

**Методы учета случайности формы включений
при вычислении эффективных диэлектрических
характеристик гетерогенных текстурированных материалов**

М.И. Завгородняя¹, И.В. Лавров²

¹*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

²*Национальный исследовательский университет «МИЭТ»*

**Methods of Accounting of Randomness of Inclusions' Form
in Calculation of Effective Dielectric Characteristics
of the Heterogeneous Textured Materials**

M.I. Zavgorodnyaya¹, I.V. Lavrov²

¹*National Research Nuclear University MEPHI, Moscow*

²*National Research University of Electronic Technology, Moscow*

Рассмотрены два метода учета случайности формы включений для вычисления тензора эффективной диэлектрической проницаемости текстурированной гетерогенной среды матричного типа с включениями случайной эллипсоидальной формы: аналитический и метод моделирования среды с несколькими видами включений. Методы основаны на обобщенной модели Максвелла–Гарнетта. Для учета распределения ориентаций включений применены представления группы вращений. Проведено сравнение результатов вычисления этими методами эффективных диэлектрических характеристик моделей пористого кремния в переменном электромагнитном поле в диапазоне частот 10^3 – 10^8 Гц.

Ключевые слова: гетерогенный материал; композит; тензор эффективной диэлектрической проницаемости; текстура; ориентация; случайная эллипсоидальная форма; приближение Максвелла–Гарнетта.

Two methods of the accounting of randomness of inclusions' form for calculation of effective permittivity tensor of the textured heterogeneous medium of matrix type with inclusions of a casual ellipsoidal form have been offered: an analytical method and a method of modeling of the medium with several types of inclusions. Both methods are constructed on the basis of the generalized Maxwell–Garnett's model, representations of the rotation group are applied to the accounting of inclusions' orientations' distribution. The results of calcula-

tion of effective dielectric characteristics of porous silicon models in the frequency range of 10^3 – 10^8 Hz produced by these two methods have been compared.

Keywords: heterogeneous; composite; effective permittivity tensor; texture; orientation; casual form; ellipsoid; Maxwell–Garnett approach.

Введение. Задача вычисления эффективных физических характеристик гетерогенных материалов уже полтора века интересует исследователей, несмотря на большое количество работ по этой тематике. Данный факт, во-первых, объясняется тем, что гетерогенные материалы – композиты, нанокompозиты, поликристаллы и пленки из них, а также различные пористые структуры – широко используются в науке и технике. Во-вторых, литосфера Земли также является гетерогенной средой и прогнозирование свойств гетерогенных материалов в зависимости от их состава и структуры имеет важное значение для геофизики (разведка полезных ископаемых, предсказание землетрясений и извержений вулканов). В-третьих, многообразие таких материалов настолько велико, а их структура настолько сложна, что не существует универсального метода для решения данной задачи, в одинаковой степени подходящего для гетерогенных материалов всех типов. Фундаментальный обзор видов гетерогенных материалов и методов определения их эффективных свойств приведен в [1]. Обзор методов вычислений эффективных характеристик неоднородных сред можно найти также в [2].

Большинство гетерогенных материалов текстурированные, что проявляется в анизотропии их макроскопических свойств. Причины возникновения текстуры различны. Например, при создании искусственных материалов из кристаллитов специально выстраивают структуры с выделенными направлениями, в природных материалах текстура образуется под воздействием внешних напряжений и полей. Процесс формирования текстуры в поликристаллическом материале смоделирован в работе [3]. Оценка характеристик текстурированных материалов сопряжена со значительными проблемами как вследствие вычислительных сложностей учета ориентаций зерен неоднородности, так и из-за недостаточной точности существующих методов исследования текстуры реальных материалов. Примерами аналитического подхода к учету текстуры в поликристаллических материалах являются работы [4–6], в материалах матричного типа – работы [7–10].

Один из видов текстуры – текстура формы – связан с преимущественной ориентацией кристаллитов, если они имеют несферическую форму. В то же время учет самой формы кристаллитов является чрезвычайно сложной задачей. В большинстве случаев предполагается, что кристаллиты имеют правильную геометрическую форму: эллипсоидальную, цилиндрическую и т.д. Однако даже при создании материалов с определенной фиксированной формой кристаллитов (включений) при современном уровне развития технологий невозможно добиться идеальной формы у всех кристаллитов. Для более адекватного прогнозирования свойств гетерогенных материалов необходимо создавать модели, учитывающие статистический разброс форм кристаллитов. В большинстве работ, где учитывается случайность формы кристаллитов, варьируются геометрические параметры, определяющие размеры кристаллитов в пределах выбранной правильной геометрической формы. В частности, если кристаллиты сфероидальные, варьируется по некоторому статистическому закону так называемое аспектное соотношение, т.е. отношение полуосей сфероида, а затем проводится усреднение путем интегрирования по данному параметру с учетом плотности его распределения. Например, в [11] принято, что аспектное соотношение распределено равномерно на некотором отрезке, а в [12] – имеет гауссово распределение с заданными средним и дисперсией.

Цель настоящей работы – сравнение двух методов вычисления компонент тензора эффективной диэлектрической проницаемости текстурированного матричного композита с включениями случайной эллипсоидальной формы с малым отклонением от сфероидальной. Первый метод – аналитический, в нем используется разложение геометрических факторов эллипсоида в ряд по степеням относительных отклонений полуосей эллипсоида [13]. Вторым методом – моделирование, где модель Максвелла–Гарнетта обобщается на случай матричной среды с несколькими видами включений (кристаллитов). При этом непрерывное распределение относительных отклонений полуосей эллипсоидов аппроксимируется дискретным [14]. Сравнение методов проводится по результатам моделирования эффективных диэлектрических характеристик пористого кремния в переменном электромагнитном поле в диапазоне частот 1 кГц – 100 МГц.

