Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–03–19U

С.Сороков

КЛАСТЕРНИЙ ПІДХІД ДО РОЗРАХУНКУ ФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ

ЛЬВІВ

УДК: 535.37

PACS: 32.50.+d, 87.15.Mi, 78.60.-b, 33.50.-j

Кластерний підхід до розрахунку фізичних характеристик композитних матеріалів

С.Сороков

Анотація. В роботі проведено огляд різноманітних методів розрахунку физичних характеристик (електро- і теплопровідності, діелектричної і магнітної проникливості, пружних сталих,коефіцієнта лінійного розширення) композитних матеріалів. Для їх обчислення пропонується єдиний кластерний підхід. Він придатний для наближенного розвязку лінійних діференціальних рівнянь з випадковими коефіцієнтами, які містять інформацію про просторовий розподіл включень. Вже перше кластерне наближення для матричного композита і в самоузгодженному підході узагальнює на довільну кількість фаз ряд результатів відомих в літературі для двохфазних систем. Пропонується застосувати вказаний підхід для обчислення внутрішніх напружень в лавоподібних паливовмістимних матеріалах.

Cluster approach for calculation of physical characteristics of composite materials

S.Sorokov

Abstract. The review of different methods for calculation of physical characteristics (conductivity and thermal conductivity, dielectric and magnetic permeability, elastic constants and linear expansion coefficient) of composite materials is presented. The universal cluster approach for their calculation is suggested. It is available for approximate solution of linear differential equations with chaotic coefficients, which contain the information about space distribution of inclusions. Even the first cluster approximation for matrix composite both in self-consistent approach generalize set of results, known in literature for two-phase system on any number of phases.It is supposed to use this approach for calculation of internal strength in lava-like fuel-containing materials.

1. Вступ

Композитами, або композиційними називають матеріали (КМ - композиційний матеріал), які складаються з двох чи більше фаз (компонент), що відрізняються за своїми фізичними характеристиками.

Фазу, неперервну по всьому об'єму КМ, будемо називати матрицею, перервну (роз'єднану) в об'ємі КМ - арматурою або армірувальним елементом (утворюється включеннями).

В основному при класифікації виділяють такі типи КМ [1]:

1) шаруваті;

2) волоконні (довжина волокон співмірна з розміром зразка);

3) голчасті (довжина волокон набагато менше від розмірів зразка);

4) зернисті (порошкові).

Ми розглядаємо тут лише макроскопічно ізотропні та однорідні КМ зернистого типу. До цього класу КМ відноситься і більшість матеріалів, що застосовуються в радіоелектроніці. Серед них резистивні [2, 3] і керамічні матеріали [4, 5].

Значний інтерес представляє розрахунок різних фізичних характеристик (ФХ) КМ, виходячи з відомих ФХ окремих фаз, об'ємних часток фаз ($c_i = \Omega_i/\Omega, \mathrm{i} = 1, 2$) і структурних особливостей розподілу фаз у композиті. В подальшому будемо використовувати наступні позначення для ФХ КМ.

1. Об'ємна густина $\bar{d}$ (ОБГ).
2. Об'ємний модуль $\bar{k}$ (ОБМ).
3. Модуль зсуву $\bar{\mu}$ (МСД).
4. Модуль Юнга $\bar{E}$ (МЮН).
5. Коефіцієнт Пуасона $\bar{\nu}$ (КПУ).
6. Питома провідність $\bar{\sigma}$ (ПП).
7. Питомий опір $\bar{\rho}$ (ПО).
8. Температурний коефіцієнт опору $\bar{\beta}$ (ТКО).
9. Діелектрична проникливість $\bar{\varepsilon}$ (ДП).
10. Магнітна проникливість M (МП).
11. Коефіцієнт теплопровідності $\bar{q}$ (КТП).
12. Коефіцієнт лінійного розширення $\bar{\alpha}$ (КЛР).

Нижче ми зупинимося детальніше на огляді методів, що використовуються в основному для розрахунку фізичних величин, які характеризують провідність, а також діелектричних характеристик КМ. Що стосується розрахунку механічних характеристик КМ, то відзначимо, що тут використовуються в основному статистичний [6-13] (вважаються середні значення за представницьким об'ємом) і регулярний [14-17] (реальне хаотичне розміщення зерен замінюється регулярним з певними значеннями параметрів) підходи.

Теоретичне визначення ефективних ФХ багатофазних матеріалів почалось з робіт [18, 19]. В них були отримані ефективні коефіцієнти електропровідності $\bar{\sigma}$ [18] і в'язкості $\bar{\eta}$ [19] для розведеного двофазного розчину. При цьому використовувався розв'язок задачі для однієї сфери в безмежному просторі, в якості якої вибиралась матрична фаза. Наближення ефективного середовища (НЕС) для розрахунку ФХ сумішей вперше запропоновано в роботах Бруггемана (1935-37 рр.). Для параметра ефективного середовища σ_m, що співпадає з провідністю суміші $\bar{\sigma}(\bar{\sigma} \equiv \sigma_m)$, було отримано самоузгоджене рівняння в симетричному, а також в т.зв. асиметричному варіанті (див. огляд [20] і роботу [21]). Відзначимо, що правомірність назви НЕС замість загальноприйнятої МЕС (метод ефективного середовища) стане зрозумілою з 4.4.

В роботах Оделевського [22-24] був розвинутий матричний (несамоузгоджений) метод розрахунку (ММР) $\bar{\sigma}$ у найпростішому наближенні [22], а також незалежно було отримане рівняння для $\bar{\sigma}$ в НЕС [23]. В [24] НЕС застосовано до розрахунку $\bar{\sigma}$ однофазного полікристалу.

Як буде показано в 5, НЕС і формула Оделевського [22] в ММР отримуються вже в першому порядку кластерного розкладу. При цьому для отримання НЕС параметри ефективного середовища (ЕС) знаходяться самоузгодженим чином, а в ММР роль ЕС відіграє матрична фаза.

Подальше стимулювання досліджень з даної тематики було викликано роботами Броудмента і Хаммерслі (див. огляд [25]). Названі автори використовували граткові моделі для розв'язку задачи про протікання рідини через статичне випадкове середовище. При цьому було строго показано, що перенесення рідини взагалі відсутнє, якщо концентрація активного середовища менша від деякого кінцевого порогового значення (порога перколяції – c_p). В подальшому чисельними методами були встановлені співвідношення між c_p і розмірністю простору D, поведінка $\bar{\sigma} = f(c)$ поблизу порога перколяції, а також ряд інших співвідношень для континуальних і граткових задач (див., наприклад, [25, 26]).

В роботі [25] вперше зроблено сучасний вивід рівняння для $\bar{\sigma}$ в НЕС на основі розкладу функції Гріна по двовузловій t-матриці (граткова задача). Показано [25], що рівняння для $\bar{\sigma}$ в НКП (наближення когерентного потенціала) зводиться до рівняння в НЕС.

Відмітимо тут відразу, що НКП відноситься до самоузгодженогого методу розрахунку (СМР) ФХ композиту. НКП вперше було запропоновано (див. [27] і огляд [28]) для розрахунку ФХ електронної підсистеми в кристалах з домішками. Можна показати, що несамоузгоджений варіант НКП, а саме т.зв. наближення середньої T-матриці (НСТ), також розвинуте спочатку для електронних граткових задач, приводить для $\bar{\sigma}$ до формули Оделевського [22], тобто НСТ виводиться в рамках ММР.

2. Огляд сучасних методів розрахунку ФХ композитів

В даному розділі ми коротко зупинимося на деяких сучасних методах розрахунку $\bar{\sigma}$ чи інших ФХ, які розраховуються аналогічним способом $(M, \bar{\varepsilon}, \bar{q})$. Однак ми не будемо тут розглядати робіт з числових методів розрахунку, а також методів, пов'язаних з ренормгруповим аналізом в околі перколяційної точки.

