

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

(повне найменування вищого навчального закладу)

Факультет математики, фізики та інформаційних технологій

(повне найменування факультету)

Кафедра теоретичної фізики та астрономії

(повна назва кафедри)

Д и п л о м н а р о б о т а

бакалавра

(ступінь вищої освіти)

на тему: **«Модель ефективних електричних властивостей систем
анізотропних частинок»**

«Model for effective electric properties of systems of anisotropic particles»

Виконала: студентка денної форми навчання
спеціальність: 104- Фізика та астрономія
Столярик Оксана Дмитрівна

Керівник к.ф.-м.н., доц. Сушко М.Я. _____

Рецензент д.ф.-м.н., проф. Козицький С.В.

Рекомендовано до захисту:

Протокол засідання кафедри

№ __ від __.__.2020 р.

Захищено на засіданні ЕК № __

протокол № __ від __.__.2020 р.

Оцінка _____ / _____ / _____
(за національною шкалою, шкалою ECTS, бали)

Завідувач кафедри

Голова ЕК

Адамян В.М.

(підпис)

Шевчук В.Г.

(підпис)

Одеса – 2020

ЗМІСТ

Вступ.....	3
1. Метод компактних груп неоднорідностей.....	9
2. Вибір допоміжної матриці.....	10
3. Модель ефективної діелектричної проникності систем анізотропних частинок	13
4. Аналіз результатів для конкретних систем.....	16
Висновки.....	21
Література.....	22

ВСТУП

У запропонованій роботі приділено увагу ефективним електричним властивостям гетерогенних систем, що складаються з двох або більше компонентів (фаз) та мають у своєму складі анізотропні за формою або властивостями частинки.

Було давно помічено, що додаванням одного компоненту можна суттєво змінювати та регулювати властивості всієї системи [1-5]. Це дало поштовх для подальшого вивчення та моделювання властивостей таких систем та появи великої кількості досліджень в цьому напрямі. Адже з'явилася можливість створювати матеріали з поліпшеними фізичними властивостями, та які є відносно дешевими. Дисперсні системи знаходять широке застосування в техніці та будівництві. Вивчення електричних властивостей дисперсних систем є дуже важливим для багатьох галузей науки та індустрії. Розгляд електричних властивостей нанофлюїдів та суспензій може бути корисним для розвитку сучасної медицини, зокрема, висновки цих досліджень можуть бути перенесені на дослідження фізичних властивостей плазми крові, що сприяє вивченню процесів, які відбуваються в організмі людини. На даний момент питання про діелектричну проникність суспензій неоднорідних та анізотропних частинок представляє особливий інтерес для біофізики, однак залишається недостатньо вивченим в теоретичному плані. Не менш цікавим об'єктом вивчення в останні роки є композитні матеріали, які являють собою суміш декількох речовин (компонентів).

Реальні гетерогенні системи можуть містити частинки доволі складної структури, фізичні властивості яких можуть значно відрізнятися у різних напрямках. При цьому середовище, у яке додаються частинки прийнято називати матрицею, а частинки в такій системі називають дисперсною фазою. В загальному випадку досліджувані системи можуть

містити в собі дисперговані частинки різного розміру та неправильної форми, бути макроскопічно неоднорідними, набувати анізотропні властивості у зовнішньому полі. Для опису гетерогенних систем у всіх цих випадках будують ідеалізовані спрощені моделі. Найпростішою та найпершою є модель системи однорідних ізотропних твердих частинок сферичної форми. Така модель часто використовується для опису суспензій та ряду композитів. Розв'язками задачі є відомі формули Максвелла-Гарнетта та Бруггемана [1,6]. Однак ця модель не завжди здатна описати властивості реальних систем, тому була введена трифазна модель [3,7-10], де частинки в матриці оточені певними оболонками, за допомогою яких намагаються урахувати різні міжфазні ефекти, такі як нерівність поверхні частинок, виникнення міжфазного шару в твердому композиті або наявність окисного шару в частинки. Третя поширена модель використовується для опису анізотропних частинок. Тут частинки мають більш низьку симетрію, можуть бути еліпсоїдальної, кубічної, циліндричної та взагалі неправильної форми, або можуть мати електричні властивості, які залежать від напрямку [11-14] (див. рис. 1).