Постановка задачи вычисления эффективной диэлектрической проницаемости матричной гетерогенной среды и ее решение в обобщенном приближении Максвелла–Гарнетта. Пусть имеется макроскопически однородный образец гетерогенного материала объемом V , состоящий из однородной изотропной матрицы с анизотропными включениями одного типа с точки зрения их физических характеристик. Суммарная объемная доля включений равна d . Главные оси тензоров диэлектрической проницаемости включений предполагаются совпадающими с осями соответствующих эллипсоидов. Ориентации включений распределены по некоторому вероятностному закону, форма включений – случайная эллипсоидальная. Ориентация включения и его форма считаются независимыми друг от друга. Пусть к границе S данного образца приложено постоянное электрическое поле \mathbf{E}_0 . Тензор диэлектрической проницаемости материала $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})$ является случайной кусочно-постоянной функцией координат:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \varepsilon_m \mathbf{I}, & \mathbf{r} \in V_m, \\ \boldsymbol{\varepsilon}_k, & \mathbf{r} \in V_k, \quad k = \overline{1, N}, \end{cases} \quad (1)$$

где ε_m – диэлектрическая проницаемость матрицы; V_m – объем, занимаемый матрицей; \mathbf{I} – единичный тензор 2-го ранга; $\boldsymbol{\varepsilon}_k, V_k$ – тензор диэлектрической проницаемости k -го включения и его объем соответственно; N – число включений в образце.

Уравнения электростатики $\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\rho$, $\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0$ и материальное уравнение $\mathbf{D} = \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{E}$ приводят к краевой задаче для потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ в данной среде ($\mathbf{E} = -\nabla\varphi$):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \nabla \varphi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}), \quad \varphi|_S = -(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\rho(\mathbf{r})$ – объемная плотность заряда.

Ставится задача вычислить тензор эффективной диэлектрической проницаемости гетерогенного материала $\boldsymbol{\varepsilon}_e$, связывающий средние значения векторов электрической индукции и напряженности электрического поля: $\langle \mathbf{D} \rangle = \boldsymbol{\varepsilon}_e \langle \mathbf{E} \rangle$.

В обобщенном приближении Максвелла–Гарнетта для $\boldsymbol{\varepsilon}_e$ получено выражение [9]

$$\boldsymbol{\varepsilon}_e = \left[(1-d)\varepsilon_m \mathbf{I} + d \langle \boldsymbol{\kappa}_k \rangle \right] \left[(1-d)\mathbf{I} + d \langle \boldsymbol{\lambda}_k \rangle \right]^{-1}, \quad (3)$$

где введены тензоры $\boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\kappa}_k$, связанные с конкретным включением:

$$\boldsymbol{\lambda}_k = \left[\mathbf{I} + (\varepsilon_m)^{-1} \mathbf{L}_k (\boldsymbol{\varepsilon}_k - \varepsilon_m \mathbf{I}) \right]^{-1}, \quad \boldsymbol{\kappa}_k = \boldsymbol{\varepsilon}_k \boldsymbol{\lambda}_k, \quad k = \overline{1, N},$$

здесь \mathbf{L}_k – тензор геометрических факторов эллипсоида.

Для упрощения выражений индекс k , привязанный к номеру включения, далее опустим. В силу совпадения главных осей тензора $\boldsymbol{\varepsilon}$ с осями эллипсоида главные значения тензоров $\boldsymbol{\lambda}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ вычисляются по формулам (ε'_j – главные значения тензора $\boldsymbol{\varepsilon}$):

$$\lambda'_j = \varepsilon_m (\varepsilon_m + L_j (\varepsilon'_j - \varepsilon_m))^{-1}, \quad \kappa'_j = \varepsilon'_j \lambda'_j, \quad j = 1, 2, 3, \quad (4)$$

где L_j – главные значения тензора \mathbf{L} (a_1, a_2, a_3 – полуоси эллипсоида):

$$L_j(a_1, a_2, a_3) = \frac{a_1 a_2 a_3}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(a_j^2 + q) [(a_1^2 + q)(a_2^2 + q)(a_3^2 + q)]^{1/2}}, \quad j = 1, 2, 3. \quad (5)$$

Усреднение тензоров $\boldsymbol{\lambda}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ в (3) проводится по всем включениям образца. В данном случае это усреднение по всем ориентациям и всем формам включений. Предполагая, что форма и ориентация включения независимы, усреднение можно проводить последовательно по ориентациям и по формам включений:

$$\langle \boldsymbol{\lambda} \rangle = \langle \langle \boldsymbol{\lambda} \rangle_o \rangle_f, \quad \langle \boldsymbol{\kappa} \rangle = \langle \langle \boldsymbol{\kappa} \rangle_o \rangle_f,$$

где $\langle \cdot \rangle_f$ – усреднение по формам; $\langle \cdot \rangle_o$ – усреднение по ориентациям включений.