В роботі [29] запропонована модель для розрахунку $\bar{q}$ (або $\bar{\sigma}$) бінарного неоднорідного середовища з хаотичним розподілом компонентів, математична реалізація якого здійснена за допомогою поєднання теорії протікання і методу приведення до елементарної комірки. Робота [29] є розвитком підходу, викладеного в [30], який ґрунтується на представленні КМ у вигляді еквівалентної схеми теплових опорів. Подальше удосконалення моделі було проведено в роботах [31, 32]. Тут [32] результати розрахунків порівняні з результатами чисельних методів і зроблено висновок про те, що розрахунок теплопровідності слід вести за формулами [31] для базової моделі або за формулами [32] для її першої варіації.

В роботі [33] обговорюються аналітичні властивості функції

$$f(c_1, h) = \bar{\sigma}(c_1, \sigma_1, \sigma_2)/\sigma_1, \qquad h = \sigma_2/\sigma_1, \tag{1}$$

що описує електропровідність двох компонентних середовищ, в комплексній площині одного з його аргументів ($h \to z$). Розглянута частотна дисперсія провідності таких середовищ у квазістаціонарному електричному полі.

В роботі [34] для системи метал-діелектрик за допомогою числового експерименту підтверджена гіпотеза подібності і виходячи з цієї гіпотези отримано наближене феноменологічне рівняння стану для $\bar{\sigma}$ вигляду

$$F(\bar{\sigma}, \tau, h) = 0, \qquad \tau = \frac{c_m - c_p}{c_p}, \qquad h = -\frac{i\omega\varepsilon_D}{4\pi\sigma_M}, \tag{2}$$

де індекси "М" ("Д") відносяться до металічної (діелектричної) фази.

У ряді робіт застосовуються варіаційні методи, що дають змогу отримати двосторонні оцінки (нижню і верхню границі) ФХ композиту.

Так у роботі [35] пропонується вираз для $\bar{\sigma}$, отриманий наближеним сумуванням ітераційного ряду. Двосторонні оцінки для $\bar{\sigma}$отримуються підстановкою у варіаційний функціонал (для швидкості генерації ентропії) пробної функції у формі, "підказаній" ітераційним розкладом. У роботі [36] отримані двосторонні оцінки добротності $\bar{z}(\bar{z} = \bar{\sigma}_n/\bar{\sigma}_a)$, де $\bar{\sigma}_n$, $\bar{\sigma}_a$ – ізотермічна, адіабатична провідності) для КМ, в якому поруч з градієнтом поля враховується градієнт температур, що суттєво у випадку присутності в КМ напівпровідникових фаз. Уточнення двосторонніх оцінок для здійснено в роботі [37]. Крім цього, подібні оцінки здійснені в [38, 39] для штучно анізотропних середовищ, зокрема шаруватонеоднорідних середовищ.

Варіаційний підхід до розрахунку провідникових і діелектричних характеристик КМ розвивається в цілому ряді робіт Казанцева В.П. [40-44], в яких проведено також порівняння двосторонніх оцінок з експериментальними даними [40,41,43]. На прикладі оцінок характеристик КМ складної конфігурації і порівняння їх з відомими точними результатами показано, що варіаційні нерівності дозволяють оцінювати не лише значення ФХ, таких як ємність, поляризованість і т.д., але й ступінь близькості деякого пробного розподілу напруженості електричного поля до дійсного (див. [44-47]).

Широке використання в радіоелектроніці резистивних матеріалів, необхідність покращення їх характеристик стимулювали дослідження для вияснення механізму провідності в резисторах. В ряді оглядів [48-52] проведено критичний аналіз теоретичних моделей механізмів провідності в керметних матеріалах. Зокрема, в роботі [53] для композиції типу $Bi_2Ru_2O_7$ встановлена задовільність опису концентраційної залежності $\bar{\sigma}$ в області порогу перколяції c_p за допомогою співвідношення теорії перколяції

$$\bar{\sigma} = \sigma_0(c - c_p)^t. \tag{3}$$

Найбільш вдалий розрахунок температурної і концентраційної залежностей $\bar{\sigma}$ резистора також проведено для композиції $Bi_2Ru_2O_7$ [54-56]. Автори використали співвідношення для $\bar{\sigma}$ в МЕС для двофазної системи (скло + $Bi_2Ru_2O_7$), врахували статистику розкиду значень σ_m, а також модельну залежність порогу перколяції від середніх розмірів частинок фаз.

Відмітимо, що в теоретичних роботах, згаданих в оглядах, не створені будь-які нові методи розрахунку ФХ КМ, а способи розрахунку, що використовуються в них, мають напівемпіричний характер.

Крім числових методів (див., напр., [25,26,57,58]), важливим для дослідження адекватності пропонованих теоретичних моделей є експериментальне дослідження модельних систем [59-61]. Так, зокрема, в [59] на основі суміші піску (c_n) і графіту (c_r) показано, що концентраційна залежність $\bar{\sigma}$ задовільно описується рівняннями теорії перколяції ($0 < c_r < 0,5$) і в НЕС ($c_r > 0,5$).

Значна кількість робіт присвячена різним модифікаціям НЕС. Так, в роботах [62,63] НЕС узагальнюється для розрахунку провідності КМ з врахуванням анізотропії фаз (лише для двокомпонентної системи). В [21] виводиться співідношення для $\bar{\sigma}$, проміжне між симетричним і асиметричним варіантами теорії Бруггемана. В [64] враховано форми включень. В роботі [65] автори дослідили частотну залежність діелектричної проникності багатофазної системи з урахуванням просторової дисперсії ($\varepsilon_i(r,\omega)$). Розрахунки здійснювались в НСТ і НКП.

У випадку граткових задач НЕС розширено на випадок, коли враховуються перескоки блукаючої частинки також на вузли, що слідують за найближчими сусідами [66]. Застосування математичного апарату, що використовується в статистичній теорії рідин, дало змогу розвинути кластерний метод розрахунку ФХ композитів (для $\bar{\varepsilon}$, див. [67] і наведені там посилання). Для розрахунку l-ої кластерної поправки (Kl) потрібно розв'язати задачу математичної фізики для l включень в безмежній фазі і знати функцію розподілу l включень. В [67] в матричному підході для двофазної системи сфер побудований кластерний ряд для $\bar{\varepsilon}$ з врахуванням довільного ступеня проникнення сфер (λ) однієї в іншу, вивчена поправка K_2. Відмітимо, що з кластерного ряду неважко отримувати розклади ФХ за степенями концентрації включень. В роботі [68] (двофазна матрична система з непроникливими включеннями) зроблені оцінки для верхньої і нижньої границі коефіцієнта електропровідності та об'ємного модуля пружності з врахуванням варіаційної поправки, яка містить тернарну функцію розподілу включень.

Нижче, використовуючи МКР, здійснимо розрахунок ряду ФХ композитів у наближенні K_1. На відміну від [67,68] розглядається довільна кількість фаз (M) і використовується, крім ММР, також СМР (самоузгоджений метод розрахунку).

3. Постановка задачі. Рівняння для розрахунку ФХ

У цьому розділі ми запишемо основні співвідношення, що використовуються при розрахунку ряду ФХ композиту (задачі електро- і теплопереносу, розрахунок пружних і термопружних характеристик).

