



## СИНЕРГЕТИКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АНАЛИЗА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

*С. А. Корчагин<sup>1</sup>, Д. В. Терин<sup>1,2</sup>, С. П. Романчук<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Энгельсский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО  
«Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина»

<sup>2</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Авторами предложен комплексный подход для анализа композиционных материалов, включающий в себя фундаментальные модели нелинейной динамики, модель эффективной среды и теорию электрических цепей. Рассмотрен композит, состоящий из сферических включений в матрице. Проведено моделирование композиционного материала различными методами.

*Ключевые слова:* Композиционные материалы, математическое моделирование, синергетика, модель эффективной среды, нелинейная динамика, электронные эквивалентные схемы.

### Введение

В настоящее время разработка и проектирование современных конструктивных и функциональных материалов является одной из важнейших приоритетных задач. Композиционные материалы применяются во многих областях человеческой деятельности, в том числе в электронике и электротехнике для создания конденсаторов, силовых резисторов, сенсоров, ячеек памяти и других устройств. Уникальность композитов состоит в том, что можно заранее спроектировать материал таким образом, чтобы придать изделию из него свойства, необходимые для конкретной области применения. Определение характеристик объекта исследования во многих случаях является затруднительным, трудоемким и дорогостоящим. Поэтому математическое и компьютерное моделирование в данной области является актуальной задачей [1]. Особое внимание при создании материалов с заданными свойствами следует уделять эволюции динамической системы. Нередко временная эволюция системы при формировании материала оказывается настолько значимой, что возникает необходимость использовать различные временные и параметрические диаграммы [2].

Кроме того, в процессе проектирования материала нельзя упускать из виду, что различные эффекты (термодинамические, кинетические, электромагнитные и т.д.) взаимосвязаны, хотя наличие такой взаимосвязи не всегда означает возможность управления ею. При моделировании таких систем удобным оказывается междисциплинарный подход, позволяющий объединить фундаментальные модели нелинейной динамики, эффективной среды и теорию электрических цепей в применении к химии материалов.

### 1. Модель эффективной среды

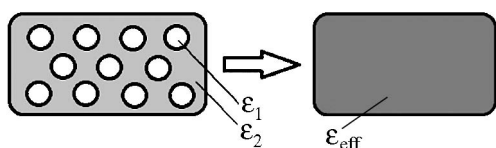


Рис. 1. Схематическое изображение эффективной среды

Важную роль в физике композитных сред играет так называемая модель эффективной среды [3]. Суть модели заключается в том, что совокупность кластеров, из которых состоит композит, рассматривается как некая новая среда, обладающая тем же уровнем поляризации (рис. 1).

Таким образом, зная параметры каждого из компонентов композита, их геометрическую форму и концентрацию, можно определить характеристики полученной композиционной среды как целого. Преимуществом данного подхода является то, что для анализа распространения излучения в композитной среде нет необходимости решать уравнения Максвелла в каждой точке пространства. В качестве моделей эффективной среды наиболее широко применяются модели Рэлея, Максвелла, Максвелл-Гарнетта, Бруггемана (см. таблицу). Авторами разработан программный

Таблица

Название	Модель
Рэлея (1 вариант)	$\varepsilon = \varepsilon_m \left[ 1 + \frac{v}{\frac{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m}{\varepsilon_p - \varepsilon_m} - v - 1,65 \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_p + 4/3\varepsilon_m} v^{10/3}} \right]$
Рэлея (2 вариант)	$\varepsilon = \varepsilon_m \left[ 1 + \frac{v}{\frac{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m}{\varepsilon_p - \varepsilon_m} - v - 1,31 \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_p + 4/3\varepsilon_m} v^{10/3}} \right]$
Максвелла	$\frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{3\varepsilon_m} = \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m} v, \quad \varepsilon = \varepsilon_m \left[ 1 + \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{2\varepsilon_m + \varepsilon_p} 3v \right]$
Максвелл-Гарнетта	$\frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} = \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m} v, \quad \varepsilon = \frac{2\varepsilon_m^2 (1 - v) + \varepsilon_m \varepsilon_p (1 + 2v)}{\varepsilon_m (2 + v) + \varepsilon_p (1 - v)}$ Условие применимости: $v < \frac{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m}{ \varepsilon_p - \varepsilon_m }$
Бруггемана	$\frac{\varepsilon_m - \varepsilon}{\varepsilon_m + 2\varepsilon} v_m + \frac{\varepsilon_p - \varepsilon}{\varepsilon_p + 2\varepsilon} v_p = 0$ $2\varepsilon^2 + \varepsilon (\varepsilon_p - 2\varepsilon_m + 3v(\varepsilon_m - \varepsilon_p)) - \varepsilon_m \varepsilon_p = 0$

