

В. В. Новиков*

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ С ХАОТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

Базуючись на ідеях ренорм-групових перетворень та теорії фракталів визначені ефективні властивості неоднорідного середовища з хаотичною структурою. Для побудови моделі структури композита з випадковим розподілом компонентів (фаз) були використані фрактальні множини, отримані на прямокутних ґратках [V. V. Novikov, "Physical properties of fractal structures", p.93-284. In the book "Advances in Chemical Physics, Volume 133, Fractals, Diffusion and Relaxation in Disordered Complex Systems"(J. Wiley, Chichester-New York-Brisbane-Toronto-Singapore, 2006)] Проведено порівняння обчислень ефективних властивостей композита з експериментальними даними та з обчисленнями, які базуються на наближенні ефективного середовища.

Ключові слова: композит, фрактал, ренорм-групові перетворення.

Прогресс в физике неупорядоченных сред, то есть физике сред с стохастическим распределением микро неоднородностей, определяется во многом решением проблем, относящихся к установлению связи между свойствами на микро уровне и свойствами на макроскопических масштабах. Эта проблема аналогична задачам: замыкания цепочки уравнений в теории жидкости; теории гидродинамической турбулентности; теории фазовых переходов и др.

Методами традиционной статистической физики достаточно строго решены задачи, в которых сделаны допущения о полном хаосе (газ) или о полном упорядочении (кристаллические твердые тела) микрокопической структуры. Неупорядоченные среды и процессы, в которых при микрокопическом описании отсутствует как кристаллическая упорядоченность, так и полный хаос не нашли адекватного описания. Это связано с тем, что в этих системах не выполняется условие, что макроскопические переменные должны значительно превышать масштабы корреляций микрокопических переменных. Для описания таких систем оказались эффективными фрактальные модели и ренорм-груповые преобразования — поэтапное осреднение на различных масштабных уровнях (на мезоуровнях).

Основной чертой фрактальных структур является зависимость их свойств C от линейного масштаба L в виде $C \sim L^\alpha$, где α — постоянное число.

Зависимость свойств от масштаба является следствием самоподобия фрактальных структур. Типичным фракталом является перколяционный кластер, который образуется в области "геометрического фазового перехода", когда несвязанные множества переходят в связанное множество. В реальных средах, обычно, эта зависимость ограничена так называемой областью промежуточной асимптотики, которая определяется в виде $l_0 \leq L \leq \xi$, где l_0 — постоянная решетки (микрокопическая постоянная); ξ — длина корреляции.

*©Новіков Віталій Володимирович працює завідувачем кафедрою вищої математики Одеського національного політехнічного університету; доктор фіз.-мат. наук, професор математики. Спеціальність: фізика, теоретична фізика. Викладач математики. Наукові напрямки: перколяція, фрактали, нерівноважні процеси, фізика неоднорідних серед, фізика композитів.

В области масштабов $L \gg \xi$ микронеоднородная среда является однородной (исчезает свойство самоподобия), и ее можно характеризовать эффективными свойствами.

Оказалось, что закономерности, выявленные в рамках теории фракталов и перколяции, справедливы в общем случае для неоднородных стохастических сред и, в частности, композиционных материалов хаотической структурой.

Нами были разработаны фрактальные модели хаотической структуры композитов и итерационный метод осреднения физических свойств [1–14]. Рассмотрим основные результаты, представленные в этих работах.

Проводимость. Итерационный метод осреднения

Полученные в литературе формулы для эффективной проводимости композитов σ с хаотической структурой достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными эффективной проводимости, если проводимости компонентов (σ_1, σ_2) композита отличаются не более, чем на два порядка или при малых концентрациях одного из компонентов (например, $p \ll 1$) [2].

Если отношение свойств системы $\sigma_2 / \sigma_1 < 10^{-2}$, то расчеты по формулам, полученным в литературе, и эксперимент сильно отличаются [1, 2].

Если отношение свойств системы $\sigma_2 / \sigma_1 \rightarrow 0$, то можно использовать результаты теории перколяции [1]:

$$\left. \begin{aligned} \sigma &\approx (p - p_c)^t, (p - p_c) > 0, \\ \sigma &\approx (p_c - p)^{-s}, (p - p_c) < 0, \end{aligned} \right\},$$

где t и s — критические индексы проводимости ($t = s \approx 1.1$ для двумерных систем ($d = 2$) и $t \approx 2, s \approx 0,8$ для трехмерных систем ($d = 3$); p_c — порог перколяции.

Если свойства системы лежат в диапазоне $0 < \sigma_2 / \sigma_1 < 10^{-2}$, до настоящего времени не существовало достаточно строгой теории, которая позволяла прогнозировать эффективные свойства неоднородной среды.

Нами была сделана попытка решить эту задачу, опираясь на идеи метода ренормгрупповых преобразований и теорию фракталов, которую ещё называют геометрией хаоса [1].

Рассмотрим случайную смесь полиэдров двух сортов (рис. 1). Перейдем от этой структуры к решетке с хаотическим распределением двух сортов связей. Для этого условно соединим центры полиэдров, получим сетку, которая состоит из двух сортов связей 1 и 2: 1 — обладает свойствами черного полиэдра; 2 — обладает свойствами белого полиэдра.

В общем случае эти связи расположены случайным образом на решетке. Будем предполагать, что расположение связей на решетке некоррелированное, то есть нахождение связи в данном месте не влияет на то, какие связи будут находиться по соседству (в дальнейшем можно будет рассмотреть случай, когда связи на сетке коррелированы).

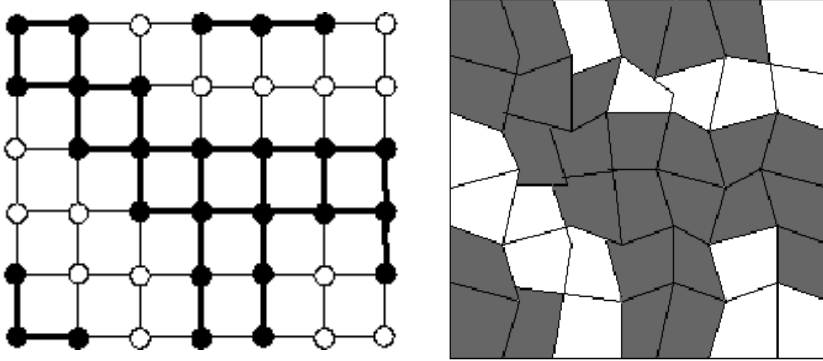


Рис. 1. Моделирование хаотической структуры композита

Таким образом, проводимость композита можно моделировать решеткой со случайно распределенными связями на ней двух видов: 1 и 2.

На начальном шаге ($k = 0$) рассматривали решетку конечных размеров с вероятностью p_0 , что связь между соседними узлами будет “черной” (“хорошо проводящей”) и с вероятностью $1 - p_0$, что связь между соседними узлами будет белой “плохо проводящей”).

На следующем шаге ($k = 1, 2, \dots$) каждая связь в решетке заменяется решеткой, полученной на предыдущем шаге (рис. 2). Итерационный процесс заканчивается, когда свойства решетки перестают зависеть от номера итерации k . Таким образом, найденное с помощью итерационной процедуры множество связей $\Omega_0(l_0, p_0)$ зависит от размера начальной решетки L_0 и вероятности p_0 [3].

На эффективную проводимость композита существенное влияние оказывают две конфигурации: соединяющее множество из черных связей l , которые связывают пространство решетки между противоположными сторонами; не соединяющее множество, для которого не существует траектории состоящей из черных связей, таких, которые соединяют две противоположных стороны решетки.

Важной характеристикой хаотического фрактального множества $\Omega_0(L_0, p_0)$ является вероятность $R(L_0, p_0)$, что данная конфигурация принадлежит соединяющему множеству. В нулевой стадии (то есть, начальном итерационном шаге), эта вероятность зависит от начальной плотности черных связей p_0 и от размера L_0 образующей решетки и может быть определена как отношение числа соединяющих конфигураций к общему количеству возможных конфигураций.

Определение эффективных свойств структурной модели в общем случае можно вести по следующей схеме: сначала находятся свойства различных конфигураций на первом этапе, проводится их усреднение, а затем эти свойства передаются на следующий этап. Определение свойств возможных конфигураций множества связей приводит к достаточно громоздким вычислениям. Поэтому воспользуемся приближенным методом, который заключается в том, чтобы не рассчитывать свойства конфигураций, получаемых при разбросах целых связей на решетке, а выделить два вида множеств конфигураций связей: соединяющие и не соединяющие множества.

