering skulle materialforskningen totalt sett stärkas ytterligare. Detta noterades också av den internationella kommittén i den nyligen genomförda utvärderingen av avdelningen för Sensorteknik.[Nilsson 2000] Materialforskningen bör bilda en fyrklöver där ”teori och modeller”, ”beräkningar”, ”experiment och mätningar” och ”tillverkning och syntes” är lika viktiga delar. Ökad verksamhet inom materialmodellering skulle också öka möjligheterna till externa samarbeten, och ekonomiska vinster genom att materialforskningen effektiviseras. En konkret vision för avdelningen för Sensorteknik

är att inom två år (senast år 2004) ha en kompetensgrupp om 4—6 personer (totalt ca 3 personårs arbetstid) som helt eller delvis arbetar med materialmodellering.

Här är inte rätta platsen att ge utförliga projektförslag. Baserat på rapportens innehåll vill vi dock ge några mycket korta exempel på verksamheter inom materialmodellering som är värdefulla för att stärka materialforskningen vid FOI, och som skulle öka kompetensen inom materialmodellering. Eftersom flera av verksamheterna är nya för FOI, är det självklart att de får karaktären av kompetensuppbyggnad om de omsätts i konkreta projekt, åtminstone under en inledande fas. Det finns dock personal vid FOI med både kunskap och intresse av materialmodellering som kan bidra till verksamheterna, och relativt snabbt komma fram med nyttiga resultat.

1. **Kvantkemisk modellering.** Kvantkemiska och molekylodynamiska beräkningar utnyttjas för att simulera kemiska reaktioner, strukturer hos mellan- och slutprodukter, struktur hos molekylära kluster, växelverkan mellan molekyler och t ex ytor, optiska spektra i UV-, vis- och IR-området, elektroniska egenskaper, mm. Syftet är att vara stöd vid kemisk syntes av olika material, t ex optiska material eller olika typer av polymerer, att modellera växelverkan mellan sensormaterial och aktiva substanser, och att beräkna grundläggande optiska egenskaper hos sensor- och skyddsmaterial. Flera kvantkemiska beräkningsprogram finns vid FOI (bl a Gaussian 98 och semi-empiriska beräkningsprogram) men kan behöva kompletteras. Flera personer med bakgrund inom kvantkemi arbetar vid FOI avdelningen för Sensorteknik.
2. **DFT för kristallina bulkmaterial.** Densitetsfunktional-metoder (DFT) tillämpas för beräkning av struktur och frekvensberoende dielektricitetsfunktion hos metaller, keramer och molekylära kristaller. Flera kommersiella beräkningsprogram för detta finns tillgängliga. Viss kompetens finns bland FOI:s personal.
3. **Modellering av effektiva randvillkor hos radarabsorberande material.** Utveckling av mjukvara för bestämning av effektiva randvillkor för radarabsorberande material. Denna typ av modellering utgör en länk mellan (radarabsorberande) materialegenskaper, och material belagda på objekt, t ex farkoster. En viss verksamhet inom detta område finns redan vid avdelningen för Sensorteknik, men behöver stärkas.
4. **Modellering av egenskaper hos nanomaterial.** Kompetensuppbyggnad kring modeller för beräkning av strukturella och elektromagnetiska egenskaper hos nanomaterial. Området är nytt, och kunskapen om sådana modeller är begränsad på FOI. En ökad modelleringsverksamhet skulle stärka den pågående experimentella verksamheten inom nanomaterial.

Modelleringsverksamheten bör innehålla litteraturstudie av existerande modeller, implementering av relevanta modeller, samt verifiering och analys i samarbete med den experimentella forskningen.