Усреднение по ориентациям включений. Пусть система координат xuz связана с образцом композита. С каждым включением свяжем систему $\xi\eta\zeta$ осей его эллипсоида, тогда ориентация включения $g' \equiv g'(\psi', \theta', \varphi')$ в системе xuz (ψ', θ', φ' – углы Эйлера) – это поворот от xuz к $\xi\eta\zeta$. Усреднение тензоров $\boldsymbol{\lambda}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ по ориентациям включений в системе xuz проводится по формулам:

$$\langle \boldsymbol{\lambda} \rangle_o = \int_{SO(3)} \boldsymbol{\lambda} F(g') dg', \quad \langle \boldsymbol{\kappa} \rangle_o = \int_{SO(3)} \boldsymbol{\kappa} F(g') dg',$$

где $F(\psi', \theta', \varphi')$ – функция распределения включений по ориентациям (ФРО) [15]; интеграл по группе $SO(3)$ имеет вид

$$\int_{SO(3)} (\cdot) dg' \equiv \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\cdot) \sin \theta' d\psi' d\theta' d\varphi'.$$

Усредненные по ориентациям компоненты тензоров $\boldsymbol{\lambda}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ в системе xuz вычислены в [9] и после усреднения по формам принимают вид (нумерация индексов $l, j = 1, 2, 3$ компонент тензоров в системе xuz соответствует $x_1 \equiv x, x_2 \equiv y, x_3 \equiv z$) [13]:

$$\begin{aligned} \langle \langle \alpha_{ij} \rangle_o \rangle_f &= \langle A \rangle_f / 3 + (-1)^{j+1} \sum_{s=-2}^2 \langle \tilde{\alpha}'_s \rangle_f \int_{SO(3)} dg' F(g') [T_{-2,s}^2(g') + T_{2,s}^2(g') + (-1)^j \sqrt{2/3} T_{0,s}^2(g')], \quad j = 1, 2, \\ \langle \langle \alpha_{33} \rangle_o \rangle_f &= \langle A \rangle_f / 3 + \sqrt{8/3} \sum_{s=-2}^2 \langle \tilde{\alpha}'_s \rangle_f \int_{SO(3)} dg' F(g') T_{0,s}^2(g'), \\ \langle \langle \alpha_{12} \rangle_o \rangle_f &= i \sum_{s=-2}^2 \langle \tilde{\alpha}'_s \rangle_f \int_{SO(3)} dg' F(g') [T_{2,s}^2(g') - T_{-2,s}^2(g')], \\ \langle \langle \alpha_{j3} \rangle_o \rangle_f &= (-i)^{j-1} \sum_{s=-2}^2 \langle \tilde{\alpha}'_s \rangle_f \int_{SO(3)} dg' F(g') [T_{-1,s}^2(g') + (-1)^j T_{1,s}^2(g')], \quad j = 1, 2, \end{aligned} \quad (6)$$

где $A = \alpha'_1 + \alpha'_2 + \alpha'_3$; $\alpha_{ij}, \alpha'_j, \tilde{\alpha}'_m$ ($l, j = 1, 2, 3, m = -2, \dots, 2$) суть $\lambda_{ij}, \lambda'_j, \tilde{\lambda}'_m$, если вычисляются $\langle\langle \lambda_{ij} \rangle\rangle_o$, или $\kappa_{ij}, \kappa'_j, \tilde{\kappa}'_m$, если вычисляются $\langle\langle \kappa_{ij} \rangle\rangle_o$, определяемые формулами:

$$\begin{cases} \tilde{\lambda}'_{-2} = \tilde{\lambda}'_2 = (\lambda'_1 - \lambda'_2)/2, & \tilde{\lambda}'_0 = (2\lambda'_3 - \lambda'_1 - \lambda'_2)/\sqrt{6}, & \tilde{\lambda}'_{-1} = \tilde{\lambda}'_1 = 0, \\ \tilde{\kappa}'_{-2} = \tilde{\kappa}'_2 = (\kappa'_1 - \kappa'_2)/2, & \tilde{\kappa}'_0 = (2\kappa'_3 - \kappa'_1 - \kappa'_2)/\sqrt{6}, & \tilde{\kappa}'_{-1} = \tilde{\kappa}'_1 = 0; \end{cases} \quad (7)$$

$T_{ms}^l(g') \equiv T_{ms}^l(\psi', \theta', \varphi')$, $l = 0, 1, \dots$; $m, s = \overline{-l, l}$ – обобщенные сферические функции [16].

Рассмотрим осесимметричное распределение ориентаций при дополнительном условии независимости от угла φ' (θ' – угол между осями z и ζ), т.е. с ФРО вида

$$F(g'(\psi', \theta', \varphi')) = (8\pi^2)^{-1} f(\theta'). \quad (8)$$

Одномерная плотность $f(\theta')$ удовлетворяет условию нормировки $\int_0^{\pi/2} f(\theta') \sin \theta' d\theta' = 1$.

Тогда для компонент тензора $\langle\langle \lambda \rangle\rangle_o$ в системе xuz имеем выражения:

$$\begin{cases} \langle\langle \lambda_{11} \rangle\rangle_o = \langle\langle \lambda_{22} \rangle\rangle_o = (\langle\lambda'_1\rangle_f + \langle\lambda'_2\rangle_f)(1 + I_1)/4 + \langle\lambda'_3\rangle_f(1 - I_1)/2, \\ \langle\langle \lambda_{33} \rangle\rangle_o = (\langle\lambda'_1\rangle_f + \langle\lambda'_2\rangle_f)(1 - I_1)/2 + \langle\lambda'_3\rangle_f I_1, \end{cases} \quad (9)$$

где

$$I_1 = \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta' f(\theta') \sin \theta' d\theta'. \quad (10)$$

Для компонент тензора $\langle\langle \kappa \rangle\rangle_o$ имеют место аналогичные выражения. Подставляя полученные формулы в (3), найдем выражения для компонент тензора ϵ_e в системе xuz для распределения ориентаций вида (8):

$$\begin{cases} (\epsilon_e)_{11} = (\epsilon_e)_{22} = \frac{4(1-d)\epsilon_m + d[(\langle\kappa'_1\rangle_f + \langle\kappa'_2\rangle_f)(1 + I_1) + 2\langle\kappa'_3\rangle_f(1 - I_1)]}{4(1-d) + d[(\langle\lambda'_1\rangle_f + \langle\lambda'_2\rangle_f)(1 + I_1) + 2\langle\lambda'_3\rangle_f(1 - I_1)]}, \\ (\epsilon_e)_{33} = \frac{2(1-d)\epsilon_m + d[(\langle\kappa'_1\rangle_f + \langle\kappa'_2\rangle_f)(1 - I_1) + 2\langle\kappa'_3\rangle_f I_1]}{2(1-d) + d[(\langle\lambda'_1\rangle_f + \langle\lambda'_2\rangle_f)(1 - I_1) + 2\langle\lambda'_3\rangle_f I_1]}, & (\epsilon_e)_{ij} = 0, \quad i \neq j. \end{cases} \quad (11)$$