В композиті дана ФХ $q(\mathbf{r})$ є функцією радіус-вектора $\mathbf{r}$. Ми будемо вважати, що в межах даної i-ої фази виконується $q(\mathbf{r}) = q_i$. Тоді для матричного КМ можна записати

$$q(\mathbf{r}) = q_1 + \sum_{n=1}^{N} X(\mathbf{r}, n)(q_n - q_1), \qquad q_n = \sum_{i=1}^{M} X(n, i) q_i, \tag{4}$$

де введені оператори проектування

$$X(\mathbf{r}, n) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in n \\ 0, & \mathbf{r} \bar{\in} n, \end{cases} \qquad X(n, i) = \begin{cases} 1, & n = i \\ 0, & n \neq i, \end{cases} \tag{5}$$

причому n – номер включення, N – кількість всіх зерен.

У випадку нематричного КМ можна записати

$$q(\mathbf{r}) = \sum_{n} X(\mathbf{r}, n) q_n \equiv q_m + \sum_{n} X(\mathbf{r}, n)(q_n - q_m), \tag{6}$$

де q_m – ФХ ефективного середовища, яка буде знайдена з умови самоузгодження. Оскільки формули (4), (6) ідентичні, будемо використовувати форму (6), замінюючи в ММР $q_m \to q_1$.

3.1. Електро- і теплопровідність. Діелектрична і магнітна проникливість

В даному випадку в якості $q(\mathbf{r})$ беремо $\sigma(\mathbf{r})$ – питому провідність (коефіцієнт теплопровідності, діелектричну або магнітну проникливість). Рівняння для потенціалу $V(\mathbf{r})$ (температурного поля $T(\mathbf{r})$) можна записати у двох формах [7, 25]

$$\begin{aligned} &a) L(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) = S(\mathbf{r}) \quad V(r)|_{\infty} = 0 \\ &б) L(\mathbf{r}) \tilde{V}(\mathbf{r}) = 0 \quad \tilde{V}(\mathbf{r})|_{|z| \to \infty} = E_m z = V_{\infty} \end{aligned} \tag{7}$$

$$L(r) = \sum_{\alpha=1}^{D} \sigma(r) \partial_{\alpha}^2 = \sigma(r) \Delta(r) \qquad \tilde{V}(\mathbf{r}) = V(r) + V_{\infty}. \tag{8}$$

У формі а) граничні умови враховуються функцією $S(\mathbf{r})$. Так як $\sigma(\mathbf{r})$ є випадковою величиною потенціал $V(\mathbf{r})$ є випадковим функціоналом від $\sigma(\mathbf{r})$. Спостережуваною величиною є ефективна електропровідність (теплопровідність, діелектрична або магнітна проникливість) композиту.

$$\bar{\sigma} = \frac{\langle \gamma_z(r) \rangle}{\langle E_z(r) \rangle} \equiv \frac{\langle \sigma(r) E_z(r) \rangle}{\langle E_z(r) \rangle}, \qquad E_\alpha(r) = \partial_\alpha V(r), \tag{9}$$

де $\gamma_\alpha(\mathbf{r})$, $E_\alpha(\mathbf{r})$ – компоненти густини струму (густини теплового потоку для теплової задачі, діелектричної або магнітної індукції у випадку діелектрика або магнетика) і напруженості поля (напруженості теплового поля, напруженості електричного поля або напруженості магнітного поля), а $\langle (\ldots) \rangle$ означає усереднення за ансамблем можливих конфігурацій випадкової системи.

3.2. Пружні властивості

Будемо використовувати рівняння Ламе для вектора зміщень $U_\alpha(\mathbf{r})$ [70, 71]

$$\sum_{\beta=1}^{P} L_{\alpha\beta}(r) U_\beta(r) = -f_\alpha(r),$$
$$L_{\alpha\beta}(r) = \mu(r)\delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \partial_\gamma^2 + [\lambda(r) + \mu(r)]\partial_\alpha \partial_\beta, \tag{10}$$

де $\lambda(\mathbf{r})$ – коефіцієнт Лема, $\mu(\mathbf{r})$ – модуль зсуву, $f_\alpha(\mathbf{r})$ – вектор зовнішніх сил.

Для опису пружних властивостей ізотропних тіл, як відомо, досить двох сталих. У таблицях переважно наведені значення для модуля Юнга E і коефіцієнта Пуасона ν. Наведемо тут зв'язок між різними пружними сталими у тривимірному випадку (D=3) [70,71]

$$k = \frac{E}{3(1-2\nu)}, \qquad \mu = \frac{E}{3(1+\nu)}, \qquad \lambda = \frac{E\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)},$$
$$E = \frac{9k\mu}{3k+\mu}, \qquad \nu = \frac{3k-2\mu}{2(3k+\mu)}, \qquad \lambda = k - \frac{2}{3}\mu, \tag{11}$$

де k – об'ємний модуль.

Тензор деформації $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ і тензор напруження $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ можна знайти через $U_\alpha(\mathbf{r})$ таким чином:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[\partial_\beta U_\alpha(\mathbf{r}) + \partial_\alpha U_\beta(\mathbf{r})],$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} k(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}) + 2\mu(\mathbf{r})\left[\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\theta(\mathbf{r})\right]. \tag{12}$$

Тут введено відносну об'ємну деформацію $\theta(\mathbf{r})$:

$$\theta(\mathbf{r}) = div\mathbf{U}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \varepsilon_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}). \tag{13}$$

Для вивчення лише об'ємних деформацій необхідно розв'язувати рівняння (10) з граничною умовою для радіальної компоненти $U_r(\mathbf{r})$

$$U_r(\mathbf{r})|_{|\mathbf{r}|\to\infty} \to C_m|\mathbf{r}|. \tag{14}$$

При цьому спостережуваний (вимірюваний) об'ємний модуль визначається за співвідношенням:

$$\bar{k} = \frac{\langle \sigma_{\alpha\alpha}(r) \rangle}{\langle \theta(r) \rangle} = \frac{\langle k(r)\theta(r) \rangle}{\langle \theta(r) \rangle} = \frac{\langle k(r)\varepsilon_{\alpha\alpha}(r) \rangle}{\langle \varepsilon_{\alpha\alpha}(r) \rangle}. \tag{15}$$

У випадку чистого зсуву граничні умови мають такий вигляд при $|\mathbf{r}| \to \infty$ $(D = 3)$

$$U_x = C_m x, \qquad U_y = -C_m y, \qquad U_z = 0, \tag{16}$$

а спостережуваний модуль зсуву $\bar{\mu}$ визначається так:

$$\bar{\mu} = \frac{\langle \mu(\mathbf{r})\varepsilon_{xy}(\mathbf{r}) \rangle}{\langle \varepsilon_{xy}(\mathbf{r}) \rangle}. \tag{17}$$

3.3. Термопружність

Рівняння для зміщень з врахуванням температурних напружень має вигляд [7,71,72]

$$\sum_\beta L_{\alpha\beta}(r) U_\beta(r) = 3k(r)\alpha(r)\partial_\alpha[T(r) - T_0] - f_\alpha(r), \tag{18}$$

де T_0 – температура, при якій термічні деформації відсутні, а $\alpha(\mathbf{r})$ – коефіцієнт лінійного розширення (КЛР).

Розв'язок рівняння для температурного поля

$$L(\mathbf{r})T(\mathbf{r}) = 0, \qquad T(\mathbf{r})|_{|\mathbf{r}|\to 0} = T_m \tag{19}$$

тривіальний і має вигляд

$$T(\mathbf{r}) = T_m. \tag{20}$$

Ефективний КЛР $\bar{\alpha}$ композиту визначається за формулою

$$\bar{\alpha} = \frac{\langle \theta^T(r) \rangle}{3\Delta T} = \frac{\langle \varepsilon^T_{\alpha\alpha}(r) \rangle}{\Delta T}, \qquad \Delta T = T_m - T_0 \tag{21}$$

за умови відсутності середніх термічних напруг у зразку

$$\langle \sigma^T_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}) \rangle = -3\Delta T \langle k(\mathbf{r})\alpha(\mathbf{r}) \rangle + \langle k(\mathbf{r})\theta^T(\mathbf{r}) \rangle = 0. \tag{22}$$

Умова (22) дозволяє визначити додаткову сталу, не знайдену при розв'язуванні (18).