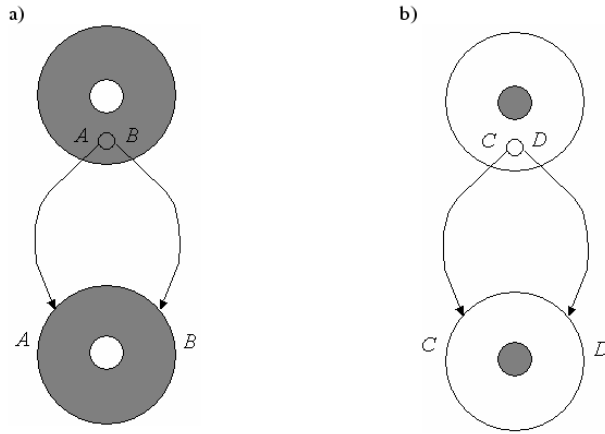


Рис. 2. Иллюстрация получения фрактального множества $\Omega_n(\ell_0, p_0)$ для случая $\ell_0 = 2$ $p_0 = 1/2$ на втором итерационном шаге ($\kappa = 2$)

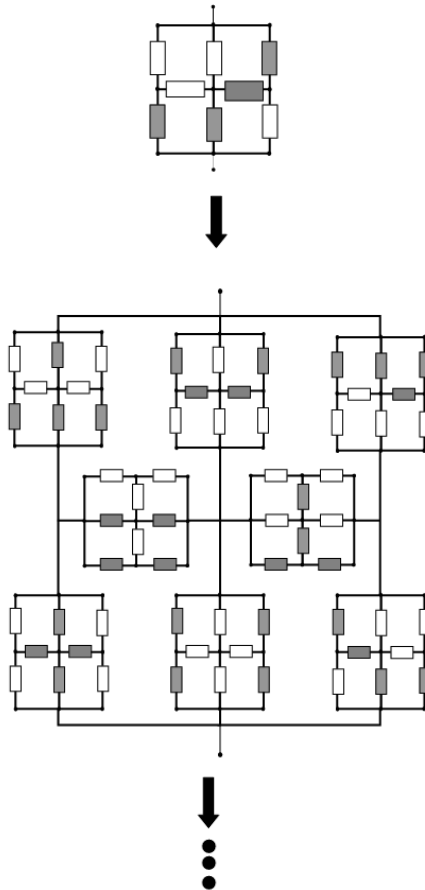


Рис. 3. Связанное множество (а) (СМ) и несвязанное множество (б) (НСМ)

В качестве модели соединяющего множества и не соединяющего множества использовалась ячейка “шар в однородном массиве” (рис. 3), то есть на каждом шаге итерационного процесса вычисления свойств структуры СМ и НСМ моделировались ячейкой “шар в однородном массиве”: соединяющее множество — непрерывная среда из “хорошо проводящей” фазы с включением шара из “плохо проводящей фазы”; не соединяющее множество — непрерывная среда из “плохо проводящей фазы” с включением шара из “хорошо проводящей фазы”.

Для расчета проводимости соединяющего множества и не соединяющего множества были использованы формулы, полученные на основе вариационных оценок [2]. Проводимости соединяющего множества на k -м этапе итерации определялись в виде:

$$\sigma_c^{(k)} = p_{k-1}\sigma_c^{(k-1)} + (1-p_{k-1})\sigma_n^{(k-1)} - \frac{p_{k-1}(1-p_{k-1})(\sigma_c^{(k-1)} - \sigma_n^{(k-1)})^2}{p_{k-1}\sigma_n^{(k-1)} + (1-p_{k-1})\sigma_c^{(k-1)} + 2\sigma_c^{(k-1)}}, \quad (1)$$

проводимость не соединяющего множества на k -м этапе итерации определялись в виде:

$$\sigma_n^{(k)} = p_{k-1}\sigma_c^{(k-1)} + (1-p_{k-1})\sigma_n^{(k-1)} - \frac{p_{k-1}(1-p_{k-1})(\sigma_c^{(k-1)} - \sigma_n^{k-1})^2}{p_{k-1}\sigma_n^{(k-1)} + (1-p_{k-1})\sigma_c^{(k-1)} + 2\sigma_n^{(k-1)}}, \quad (2)$$

где $\sigma_c^{(0)} = \sigma_1$; $\sigma_n^{(0)} = \sigma_2$; $p_{k-1} = R(p_k)$ $p_0 = p$ — концентрация компонента с проводимостью σ_1 . В (1) и (2) нижние индексы k, c означают, что данная величина относится к: k — не соединяющее множество; c — соединяющее множество; верхний индекс k указывает номер итерационного шага.

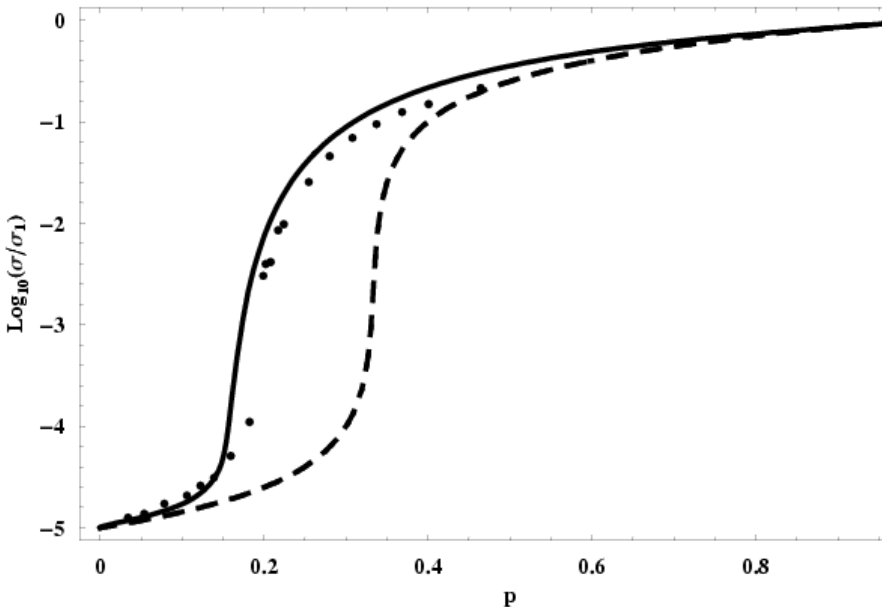


Рис. 4. Сравнение расчета (кривые) и эксперимента (точки)

В расчетах использовалась функция вероятности $R(p_0)$ [1]

$$R(p_0) = 5p_0^2(1-p_0)^{12} + 68p_0^3(1-p_0)^{11} + 398p_0^4(1-p_0)^{10} + 1298p_0^5(1-p_0)^9 + 2575p_0^6(1-p_0)^8 + 3288p_0^7(1-p_0)^7 + 2977p_0^8(1-p_0)^6 + 2000p_0^9(1-p_0)^5 + 1001p_0^{10}(1-p_0)^4 + 364p_0^{11}(1-p_0)^3 + 91p_0^{12}(1-p_0)^2 + 14p_0^{13}(1-p_0) + p_0^{14}, \quad (3)$$

порог перколяции для этой функции равен $p_c \cong 0.17863$.

Были проведены расчеты для двухкомпонентной среды. На рис. 4 представлены сравнение расчета (при $\sigma_2/\sigma_1 = 10^{-4}$) по итерационному методу (сплошная кривая), методу самосогласованого поля (пунктир), численному моделированию (точки) [1]. Сравнение показывает хорошее согласие итерационного метода (сплошная кривая) с численным экспериментом (точки) и существенное расхождение метода самосогласованого поля (пунктир) с численным экспериментом.

Таким образом, разработанный итерационный метод расчета эффективной проводимости σ можно использовать для прогнозирования проводимости неоднородных материалов с хаотической структурой при любых значениях проводимости компонентов композита (фаз) σ_1 и σ_2 и во всем диапазоне концентраций $0 \leq p \leq 1$.

Полученные результаты могут быть использованы при анализе зависимости проводимости композита не только от свойств и концентраций их компонентов, но и от такой характеристики структуры композита, как фрактальная размерность.

Частотные зависимости диэлектрических свойств металлодиэлектрических композитов

В последнее время большое внимание уделяется анализу зависимостей свойств композитов типа металл — диэлектрик от частоты, что связано с трудностями описания аномального поведения диэлектрических свойств в низкочастотном пределе. Природу аномального поведения частотных зависимостей диэлектрических свойств можно выяснить, если рассмотреть модельную среду, состоящую из малых сферических металлических частиц, которые описываются диэлектрической функцией Друдэ:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau_1)}$$

и которые погружены в диэлектрическую матрицу с диэлектрической постоянной, равной единице ($\varepsilon_2 = 1$); ω_p — плазменная частота, τ_1 — время релаксации металлической фазы.

Если такая среда подвергается воздействию электрического поля [3] и учитывая, что решение электростатической задачи для сферического включения в однородной среде дает зависимость для электрического поля E_1 внутри сферической металлической частицы в виде $E_1 = 3 \cdot E_0 / (\varepsilon_1 + 2)$, получим, что

электрическое поле E_1 стремится к бесконечности при частотах в области $\omega \cong \omega_{p1} / \sqrt{3}$

На таких частотах приложенное поле находится в резонансе с модой малой металлической частицы, и в результате появляется сильное поглощение на этой частоте, то есть в окрестности частоты $\omega_{p1} / \sqrt{3}$ сильно возрастает мнимая часть эффективной диэлектрической проницаемости среды.

Для неоднородных сред типа металл–диэлектрик с хаотической структурой картина еще больше усложняется.

Нами были проанализированы частотные зависимости диэлектрических свойств композитов с хаотической структурой. Были приведены результаты расчета диэлектрических свойств композитов типа металл–диэлектрик с хаотической, иерархической, самоподобной структурой на основе фрактальной модели во всей области концентраций неоднородностей при различных частотах внешнего поля [3].

