

# О СВЯЗИ МОДЕЛИ СЛУЧАЙНОЙ КЛАСТЕРИЗАЦИИ С ФИЗИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ ДВУХФАЗНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Ефремов А. В. - аспирант, Ишков А. В. – к.х.н., д.т.н.

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул)

Образование различных кластерных структур в объеме двухфазных систем существенным образом влияет на их физические свойства и если объяснять такие процессы можно в рамках теории перколяции, то моделирование геометрических фазовых переходов и установление зависимостей состав-структура-свойство для таких систем представляет определенные трудности [1]. Решение этой задачи с применением стохастических численных методов, позволяет не только освободиться от различных допущений на входе алгоритма, но и исследовать поведение модели при максимально возможном числе входных параметров, тем самым приблизить результаты расчетов к реальным физическим свойствам системы.

Ранее нами была предложена модель случайной анизотропной кластеризации для двумерной системы, реализованная для системы электропроводящих композиционных материалов (ЭПКМ) на ЭВМ в виде расчетной программы Cluster, написанной на платформе Qt C++ [2, 3]. Модель основывается на случайной генерации элементов кластера, анизотропию размера которых ( $d/l$ ), положение на плоскости и приоритетное направление роста кластера ( $P_{v,n}$ ) можно задавать произвольно.

Теоретическое обоснование двумерной модели случайной анизотропной кластеризации базируется на представлении частиц наполнителя как прямоугольников, длина и ширина которых зависит от реальных геометрических параметров частиц и их топологии и может быть определена однозначно во входных данных программы. В базовой версии размеры частиц варьируются по нормальному распределению, за показатель анизотропии ( $d/l$ ) частиц берется среднее отношение ширины частиц к их длине.

Для упрощения вычислений и ускорения процедуры счета разработан алгоритм определения положения данных частиц на полимерной матрице, основанный на замене числового массива его геометрическим образом. Частица появляется на матрице в случайной точке и под случайным углом. По полученным значениям случайных координат и угла поворота, с учетом текущих размеров частицы, определяется её местоположение на матрице, закрашивая полученную область в другой «цвет». Затем, с помощью оптимизированного алгоритма метода «жука» [4], происходит обход матрицы и определение границы частицы. Затем генерируется следующая частица, к которой применяются вышеописанные алгоритмы.

Как показал компьютерный эксперимент в такой системе частицы образуют случайные кластеры, что в результате приводит к геометрическому фазовому переходу (адекватному перколяционному переходу диэлектрик-металл), который физически характеризуется резким изменением электропроводности ЭПКМ. Критическое значение концентрации наполнителя, при котором происходит данный переход, называется порогом протекания.

В данной работе изучалась зависимость электрофизических характеристик модельной двухфазной системы от концентрации проводящего наполнителя (дисперсной фазы), так как среди множества факторов, влияющих на свойства ЭПКМ, этот параметр является наиболее существенным.

Результатами работы программы Cluster+ является следующий набор характеристик: комплекс электрофизических параметров двухфазной системы ( $R$ ,  $\varepsilon$ , и ее компоненты  $\varepsilon_{\perp}$ ,  $\varepsilon_{\parallel}$ ), значение границ фазовых переходов ( $v_{нач.}$ ,  $v_{кон.}$ ), фрактальная размерность границы растущего кластера ( $D$ ), текущая концентрация фаз ( $v_i$ ), вид двухфазной системы (графический файл \*.jpeg). Существенным отличием программы Cluster+ от разработанной ранее Cluster [2] является возможность проведения моделирования в реальном времени и интерактивном режиме, наблюдение за протекающим процессом кластеризации, построение зависимостей фрактальной размерности и удельного электрического сопротивления от

концентрации проводящего наполнителя, возможность остановки счета с сохранением текущих параметров. Также в отличие от программы [2] программа Cluster+ позволяет определить влияние анизотропии различных уровней на диэлектрическую проницаемость системы в рамках модели эффективной среды.

Связь геометрической модели и ее анизотропных параметров с физической анизотропией материала осуществляется в рамках модели эффективной среды Максвелла-Гарнета, допускающей свое обобщение на этот случай. Эффективная диэлектрическая проницаемость имеет такой же вид, как и для эллипсоидов [5]:

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_2}{L(\varepsilon_{eff} - \varepsilon_2) + \varepsilon_2} = v \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{L(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + \varepsilon_2}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_{eff}$  - эффективная диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  - диэлектрические проницаемости наполнителя и матрицы соответственно,  $v$  - концентрация наполнителя,  $L$  - фактор деполяризации.

Величина  $Lx$  определяется через отношение  $\xi = a/b$ . В случае эллипсоидов  $a$  и  $b$  - полярная и экваториальные полуоси. В нашем случае это усредненные проекции частиц на главные оси по усредненному углу поворота (рис. 1), а величины  $Lx$  и  $Ly$  связаны соотношением  $Lx + 2Ly = 1$ .