Здесь  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость смеси;  $\varepsilon_m$  – диэлектрическая проницаемость матрицы;  $\varepsilon_p$  – диэлектрическая проницаемость включений;  $v$  – объемная доля включений

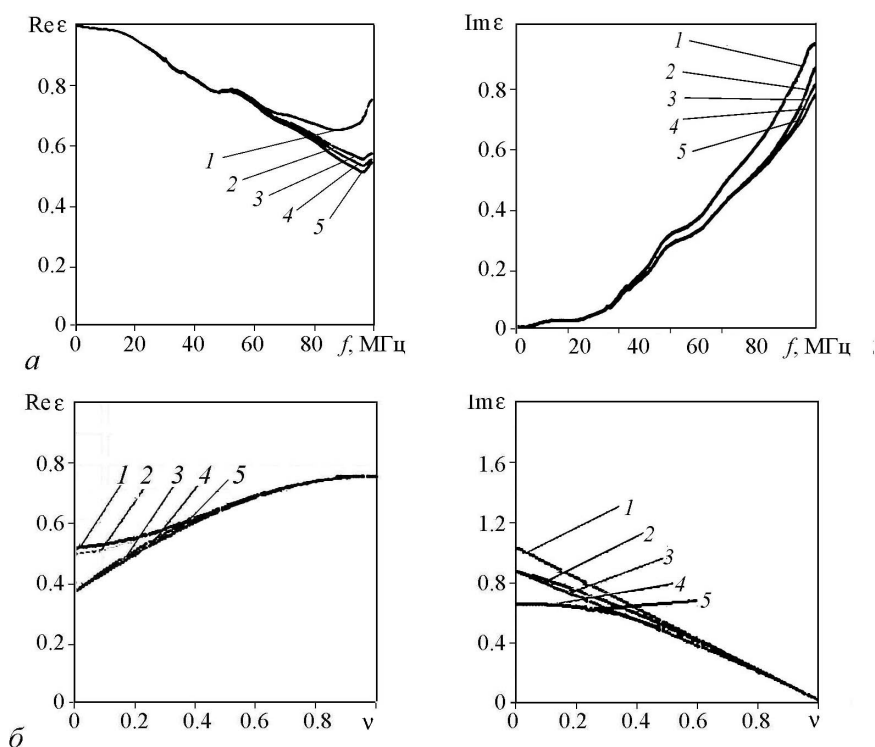


Рис. 2. Частотные зависимости комплексной диэлектрической проницаемости композита (а) и зависимости от объёмной доли включений углерода в матрице кремния (б), построенные по приведенным в таблице формулам: 1 – формула Рэля (1 вариант), 2 – формула Рэля (2 вариант), 3 – формула Максвелла, 4 – формула Максвелл-Гарнетта/Винера, 5 – формула Бруггемана/Бетчера (1 вариант)

комплекс [4], позволяющий проектировать композитные среды и прогнозировать их характеристики с наперед заданными свойствами компонентов, опираясь на приведенные ниже модели.

Проведено моделирование композиционного материала, состоящего из кремния (в качестве матрицы) с включениями углерода. Интерес к таким композиционным материалам вызван возможностью различных практических применений, например, при изготовлении деталей химической и металлургической аппаратуры, работающей в области высоких температур, а также в электронике при создании варисторов, вентилях разрядников, высокотемпературных тиристоров [5].

В программном пакете [4], разработанном авторами, построены графики зависимостей действительной и мнимой части диэлектрической проницаемости композиционного материала от частоты внешнего электромагнитного воздействия в диапазоне от 1 до 100 МГц при объемной доле углерода 29% и от объемной доли включений (рис. 2).