В качестве модели осесимметричного распределения рассматривается распределение рэлеевского типа с одномерной плотностью:

$$f(\theta') = \frac{1}{s^2} \frac{1}{\cos^3 \theta'} \exp\left(-\frac{\text{tg}^2 \theta'}{2s^2}\right), \quad 0 \leq \theta' \leq \frac{\pi}{2}, \quad (12)$$

где параметр s^2 играет роль величины разброса в ориентациях осей ζ включений, причем $\langle \text{tg} \theta' \rangle = \sqrt{\pi/2} s$, $\langle \text{tg}^2 \theta' \rangle = 2s^2$, $D[\text{tg} \theta'] = \frac{4-\pi}{2} s^2$ [10].

Методы усреднения по формам включений. Форма включений принимается случайной эллипсоидальной. Средней формой считается сфероидальная с отношением полуосей $a:a:c$. Величина третьей полуоси a_3 у всех включений фиксирована: $a_3 = c = \text{fixe}$, а полуоси a_1 и a_2 случайно отклоняются от среднего значения, равного a , т.е. $\langle a_1 \rangle = \langle a_2 \rangle = a$. В этом случае форма каждого включения задается случайным вектором, компоненты которого – относительные отклонения e_1, e_2 полуосей a_1, a_2 от их средних значений: $e_j = (a_j - a)/a$, $j=1, 2$. Очевидно, что $\langle e_1 \rangle = \langle e_2 \rangle = 0$. Дисперсии величин e_1, e_2 считаются малыми: $\langle e_j^2 \rangle \equiv \sigma_j^2 \ll 1$, $j=1, 2$; также считается, что e_1 и e_2 независимы, поэтому $\langle e_1 e_2 \rangle = 0$.

Как видно из (6) и (9), для усреднения компонент тензоров λ и κ в системе xuz по всем включениям нужно вычислить средние значения главных компонент тензоров λ и κ по форме, т.е. $\langle \lambda'_j \rangle_f, \langle \kappa'_j \rangle_f$, $j=1, 2, 3$. Рассмотрим и сравним два метода вычисления таких средних: аналитический метод и метод моделирования.

Аналитический метод учета случайности формы включений. Данный метод предложен в работе [13] и состоит в разложении геометрических факторов эллипсоида L_1, L_2, L_3 , а затем величин λ'_j, κ'_j ($j=1, 2, 3$) по степеням e_1, e_2 до 2-го порядка включительно с последующим усреднением. В итоге для $\langle \lambda'_j \rangle_f, \langle \kappa'_j \rangle_f$ получены выражения:

$$\langle \lambda'_j \rangle_f \approx \lambda_j^{\prime 0} [1 + z_j \sigma_1^2 + y_j \sigma_2^2], \quad \langle \kappa'_j \rangle_f = \varepsilon'_j \langle \lambda'_j \rangle_f, \quad j=1, 2, 3, \quad (13)$$

где

$$z_j = q_j^2 A_{j1}^2 - q_j B_{j1}, \quad y_j = q_j^2 A_{j2}^2 - q_j B_{j2}, \quad (14)$$

$$\lambda_j^{\prime 0} = \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_m + L_j^0 (\varepsilon'_j - \varepsilon_m)}, \quad q_j = \frac{\varepsilon'_j - \varepsilon_m}{\varepsilon_m + L_j^0 (\varepsilon'_j - \varepsilon_m)}, \quad L_j^0 = L_j(a, a, c), \quad (15)$$

$$A_{11} = A_{22} = \frac{a^2 c}{2} J_2 - \frac{3}{2} a^4 c J_3, \quad A_{12} = A_{21} = \frac{a^2 c}{2} J_2 - \frac{1}{2} a^4 c J_3, \quad A_{31} = A_{32} = \frac{a^2 c}{2} \tilde{J}_1 - \frac{1}{2} a^4 c \tilde{J}_2, \\ B_{11} = B_{22} = \frac{15}{4} a^6 c J_4 - \frac{9}{4} a^4 c J_3, \quad B_{12} = B_{21} = \frac{3}{4} a^4 c (a^2 J_4 - J_3), \quad B_{31} = B_{32} = \frac{3}{4} a^4 c (a^2 \tilde{J}_3 - \tilde{J}_2), \quad (16)$$

$$J_n = \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)^n (c^2 + q)^{1/2}}, \quad \tilde{J}_n = \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)^n (c^2 + q)^{3/2}}.$$

Метод моделирования случайности формы включений. Метод учета случайности формы основан на моделировании гетерогенного материала с несколькими видами включений. Если материал содержит M видов включений, каждый со своими параметрами и распределением ориентаций, то тензор ε_e будет вычисляться по формуле, обобщающей (3) на этот случай [16]:

$$\varepsilon_e = \left[\left(1 - \sum_{p=1}^M d_p \right) \varepsilon_m \mathbf{I} + \sum_{p=1}^M d_p \langle \kappa^p \rangle \right] \cdot \left[\left(1 - \sum_{p=1}^M d_p \right) \mathbf{I} + \sum_{p=1}^M d_p \langle \lambda^p \rangle \right]^{-1}, \quad (17)$$

где индекс p показывает, что величина относится к данному виду включений, угловые скобки означают усреднение по всем включениям p -го вида.