Таким чином, ми маємо рівняння, що дають змогу розрахувати для КМ питому провідність $\bar{\sigma}$, коефіцієнт теплопровідності $\bar{q}$, діелектричну $\bar{\varepsilon}$ і магнітну M проникливості, пружні константи $\bar{k}$, $\bar{\mu}(\bar{E}, \bar{\nu})$, коефіцієнт лінійного розширення $\bar{\alpha}$.

Для їх обчислення необхідно розв'язати відповідні лінійні диференційні рівняння (ЛДР) у частинних похідних з випадковими параметрами $(\sigma(\mathbf{r}), \mu(\mathbf{r}), k(\mathbf{r}), \alpha(\mathbf{r}))$. В наступному розділі ми сформулюємо рецепт розв'язування таких ЛДР, який грунтується на кластерному розвиненні відповідної ЛДР функції Гріна.

4. Метод кластерних розвинень (МКР)

Ми розглянемо МКР для розв'язування задачі пружності (10). При цьому будемо використовувати математичний апарат в дусі робіт [73, 68]. Очевидно форма рівняння для потенціалу (7) є частинним випадком векторного рівняння (10). Запишемо рівняння (10) у просторі бра- $\langle A|$ і кет-векторів $|A\rangle$. Система векторів $|\mathbf{r}\rangle$, $\langle \mathbf{r}|$ є повною і ортонормованою.

$$\int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}| = 1, \qquad \langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{23}$$

($\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle$ означає скалярний добуток) і може бути вибрана як базова. У даному просторі оператор L і кет-вектори $|\mathbf{u}, |\mathbf{f}\rangle$ у базисі $|\mathbf{r}\rangle$ мають вигляд

$$\begin{aligned}\hat{L} &= \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle L(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r}|, \\ |\mathbf{u}\rangle &= \int d\mathbf{r} \mathbf{u}(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle, \qquad |\mathbf{f}\rangle = \int d\mathbf{r} \mathbf{f}(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle.\end{aligned} \tag{24}$$

Тепер рівняння (10) набуде вигляду

$$\hat{L}|\mathbf{u}\rangle = -|\mathbf{f}\rangle. \tag{25}$$

Символічний розв'язок (15) запишемо через функцію Гріна

$$|\mathbf{u}\rangle = -\hat{G}|f\rangle, \qquad G = L^{-1}. \tag{26}$$

ФГ за допомогою співвідношення (6) для величин $\lambda(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r})$ представимо у вигляді

$$\hat{G} = L^{-1} = \left[L_m - \sum_m L_{mn} \right]^{-1}, \tag{27}$$

причому оператори в $\mathbf{r}$-просторі мають вигляд

$$L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, mn) = X(\mathbf{r}, n)[L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, n) - L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, m)], \tag{28}$$

$$\begin{aligned}L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, n) &= \mu_n \delta_{\alpha\beta} \Delta(\mathbf{r}) + (\lambda_n + \mu_n) \partial_\alpha \partial_\beta, \\ L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, m) &= \mu_m \delta_{\alpha\beta} \Delta(\mathbf{r}) + (\lambda_m + \mu_m) \partial_\alpha \partial_\beta.\end{aligned} \tag{29}$$

Тут λ_n, μ_n – випадкові величини, що набувають значень залежно від сорту частинки з номером n (число фаз дорівнює M), λ_m, μ_m відповідають деякому ефективному середовищу і будуть вибрані нижче з умови самоузгодження. В СМР ФГ ефективного середовища $G_m = L_m^{-1}$ (в ММР ФГ матриці $G_1 = L_1^{-1}$) вибирається як нульове наближення. За оператором $\sum_n L_{mn}$ в (27) проводять розклад в ряд. У методі кластерних розкладів [73, 68] члени ряду сумуються таким чином, що перша кластерна поправка (K_1) представляє собою суму ФГ окремих зерен в однорідному ефективному середовищі, друга (K_2) – суму ФГ пар зерен і т.д. Підстановки кластерного ряду в (26) дозволяє записати з точністю до K_2 вираз для зміщень

$$\begin{aligned}\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_m &+ \sum [\mathbf{u}(\mathbf{r}, n_1) - \mathbf{u}_m] + \\ &\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} [\mathbf{u}(\mathbf{r}, n_1, n_2) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, n_1) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, n_2) + \mathbf{u}_m].\end{aligned} \tag{30}$$

Тут $\mathbf{u}(\mathbf{r}, n)$ – розв'язок краєвої задачі для включення сорту n в ефективній фазі

$$\sum_\beta L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, n) u_\beta(\mathbf{r}, n) = -f_\alpha(\mathbf{r}). \tag{31}$$

Для зерен довільної форми дана задача пружності аналітично точно не розв'язується. Тому ми будемо використовувати усереднену за орієнтаціями формою зерен. Для розглядуваних КМ зернистого типу ми будемо використовувати усереднені включення сферичної форми.

Аналогічно $\mathbf{u}(\mathbf{r}, n_1, n_2)$ – розв'язок наступної краєвої задачі

$$\sum_{\beta} L_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, n_1, n_2) u_\beta(\mathbf{r}, n_1, n_2) = -f_\alpha(\mathbf{r}). \tag{32}$$

Після усереднення по формі зерен задача зводиться до контакту двох кульок із заданою функцією розташування однієї кульки відносно іншої (парна функція розподілу зерен).

Для прикладу, на основі (13), (12) і (30) для сферичних гранул запишемо об'ємну деформацію з точністю до K_2

$$\langle\theta(\mathbf{r})\rangle = \theta_m + \sum_{i=1}^{M} \frac{c_i}{\nu_i} \int d\mathbf{r}[\theta_i(\mathbf{r}) - \theta_m] + \tag{33}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{c_i c_j}{\bar{\nu}_i \bar{\nu}_j} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' F_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')[\theta_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{r}') - \theta_i(\mathbf{r}) - \theta_j(\mathbf{r}') - \theta_m],$$

де $\bar{\nu}_i$ – об'єм зерен фази (вважаємо всі зерна даного сорту однаковими), c_i – об'ємна доля i-ої фази, $F_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ – парна функція розподілу зерен фаз i і j.

В матричному методі розрахунку (ММР) використовуємо для визначення $\bar{k}$, $\bar{\mu}$ вирази (15), (17) з $\lambda(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r})$ у формі (4). Вирази для $\theta(\mathbf{r})$, $\varepsilon_{xy}(\mathbf{r})$ знаходяться з потрібною точністю з (30) і (12), (13).

У самоузгодженому методі розрахунку (СМР) для $\lambda(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r})$ використовуємо форму (6). Задачі для об'ємної деформації і деформації зсуву розв'язуються незалежно. Однак для знаходження параметрів ефективного середовища λ_m, μ_m (або k_m, μ_m) з врахуванням (11) необхідно розв'язати систему двох рівнянь

$$\begin{aligned} &\langle\theta(\mathbf{r})\rangle = \theta_m, \qquad \langle\theta(\mathbf{r})\rangle = 3\langle\varepsilon_{\alpha\alpha}(\mathbf{r})\rangle, \\ &\langle\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})\rangle = \varepsilon_{\alpha\beta,m}(\mathbf{r}), \qquad \alpha \neq \beta. \end{aligned} \tag{34}$$

У наступному розділі ми детальніше зупинимося на виразах для спостережуваних у наближенні K_1.