Каждая k -я связь в множестве $\Omega_n(I_0, P_0)$ обладала комплексным сопротивлением (импедансом) $Z_k(\omega)$, которое состоит из активного сопротивления R_k , индуктивности L_k и емкости C_k :

$$Z_k^{-1}(\omega) = (R_k + i\omega L_k)^{-1} + i\omega C_k.$$

В дальнейшем каждая связь будет характеризоваться комплексной электропроводностью σ_k^* с учетом того, что выполняется $\sigma_k^* = Z_k^{-1}(\omega)$.

Были проведены расчеты для двухфазной (двухкомпонентной) среды. Расчеты диэлектрических свойств неоднородных сред при различных частотах и концентрациях показали, что итерационный процесс сходится, то есть:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_c^{*(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_n^{*(k)} = \sigma^*$$

Комплексная локальная проводимость для металлической фазы с учетом диэлектрической функции Друде (8) определялась в виде:

$$\sigma_1^*(\omega) = \sigma_1 + i\omega \left(\varepsilon_1 - \frac{1}{x^2 + \gamma^2} \right),$$

$$x = \omega / \omega_{p1}; \quad \gamma = \frac{1}{\omega_{p1} \tau_1}$$

где

Комплексная локальная проводимость диэлектрической фазы определялась в виде:

$$\sigma_2^*(\omega) = \sigma_2 + i\omega \varepsilon_2.$$

В расчетах было принято:

$$\varepsilon_1 = 1; \quad \varepsilon_2 = 10; \quad \gamma = \frac{1}{\omega_p \tau_1} = \frac{1}{30}; \quad \omega_p \tau_1 = 30;$$

$$\sigma_2 / \sigma_1 = 10^{-2}; \quad \tau_1 = 1; \quad 0.001 \leq \frac{\omega}{\omega_p} \leq 1.5$$

На рис. 5 и 6 приведены зависимости эффективной проводимости $\sigma = \text{Re}(\sigma^*)$ и эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon = \text{Im}(\sigma^*)/\omega$ от концентрации металлической фазы p и относительной частоты ω/ω_p . Нули эффективной диэлектрической проницаемости ε определяют плазменные частоты системы, то есть определяют переход “металл \leftrightarrow диэлектрик”.

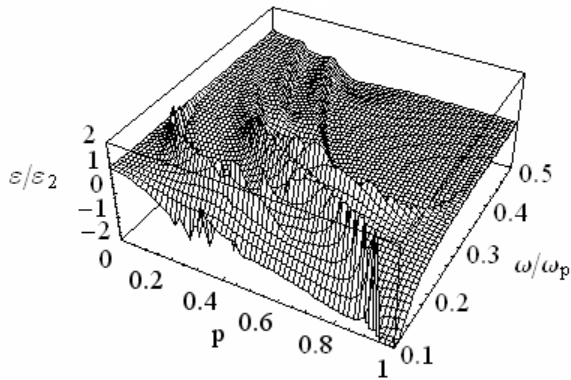


Рис. 5. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости композита с хаотической структурой от концентрации металлической фазы p и частоты ω

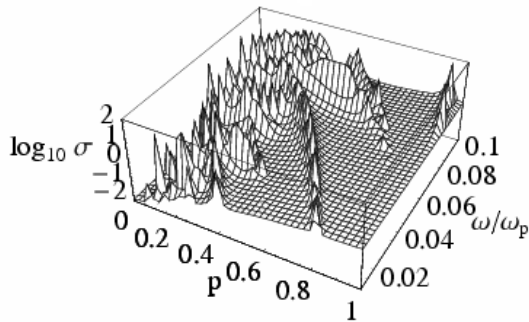


Рис. 6. Зависимость эффективной электропроводности композита с хаотической структурой от концентрации металлической фазы p и частоты ω

Из расчетов (рис. 5, 6) следует, что на низких частотах возникает расходимость эффективной диэлектрической проницаемости и эффективной проводимости (резкое возрастание потерь). Это объясняется тем, что в системе обра-

зуются конечные кластеры из металлической фазы, которые разделены тонкими диэлектрическими прослойками. Такие структуры образуют иррегулярную, самоподобную хаотическую емкостную сеть, которая и порождает систему резонансных частот.

Кроме этого, на частотные зависимости эффективных свойств оказывают влияние конфигурации конечных кластеров.

Остановимся на одном из возможных приложений рассмотренных выше модельных представлений о диэлектрических свойствах фрактальных систем.

Оптические свойства коллоидных систем до последнего времени не находили своего объяснения в рамках классической теории, например, теории Ми. Так, в рамках классической теории, изменение окраски золей объяснялось появлением в растворе разноразмерных частиц металла (серебра), что связывалось с зависимостью резонансной (плазменной) частоты от радиуса частицы. Однако экспериментальные исследования показали, что спектральные зависимости коллоидов не коррелируют со статистической функцией распределения частиц по размерам, то есть роль фактора размера частиц была признана не существенной. Появление длинноволнового крыла в спектре коллоида можно объяснить агрегацией частиц во фрактальные структуры.

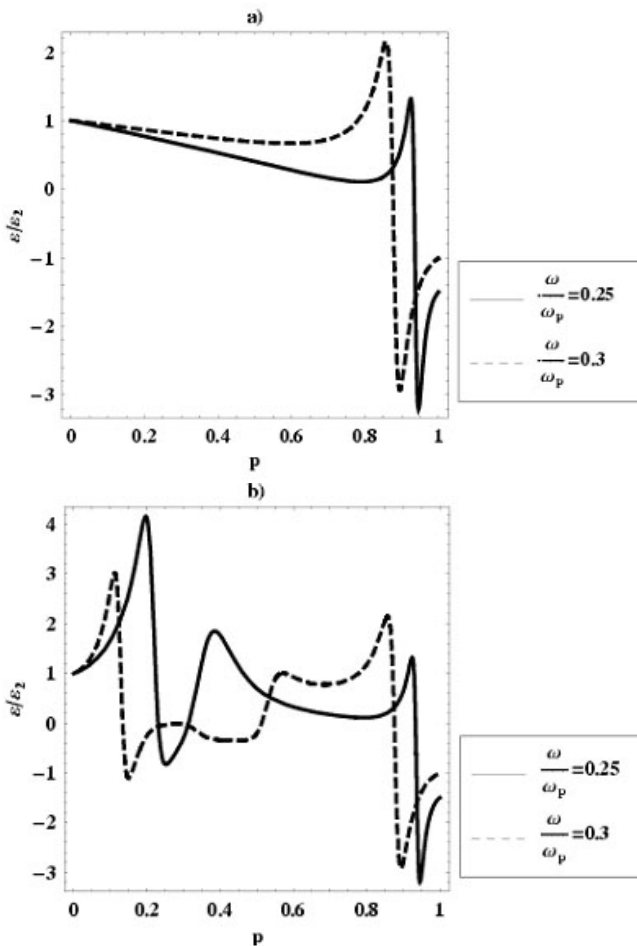


Рис. 7. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости ϵ/ϵ_2 коллоида типа металл — диэлектрик от концентрации металлической фазы (серебра) p при частотах $\omega/\omega_p = 0,25$ и $\omega/\omega_p = 0,3$: а) расчет на основании модели Лоренца; б) расчет на основании фрактальной модели

Так, например, малая серебряная частица имеет частоту плазменных колебаний с длиной волны $\lambda = 2\pi c/\omega_p = 140$ нм. Классическая теория (Лоренц) для объяснения пика при 650 нм требует присутствие в коллоиде объёмной концентрации серебра, равного $p \cong 0,86$ (рис. 7, а), а эксперимент даёт значения p на много меньше, что согласуется с нашими расчетами (рис. 7, б).

Таким образом, смещение пика в коллоидных растворах в область малых концентраций металла объясняется образованием в них фрактальных структур.

Можно указать еще несколько объектов, которые имеют фрактальные структуры. Например, при режимах напыления, которые соответствуют модели диффузионной агрегации, можно получить тонкие пленки из металлических фрактальных кластеров. Перколяционный кластер вблизи порога протекания, структуры бинарных растворов и полимеров так же имеют фракталы. Диэлектрические свойства всех этих объектов можно прогнозировать с помощью рассмотренной выше фрактальной модели.

Проводимость в магнитном поле 3-х мерного композита с хаотической фрактальной структурой

Для определения эффективных гальваномагнитных характеристик композита вводится тензор эффективных проводимостей $\hat{\sigma}_e$:

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \hat{\sigma}_e \langle \mathbf{E} \rangle,$$

$$\hat{\sigma}_e = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{vmatrix}.$$

Угловые скобки означают усреднение по объему V :

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \frac{1}{V} \int \mathbf{j}(\mathbf{r}) d^3r, \quad \langle \mathbf{E} \rangle = \frac{1}{V} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) d^3r,$$

где $\mathbf{j}(\mathbf{r}), \mathbf{E}(\mathbf{r})$ — случайные функции координат. Предполагают, что для локальных областей выполняется: $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \hat{\sigma}(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})$, где

$$\hat{\sigma}(\mathbf{r}) = \begin{vmatrix} \sigma_{11}(\mathbf{r}) & \sigma_{12}(\mathbf{r}) & 0 \\ \sigma_{12}(\mathbf{r}) & \sigma_{22}(\mathbf{r}) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33}(\mathbf{r}) \end{vmatrix}.$$

Тензор проводимости можно представить в виде: $\hat{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) = \hat{\sigma}_{ij}^s(\mathbf{r}) + \hat{\sigma}_{ij}^a(\mathbf{r})$, где $\hat{\sigma}_{ij}^s(\mathbf{r})$ — симметричная часть тензора ($\hat{\sigma}_{ij}^s(\mathbf{r}) = \hat{\sigma}_{ji}^s(\mathbf{r})$), а $\hat{\sigma}_{ij}^a(\mathbf{r})$ — антисимметричная часть тензора ($\hat{\sigma}_{ij}^a(\mathbf{r}) = -\hat{\sigma}_{ji}^a(\mathbf{r})$). Антисимметричную часть $\hat{\sigma}_{ij}^a(\mathbf{r})$ ассоциируют с эффектом Холла.