В данном методе непрерывное распределение величин e_1, e_2 аппроксимируется дискретным распределением путем разбиения квадрата $-1 < e_1, e_2 < 1$ на $(2n+1)^2$ ячеек и задания каждой ячейке относительной доли включений с отклонениями полуосей, лежащими внутри данной ячейки. При этом, если ячейка (k_1, k_2) содержит относительную долю d_{k_1, k_2} включений, принимается, что все они имеют относительные отклонения, равные координатам центра ячейки, т.е.

$$e_1 = 2k_1/(2n+1), \quad e_2 = 2k_2/(2n+1). \quad (18)$$

Сумма относительных долей включений по всем ячейкам равна 1, т.е. $\sum_{k_1=-n}^n \sum_{k_2=-n}^n d_{k_1, k_2} = 1$. Пусть суммарная объемная доля всех включений равна d , тогда формула (17) может быть применена для данной модели в виде [14]

$$\boldsymbol{\varepsilon}_e = \left[(1-d)\boldsymbol{\varepsilon}_m \mathbf{I} + d \sum_{k_1=-n}^n \sum_{k_2=-n}^n d_{k_1, k_2} \langle \mathbf{k}^{k_1, k_2} \rangle_o \right] \cdot \left[(1-d)\mathbf{I} + d \sum_{k_1=-n}^n \sum_{k_2=-n}^n d_{k_1, k_2} \langle \boldsymbol{\lambda}^{k_1, k_2} \rangle_o \right]^{-1}, \quad (19)$$

здесь \mathbf{k}^{k_1, k_2} и $\boldsymbol{\lambda}^{k_1, k_2}$ – тензоры включений с относительными отклонениями полуосей (18).

Усреднение в (19) проводится по ориентациям данного типа включений. Если все виды включений имеют распределение ориентаций с ФРО вида (8), то усредненные по ориентациям тензоры $\langle \boldsymbol{\lambda}^{k_1, k_2} \rangle_o$ одноосные с главными значениями:

$$\begin{cases} \langle \lambda_{11}^{k_1, k_2} \rangle_o = \langle \lambda_{22}^{k_1, k_2} \rangle_o = (\lambda'_1)^{k_1, k_2} + (\lambda'_2)^{k_1, k_2} (1+I_1)/4 + (\lambda'_3)^{k_1, k_2} (1-I_1)/2, \\ \langle \lambda_{33}^{k_1, k_2} \rangle_o = (\lambda'_1)^{k_1, k_2} + (\lambda'_2)^{k_1, k_2} (1-I_1)/2 + (\lambda'_3)^{k_1, k_2} I_1, \end{cases} \quad (20)$$

где $(\lambda'_j)^{k_1, k_2}$, $j=1,2,3$ – главные значения тензоров $\boldsymbol{\lambda}^{k_1, k_2}$; I_1 определяется формулой (10). Для компонент тензора $\langle \mathbf{k}^{k_1, k_2} \rangle_o$ имеют место аналогичные формулы.

Сравнение результатов моделирования частотных диэлектрических характеристик пористого кремния, полученных двумя методами. По формулам (11), (13)–(16) (аналитический метод) и (19), (20) (метод моделирования материала с несколькими видами включений) рассчитывались частотные диэлектрические характеристики пористого кремния с волокнистой или слоистой структурой в системе $\mu\text{жз}$ в диапазоне частот 10^3 – 10^8 Гц. В силу малой объемной доли кремния в материале он рассматривался как включения, а матрицей считался воздух. Зависимость диэлектрической проницаемости кремния от частоты электромагнитного поля на низких частотах имеет вид $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_s + i4\pi\sigma_s/\omega$, где $\sigma_s = 0,435 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ – статическая проводимость кремния; $\varepsilon_s = 11,7$ – статическая диэлектрическая проницаемость [17]. Пористый кремний с волокнистой структурой моделировался включениями случайной эллипсоидальной формы с небольшим разбросом вокруг средней сильно вытянутой сфероидальной формы. Материал со слоистой структурой моделировался включениями с малым отклонением от средней сильно сжатой сфероидальной формы. Ориентации включений считались распределенными по осесимметричному закону с ФРО вида (8) с одномер-

ной плотностью (12) при различных величинах разброса s^2 . Распределение относительных отклонений e_1, e_2 полюсей включений считалось нормальным с дисперсиями σ_1^2, σ_2^2 . Связующие перегородки между волокнами или слоями в материале не учитывались.

Цель моделирования – сравнение результатов, полученных двумя методами, и оценка границ применимости аналитического метода в зависимости от дисперсий величин e_1, e_2 и от параметров, характеризующих среднюю форму включений. Некоторые результаты вычислений приведены на рис.1–4.