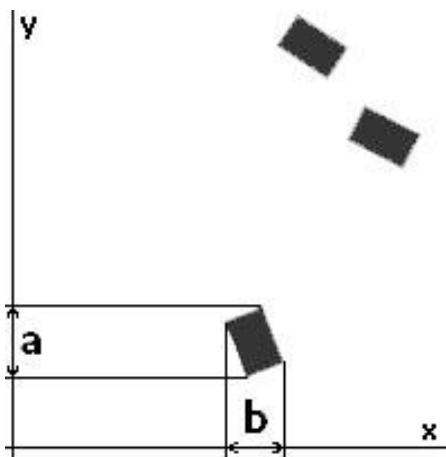


Рис. 1. Пояснение для определения характерных размеров  $a$  и  $b$ .

Направлениям поля будут соответствовать факторы деполяризации  $Lx$  и  $Ly$  и, как следствие разные величины эффективной диэлектрической проницаемости, что позволяет учесть анизотропию при помощи модели эффективной среды.

В данный момент нами получены теоретические результаты по влиянию анизотропии на эффективную диэлектрическую проницаемость двумерного модельного композита и рассматривается область применимости нашего подхода при согласовании с экспериментальными данными.

Исследование зависимости фрактальной зависимости ЭПКМ от концентрации наполнителя и сопоставление полученных результатов с экспериментом показало их общее соответствие [6]. Характерной особенностью этой зависимости является заметный скачок фрактальной размерности вблизи порога перколяции, что хорошо согласуется с экспериментальными данными, а также существование дополнительных переходов (рис. 2).

Была получена и зависимости порога протекания ЭПКМ от анизотропии формы частиц дисперсной фазы и анизотропии растущего кластера. Так, например, при  $(d/l) = 5$  происходит снижение нижней границы перколяционного перехода с 0,22 до 0,12 а для частиц с  $(d/l) = 25$  это снижение еще более заметно. Этот факт также хорошо согласуется с экспериментом [7] и общими положениями теории перколяции [1].

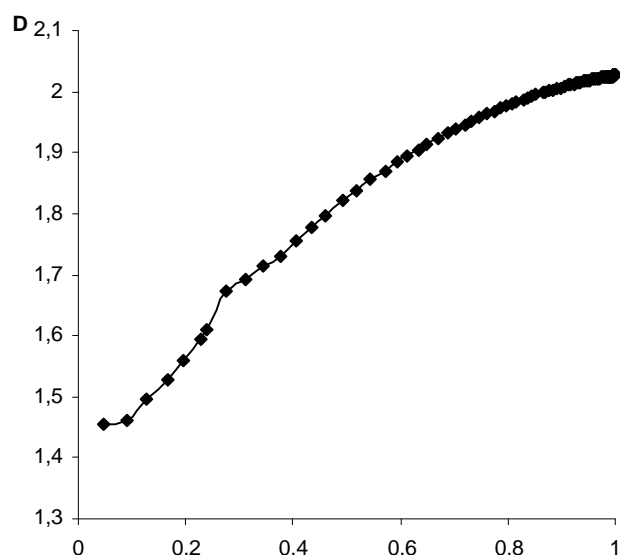


Рис. 2. Зависимость фрактальной размерности  $D$  от концентрации наполнителя  $v$ .

Таким образом, заложенные в модель положения, полученные результаты компьютерных экспериментов, и их сопоставление с физическими характеристиками реальных систем показывают, что предложенная нами модель, основанная на случайной кластеризации, может с успехом использоваться для описания реальных физических двухфазных систем – ЭПКМ.

#### Литература

- [1] Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: Наука, 2002 г. — 102 с.
- [2] Ишков А.В, Ефремов А.В, Сагалаков А.В. // Известия АГУ 2006 г. № 1, с. 116 — 120.
- [3] Св-во рег. прогр. ЭВМ № 2005612128 (RU) 19.08.2005. / Ишков А. В., Ефремов А. В. // Бюлл. № 3. 2005.
- [4] У. Претт «Цифровая обработка изображений», том 2, Москва – 1982г.-с.499-500,564-566.
- [5] Головань Л. А., Тимошенко В. Ю., Кашкаров П. К. // УФН. 2007 г. Т. 177. № 6, с. 620 — 622.
- [6] Ишков А. В., Сагалаков А. М. // Письма в ЖТФ, 2006 г. Т. 32. № 11, с. 22 — 27.
- [7] Чмутин И. А., Летягин С. В., Шевченко В. Г., Пономаренко А. Т. // Высокомолекулярные соединения. 1994 г. Т. 36. № 4, с. 699 — 713.