Простейшая форма закона Ома в такой среде имеет вид: $\mathbf{j} + \mathbf{j} \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}) = \sigma_0(\mathbf{r})\mathbf{E}$, где $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r}) = \beta(\mathbf{r})\mathbf{n}$ — параметр Холла, пропорциональный внешнему магнитному полю \mathbf{H} , направленный, как и само поле,

по нормали к поверхности образца. Параметр Холла связан с коэффициентом

$$\text{Холла: } R = -\frac{\beta}{\sigma_0 H},$$

Тензор проводимостей определяется в виде:

$$\hat{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{\sigma_0(\mathbf{r})}{1 + \beta^2(\mathbf{r})} \begin{bmatrix} 1 & -\beta(\mathbf{r}) & 0 \\ \beta(\mathbf{r}) & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \beta^2(\mathbf{r}) \end{bmatrix}$$

Тензор $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ хорошо описывает нескомпенсированные металлы и полупроводники, а также импульсную плазму.

Поскольку нам не известны работы, в которых анализировалось влияние фрактальной и хаотической структуры 3-х мерного композита на эффективные гальваномагнитные свойства на основе фрактальной модели структуры композита и итерационного метода усреднения был проведен подробный анализ эффективных холловских свойств композитов [4].

Предполагалось, что каждая к-я связь из множества $\Omega_f(L, p)$ обладала набором холловских свойств (σ_k, β_k) , состоящим из проводимости и параметра Холла.

Двухфазная система описывалась функцией распределения

$$p(\sigma) = (1-p)\delta(\sigma - \sigma_2^{(0)}) + p\delta(\sigma - \sigma_1^{(0)})$$

$$p(\beta) = (1-p)\delta(\beta - \beta_2^{(0)}) + p\delta(\beta - \beta_1^{(0)})'$$

где $\delta(x)$ — функция Дирака; p — вероятность того, что данная локальная область обладает свойствами $\sigma_1^{(0)} = \sigma_1, \beta_1^{(0)} = \beta_1$, а $(1-p)$ — вероятность того, что данная локальная область обладает свойствами $\sigma_2^{(0)} = \sigma_2, \beta_2^{(0)} = \beta_2$.

В этом случае после k итерационных шагов функция плотности принимает вид:

$$p_k(\sigma) = \delta(\sigma - \sigma^{(k)})$$

$$p_k(\beta) = \delta(\beta - \beta^{(k)})$$

В пределе же будем иметь:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_{CK}^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_{HCK}^{(k)} = \sigma$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \beta_{CK}^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \beta_{HCK}^{(k)} = \beta$$

Трудности анализа эффективной проводимости композита с хаотической структурой существенно возрастают при $\mathbf{H} \neq 0$. Это связано с тем, что при $\mathbf{H} = 0$ эффективная проводимость зависит только от двух параметров: от объемной концентрации p и от отношения проводимостей компонентов: $x = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$.

В случае, когда $H \neq 0$, эффективная проводимость зависит от четырех параметров: к двум параметрам x, p , о которых сказано выше, добавляются зависимости от магнитного поля H и от отношения подвижностей компонен-

тов:
$$y = \frac{\mu_2}{\mu_1}$$

Критические индексы t, s, t_1, s_1 определялись из зависимостей гальваномагнитных свойств вблизи порога перколяции:

$$\sigma \sim (p_c - p)^{-s}, \quad \text{if } (p_c - p) > 0,$$

$$\sigma \sim (p - p_c)^t, \quad \text{if } (p - p_c) > 0,$$

$$R \sim (p_c - p)^{-s_1}, \quad \text{if } (p_c - p) > 0,$$

$$R \sim (p - p_c)^{t_1}, \quad \text{if } (p - p_c) > 0,$$

При расчетах критических индексах определялись функции $\chi_\sigma(p, x, y, H)$ и $\chi_R(p, x, y, H)$:

$$\left. \begin{aligned} \chi_\sigma(p, x, y, H) &= \frac{\log_{10}[\sigma(p + \Delta p, x, y, H)] - \log_{10}[\sigma(p, x, y, H)]}{\log_{10}[p + \Delta p - p_c] - \log_{10}[p - p_c]}, \\ \chi_R(p, x, y, H) &= \frac{\log_{10}[R(p + \Delta p, x, y, H)] - \log_{10}[R(p, x, y, H)]}{\log_{10}[p + \Delta p - p_c] - \log_{10}[p - p_c]} \end{aligned} \right\}$$

Критические индексы t, s и t_1, s_1 можно определить, если найти значения функций $\chi_\sigma(p, x, y, H)$ и $\chi_R(p, x, y, H)$ в перколяционном пределе ($p \rightarrow p_c, x \rightarrow 0, y \rightarrow \infty, xy \rightarrow 1$)

$$t(H) = \lim_{\substack{p \rightarrow p_c + 0 \\ x \rightarrow 0 \\ y \rightarrow \infty}} \chi_\sigma(p, x, y, H), \quad t_1(H) = \lim_{\substack{p \rightarrow p_c + 0 \\ x \rightarrow 0 \\ y \rightarrow \infty}} \chi_R(p, H),$$

$$s(H) = \lim_{\substack{p \rightarrow p_c - 0 \\ x \rightarrow 0 \\ y \rightarrow \infty}} \chi_\sigma(p, x, y, H), \quad s_1(H) = \lim_{\substack{p \rightarrow p_c - 0 \\ x \rightarrow 0 \\ y \rightarrow \infty}} \chi_R(p, H)$$

На основе проведенных расчетов были определены приближенные значения критических индексов:

$$\left. \begin{aligned} H \rightarrow 0, & \quad 2.0 \leq t \leq 2.7, \quad 0.85 \leq s \leq 0.9; \quad 3.9 \leq t_1 \leq 5.1, \quad 1.6 \leq s_1 \leq 2.2; \\ H = 10^5, & \quad 2.6 \leq t \leq 3.0, \quad -1.4 \leq s \leq -1.3; \quad 0 \leq t_1 \leq 1.5, \quad s_1 \cong 0; \\ H \rightarrow \infty, & \quad 3.0 \leq t \leq 3.7, \quad -1.4 \leq s \leq -1.3; \quad t_1 \square s_1 \cong 0; \end{aligned} \right\}$$

В настоящее время в литературе достаточно полно исследованы критические индексы t и s , которые определены при $H = 0$. Сравнение расчета критических индексов t, s при $H = 0$ с литературными данными $1,6 < t < 2,5, 0,7 < s < 0,9$ [см. Chapter 2] показывает, что наши значения $2,0 \leq t \leq 2,7, 0,85 \leq s \leq 0,9$ завышены по сравнению с литературными данными, поэтому наш анализ гальваномагнитных свойств в перколяционном пределе ($p \rightarrow p_c, x \rightarrow 0, y \rightarrow \infty, xy \rightarrow 1$) можно рассматривать как качественный анализ. Точность расчета гальваномагнитных свойств зависит от адекватности функции вероятности $Y(p)$ и материальных уравнений структуре и свойствам неоднородной среды.

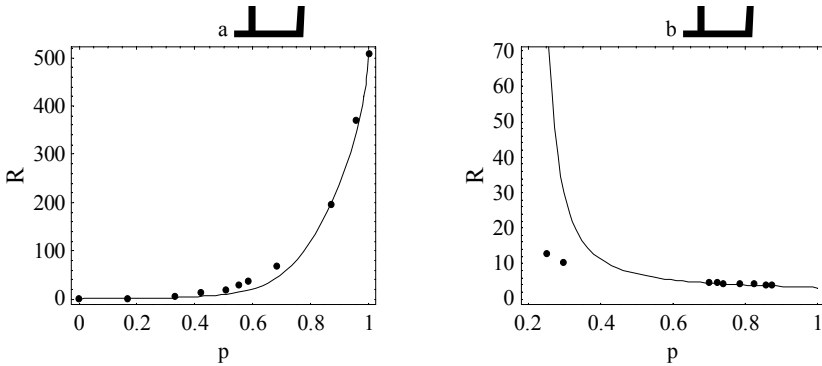


Рис. 8. Сравнение расчетов с экспериментами для зависимостей эффективного коэффициента Холла композитов $Bi-Cd$ (а) и для Na_xWO_3 (б) от концентрации фазы одного из компонентов

На рис. 8 представлены расчеты эффективного относительного коэффициента Холла (а) и относительной эффективной проводимости (б), когда значения проводимостей компонентов равны, значение подвижности во втором компоненте очень маленькое: $\mu_2 = 10^{-10} \mu_1$ при разных значениях магнитного поля H .