5. **Utveckling av beräkningsprogram för fotonbandgapsmaterial.** Implementering och vidareutveckling av modeller för beräkning av elektromagnetiska egenskaper hos fotonbandgapsmaterial. Modellerna inriktas mot beräkning av optiska och elektromagnetiska egenskaper hos tredimensionella fotonbandgapsmaterial, med tillämpningar från mikrovågsantennor till optiska kretsar och signaturmaterial. Viss begränsad modelleringsverksamhet har utförts vid FOI, men behöver underhållas och utvecklas mot fler materialtyper och strukturer. Framförallt experimentell verksamhet inom detta område pågår vid avdelningen för Sensorteknik. Denna skulle stärkas av parallell forskning inom modellering.
6. **Homogenisering och effektiva materialegenskaper.** Olika typer av homogenisering används för beräkning av effektiva elektromagnetiska egenskaper hos materialblandningar. Många avancerade material är blandningar av olika komponenter, t ex vissa signaturmaterial i optiska och radarområdet, kompositmaterial, och även vanliga material som lera och betong. Homogenisering kan användas för optimering eller analys av elektromagnetiska egenskaper vid utveckling av sådana material. Viss kompetens, men ingen verksamhet, inom detta område finns på avdelningen för Sensorteknik.
7. **Modellering av materialstrukturer.** Många avancerade material är egentligen strukturer av olika homogena material. Detta gäller t ex multilagerstrukturer för t ex signaturtillämpningar. Denna typ av materialmodellering ligger alltså på gränsen mot elektromagnetiska beräkningar av komponenter och system. Metoder inom elektromagnetisk utbredning kan användas för att analysera och utforma sådana strukturer. Avdelningen för Sensorteknik har en pågående verksamhet och stor kunskap inom elektromagnetiska beräkningar. Verksamheten kan dock stärkas vad gäller modellering av egenskaper hos materialstrukturer, för t ex signaturtillämpningar.

Referenser

- [Aabloo 1999] Aabloo, A., Klintonberg, M., Thomas, J.O., *Molecular dynamics simulation of a polymer-inorganic interface*. personal communication-preprint, 1999-05-03, Uppsala University
- [Bell 1995] P. M. Bell et al., *A program for calculating photonic band structures and transmission coefficients of complex structures*, Computer Phys. Commun., **85** (1995) 306.
- [Cornil 2001] Jérôme Cornil, David Beljonne, Jean-Philippe Calbert och Jean-Luc Brédas, Adv. Mat. **13** (2001) 1053.
- [Dewar 1985] M.J.S. Dewar, E.Zoebisch, E. Healy and J.J.P. Stewart, J. Am.Chem. Soc. **107** (1985) 3902.
- [Fagerström 2000] Jan Fagerström, Stig Leijon, Nils Gustafsson, och Torleif Martin, *A study of a three-dimensional photonic band-gap material in the microwave region*, Vetenskaplig rapport FOA-R—00-01566-408—SE, FOA, Linköping (2000).
- [Fan 1998] Shanhui Fan *et al.*, *Channel Drop Tunneling through Localized States*, Phys. Rev. Lett., **80**(5) (1998) 960.
- [Forssell 2000] Göran Forssell, *Modellberäkningar för skrovliga ytor – anpassande till reflektansmätningar på färgprover*, FOA rapport nr FOA-R—00-01478-615—SE (2000).
- [Frisch 1998] *Gaussian 98, Revision A.5*, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, Jr., R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
- [Godbout 1992] N Godbout, R. D. Salahub, J. Andzelm and E. Wimmer, Can. J. Chem. **70** (1992) 560.
- [Helgaaker 1997] T. Helgaaker, H.J.Aa. Jensen, P. Jörgensen, J. Olsen, K. Ruud, H. Ågren, T.A. Andersen, K. L. Bak, V. Bakken, O. Christiansen, P. Dahle, E.K. Dalskov, T. Enevoldsen, H. Heiberg, H. Hetta, D. Jonsson, S. Kirpekar, R. Kobayashi, H. Koch, K.V. Mikkelsen, P. Norman, M.J. Packer, T. Sauer, P.R. Taylor and O. Vahtras, *Dalton ab initio electron structure program, Release 1.0* (1997). Se <http://www.kjemi.uio.no/software/dalton/dalton.html>
- [Hafner 1999] J. Hafner, *Atomic-Scale Computational Materials Science*, Acta Mater., **48** (1999) 71.