## 2. Метод электрических эквивалентных схем

Во многих случаях для анализа композитной среды удобным оказывается использование метода эквивалентных схем, при котором электрическая, механическая и магнитная составляющие композита представляются в виде электрических эквивалентов [6]. Представим композит матрицей (рис. 3), каждая ячейка которой

$Z$  – последовательно соединенные слои проводящего материала и диэлектрика. В зависимости от физических свойств ячейка может быть представлена той или иной эквивалентной схемой, относящейся к электрической цепи [7]. Построим эквивалентные схемы композита, состоящего из случайно расположенных шаровых включений в матрице.

Рассмотрим случай, когда в веществе возможны только два механизма поляризации с временами релаксации  $\tau_1 \ll \tau_2$ . В таком случае, с увеличением частоты диэлектрическая проницаемость уменьшается от статистической  $\varepsilon_s$  до высокочастотной  $\varepsilon_v$ . Эквивалентная схема замещения композита будет выглядеть следующим образом (рис. 4, а).

Поляризация с временем релаксации  $\tau_1$  учитывается конденсатором  $C_1$ . Потери энергии электромагнитного поля при электронной поляризации пренебрежем. Емкость конденсатора  $C_1$  пропорциональна высокочастотной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_v$ . Последовательно соединенные конденсатор  $C_2$  и резистор  $R_1$  описывают поляризации с характерным временем релаксации  $\tau_2$ . Резистор  $R_1$  учитывает