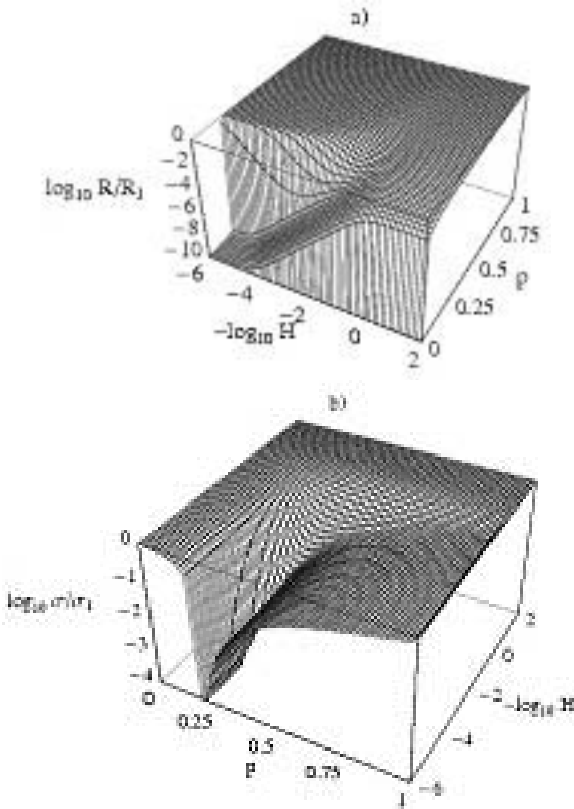


Рис. 9. Зависимости эффективного коэффициента Холла а) и эффективной электропроводности б) композита от напряженности магнитного поля H и концентрации компонента p с проводимостью

$$\sigma_1$$

Аномальная релаксация

В последнее время достаточно большое внимание уделяется анализу аномальной релаксации, которая характеризуется не экспоненциальными релаксационными функциями, а проблема релаксации в неупорядоченных средах отнесена к приоритетным задачам научных исследований.

Можно выделить три основных закона релаксации, встречающихся при экспериментальном изучении сложных систем:

$$f(t) \approx \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\alpha\right], 0 < \alpha < 1, t > \tau$$

растянутый экспоненциальный

$$f(t) \approx \exp\left[-B \cdot \ln^\alpha\left(\frac{t}{\tau}\right)\right]$$

экспоненциально – логарифмический

$$f(t) \approx \left(\frac{t}{\tau}\right)^{-\alpha}, \text{ где } \alpha, \beta, \tau \text{ и } B \text{ —}$$

алгебраическое затухание экспериментальные параметры.

Количественной микроскопической теории, которая могла бы объяснить наблюдаемые зависимости, в настоящее время не предложено, и все чаще утверждают, что такой теории не может быть создано. Это связано с тем, что пространственная неоднородность, связанная, например, со случайным расположением примесных молекул в матрице или с расположением атомов в

аморфних полупроводниках, и определяющая распределение межатомных расстояний, приводит к тому, что диапазон микроскопических скоростей переходов оказывается весьма широким. Такой пространственный беспорядок приводит к временному, а иногда и к энергетическому беспорядку.

Нами была предложена фрактальная модель [6, 7], которая позволила описать аномальную релаксацию. Основные идеи, которые использовались при построении этой модели, опишем ниже на примере релаксации вязкоупругого тела.

Фрактальная модель релаксации

Для стандартного линейного тела (модель Зинера) вероятность перехода $f(t)$ из начального состояния ($t=0$) в произвольное состояние $\mu(t)$ определяется по формуле:

$$f_0(t) = \frac{\mu_0 - \mu(t)}{\mu_0 - \mu_\infty} = \exp\left(-\frac{t}{\tau_\sigma}\right), \text{ где } \mu_\infty, \mu_0 \text{ — релаксированное}$$

($t \rightarrow \infty$) и не релаксированное ($t = 0$) значение модуля сдвига, соответственно; τ_σ — время релаксации при постоянной деформации тела.

Время релаксации τ согласно формуле Аррениуса равно: $\tau = \tau_0 \exp\left[\frac{Q}{kT}\right]$, где Q — энергетический барьер между начальным и конечным состоянием; T — температура; k — постоянная Больцмана; τ_0 — постоянная.

Согласно фрактальной модели и итерационному методу расчета модулей сдвига при переходе из начального в конечное состояние система совершает последовательную цепочку переходов:

$\mu^{(0)} \rightarrow \mu^{(1)} \rightarrow \dots \mu^{(i)} \rightarrow \mu^{(i+1)} \rightarrow \dots \mu^{(n)}$, каждый из которых описывается вероятностью перехода $f_i(t)$ из i -го состояния в $(i+1)$. Поскольку функция $f_i(t)$ определяется экспонентой с временем релаксации τ_i , задаваемым формулой Аррениуса и высотой энергетического барьера Q_i , можно написать цепочку неравенств:

$$\tau_0 > \tau_1 > \dots \tau_i > \tau_{i+1} > \dots > \tau_n = \tau.$$

При этом для множества времен релаксации $\{\tau_i\}$ существует нижний τ_0 и верхний предел τ . Следовательно, в соответствии с фрактальной моделью множество времен релаксации $\{\tau_i\}$ удовлетворяет критерию самоподобия и ограничено нижним и верхним асимптотическими пределами.

Если предположить, что флуктуации вязкоупругих свойств на нулевом масштабном уровне являются независимыми, то в этом случае независимо действует набор параллельных каналов релаксации. Каждый канал отвечает статистическому ансамблю α , который реализуется с вероятностью Φ_α .

Наличие множества времен релаксации на $l^{(k)}$ — масштабном уровне может быть обеспечено только при условии, что потенциальные барьеры $Q_{\alpha\beta}$, разделяющие различные минимумы кластеров α, β , отличаются по

высоте. Это приводит к тому, что потенциальный рельеф системы $U(l)$ имеет иерархическую структуру: на крупномасштабные минимумы зависимости $U(l)$ накладываются более мелкие, на них еще мельче и так далее, то есть получаем фрактальную зависимость $U(l)$ (рис. 10).

Иерархической цепочке переходов из начального состояния ($t = 0$) в конечное ($t \rightarrow \infty$) можно поставить в соответствие дерево Кейли (рис. 10). В этом случае, статическим ансамблям α и β будут отвечать узлы дерева Кейли (рис. 10), которым можно сопоставить точки в ультраметрическом пространстве, которые разделены расстоянием $l_{\alpha\beta}$.

Величина $l_{\alpha\beta}$ определяется числом шагов до общего узла по уровням дерева Кейли на рис. 10 и задает степень иерархической связи. Следовательно, высота барьера $Q_{\alpha\beta}$ и время релаксации $\tau_{\alpha\beta}$ связаны функциями расстояния $l_{\alpha\beta}$ в ультраметрическом пространстве, то есть $Q_{\alpha\beta} = Q_{\alpha\beta}(l)$, $\tau_{\alpha\beta} = \tau_{\alpha\beta}(l)$

В связи с тем, что с удалением кластеров возрастает высота барьеров, разделяющих кластеры, предполагается монотонно возрастающая зависимость $Q_{\alpha\beta}(l)$.

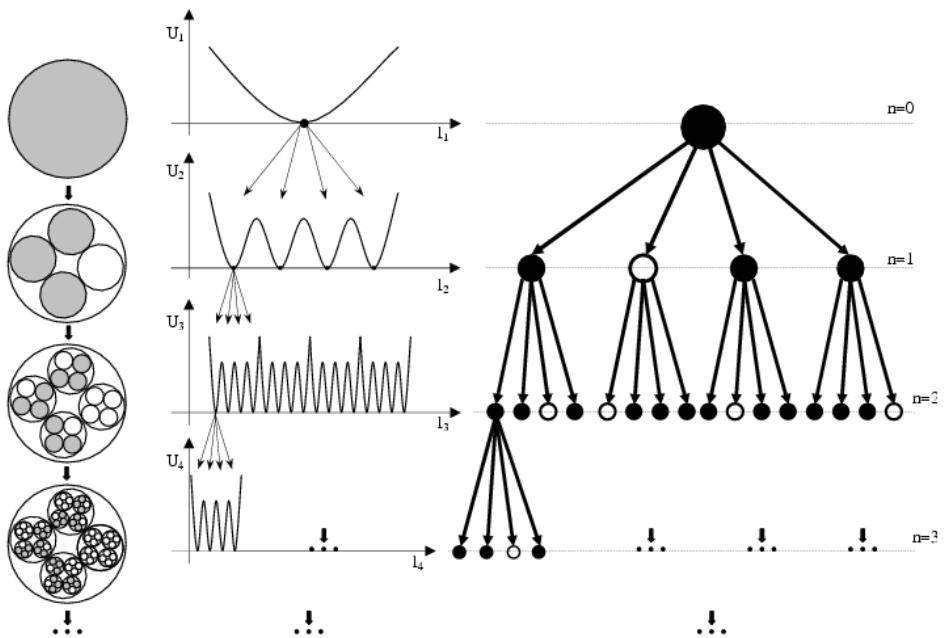


Рис. 10. К построению иерархической модели релаксации

Таким образом, согласно фрактальной модели независимо действует набор параллельных каналов релаксации. Вероятность перехода между каналами α и β определяется по формуле:

$$f_{\alpha\beta}(t) = \exp[-t/\tau_{\alpha\beta}],$$

$$\tau_{\alpha\beta} = \tau_0 \exp[Q_{\alpha\beta}/kT],$$

где $Q_{\alpha\beta}$ — высота энергетического барьера разделяющего каналы.