5. Фізичні характеристики композиту в наближенні K_1

5.1. Електро- і теплопровідність. Діелектрична і магнітна проникливості

В K_1 необхідно розв'язати наступну задачу для потенціала $V(\mathbf{r_n})$ (температура $T(\mathbf{r_n})$ (див. (7) і (31):

$$\begin{aligned} &\sigma(\mathbf{r_n})\Delta V(\mathbf{r_n}) = 0, \qquad V(\mathbf{r_n})|_{|\mathbf{r_n}|\to\infty} = E_m z = V_m(\mathbf{r}) \\ &\sigma(\mathbf{r_n}) = \begin{cases} \sigma_n, & |\mathbf{r_n}| \le a_n \\ \sigma_m, & |\mathbf{r_n}| > a_n, \end{cases} \qquad \mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n, \end{aligned} \tag{35}$$

де a_n – радіус кульки (зерна), $\mathbf{R}_n$ – радіус-вектор центру кульки.

Розв'язки даної задачі відомі і мають вигляд [74]:

$$\delta V_n(\mathbf{r}_n) = V_n(\mathbf{r}_n) - V_m(\mathbf{r}_n) = \begin{cases} (P_n^\sigma - 1)E_m z, & |\mathbf{r_n}| \le a_n \\ (P_n^\sigma - 1)E_m z \frac{a_n^3}{r_n^3}, & |\mathbf{r_n}| > a_n, \end{cases} \tag{36}$$

причому

$$P_n^\sigma = \frac{\sigma_m}{(1-c_p)\sigma_m + c_p\sigma_n}, \qquad c_p = \frac{1}{D}. \tag{37}$$

Нам потрібні лише z-компоненти напруженості (градієнти температур)

$$\delta E_n^z(\mathbf{r}_n) = E_n^z(\mathbf{r}_n) - E_m^z(\mathbf{r}_n) = \begin{cases} (P_n^\sigma - 1)E_m, & |\mathbf{r_n}| \le a_n \\ (P_n^\sigma - 1)\left[1 - \frac{3z_n^2}{r_n^2}\right]\frac{a_n^3}{r_n^3}E_m, & |\mathbf{r_n}| > a_n. \end{cases} \tag{38}$$

Вираз (30) набуде вигляду (в K_1)

$$E^z(\mathbf{r}) = E_m^z(\mathbf{r}) + \sum_n \delta E_n^z(\mathbf{r}_n). \tag{39}$$

Розглянемо спочатку ММР. Тоді після підстановки (38) у (9) і проведення процедури усереднення отримаємо наступний результат для питомої провідності $\bar{\sigma}$ (коефіцієнта теплопровідності $\bar{q}$, діелектричної сталої $\bar{\varepsilon}$, магнітної проникливості M

$$\bar{\sigma} = \frac{\sum_{i=1}^{M} \sigma_i c_i p_i^\sigma}{\frac{c_0}{1-c_p} + \sum_{i=1}^{M} c_i p_i^\sigma}, \qquad c_0 + \sum_{i=1}^{M} c_i = 1. \tag{40}$$

Тут ми додатково виділили (як окрему фазу $i = 0$) порожнини з об'ємною часткою c_0 (для порожнин $\sigma_0 = 0, p_0^\sigma = (1-c_p)^{-1}$). В суму $\sum_{i=1}^{M}$, таким чином, входять лише масові фази (їх кількість дорівнює M).

У випадку двох фаз $i = 1,2$ з (39) випливає відома формула Оделевського [1, 22]

$$\bar\sigma = \sigma_1 \frac{\sigma_2[c_2 + c_p c_1] + \sigma_1 c_1(1-c_p)}{\sigma_2 c_p c_1 + \sigma_1[1 - c_p c_1]}. \tag{41}$$

Співвідношення (41) має два критичні переходи

$$\bar\sigma \to \left\{ \begin{array}{ll} \sigma_1 \frac{c_2 + c_p c_1}{c_p c_1} \to 0, & \sigma_1 \to 0 \\ \sigma_1 \frac{1-c_p}{1-c_p c_1} c_1, & \sigma_2 \to 0. \end{array} \right. \tag{42}$$

Таким чином, при $\sigma_1 \to 0$ КМ при будь-якій частці ($c_2 < 1$), струм не проводить, при $\sigma_2 \to 0$ КМ завжди ($c_1 > 0$) є провідником.

З (42) випливає, що перколяційна границя c_{pi} дорівнює: $c_{p1} = 1(c_{p2} = 0)$ при $\sigma_1 \to 0$, $c_{p1} = 0$ ($c_{p2} = 1$) при $\sigma_2 = 0$. Це звичайно відображає той факт, що $a_1/a_2 \to 0$. В результаті матриця, навіть при найменших концентраціях ($c_1 \to 0$) обволікає зерна фази 2, утворюючи безмежний кластер, і таким чином визначає властивості композиту як провідника.

У випадку СМР необхідно розрахувати властивості ефективного середовища σ_m (в ММР роль ефективної фази відіграє матриця). З (37), (38) для середньої напруженості знаходимо

$$\langle E^z(\mathbf{r})\rangle = E_m + \sum_{i=1}^{M} c_i(p_i^\sigma - 1). \tag{43}$$

З умови $\langle E^z(\mathbf{r})\rangle = E_m$ випливає з (43) рівняння для σ_m і розраховуючи в K_1 $\bar\sigma$ за формулою (9) можна показати, що $\bar\sigma = \sigma_m$. Таким чином, запишемо кінцевий варіант рівняння для $\bar\sigma$ [23,25].

$$\begin{aligned} \frac{c_c - c_p}{1-c_p}\frac{1}{\bar\sigma} &= \sum_{i=1}^{M} \frac{c_i}{(1-c_p)\bar\sigma + c_p\sigma_i}, \\ c_c = 1 - c_0 &= \sum_{i=1}^{M} c_i, \qquad \bar\sigma = \sigma_m, \end{aligned} \tag{44}$$

де c_c – загальна частка провідних (масових) фаз. Оскільки ми шукаємо лише позитивні рішення $\bar\sigma$, з (44) випливає, що при $c_c \le c_p$ зразок струму не проводить.

Таким чином, $c_p = 1/D$ є перколяційною границею для всіх фаз (при $c_i > c_p$ фаза "і" утворює безмежний кластер). Це адекватно описує ситуацію для КМ з однаковими розмірами зерен.

У випадку лише двох фаз (i = 1,2) знаходимо з (44) розв'язуванням квадратного рівняння

$$\begin{aligned} &\bar\sigma = 2^{-1}(1-c_p)^{-1}[(c_1 - c_p)\sigma_1 + (c_2 - c_p)\sigma_2 + \sqrt{D}], \\ &D = [(c_1 - c_p)\sigma_1 - (c_2 - c_p)\sigma_2]^2 + 4\sigma_1\sigma_2 c_1 c_2. \end{aligned} \tag{45}$$

При $\sigma_2 \to 0$ з (45) випливає

$$\bar\sigma = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\sigma_1}{1-c_p}(c_1 - c_p), & c_1 \ge c_p \\ 0, & c_1 < c_p. \end{array} \right. \tag{46}$$

У СМР в наближенні K_1 маємо

$$c_p = \left\{ \begin{array}{ll} 0,5 & D = 2 \\ 0,333... & D = 3 \end{array} \right. \tag{47}$$

У тривимірному випадку має місце відхилення (c_p=1/3) від значення машинних розрахунків (c_p = 0,17 для твердих сфер і c_p =0,29 для сфер з повним проникненням). При малих відмінностях σ_1 і σ_2 ММР і СМР в K_1 дає близькі результати. У випадку $\sigma_2 \to 0$ СМР на відміну від ММР описує перколяційний перехід, однак дає завищене значення $c_p = 1/3$. При цьому значні відхилення спостережуваної $\bar\sigma$ від точного значення проявляються лише в околі c_p.