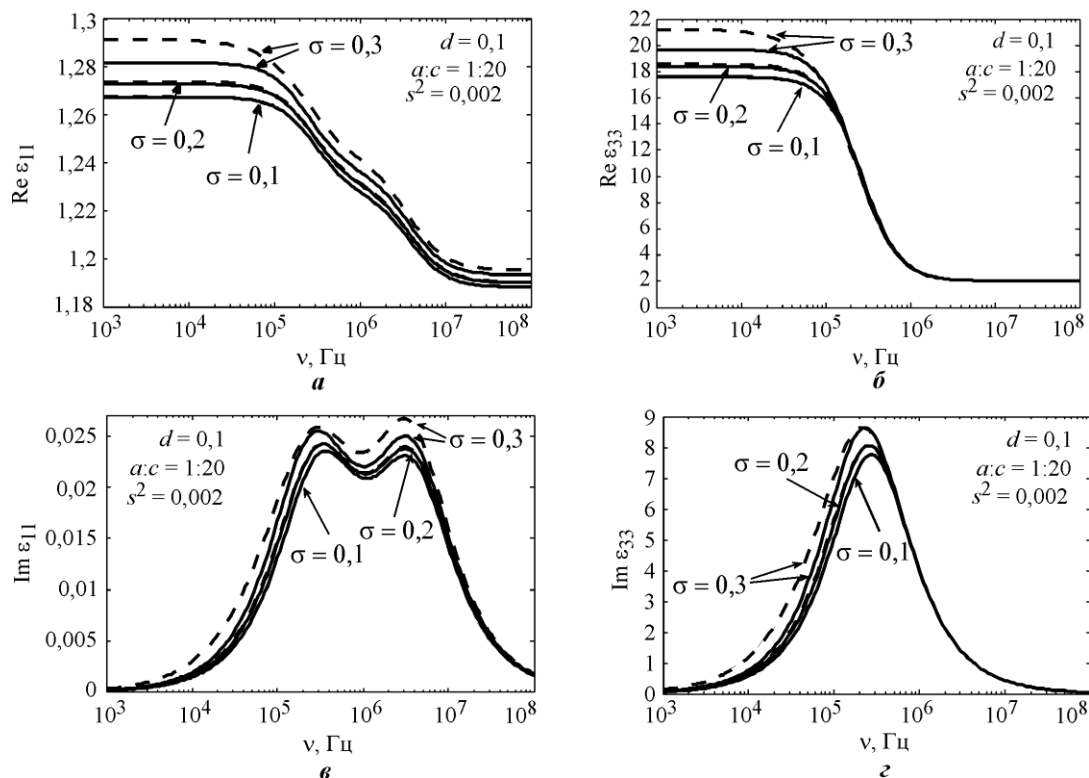


Рис.1. Частотные характеристики действительных (а, б) и мнимых (в, г) частей компонент $(\epsilon_e)_{11}$ (а, в) и $(\epsilon_e)_{33}$ (б, г) эффективной диэлектрической характеристики модели пористого кремния с волокнистой структурой при различных разбросах в формах включений: сплошные кривые – аналитический метод; штриховые – моделирование

Как можно видеть из графиков, представленных на рис.1, 2, 4, при малых разбросах в формах включений ($\sigma_1, \sigma_2 \leq 0,08$) аналитический метод и метод моделирования дают очень близкие результаты. При любых аспектных соотношениях средней формы включений относительная разность при вычислении эффективных диэлектрических характеристик в диапазоне частот 1 кГц – 100 МГц не превышает 0,1%. При увеличении разброса в формах расхождение в результатах, полученных разными методами, увеличивается. Это объясняется увеличением членов, по степеням которых ведется разложение в процедуре аналитического метода, следовательно, увеличивается остаток ряда, которым пренебрегают. Учитывая этот факт, а также то, что за счет увеличения количества ячеек, на которые разбивается область изменения относительных отклонений полюсей включений, метод моделирования может быть как угодно точным в пределах точности, обеспечиваемой квазистатическим приближением Максвелла–Гарнетта. Разность между результатами двух рассмотренных методов можно трактовать как погрешность аналитического метода.