Параллельное действие различных каналов релаксации обеспечивается только в условиях иерархического соподчинения соответствующего набора статических ансамблей. Характер иерархического соподчинения выражается в том, что пока не сработают каналы с заданным временем релаксации τ_i , не включается параллельная сеть каналов следующего уровня, обладающего временем релаксации $\tau_{i+1} > \tau_i$. Таким образом, сначала протекают наиболее быстрые процессы, отвечающие преодолению барьеров минимальной высоты $Q_{\alpha\beta}$. При этом происходит слияние статистических ансамблей, и система переходит на более высокий иерархический уровень дерева Кейли.

Следовательно, статистические ансамбли α, β могут объединяться в кластеры, каждый из которых характеризуется максимальной высотой $Q_{\alpha\beta}$ барьера, отделяющего данный кластер от других. Такое иерархическое соподчинение является причиной замедления релаксации, приводящего к трансформации дебаевской экспоненты (5.13) в более медленно спадающие зависимости.

Действительно, согласно описанной модели релаксации можно определить зависимость $Q_{\alpha\beta}(l)$ и $\omega_{\alpha}(l)$ от расстояния в ультраметрическом пространстве в виде

$$Q_{\alpha\beta}(l) \approx Q \ln l, \quad \Phi_{\alpha}(l) \approx l^{-d_f},$$

где d_f — фрактальная размерность.

В соответствии с нашими расчетами зависимость времени релаксации $\tau_{\alpha\beta}(l)$ от расстояния в ультраметрическом пространстве l имеет вид:

$$\tau_{\alpha\beta}(l) = \tau_0 l^{Q/kT}$$

Суммарную вероятность можно определить в виде:

$$f(t) = \int_0^{\infty} \varphi(l) f_{\alpha\beta}(t)(l) dl$$

или

$$f(t) = \int_0^{\infty} \varphi(l) \exp\left(-\frac{t}{\tau_{\alpha\beta}(l)}\right) dl,$$

которая описывает релаксацию всеми наборами каналов релаксации, где $\varphi(l)$ — вероятность реализации статистического ансамбля.

С учетом полученных формул определим степенью закон релаксации

$$f(t) \approx t^{-\gamma}, \text{ если } t \rightarrow \infty,$$

$$\gamma = \frac{1-d_f}{Q/kT},$$

где d_f — фрактальная размерность множества времен релаксации ($d_f < 1$).

Таким образом, на макроскопическом уровне результат осреднения релаксации напряжения по иерархическим мезоуровням приводит к аномальной релаксации.

Аномальная диффузия

В последние годы появилось много работ посвященных аномальной диффузии. Отличие аномальной диффузии от нормальной заключается в том, что ширина диффузионного пакета растет по закону: $\langle \Delta x^2 \rangle \sim t^H, H \neq \frac{1}{2}$.

Для описания аномальной диффузии необходима дополнительная информация о диффузионном процессе, например: описание конкретной физической модели, (скачкообразных процессов); наложение некоторых условий, например, условия самоподобия (автомодельность), согласно которому плотность вероятности $p(x, t)$, что частица в момент времени t находится в точке x равна: $p(x, t) = t^{-H} f(x, t^{-H})$, где H может быть не равной $1/2$, а $f(x)$ может быть не гауссовским распределением.

Нами была построена математическая модель, на основании которой получим обобщение для эффективного коэффициента аномальной диффузии [1, 6, 15].

Отличительной чертой диффузии с учетом инерциальных эффектов или, как ее еще называют, мезоскопической диффузии является отклонение от закона Фика, то есть для мезоскопической диффузии вместо закона Фика справедлив закон Максвелла-Каттанео, который вместе с уравнением непрерывности приводит к уравнению для распределения плотности частиц $p(x, t)$ в виде телеграфного уравнения с дробными производными:

$$\frac{\partial^{2\alpha} p}{\partial t^{2\alpha}} + \left(\frac{1}{\tau}\right)^\alpha \frac{\partial^\alpha p}{\partial t^\alpha} = \nu_\alpha^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

Учитывая начальные условия уравнение можно переписать в виде:

$$\tau^\alpha \frac{\partial^{2\alpha} p(x, t)}{\partial t^{2\alpha}} - \frac{\tau^\alpha \delta(x)}{\Gamma(1-2\alpha)t^{2\alpha}} + \frac{\partial^\alpha p(x, t)}{\partial t^\alpha} - \frac{\delta(x)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha} = D_\alpha \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}$$

где $D_\alpha = \nu^2 \tau^\alpha$, а начальные условия имеют вид:

$$\frac{\partial^{2\alpha} \tau^\alpha p(x, 0)}{\partial t^{2\alpha}} = \frac{\tau^\alpha \delta(x)}{\Gamma(1-2\alpha)t^{2\alpha}}, \quad \frac{\partial^\alpha p(x, 0)}{\partial t^\alpha} = \frac{\delta(x)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha}.$$

Применив преобразование Фурье, получим:

$$\hat{p}(k, t) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - 4\tau^\alpha k^2 D_\alpha}} \right) H_{1,2}^{1,1} \left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\alpha \left(\frac{\sqrt{1 - 4\tau^\alpha k^2 D_\alpha} - 1}{2} \right) \middle| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1) \end{matrix} \right]_{(0,\alpha)} +$$

$$+ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - 4\tau^\alpha k^2 D_\alpha}} \right) H_{1,2}^{1,1} \left[\left(\frac{t}{\tau}\right)^\alpha \left(\frac{\sqrt{1 - 4\tau^\alpha k^2 D_\alpha} + 1}{2} \right) \middle| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1) \end{matrix} \right]_{(0,\alpha)}$$

где $H_{1,2}^{1,1}$ — функции Фокса.

С учетом четности $\hat{p}(k, t)$ по k получим решение телеграфного уравнения с дробной производной в виде интеграла:

$$p(x, t) = \frac{2}{2\pi} \int_0^\infty \hat{p}(k, t) \cos(kx) dk.$$

Второй момент или среднеквадратичное отклонение диффузионной частицы от начального положения $\langle x^2 \rangle$ равно:

$$\langle x^2 \rangle = 2D_\alpha \tau^\alpha \left(E_{\alpha,1} \left(-\frac{t}{\tau} \right) - 1 + \frac{1}{\Gamma(1+\alpha)} \left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha \right), \text{ где } E_{\alpha,1} \left(-\frac{t}{\tau} \right) \text{ функция}$$

Mittag-Leffler'a.

Для аномальной диффузии характерна более медленная степенная зависимость второго момента от времени. При $t/\tau \rightarrow 0$, $\langle x^2 \rangle \rightarrow D_\alpha t^{2\alpha} / \tau^\alpha$ — баллистическое движение, а при $t/\tau \rightarrow \infty$, получаем $\langle x^2 \rangle \rightarrow 2D_\alpha t^\alpha$, этот результат соответствует аномальной диффузии с учетом инерциальных эффектов.

Упругие свойства

Определение упругих свойств неоднородной среды с фрактальной структурой [8] можно провести по итерационной процедуре аналогично тому, как это было сделано в предыдущем разделе при определении эффективной проводимости.

Упругие свойства (объемная упругость K и модуль сдвига μ) СМ и НСМ можно определить с помощью формул Хашина-Штрикмана, полученных в физике композиционных материалов.

Отрицательный коэффициент Пуассона

При внешнем воздействии на тело, его можно охарактеризовать двумя параметрами, которые определяют способность тела оказывать сопротивление изменению объема — модуль всестороннего сжатия k и изменению формы — модуль сдвига μ .

Упругое поведение тела при однородном растяжении можно охарактеризовать коэффициентом Пуассона, который определяется отношением поперечного сжатия к продольному растяжению.

Типичные окружающие нас материалы имеют положительные коэффициенты Пуассона, $\nu > 0$. Коэффициент Пуассона ν связан с k и μ : для трехмерного изотропного тела ($d = 3$):

$$\nu = \frac{1}{2} \left(\frac{3k - 2\mu}{3k + 2\mu} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{3 - 2x}{3 + 2x} \right);$$

для двумерного изотропного тела ($d = 2$):

$$\nu = \frac{k - \mu}{k + \mu} = \frac{1 - x}{1 + x}, \quad x = \mu / k.$$

Таким образом, коэффициент Пуассона зависит от размерности пространства d и в общем случае для d — мерной изотропной среды коэффициент Пуассона можно определить в виде:

$$\nu = \frac{kd - 2\mu}{d(d - 1)k + 2\mu} = \frac{d - 2x}{d(d - 1) + 2x};$$

т.о. коэффициент Пуассона может, изменяться в пределах

$$-1 < \nu < \frac{1}{d - 1};$$

т.о. коэффициент Пуассона может принимать отрицательные значения, если $x > \frac{d}{2}$.

Для обычных материалов ($d = 2,3$) значения $x = \mu / k < 1$, то есть для обычных материалов $\nu > 0$.

Материал с отрицательным коэффициентом Пуассона можно получить следующими способами: выбором материала для которого выполнялось $\mu > kd / 2$, или созданием структуры материала размерность которой была меньше значения $2\mu / k$, то есть $d < 2\mu / k$, или сочетанием первого и второго способа. Изменение размерности возможна в фрактальных структурах. Один из фрагментов фрактальной структуры, который имеет отрицательный коэффициентом Пуассона, представлен на рис. 11.