5.2. Пружні властивості

Розглянемо тут лише задачу для об'ємної деформації (стиск або розширення). У цьому випадку у сферичних координатах необхідно розв'язати рівняння для сферичних компонент u_r, u_φ, u_θ [7, 71]

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial^2}{\partial r_n^2} + \frac{2}{r_n}\frac{\partial}{\partial r_n} - \frac{2}{r_n^2}\right) u_r(\mathbf{r}_n) = 0, \\ &u_\varphi(\mathbf{r}) = u_\theta(\mathbf{r}) = 0, \qquad u_r(\mathbf{r}) = u_r(\mathbf{r}_n) \end{aligned} \tag{48}$$

при наступних граничних умовах для внутрішніх і зовнішніх розв'язків

$$\begin{aligned} &u_r^{(1)}(a_n) = u_r^{(2)}(a_n), \qquad \sigma_{rr}^{(1)}(a_n) = \sigma_{rr}^{(2)}(a_n), \\ &u_r^{(2)}(\mathbf{r}_n)|_{|\mathbf{r}_n|\to\infty} \to \varepsilon_m|\mathbf{r}_n| = u_m(\mathbf{r}_n), \end{aligned} \tag{49}$$

причому

$$\sigma_{rr} = 2\mu\varepsilon_{rr} + \lambda\theta, \qquad \varepsilon_{rr} = \partial_r u_r, \qquad \theta = \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r}\right] u_r. \tag{50}$$

За знайденим розв'язком $u_r(\mathbf{r})$ відновлюємо декартові компоненти зміщення ($u_\alpha(\mathbf{r}) = u_r r_n^\alpha / r_n$)

$$\delta u_\alpha(\mathbf{r}_n) = u_\alpha(\mathbf{r}_n) - u_m(\mathbf{r}_n) = \begin{cases} (p_n^k - 1)\varepsilon_m r_n^\alpha, & r_n \le a_n \\ (p_n^k - 1)\varepsilon_m \frac{a_n^3 r_n^\alpha}{r_n^3}, & r_n > a_n, \end{cases} \tag{51}$$

де

$$p_n^k = \frac{k_m + 4c_p\mu_m}{k_n + 4c_p\mu_m}, \qquad c_p = 1/D. \tag{52}$$

Для об'ємної деформації $\theta(\mathbf{r}_n)$ знаходимо (див. (50))

$$\delta\theta(\mathbf{r}_n) = \theta(\mathbf{r}_n) - \theta_m(\mathbf{r}_n) = \begin{cases} 3(p^k - 1)\varepsilon_m, & r_n \le a_n \\ 0, & r_n > a_n. \end{cases} \tag{53}$$

З врахуванням (4.20) в K_1 отримаємо

$$\langle\theta(\mathbf{r})\rangle = 3\varepsilon_m \left[1 + \sum_{i=1}^{M} (p^k - 1)c_i + \frac{k_m}{4c_p\mu_m} c_0\right]. \tag{54}$$

Тут виділено складову i $= 0$, що відповідає порожнинам ($\lambda_0 = \mu_0 = 0$).

В СМР з (15) і умови самоузгодження випливає одне рівняння для параметрів ефективного середовища λ_m, μ_m

$$\sum_{\alpha=1}^{M} \frac{c_\alpha}{k_\alpha + 4c_p\mu_m} = \frac{1}{k_m + 4c_p\mu_m} - \frac{c_0}{4c_p\mu_m}. \tag{55}$$

Друге рівняння знаходимо при розв'язуванні задачі на деформацію зсуву.

Тут ми зупинимося лише на виразі для $\bar{k}$ в ММР. З врахуванням (52), (53) і визначення (15) знайдемо в наближенні K_1 в ММР

$$\bar{k} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{M} k_i c_i p_i^k}{c_0 \frac{k_1 + 4c_p\mu_1}{4c_p\mu_1} + \sum\limits_{i=1}^{M} c_i p_i^k},$$
$$p_i^k = \frac{k_1 + 4c_p\mu_1}{k_i + 4c_p\mu_1}. \tag{56}$$

У випадку лише двох фаз (i=1,2) з (56) знаходимо відомий вираз [1, 7] для об'ємного модуля $\bar{k}$

$$\bar{k} = \frac{k_1(k_2 + 4c_p\mu_1) + c_2 4c_p\mu_1(k_2 - k_1)}{k_2 + 4c_p\mu_1 - c_2(k_2 - k_1)}. \tag{57}$$

Вираз (57) має два граничних переходи

$$\bar{k} \to \begin{cases} \frac{k_1 + 4c_p\mu_1 c_2}{c_1} \to 0, & k_1, \mu_1 \to 0 \\ \frac{4c_p\mu_1 + k_1 c_2}{,} & k_2, \mu_2 \to 0. \end{cases} \tag{58}$$

Таким чином, як і у випадку електропровідності, границі (58) відображають той факт, що $a_2/a_1 = 0$.

5.3. Термопружність

Рівномірне нагрівання для задачі кулі в ефективному середовищі приводить лише до об'ємної деформації. При цьому у сферичних координатах отримуємо ЛДР, аналогічне до (48), але з температурним джерелом деформації [71].

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{2}{r^2}\right) u_r(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}_n)\partial_r(\Delta T),$$
$$f(\mathbf{r}) = \frac{3k(\mathbf{r})\alpha(\mathbf{r})}{\lambda(\mathbf{r}) + 2\mu(\mathbf{r})}, \qquad u_\varphi(\mathbf{r}_n) = u_\theta(\mathbf{r}_n). \tag{59}$$

Граничні умови на поверхні кулі (49) дадуть змогу знайти два із трьох невідомі коефіцієнти, що входять у розв'язок рівняння (59). В результаті для декартових компонент запишемо [71]

$$\delta u_\alpha(\mathbf{r}_n) = \frac{r_n^\alpha}{r_n} u_r(\mathbf{r}_n) = \begin{cases} B_n \Delta T r_n^\alpha, & r_n \le a_n \\ B_n \Delta T \frac{a_n^3}{r_n^3} r_n^\alpha, & r_n > a_n, \end{cases}$$
$$u_\alpha^m(\mathbf{r}) = A_m \Delta T r_n^\alpha, \tag{60}$$

де

$$B_n = \frac{(k_m - k_n)A_m + 3(k_n\alpha_n - k_m\alpha_m)c_p}{k_n + 4c_p\mu_m}. \tag{61}$$

На основі (60) знаходимо для об'ємної деформації

$$\delta\theta(\mathbf{r}_n) = \sum_{\alpha=1}^{D} \varepsilon_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}_n) = \begin{cases} 3B_n\Delta T, & r_n \le a_n \\ 0, & r_n > a_n \end{cases} \tag{62}$$

Для знаходження коефіцієнта A_m використовуємо умову (22). Після громіздких обчислень за співвідношенням (21) знайдемо ефективний КЛР композиту в ММР (СМР ми тут не розглядаємо)

$$\bar{\alpha} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{M} c_i \alpha_i p_i^{\alpha}}{\sum\limits_{i=1}^{M} c_i p_i^{\alpha}}, \qquad p_i^k = \frac{k_i}{k_i + 4c_p\mu_1}. \tag{63}$$

Тут порожнини явно не виділені, оскільки для них $\alpha_0 = 0$.