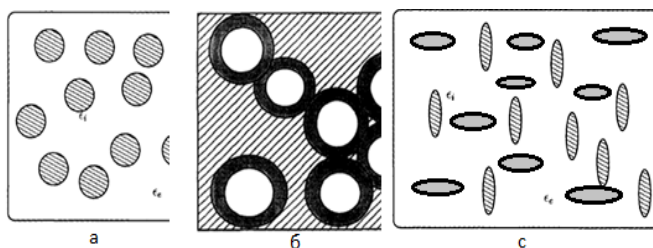


Рис. 1: Моделі для опису гетерогенних систем: а) модель однорідних ізотропних частинок; б) модель неоднорідних ізотропних частинок; в) модель анізотропних однорідних частинок

Модель системи анізотропних частинок охоплює найширший клас реальних систем. Прикладами є системи полікристалів, зокрема частинок сегнетоелектрика, або системи з надпровідних частинок, в яких провідність має велике значення вздовж однієї осі тощо [15,16]. Останнім часом

відбувається активне дослідження композитних матеріалів, у яких у якості наповнювача виступають вуглецеві нанотрубки та графен [17]. Така система також може бути описана за допомогою моделі анізотропних частинок.

Одними з найпростіших величин, що характеризують електричні властивості гетерогенної системи, є її ефективна діелектрична проникність та ефективна електрична провідність, які в квазістатичному наближенні визначаються відповідно дійсною та уявною частинами комплексної діелектричної проникності. Ця величина характеризує відгук системи на зовнішнє квазістатичне поле. Зокрема, ефективна діелектрична проникність може бути знайдена як коефіцієнт пропорційності між середніми значеннями вектора електричної індукції та вектора напруженості електричного поля в системі. Ефективна електрична провідність визначається як коефіцієнт пропорційності між середніми значеннями вектора густини струму та вектора напруженості електричного поля.

Задача відшукування параметрів гомогенної системи, яка за своїми електричними властивостями буде еквівалентною досліджуваній багатофазній системі, називається електродинамічною гомогенізацією заданої гетерогенної системи.

Необхідно підкреслити, що в більшості підходів ця задача для систем анізотропних частинок розв'язується в одночастинковому наближенні, тобто зводиться до аналізу відгуку однієї ізольованої частинки на деяке середнє поле, яке враховує наявність інших частинок. Прикладом застосування такого підходу є розв'язок Леві-Страуда [18], знайдений для системи сферичних частинок з анізотропними провідними властивостями та хаотично орієнтованими головними осями індивідуальних тензорів провідності. У цій роботі було застосовано функцію розподілу за орієнтаціями для знаходження середнього дипольного моменту однієї

частинки в деякому середньому полі. Тоді середній макроскопічний дипольний момент знаходився як сума одночастинкових дипольних моментів в одиниці об'єму. В цьому підході висувалося припущення про середнє макроскопічне поле, як суму поля всередині частинок та поля в матриці з врахуванням відповідних об'ємних концентрацій цих компонентів. На підставі цих міркувань знаходяться середні поле та індукція, та діелектрична проникність як коефіцієнт пропорційності між ними. В роботі Авеланеда із співавторами [19] було також використано одночастинкове наближення при знаходженні провідності системи полікристалів із застосуванням висновків роботи [20] стосовно верхньої і нижньої межі проникності – показано, що середнє гармонічне та середнє арифметичне є відповідно нижньою та верхньою межею ефективної діелектричної проникності. Такий підхід є занадто грубим, адже вказані задачі є суттєво багаточастинковими. Для їх розв'язання необхідно враховувати як взаємні кореляції в просторових розташуваннях частинок (що особливо суттєво для анізотропних частинок), так і ефекти взаємної поляризації частинок одна на одну, що, строго кажучи, вимагає урахування нескінченної сукупності вищих кореляційних функцій.

Необхідно підкреслити, що в такій ситуації є надзвичайно важливим мати деякі обмеження на можливі значення ефективної проникності. З цього боку підійшли до проблеми Хашін та Штрікман в роботі [20]. Застосовуючи варіаційний принцип, вони встановили межі значень, в яких може перебувати ефективна діелектрична проникність системи.