Рис. 11. Фрагмент фрактальной структуры с отрицательным коэффициентом Пуассона.

Нами были приведены численные расчеты коэффициента Пуассона^V хаотической среды на основе разработанного итерационного метода усреднений [9] (рис. 12).

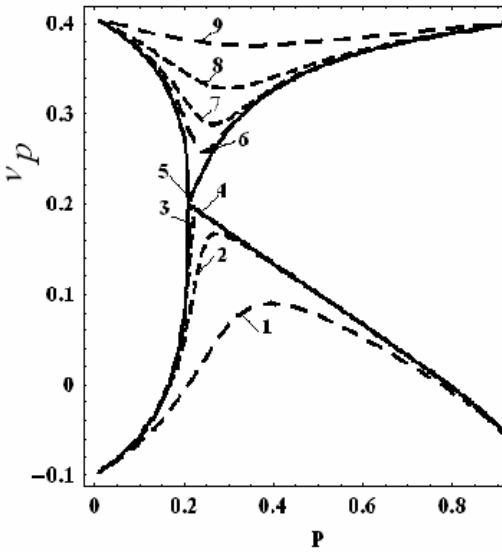


Рис. 12. Зависимость коэффициента Пуассона от концентрации p и свойств компонентов

$$K_1 / \mu_1 = K_2 / \mu_2 = K / \mu$$

: а), б)

Вязкоупругие свойства

Если внешнее воздействие зависит от времени, то есть напряжения $\sigma(t)$ и деформации $\varepsilon(t)$ зависят от времени, то закон Гука можно записать в виде:

$$\bar{\sigma}(\omega) = C^*(\omega)\bar{\varepsilon}(\omega),$$

где $\bar{\sigma}(\omega)$, $\bar{\varepsilon}(\omega)$ преобразование Фурье функций $\sigma(t)$ и $\varepsilon(t)$ соответственно

$$\bar{\sigma}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \sigma(t) dt, \quad \bar{\varepsilon}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \varepsilon(t) dt, \quad \sigma(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \bar{\sigma}(\omega) d\omega,$$

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \bar{\varepsilon}(\omega) d\omega,$$

Комплексный модуль упругости равен

$$C^*(\omega) = C'(\omega) + iC''(\omega), \quad (A7),$$

где действительная и мнимая части модуля $C^*(\omega)$ равны [5]:

$$C'(\omega) = C_{\infty} + \omega \int_{-\infty}^{\infty} g(t) \sin \omega t dt, \quad C''(\omega) = \omega \int_{-\infty}^{\infty} g(t) \cos \omega t dt.$$

Закон Гука относительно тензора модулей податливости S можно записать в виде:

$$\bar{\varepsilon}(\omega) = S^*(\omega)\bar{\sigma}(\omega),$$

где $S^*(\omega) = S'(\omega) + iS''(\omega)$, $S'(\omega)$ — податливость накоплений, $S''(\omega)$ — податливость потерь.

Можно показать, что относительное рассеяние упругой энергии связано только с мнимой составляющей $S''(\omega)$ упругих модулей.

В дальнейшем будем рассматривать изотропные среды, для которых можно ввести понятие комплексного объёмного модуля упругости $K^*(\omega)$.

Комплексный модуль сдвига μ^* и комплексную вязкость η^* можно записать в виде:

$$\mu^*(\omega) = \mu'(\omega) + i\mu''(\omega), \quad \eta^* = \mu^*/i\omega, \quad \eta^*(\omega) = \eta'(\omega) + i\eta''(\omega)$$

Связь между $\mu'(\omega)$, $\mu''(\omega)$ и $\eta'(\omega)$, $\eta''(\omega)$ определяется в виде:

$$\mu'(\omega) = \omega\eta'(\omega); \quad \mu''(\omega) = \omega\eta''(\omega)$$

Для среды, которая является ньютоновской жидкостью, выполняется

$$\mu^*(\omega) = i\omega\eta'(\omega)$$

Нами был проведен анализ вязкоупругих свойств композитов с фрактальной структурой [10—13].

Отрицательный модуль сдвига

В литературе было показано, что можно создать материалы с экстремальными, необычными свойствами, а именно с отрицательным модулем сдвига.

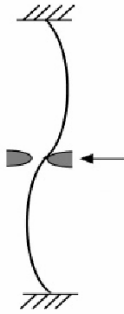


Рис. 13. Схема предлагаемой конструкции для нагружения.

Идея получения таких материалов базируется на поведении конструкции изображенной на рис. 13. Эта конструкция (линейка изогнутая в виде буквы “S”) находится в предварительно нагруженном состоянии. При приложении к ней касательных сил она не будет сопротивляться внешнему воздействию, а будет способствовать смещению в направлении приложения сил. Таким образом, коэффициент пропорциональности (модуль сдвига) между касательными напряжениями и смещением будет отрицательным.

Такие конструкции нестабильны. Стабилизировать конструкцию можно, если их поместить в матрицу (в столбики) с стабильными свойствами, например, в полимер. Таким образом, можно создать композиционный материал, состоящий из включений с отрицательным модулем сдвига и матрицы-полимера с положительным модулем сдвига.

Нами были рассмотрены упругие свойства неоднородной среды с хаотической, фрактальной структурой в которой одна фаза обладала отрицательным модулем сдвига. Анализ был проведен на основе фрактальной, иерархической модели структуры двухфазной среды и итерационного метода расчета упругих свойств [7—13]. Каждая связь характеризуется комплексным модулем сдвига $\mu^*(i\omega) = \mu'(\omega) + i\mu''(\omega)$.

Проведено сравнение расчетов вязкоупругих свойств по формулам Хашина-Штрикмана (“композит Хашина-Штрикмана”) композита с фрактальной структурой (рис. 14). Из расчетов вязкоупругих свойств следует, что в композите с фрактальной структурой возникают пики (“резонансы”) в широком диапазоне концентраций фаз, в то время как в “композите Хашина-Штрикмана” существует только один пик.

Основное различие в зависимости эффективного модуля сдвига от y между фрактальной структурой и “композитом Хашина-Штрикмана” заключается в том, что при концентрациях первой фазы $0 < p < 0,8$ в неоднородной среде с фрактальной структурой существуют “резонансные” точки при различных значениях $y = \frac{\mu_2''}{\mu_2'}$, $x = \frac{\mu_2'}{\mu_1'}$, а в “композите Хашина-Штрикмана” возникает только одна “резонансная” точка, когда $p \rightarrow 1$ (рис. 14, а, б).

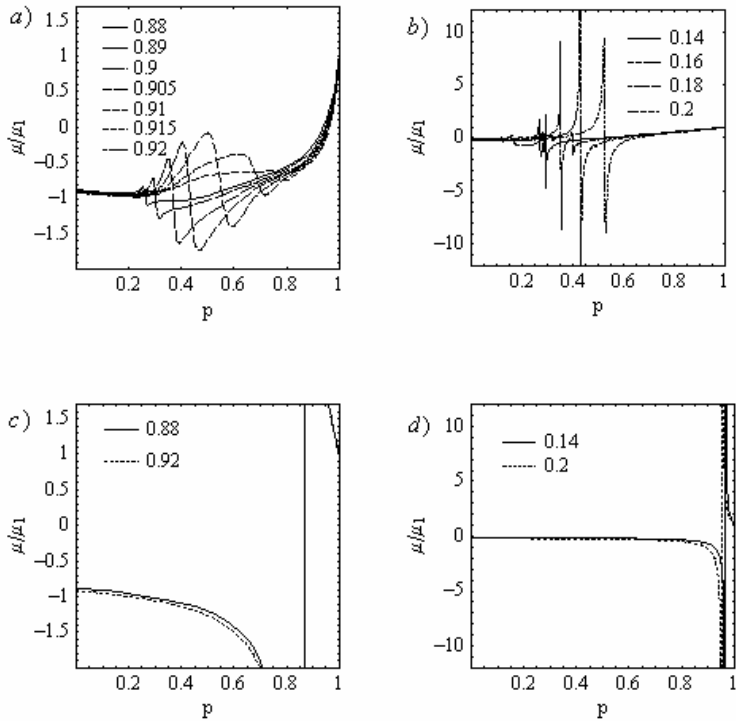


Рис. 14. Зависимость модуля сдвига от концентрации p и разных значений $x = \mu_2' / \mu_1'$

$$\text{при } y = \mu_2'' / \mu_2' = 10^{-3}$$

В заключение отметим, что создание материалов с фрактальной структурой, которые будут иметь упругие свойства, адекватные рассмотренным модельным расчетам, можно провести по следующей схеме: на первом масштабном уровне создаются “таблетки”, например, при создании материала с высокими демпфирующими свойствами “таблетка” состоит из полимерной оболочки с включением из доменов ферромагнитного материала; на втором масштабном уровне создаётся «таблетка» включениями, в которой служат “таблетки”.

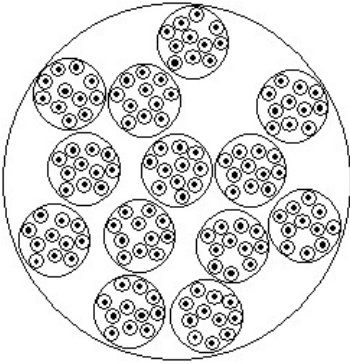


Рис. 15. Модели, полученные на первом масштабном уровне и так далее.