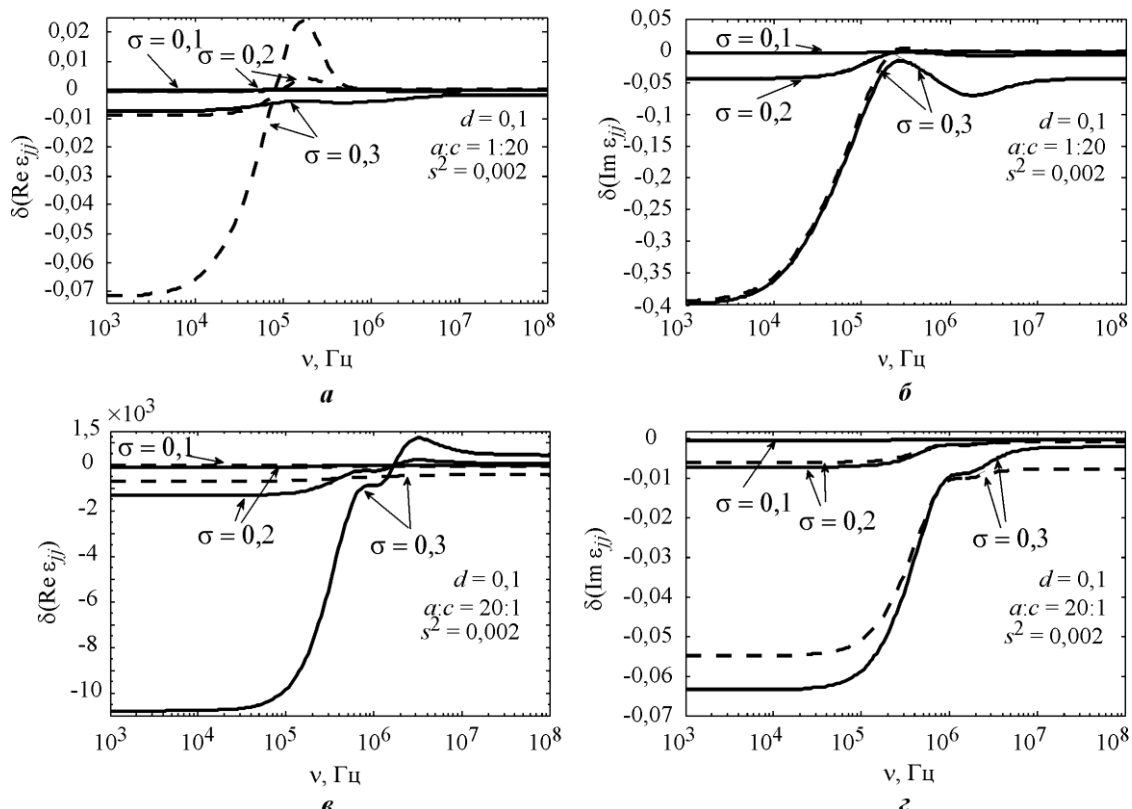


Рис.2. Частотные зависимости относительной разности результатов аналитического метода и метода моделирования при вычислении действительных (а, в) и мнимых (б, г) частей компонент $(\epsilon_e)_{11}$ (сплошные кривые) и $(\epsilon_e)_{33}$ (штриховые кривые) для моделей пористого кремния при различных разбросах в формах включений

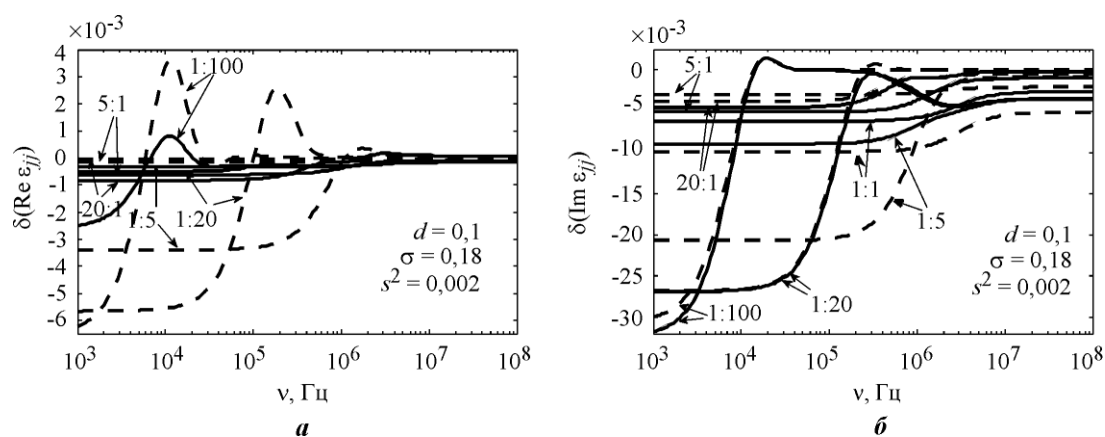


Рис.3. Частотные зависимости относительной разности результатов аналитического метода и метода моделирования при вычислении действительных (а) и мнимых (б) частей компонент $(\epsilon_e)_{11}$ (сплошные кривые) и $(\epsilon_e)_{33}$ (штриховые кривые) для моделей пористого кремния при различных аспектных соотношениях $a:c$ средней формы включений

Одной из характерных особенностей представленных на рис.2 и 3 частотных зависимостей является то, что наибольшее значение относительная погрешность аналитического метода имеет на низких частотах. Это объясняется тем, что диэлектрическая проницаемость кремния на низких частотах имеет очень большую мнимую часть: $\text{Im}(\epsilon(\omega)) = 4\pi\sigma_s/\omega$, поскольку проводимость σ_s при использовании данной формулы

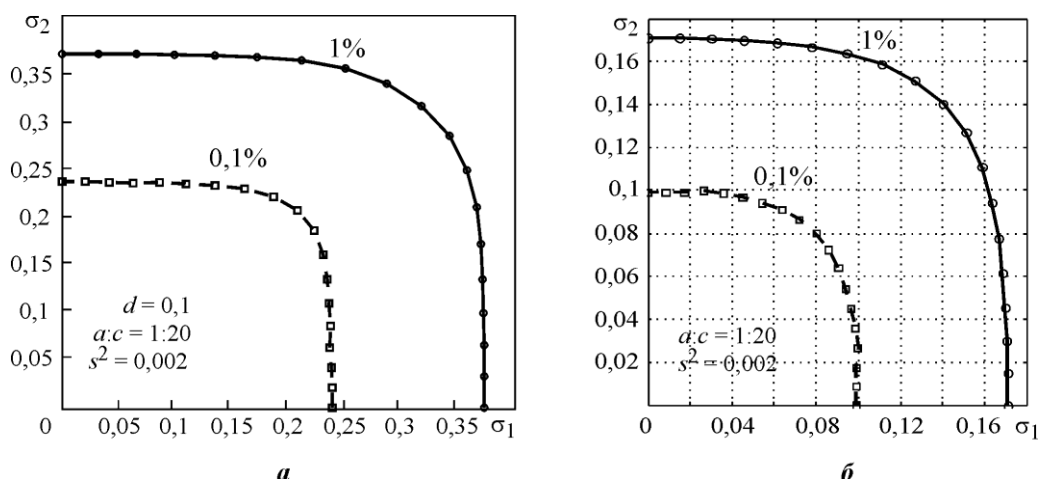


Рис.4. Области на плоскости параметров σ_1 , σ_2 , в которых относительные отклонения действительных (а) и мнимых (б) частей компоненты $(\epsilon_e)_{11}$ эффективной диэлектрической проницаемости для модели пористого кремния с волокнистой структурой в диапазоне 1 кГц – 100 МГц, вычисленных аналитическим методом, не превышают 0,1 или 1%

берется в единицах системы СГС, т.е. значение $0,435 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ должно умножаться на $(4\pi\epsilon_0)^{-1} \approx 9 \cdot 10^9$. Отсюда следует, что на низких частотах член, по которому ведется разложение в процедуре аналитического метода, стремится к своему максимальному значению (при фиксированных величинах разброса в формах). Следовательно, максимальное значение имеет и погрешность из-за пренебрежения остатком ряда.