У запропонованій роботі застосовано відносно новий метод компактних груп [21-24] для знаходження ефективної діелектричної проникності в моделі анізотропних частинок, застосовний у випадках анізотропії форми та електричних властивостей. Суть методу полягає в тому, що при аналізі відгуку системи на довгохвильове поле розглядаються локальні відхилення діелектричної проникності, спричинені не окремими

частинками, а макроскопічними областями частинок, які по відношенню до поля фактично залишаються точковими. Користуючись методами теорії узагальнених функцій та вимогою, що система повинна бути однорідною та ізотропною в цілому, середні значення електричної індукції та напруженості електричного поля можна отримати без деталізації процесів взаємної кореляції та поляризації частинок. Даний метод має значні переваги перед попередніми підходами, адже він не потребує детального опису знаходження граничних умов та розподілу поля для частинок складної форми. Цей метод виявився досить успішним і ефективним для цілого ряду задач і саме тому його обрано.

Метою даної роботи є застосування методу компактних груп для знаходження ефективної проникності системи анізотропних частинок (як за формою, так і за електричними властивостями) та застосування цього результату до конкретних систем: системи сферичних частинок з одноосною анізотропією та до полікристалу; порівняння отриманих результатів з вже відомими та перевірка їх узгодженості з границями Хашина–Штрікмана, отриманими за допомогою варіаційного принципу.

В першому розділі описуються суть методу компактних груп та наводяться загальні вирази для середнього макроскопічного поля та середньої індукції в системі в рамках цього методу. Другий розділ присвячено розкриттю поняття гомогенізації, його видів, вибору діелектричної проникності (провідності) допоміжної матриці, базуючись на результатах варіаційної теореми Хашина-Штрікмана. В третьому розділі формулюється модель системи анізотропних частинок для аналізу в рамках методу компактних груп та знаходження ефективної діелектричної проникності такої модельної системи. В четвертому розділі виконано відповідні обчислення для випадку сферичних частинок з одноосною анізотропією електричних властивостей та випадку полікристалу, що складається з несферичних гранул; виконано порівняння результатів

методу компактних груп, отриманих при використанні наближень Максвелла-Гарнетта та Бруггемана, з результатом Леві і Страуда та перевірка їх узгодженості з межами Хашіна-Штрікмана. Показано, що запропонована в роботі модель дозволяє єдиним чином відновити ці результати як окремі граничні випадки, а отже є дієвим інструментом для дослідження ефективних електричних властивостей систем анізотропних частинок.

ВИСНОВКИ

В рамках методу компактних груп неоднорідностей та варіаційного принципу Хашіна-Штрікмана запропоновано замкнену модель для обчислення ефективної квазістатичної діелектричної проникності макроскопіно однорідної та ізотропної системи анізотропних частинок. У якості матриці для гомогенізації треба брати середовище із шуканою діелектричною проникністю (наближення типу Бруггемана), а реальну матрицю та частинки вважати вкрапленими в нього. Анізотропія частинок може бути пов'язана з анізотропією діелектричних властивостей їх матеріалу та (або) їх форми.

За допомогою запропонованої моделі знайдено ефективну діелектричну проникність системи сферичних анізотропних частинок у широкому інтервалі концентрацій частинок. При малих концентраціях частинок отриманий нами результат відновлює відомий результат Леві–Страуда для сферичних частинок з одноосною анізотропією та хаотично орієнтованими діелектричними осями, отриманий у наближенні Максвелла-Гарнетта. З переходом до більших концентрацій диспергованих частинок відмінності між цими результатами стають суттєвими.

У рамках цього ж формалізму розраховано ефективну діелектричну проникність полікристалів без деталізації геометричної форми електрично анізотропних гранул, з яких вони складаються. Отриманий результат лежить всередині відомих меж Хашіна-Штрікмана для ефективної діелектричної проникності полікристалів.

Отримані результати вказують на результативність запропонованої моделі для опису ефективних електричних властивостей широкого класу систем анізотропних частинок.