Реологическую модель процесса ползучести

В 1910 г. Андраде провел испытание на ползучесть металлов при высоких температурах и при напряжениях от средних до высоких. Им была установлена зависимость деформации ε от времени t в виде $\varepsilon(t) = \varepsilon_c + \varepsilon_p + m \cdot t^\alpha + k \cdot t$, где ε_c — упругая деформация; ε_p — мгновенная деформация; m, k, α — постоянные. Было установлено, что $\alpha < 1$ (из обработки экспериментальных данных было получено: $\frac{1}{4} < \alpha < \frac{2}{3}$).

Все существующие теории объясняют главным образом стадию установившейся ползучести. Убедительной теории, объясняющей неустановившуюся ползучесть, до настоящего времени нет. Это можно объяснить сложностью описания дислокационной структуры, которая изменяется от начальной структуры, возникшей в результате мгновенной пластической деформации, до дислокационной структуры, которая появляется в процессе установившейся ползучести.

Нами была создана реологическая модель процесса ползучести [14]. Для описания процесса перехода в пластическое состояние с учетом ее стохастической природы был введено понятие “пластмона” — единичного носителя перехода из упругого в пластическое состояние. Это могут быть дислокации, дефекты и другие носители. В этом случае переход в пластическое состояние можно описать по следующей схеме: вначале возникают единичные пластмоны с линейными размерами порядка l_0 (нулевой масштабный уровень) затем возникают скопления (кластеры) пластмонов с линейными размерами l_1 (первый масштабный уровень) и так далее пока на l_n масштабном уровне не появится область, перешедшая в пластическое состояние и пронизывающая весь образец. В этом случае пластмоны образуют фрактальное множество, то есть самоподобное множество, “масса” которого зависит от масштаба в виде $M_f \sim l^{d_f}$, где d_f — фрактальная размерность данного множества.

В работе [14, 17] рассмотрено неравновесное состояние среды, которое определяется фрактальной природой. Предполагалось, что неравновесное состояние определяется множеством времен событий, в которых следующее событие случается через время τ_i после того, как произошло предыдущее событие. В этом случае в процессе эволюции системы из непрерывных состояний системы исключаются некоторые отрезки по заданному закону. Такой процесс можно характеризовать как процесс, порождаемый фрактальным состоянием с заданной фрактальной размерностью d_f .

На основе реологической модели было получено дифференциальное уравнение с дробными производными, которое описывало неустановившуюся ползучесть. Решение уравнения имеет вид:

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + \varepsilon_1(t) = \left[s_0 + s_\infty \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \cdot \left(\frac{t}{\tau_1} \right)^{\alpha(n+1)}}{\Gamma[\alpha(n+1) + 1]} \right] \cdot \sigma,$$

Если $\alpha = 1$, то получаем

$$\varepsilon(t) = \left[s_0 + s_\infty \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \cdot \left(\frac{t}{\tau_1} \right)^{(n+1)}}{\Gamma(n+2)} \right] \cdot \sigma = \left[s_0 + s_\infty \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_1} \right) \right) \right] \cdot \sigma$$

Здесь учтено, что $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \cdot (z)^n}{\Gamma[(n+1)]} = \exp(-z)$, $z = \frac{t}{\tau}$

Было показано, что переход от строго экспоненциальной к аномальной зависимости ползучести происходит при переходе от непрерывного распределения ($\alpha = 1$) к фрактальному распределению времен релаксации ($0 < \alpha = d_f < 1$).

На основе полученных решений можно записать

$$\varepsilon(t) \approx \left[\left(1 - \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau_1} \right)^\alpha \right) \right) \right] \cdot \sigma, \text{ что согласуется с результатами исследований Андраде.}$$

Действительно, если ограничиться первыми членами ряда, то зависимость $\varepsilon(t)$ от времени примет вид: $\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + a_1 \cdot t^\alpha + \dots$, где первый член ε_0 определяет ползучесть не зависящую от времени, а второй член – неустановившуюся ползучесть.

Из полученного решения следует, что скорость неустановившейся ползучести определяется в виде: $\frac{d\varepsilon_1(t)}{dt} = a_1 \cdot \alpha \cdot t^{\alpha-1} + \dots$.

Полученные зависимости совпадают с зависимостями Андраде, которые определены из экспериментальных исследований. Сравнение полученных зависимостей позволяет предположить, что фрактальное множество времен релаксации, которое лежит в основе неустановившейся ползучести Андраде, имеет размерность $\frac{1}{4} < d_f < \frac{2}{3}$.

Выводы

Предложена простая перколяционная модель, построенная на иерархических решетках. Главная идея состоит в поэтапном усреднении физических параметров на различных уровнях масштаба неоднородной среды. Разработанная модель полезна для анализа проводимости, диэлектрических и упругих свойств неоднородных сред с фрактальной структурой. Известно, что некоторые из таких сложных структур могут обладать удивительными свойствами. Системы, которые показывают необычные свойства, нами изучались компьютерным моделированием и аналитически. Полученные нами результаты, являются более общими, чем результаты, которые базируются на модели эффективной среды,

теории перколяции и теории возмущений, так как в нашей модели нет малого параметра (мы используем функцию ренормализации, которая точна при любых значениях концентраций компонентов неоднородной среды).

Основываясь на идеях метода ренорм-групповых преобразований и теории фракталов определены эффективные свойства неоднородной среды с хаотической структурой. Для построения модели структуры композита со случайным распределением компонентов (фаз) были использованы фрактальные множества, полученные на прямоугольных решетках [V. V. Novikov, “Physical properties of fractal structures”, p.93-284. In the book “Advances in Chemical Physics, Volume 133, Fractals, Diffusion and Relaxation in Disordered Complex Systems”(J. Wiley, Chichester-New York-Brisbane-Toronto-Singapore, 2006)] Проведено сравнение вычисления эффективных свойств композита с экспериментальными данными и с вычислениями, основанными на приближении эффективной среды.

Ключевые слова: композит, фрактал, ренорм-групповые преобразования.

The effective property of a heterogeneous medium with chaotic structure is defined basing on the ideas of the renormalization group transformation method and the theory of fractals. The fractal sets obtained from rectangular lattices have been used to construct the structure of a composite with random distribution of components (phases) [V. V. Novikov, “Physical properties of fractal structures”, p.93-284. In the book “Advances in Chemical Physics, Volume 133, Fractals, Diffusion and Relaxation in Disordered Complex Systems”(J. Wiley, Chichester-New York-Brisbane-Toronto-Singapore, 2006)]. The calculation of effective property of a composite is compared with experimental data and with the calculations based on effective medium approximation.

Keywords: composites, fractal structure, renormalization group transformation method.

1. Novikov V. V. Physical Properties of Fractal Structures: In the book “Fractals, diffusion and relaxation in disordered complex systems” Edited by Stuart A. Rice, Guest editors: William T. Coey and Yuri P. Kalmykov, JOHN WILEY & SONS, New York – Chichester – Brisbane – Toronto – Singapore, 2006.
2. Privalko V. P., Novikov V. V. “The Science of Heterogeneous Polymers: Structure and Thermophysical Properties”, Chichester, London, Wiley, 1995.
3. Новиков В. В., Белов В. П. Обратное ренормгрупповое преобразование в задаче о протекании по связям, ЖЭТФ, 106, 780, (1994).
4. Новиков В. В., Wojciechowski K. W. Частотная зависимость диэлектрических свойств композитов типа металл-диэлектрик, ФТТ, **44**, 1963 (2002).
5. Novikov V. V., Zubkov D. Y. Conductivity in a magnetic field of a three — dimensional composite with a random fractal structure, Phys. Rev. **B 73**, 1 (2006).
6. Novikov V. V., Privalko V. P. Temporal fractal model for the anomalous dielectric relaxation of inhomogeneous media with chaotic structure, Phys. Rev. E, **64**, 031504, (2001).
7. Novikov V. V., Wojciechowski K. W., Komkova O. A., Thiel T. Anomalous relaxation in dielectrics. Equations with fractional derivatives, Materials Science — Poland, **23**, No. 4, (2005).
8. Novikov V. V., Wojciechowski K. W., Belov D. V., Privalko P. V. “Elastic properties of inhomogeneous media with chaotic structure”, Phys. Rev. **E 63**, 036120 (2001).
9. Новиков В. В., Wojciechowski K. W. Отрицательный коэффициент Пуассона фрактальных структур, ФТТ, **41**, 2147 (1999).
10. Novikov V.V., Friedrich Chr., Viscoelastic properties of composite materials with random structure, Phys. Rev., **E72**, 021506 (2005).
11. Новиков В. В., Wojciechowski K. W. Вязкоупругие свойства неоднородных сред с фрактальной структурой, ЖЭТФ, **95**, 462 (2002).
12. Новиков В. В., Wojciechowski K. W. Вязкоупругие свойства фрактальных сред, ПМТФ, **41**, 149 (2000).
13. Novikov V. V., Wojciechowski K. W. Extreme viscoelastic properties of composites of strongly inhomogeneous structures due to negative stiffness phases, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, No. 3, 645–652 (2005).
14. Новиков В. В. Фрактальная модель ползучести неоднородных сред, Укр. Физ. Ж., **49**, No. 1, 117—122, (2001).