В літературі [1, 7] зустрічається вираз для КЛР композиту лише у випадку одного сорту включень в матриці (M=2). Запишемо (62) для $M = 2$ в наступній формі

$$\bar{\alpha} = \sum_{i=1,2} c_i \alpha_i + c_1 c_2 (\alpha_1 - \alpha_2) \times$$
$$\times \left(\frac{k_1}{k_1 + 4c_p\mu_1} - \frac{k_2}{k_2 + 4c_p\mu_1} \right) \left(\sum_{i=1,2} \frac{k_i c_i}{k_i + 4c_p\mu_1} \right)^{-1}. \tag{64}$$

Само в такому вигляді неважко переконатися в тотожності (63) до відомого виразу [1, 7].

Не вникаючи в процедуру розрахунку, запишемо результати обчислень середнього КЛР $\bar{\alpha}_i$ і середнього напруження $\bar{\sigma}_i$ для і-ої фази в композиті

$$\bar{\alpha}_i = \frac{k_i \alpha_i + 4c_p\mu_1 \bar{\alpha}}{k_i + 4c_p\mu_1}, \qquad \bar{\alpha} = \sum_{i=0}^{M} c_i \bar{\alpha}_i, \tag{65}$$

$$\bar{\sigma}_i = 4\mu_1 p_i (\alpha_i - \bar{\alpha}) \Delta T = 4\mu_1 (\bar{\alpha}_i - \bar{\alpha}) \Delta T. \tag{66}$$

Як можемо бачити, у випадку порожнин $\bar{\alpha}_0 = \bar{\alpha}(p_0 = 0)$ і напруження природньо не виникає ($\bar{\sigma}_0 = 0$). Знак напруги ($\bar{\sigma}_i > 0$) відповідає стиску фази і і залежить від співвідношення між α_i і $\bar{\alpha}$ (або $\bar{\alpha}_i$ і $\bar{\alpha}$). Якщо КЛР α_i вихідного матеріалу менше, ніж КЛР композиту $\bar{\alpha}$, і-а фаза в композиті виявиться стиснутою ($\bar{\sigma}_i > 0$) при зниженні температури T над вихідною $T_0 (\Delta T = T - T_0 < 0)$. При $\bar{\alpha}_i > \bar{\alpha}$ за таких самих умов фаза і буде розтягнута ($\bar{\sigma}_i < 0$). Подібний ефект спостерігається, зокрема, в резистивних, керамічних матеріалах і ЛПВМ (лавоподібних паливовмісних матеріалах). Матеріал формується при деякій високій температурі T_0 ($T_0 \approx$ піковій температурі обпалу). Сформований зразок (матеріал) експлуатується при значно нижчих температурах. У температурній області експлуатації частина фаз виявляється у стиснутому, частина - в розтягнутому стані. Величини середніх внутрішніх напруг $\bar{\sigma}_i$ в кожній фазі можна знайти в ММР, використовуючи співвідношення (66) з врахуванням (65), (63).

Література

1. Композиционные материалы. Справочник. Под ред. Карпиноса Д.М. К., Наук. думка, 1985. 592 с.
2. Переменные толстопленочные резисторы. Под ред. Смолина М.Д. К., Наук. думка, 1980. 232 с.
3. Мартюшов К.И. Проблемы резисторного материаловедения // Обзоры по электрон. техн. Сер. 5. М., ЦНИИ, <Электроника>, 1985. Вып. 2. (1108). 68 с.
4. Окадзаки К. Технология керамических диэлектриков. Л., Энергия, 1976.
5. Балкевич В.П. Техническая керамика. М., Стройиздат, 1984. 256 с.
6. Композиционные материалы. Т.2. Механика композиционных материалов. Под ред. Браутнани, Р.Крока. М., Мир, 1978. 564 с.
7. Кристенсен Р. Введение в механику композитов. М., 1982. 334 с.
8. Механика композитных материалов и элементов конструкций. Т.1. Механика материалов. Под ред. А.Н.Гуза. К., Наук. думка, 1982. 367 с.
9. Хорошун Л.П., Маслов Б.П. Методы автоматизированного расчета физико- механических постоянных композиционных материалов. К., Наук. думка, 1980. 156 с.
10. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М., Наука, 1977. 399 с.
11. Волков С.Д., Ставров В.П. Статистическая механика композитных материалов. Минск, Изд-во БГУ им.Ленина. 1978. 210 с.
12. Сендецки Дж. Упругие свойства композитов. В кн.: Механика композиционных материалов. Под ред. Сендецки Дж. М., Мир, 1978. С. 61-101.
13. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Л., Энергия, 1974. 264 с.
14. Григолюк Э.И., Фильштинский Л.А. Перфорированные пластины и оболочки. М, Наука, 1970. 556 с.
15. Композиционные материалы волокнистого строения. Под ред. И.Н.Францевича, Д.М.Карпиноса. К., Наук. думка, 1970. 403 с.

16. Ван Фо Фы Г.А. Теория армированных материалов. К., Наук. думка, 1971. 232 с.
17. Ломакин В.А. Теория упругости неоднородных тел. М., Изд-во МГУ, 1976. 368 с.
18. Maxwell J.C. Treatise on Electicity and Magnetism. 3-rd ed. Oxford: Oxford University, 1904.
19. 19. Einstein A. Investigation on the Theory of Brownian Motion. New York: Dover, 1956.
20. Landauer R. Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media // Amsterdam: Am. Inst. Phys. Conf. Proc. 40. 1978. P.2.
21. McLachlan D.S. Equation for the conductivity of metall-insulators mixtures // J. Phys. C.: Solid State Phys. 1985. V.18. N 9. P.1891-1897.
22. Оделевский В.И. Расчет обобщенной проводимости гетерогенных систем. I. Матричные двухфазные системы с невытянутыми включениями // ЖТФ. 1951. Т.21. Вып. 6. С.667-677.
23. Оделевский В.И. Расчет обобщенной проводимости гетерогенных систем. II. Статистические смеси невытянутых частиц // ЖТФ. 1951. Т.21. Вып. 6. С.678-685.
24. Оделевский В.И. Расчет обобщенной проводимости гетерогенных систем. III. Поликристалл // ЖТФ. 1951. Т.21. Вып. 11. С.1379-1382.
25. Киркпатрик С. Перколяция и проводимость. В кн.: Теория и свойства неупорядоченных материалов. М., Мир, 1977. С.249-289.
26. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979. 416 с.
27. Soven P. Coherent-potential model of substitutional disordered alloys // Phys. Rev. 1967. V.156. N 3. P.809-813.
28. Эллиот Р., Крамхансл Дж., Лис П. Теория и свойства случайно неупорядоченных кристаллов и связанных с ними физических систем. В кн.: Теория и свойства неупорядоченных материалов. М., Мир, 1977. С.11-248.
29. Дульнев Г.Н., Новиков В.В. Проводимость неоднородных систем // ИФЖ. 1979. Т.36, № 5. С.901-910.
30. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Л., Энергия, 1974. 264 с.
31. Дульнев Г.Н., Новиков В.В. Теория протекания и проводимости неоднородных сред. I. Базовая модель неоднородной среды // ИФЖ. 1983. Т.45. № 3. С.443-451.
32. Волков Д.П., Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П., Муратова Б.Л. Теория протекания и проводимости неоднородных сред. II. Вариации базовой модели неоднородной среды // ИФЖ. 1984. Т.46. № 2. С.247-252.