Столярик О. Д.
(Підпис автора роботи)

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Челидзе, Т. Л., Деревянко, А. И., Куриленко, О. Д. Электрическая спектроскопия гетерогенных систем, Киев, Наукова думка, 1977, 232 с.
2. Sihvola, A. Electromagnetic mixing formulas and applications. IEE Electromagnetic Waves Series 47, The Institution of Electrical Engineers, London. 1999.
3. Nan, Ce-Wen. Physics of inhomogeneous inorganic materials. // Progress in Materials Science. – 1993. – Vol. 37, No 1. – P. 1.
4. Виноградов, А. П. Электродинамика композитных материалов. М.: Эдиториал УРСС 208 (2001).
5. Torquato, S. Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties. Springer, New York, 2002.
6. Garnett, JC Maxwell. XII. Colours in metal glasses and in metallic films. // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, – 1904 -Vol.203, No 359-371. - P. 385-420.
7. Rikvold, P. A., Stell, G. Porosity and specific surface for interpenetrable-sphere models of two-phase random media.// Journal of Chemical Physics. – 1985. – Vol.82, No 2. – P. 1014.
8. Lee S. B., Torquato S., Porosity for the penetrable concentric shell model of twophase disordered media: Computer simulation results. // Journal of Chemical Physics. – 1988. – Vol. 89, - P, 3258.
9. Rottereau, M., et al. 3d Monte Carlo simulation of site-bond continuum percolation of spheres. // The European Physical Journal E. – 2003. – Vol. 11, No 1. – P. 61.
10. Torquato S., Stell G. Microstructure of twophase random media // Journal of Chemical Physics. – 1982. – Vol. 77. – P. 2071.
11. López-López, E. Effective permittivity of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents. // Journal of Electrostatics. – 2013. Vol.71,

- No 4. – P. 791.
12. Dong, L., et al. Dielectric response of graded spherical particles of anisotropic materials. // Journal of Applied Physics. - 2004. –Vol. 95, No 2. – P. 621.
 13. Gu, G., Yu., K. W. Conductivities of dilute suspensions of graded fibers. // Journal of Applied Physics. - 2003. – Vol.94, No 5. – P. 3376.
 14. Callaway, Duncan S., et al. Network robustness and fragility: Percolation on random graphs. // Physical Review Letters. -2000.- Vol.85. No 25. – P. 5468.
 15. Sulewski, P. E., Far-infrared composite-medium study of sintered La_2NiO_4 and $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_{4-y}$. // Physical Review B. -1987.- Vol. 36, No10. - P. 5735
 16. Вендик, О. Г., Медведева, Н. Ю. Зубко, С. П. Эффективная диэлектрическая проницаемость наноструктурированной пленки, содержащей сегнетоэлектрические гранулы эллиптической формы. // Письма в Журнал технической физики. – 2008. - Т.34, №8. - С. 13.
 17. Sequeira, C., Santos, D., Polymer electrolytes: fundamentals and applications. Woodhead Publishing, Oxford, 2010.
 18. Levy, O., Stroud, D. Maxwell Garnett theory for mixtures of anisotropic inclusions: Application to conducting polymers. // Physical Review B. – 1997. - Vol. 56, No 13. - P. 8035.
 19. Avellaneda, M. On the effective conductivity of polycrystals and a three-dimensional phase-interchange inequality. // Journal of Applied Physics - 1988. - Vol.63, No10. - P. 4989.
 20. Hashin, Z., Shtrikman S. Conductivity of polycrystals. // Physical Review. – 1963. – Vol.130, No 1. – P. 129.
 21. Сушко М. Я. О диэлектрической проницаемости суспензий // ЖЭТФ. – 2007. - Т. 132, - С.478 .
 22. Sushko M.Ya. Effective permittivity of mixtures of anisotropic particles //

- Journal of Physics. D: Applied Physics. - 2009.- Vol. 42, - P. 155410.
23. Sushko, M. Ya. Effective dielectric response of dispersions of graded particles. // Physical Review E. - 2017. - Vol.96, No 6. - P. 062121.
 24. Sushko, M. Ya., Semenov, A. K. Rigorously solvable model for the electrical conductivity of dispersions of hard-core–penetrable-shell particles and its applications. // Physical Review E. - 2019.- Vol.100, No 5.- P. 052601.
 25. Weiglhofer, Werner. Delta-function identities and electromagnetic field singularities. // American Journal of Physics. - 1989. - Vol. 57, No 5. - P. 455-456.
 26. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Электродинамика сплошных сред, Москва, Наука, 1982.
 27. Hashin, Z., Shtrikman, S. A. Variational approach to the theory of effective magnetic permeability of multiphase materials // Journal of Applied Physics. - 1962. - Vol. 33. - P. 3125.
 28. Walker, D., and K. Scharnberg. Electromagnetic response of high- T_c superconductors. // Physical Review B. – 1990. – Vol.42, No 4. – P. 2211.