Анализируя приведенные на рис.3 и 4 частотные зависимости, отметим, что относительная погрешность аналитического метода зависит от аспектного отношения $a:c$ средней формы включений. Наибольшее различие в результатах имеет место при сильно вытянутой средней форме включений, т.е. при $a:c \leq 1:20$, причем мнимые части диэлектрических характеристик отличаются в большей степени, чем действительные.

Заключение. Для оценки влияния случайности формы включений на диэлектрические характеристики гетерогенных материалов в переменном электромагнитном поле можно использовать оба предложенных метода, каждый из которых имеет свои достоинства и недостатки. Недостатком аналитического метода является рост его погрешности с увеличением разброса форм включений. Тем не менее при разбросе в формах $\sigma_1, \sigma_2 \leq 0,14$ относительная погрешность не превышает 1% в диапазоне 1 кГц – 100 МГц. Преимуществом аналитического метода является очень низкая вычислительная ресурсоемкость с точки зрения времени и объема требуемой памяти. В частности, при расчете характеристик материала с очень вытянутыми включениями метод моделирования требует в несколько сотен раз больше компьютерного времени, чем аналитический метод. Метод моделирования можно применять при любых геометрически допустимых разбросах в формах.

Рассмотренные методы могут быть применены при создании материалов с желаемыми физическими свойствами, а также в геофизике при анализе результатов диэлектрической спектроскопии. Также следует отметить, что в отличие от аналитического метода моделирования может быть применен для вычисления оптических характеристик композитов с диэлектрической матрицей и металлическими включениями случайной формы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 13-08-00672-а, № 14-08-00654-а).

Литература

1. *Milton G.* The theory of composites. – Cambridge: Cambridge University Press, 2004. – 719 p.
2. *Фокин А.Г.* Макроскопическая проводимость случайно-неоднородных сред. Методы расчета // УФН. – 1996. – Т. 166. – № 10. – С. 1069–1093.
3. Энергетический подход при моделировании формирования текстуры в поликристаллах под влиянием внешних напряжений / *В.И. Колесников, И.И. Чекакина, В.В. Бардушкин и др.* // Вестник Южного научного центра РАН. – 2008. – Т. 4. – № 3. – С. 3–8.
4. *Лавров И.В.* Эффективная проводимость поликристаллической среды в случае слабой макроскопической анизотропии // Изв. вузов. Электроника. – 2012. – № 4. – С. 3–12.
5. *Dias-Guilera A., Tremblay A.-M. S.* Random mixtures with orientational order, and the anisotropic resistivity tensor of high-Tc superconductors // J. Appl. Phys. – 1991. – Vol. 69. – N 1. – P.379–383.
6. *Lavrov I.V.* Effective conductivity of a polycrystalline medium. Uniaxial texture and biaxial crystallites // Semiconductors. – 2011. – Vol. 45. – № 13. – P. 1621–1627.
7. *Giordano S.* Equivalent permittivity tensor in anisotropic random media // J. Electrostat. – 2006. – Vol. 64. – P. 655–663.
8. *Иванов Е.Н., Лавров И.В.* Теория диэлектрической проницаемости композиционных материалов с текстурой. Ч.1 // Оборонный комплекс – научно-техническому прогрессу России. – 2007. – №1. – С. 73–78.
9. *Лавров И.В.* Диэлектрическая проницаемость композиционных материалов с текстурой: эллипсоидальные анизотропные кристаллиты // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. – 2009. – №1. – С. 52–58.
10. *Лавров И.В., Завгородняя М.И.* Оптические свойства текстурированных нанокомпозитов с металлическими эллипсоидальными включениями // Оборонный комплекс – научно-техническому прогрессу России. – 2013. – №3. – С. 48–55.
11. *Protsenko I.E., Zaimidoroga O.A., Samoilo V.N.* Heterogeneous medium as a filter of electromagnetic radiation // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. – 2007. – Vol.9. – P. 363–368.
12. *Koledintseva M. Y., DuBroff R. E., Schwartz R. W., Drewniak J. L.* Double statistical distribution of conductivity and aspect ratio of inclusions in dielectric mixtures at microwave frequencies // PIER. – 2007. – Vol. 77. – P. 193–214.
13. *Завгородняя М.И., Лавров И.В., Фокин А.Г.* Аналитический подход к вычислению эффективных диэлектрических характеристик гетерогенных текстурированных материалов со случайной формой включений // Изв. вузов. Электроника. – 2014. – №5. – С. 3–14.
14. *Завгородняя М.И., Лавров И.В.* Моделирование диэлектрических свойств текстурированных композитов со случайной формой включений // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения: материалы междунар. науч.-техн. конф. «INTERMATIC – 2012» / Под ред. акад. РАН А.С. Сигова. – М.: МГТУ МИРЭА – ИРЭ РАН, 2012. – Ч. 2. – С.13–16.
15. *Боровков М.В., Савелова Т.И.* Нормальные распределения на SO(3). – М.: МИФИ, 2002. – 96 с.
16. *Гельфанд И.М., Минлос Р.А., Шапиро З.Я.* Представления группы вращений и группы Лоренца. – М.: ГИФМЛ, 1958. – 294 с.
17. Физические величины: справочник / Под ред. *И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова.* – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

Статья поступила
13 апреля 2015 г.

Завгородняя Марина Игоревна – магистрант факультета экспериментальной и теоретической физики Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». *Область научных интересов:* теоретические методы исследования физических свойств неоднородных сред.

Лавров Игорь Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики № 2 МИЭТ. *Область научных интересов:* теоретические методы исследования физических свойств неоднородных сред.
E-mail: iglavr@mail.ru