33. Балагуров Б.Я. К теории дисперсии проводимости двухкомпонентных сред // ЖЭТФ. 1985. Т.88. Вып. 5. С.1664-1675.
34. Виноградов А.П., Каримов А.М., Сарычев А.К. Диэлектрическая проницаемость перколяционных композитных материалов: закон подобия и уравнение состояния // ЖЭТФ. 1988. Т.94. Вып. 10. С.301-308.
35. Кудинов В.А., Мойжес Б.Я. Эффективная проводимость неоднородной среды. Итерационный ряд и вариационные оценки для метода Херринга // ЖТФ. 1979. Т.49. Вып. 8. С.1595-1603.
36. Кудинов В.А. Эффективные параметры неоднородных материалов с высокой термоэлектрической добротностью // ЖТФ. 1983. Т.53. Вып. 4. С.620-625.
37. Снарский А.А., Морозовский А.Е. Вариационные оценки в термоэлектрических средах // ФТП. 1985. Т.19. Вып. 2. С.305-307.
38. Снарский А.А. Эффективная проводимость искусственно-анизотропной среды с мелкомасштабными искаженями // УФЖ. 1985. Т.30. Вып. 1. С.95-98.
39. Белоцкий Е.Д., Снарский А.А., Трофимов С.С. Исследование искусственно-анизотропных сред // УФЖ. 1982. Т.27. №1. С.91-95.
40. Казанцев В.П. Вариационные оценки эффективной проводимости среды с макроскопическими включениями // Изв. вузов СССР. Физика. 1979. № 5. С.55-59.
41. Казанцев В.П. Вариационные оценки поляризуемостей неоднородных диэлектрических тел случайной формы // Изв. вузов СССР. Физика. 1980. № 9. С.44-47.
42. Казанцев В.П. Общие свойства тензора эффективной проводимости неоднородных сред, следующие из вариационных принципов // Изв. вузов СССР. Физика. 1980. № 12. С.58-61.
43. Казанцев В.П. Вариационные оценки в электростатике диэлектриков // ЖТФ. 1983. Т.53. Вып. 3. С.449-457.
44. Казанцев В.П. Вариационные оценки в электростатике. Емкость плоского конденсатора // Изв. вузов СССР. Физика. 1984. № 8. С.96-99.
45. Казанцев В.П. Вариационные оценки в электростатике. Метод обобщенных координат // Изв. вузов СССР. Физика. 1984. № 8. С.100-104.
46. Казанцев В.П. Вариационные оценки емкостей проводящих пластин // ЖТФ. 1983. Т.53. Вып. 3. С.458-465.

47. Казанцев В.П. О методе вариационных неравенств в электростатике // Изв. вузов СССР. Физика. 1984. № 11. С.93-98.
48. Мартюшов К.И. Механизм электропроводности керметных и легирование полупроводниковых резисторов // Обзоры по электр. техн. Сер. 5. М., ЦНИИ. <Электроника>. 1979. Вып. 3(683). 76 с.
49. Мартюшов К.И. Электропроводность композиционных резистивных материалов // Обзоры по электр. техн. Сер. 5. М., ЦНИИ. <Электроника>. 1982. Вып. 8(910). 58 с.
50. Мартюшов К.И. Токовые шумы в резисторах // Обзоры по электр. техн. Сер. 5. М., ЦНИИ. <Электроника>. 1983. Вып. 5(989). 44 с.
51. Аванесян Р.Р. Резистивные свойства аморфных материалов. II. Резистивные свойства керметных материалов // Обзоры по электр. техн. Сер. 5. М., ЦНИИ. <Электроника>. 1984. Вып. 3(1048). 56 с.
52. Аванесян Р.Р. Устойчивость электропереноса в резистивных материалах и слоях. I. Механизмы электропереноса и факторы, определяющие его устойчивость // Обзоры по электр. техн. Сер. 5. М., ЦНИИ. <Электроника>. 1987. Вып. 2(1276). 66 с.
53. Pike G., Seager C. Electrical properties and conduction mechanism of Ru-based thick-film (cermet) resistors // J. Appl. Phys. 1977. V.48. N 12. P.5152-5169.
54. Smith D., Anderson J. Theory of electrical conduction in particulate systems // Philosophical Magazine. 1981. V.B43. N 5. P.797-810.
55. Smith D., Anderson J. Electrical conduction in thick film pastl resistors // Thin Solid Films. 1980. V.71. P.79-89.
56. Smith D., Anderson J. Electrical conduction in particulate thick Films // Philosophical Magazine. 1981. V.B43. N 5. P.811-823.
57. Kusy A., Listkiewicz E., Phis D. Komputerowa symulacja structury I przewodnictwa micszanin typu osrodek przewodzacy+osrodek izolujacy // Arch. electrotech. 1982. V.31. N 3-4. P.327-343.
58. Derrida B., Zabolitzky J.G., Vannimenus J., Stauffer D. A Transfer Matrix Program to Calculate the Conductivity of Random Resistor Networks // J. Stat. Phys. 1984. V.36. N 1-2. P.31-42.
59. Белькова Л.А., Замотринская Е.А., Загоскин В.В., Михайлова Т.Г., Нестеров В.М. Электропроводимость дисперсной смеси диэлектрик-проводник // Изв. вузов СССР. Физика. 1982. № 4. С.85-89.
60. Белькова Л.А., Замотринская Е.А., Загоскин В.В., Михайлова Т.Г., Нестеров В.М. Влияние размеров частиц компонентов на порог протекания электропроводимости дисперсной смеси // Изв. вузов СССР. Физика. 1982. № 7. С.10-14.

61. Михайлова Т.Г., Белькова Л.А., Нестеров В.М., Загоскин В.В., Замотринская Е.А. Моделирование электропереноса в смеси дисперсного диэлектрика и мелкодисперсного твердофазного либо жидкофазного проводника // Изв. вузов СССР. Физика. 1984. № 11. С.29-35.
62. Балагуров Б.Я. К теории проводимости анизотропных двухкомпонентных сред // ФТТ. 1985. Т.27. Вып. 8. С.2375-2382.
63. Балагуров Б.Я. О термоэлектрических свойствах неоднородных тонких пленок // ФТТ. 1982. Т.16. Вып. 2. С.259-275.
64. McCullough R.L. Generalized Combining Rules for Predicting Transport Properties of Composite Materials // Composite Csience and Technology. 1985. V.22. P.3-21.
65. Agarwal G.S., Ramarao Ingava. Effective-medium theory of a heterogeneous medium with individual grains having a nonlocal dielectrical function // Phys. Rev. 1984. V.B30. N 10. P.6108-6117.
66. Metzger J., Kertecz. J. Effective-medium theory for further-neighbour hopping transport // J. Phys. C.: Solid State Phys. 1984. V.17. P.5153-5161.
67. Torguato S. Bulk properties of two-phase disordered media. I. Cluster expantion for the effective dielectric constant of dispersions of penetrable spheres // J. Chem. Phys. 1984. V.81. N 11. P.5079-5088.
68. Lado F., Torguato S. Effective properties of two-phase disordered composite Media. I. Simplification of bounds on the conductivity and bulk modulus of dispersions of impenetrable spheres // Phys. Rev. B. 1986. V.33, N 5. P.3370-3378.
69. Балагуров Б.Я. О проводимости неоднородных сред с малой концентрацией включений // ЖЭТФ. 1985. Т.89. Вып.5. № 11. С.1796-1809.
70. Самуль В.И. Основы теории упругости и пластичности. М., Высш. школа. 1982. 264 с.
71. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.8. Теория упругости. М., Наука. 1987. 246 с.
72. Подстригач Я.С., Ломакин В.А., Коляно Ю.М. Термоупругость тел неоднородной структуры. М., Наука. 1984. 368 с.
73. Иванченко Ю.М., Козинская А.И., Лисянский А.А. Кластерные эффекты в мнокомпонентных сплавах // ТМФ. 1981. Т.48. № 42. С.250-260.
74. Мэтьюз Дж.., Уокер Р. Математические методы физики. М., Атомиздат, 1972. 398 с.

Сергій Іванович Сороков

Кластерний підхід до розрахунку фізичних характеристик композитних матеріалів

Роботу отримано 18 серпня 2003 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України