- [Ho 1994] K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, R. Biswas, och M. Sigalas, *Photonic band gaps in three dimensions: New layer-by-layer periodic structures*, Solid State Commun. **89**(5) (1994) 328.
- [Hohenberg 1964] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136** (1964) B864.
- [Holm 1999] B. Holm, R. Ahuja, Y. Yourdshahyan, B. Johansson och B. I. Lundqvist, *Elastic and optical properties of α - and κ -Al₂O₃*, Phys. Rev. B, **59** (1999) 12777.
- [Isaksson 2000] Johanna Isaksson, *Mathematical and Numerical Modeling of Electromagnetism in Heterogeneous Media Using Homogenization of Maxwell's Equations*, Examensarbetet, Luleå Tekniska Universitet, ISSN1402 –1617/ISRN LTU–EX–00/302–SE/NR 2000:32.
- [Kelly 2001] Kelly, K.L., Lazarides, A.A., Schatz, G.C., Computational electromagnetics of metal nanoparticles and their aggregates, Nanotechnology July/August 2001 pp. 67
- [Kohn 1965] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. **140** (1965) A1133.
- [Lee 1988] C. Lee, W. Yang and R.G. Parr, Phys. Rev. B **37** (1988) 785.
- [Mekis 1996] Attila Mekis *et al.*, *High Transmission through Sharp Bends in Photonic Crystal Waveguides*, Phys. Rev. Lett. **77**(18) (1996) 3787.
- [MIT Photonic Bands] “MIT Photonics Band Package”, <http://ab-initio.mit.edu/mpb/>
- [MRS Bulletin 2001] MRS Bulletin, *Materials Research by Means of Multiscale Computer Simulation*, Volume **26**, Nummer 3 (2001). Tema nummer om materialmodellering över flera skalor.
- [Nilsson 2000] Olle Nilsson *et al.*, *A Review of the Sensor Technology Division of the Defence Research Establishment*, Rapport FOA Reg nr 00-5899/S.
- [Ohno 1999] K. Ohno, K. Esfarjani och Y. Kawazoe, *Computational Materials Science*, Springer (1999).
- [ONR Grand Challenges] http://www.onr.navy.mil/sci_tech/grandc.htm
- [Ousbäck 2000] Jan-Olof Ousbäck och Fritz Larsson, *Radarabsorberande material. En översikt*, FOA rapport nr FOA-R—00-01543-615—SE, Linköping (2000).
- [Parr 1999] R.G. Parr and W. Yang, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford, New York (1999).
- [Persson 1993] Lars-Erik Persson, Leif Persson, John Wyller och Nils Svanstedt, *The Homogenization Method – An Introduction*, Studentlitteratur, Lund (1993)
- [Reynolds] Andrew L. Reynolds, Univ. of Glasgow, <http://www.elec.gla.ac.uk/~areynolds/Software/SoftwareMain.htm>.
- [Sakoda 2001] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer, Berlin Heidelberg (2001).
- [Schiötz 2001] Schiötz, J. *Simulations of nanocrystalline metals at the atomic scale*, in *Science of metastable and nanocrystalline alloys. Structure, properties and modelling*. A.R. Dinesen, et al (eds.) Risö National Laboratory, Roskilde, Denmark, 2001, pp. 127.

- [Sihvola 1999] Ari Sihvola, *Electromagnetic Mixing Formulas and Applications*, The Institution of Electrical Engineers (IEE), London (1999).
- [Skoroduma 2001] N. V. Skoroduma, R. Ahuja, S. I. Simak, I. A. Abrikosov, B. Johansson och B. I. Lundqvist, *Electronic, bonding and optical properties of CeO₂ and Ce₂O₃ from first principles*, Phys. Rev. B **64** (2001) 115108.
- [Springborg 1987] M. Springborg and O.K. Andersen, J. Chem. Phys. **87** (1987) 7125.
- [Steeman 1990] Steeman, P.A.M. och Maurer, F.H.J., An interlayer model for the complex dielectric constant of composites, Colloid & Polymer Science **268** (1990) 315.
- [Szabo 1989] Attila Szabo och Neil S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, 1st edition, revised, Mc-Graw-Hill (1989).
- [Weast 1980] Robert C. Weast (ed.), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 61st edition (1980—1981), CRC Press, Boca Raton (1980).
- [Wellander 2000] Niklas Wellander, *Homogenization of the Maxwell Equations: Case I. Linear Theory*, Appl Math **vol. 46, nr. 1** (2000) 29-51.
- [Wellander 2001] Niklas Wellander, *Homogenization of the Maxwell Equations: Case II. Nonlinear Conductivity*, Submitted to Appl Math.
- [Zerner 1980] M.C. Zerner, G.H. Loew, R.F. Kichner and U.T. Mueller-Westerhoff, J. Am. Chem. Soc. **102** (1980) 589.
- [Åstrand 2000] Per-Olof Åstrand, P. S. Ramanujam, Søren Hvilsted, Keld L. Bak, och Stephan P. A. Sauer, Ab-initio calculation of the electronic spectrum of azobenzene dyes and its impact on the design of optical data storage materials, J. Am. Chem. Soc, **122** (2000) 3482.