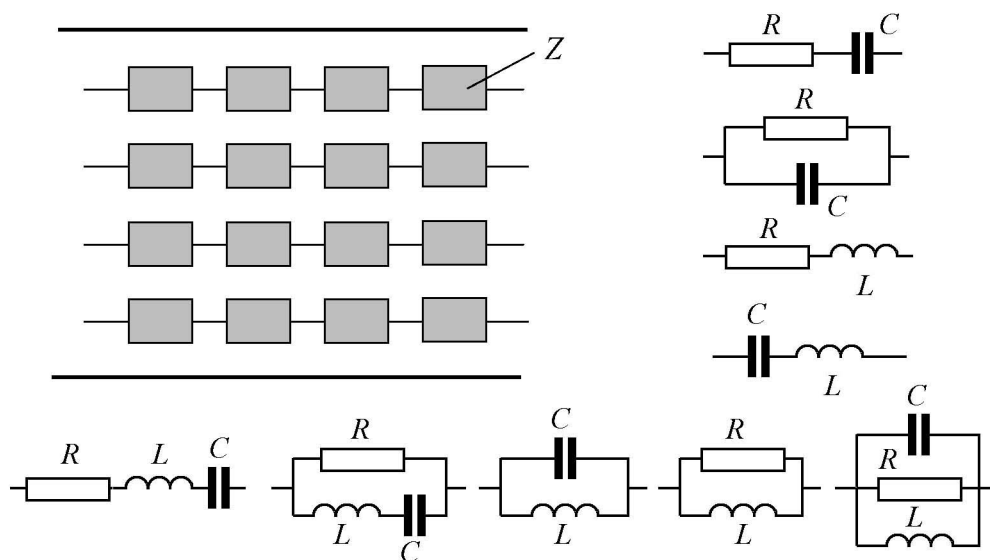


Рис. 3. Эквивалентные схемы включений в матрице

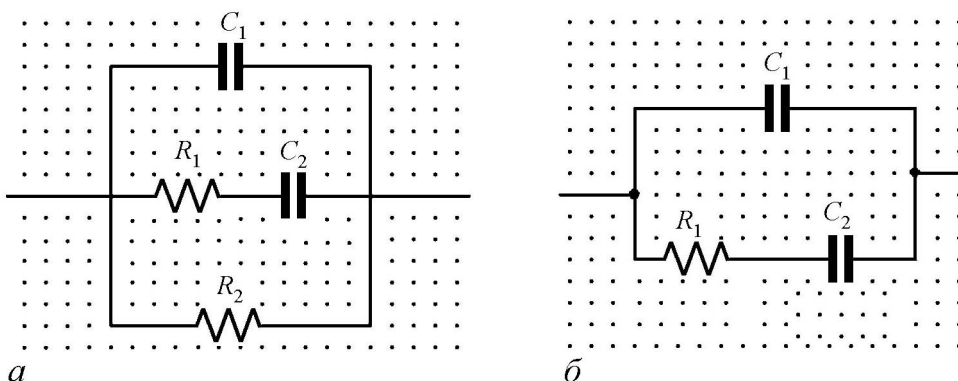


Рис. 4. Эквивалентные схемы замещения композита для механизма поляризации с временем релаксации  $\tau_1 \ll \tau_2$

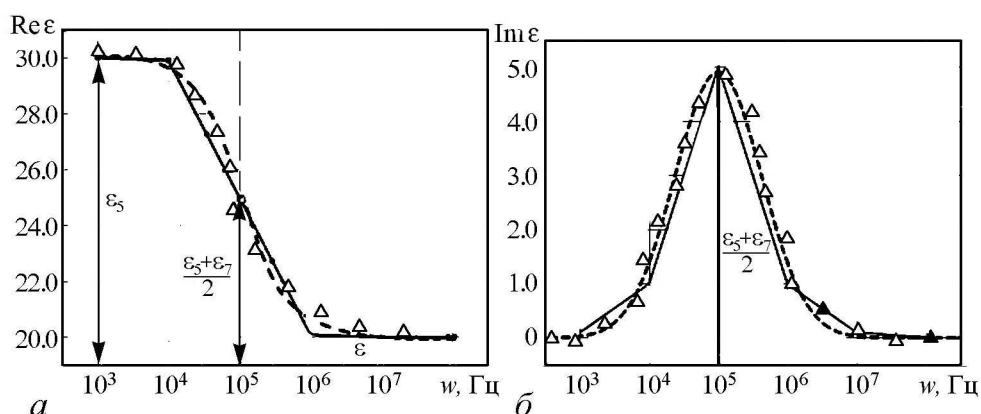


Рис. 5. Зависимость действительной (а) и мнимой (б) частей диэлектрической проницаемости от частоты: рассчитанная по эквивалентной схеме (сплошная линия); на основе решения волнового уравнения (штриховая линия);  $\Delta$  – экспериментальные значения

диэлектрические потери, связанные с поляризацией. Емкость конденсатора  $C_2$  пропорциональна разности между статической диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_s$  и высокочастотной  $\epsilon_v$  ( $\omega \gg 1/\tau_2$ ). Сквозная проводимость композита учитывается резистором  $R_2$ . Допустим, что  $R_2 \rightarrow \infty$ , в таком случае можно пренебречь потерями энергии переменного тока и воспользоваться эквивалентной схемой рис. 4, б. Для расчета  $\text{Re } \epsilon = \epsilon'$  и  $\text{Im } \epsilon = \epsilon''$  в случае диэлектрика без сквозной проводимости можем воспользоваться формулами Дебая [8]

$$\epsilon' = \epsilon_s + \frac{\epsilon_s - \epsilon_v}{1 + (\omega\tau_2)^2}, \quad \epsilon'' = \omega\tau_2 \frac{\epsilon_s - \epsilon_v}{1 + (\omega\tau_2)^2} \quad (1)$$

где  $\tau_2$  – время релаксации поляризации, проходящей по второму механизму.

Построены графики зависимости мнимой и действительной частей диэлектрической проницаемости от частоты для образца керамики со следующими значениями параметров:  $\epsilon_s = 15$ ,  $\epsilon_v = 10$ ,  $\tau = 0.01$  (рис.5).

Метод эквивалентных схем имеет определенные преимущества по сравнению с непосредственным решением волнового уравнения, которые заключаются в возможности привлечения эффективных методов теории электрических цепей, а также в том, что частично задача решается уже на этапе ее постановки. Применение метода эквивалентных схем может дать такие же точные результаты, как и непосредственное решение волнового уравнения. Если при этом исходные условия задачи для обоих методов совпадают, то эквивалентная схема может рассматриваться как точное представление композиционного материала в одномодовом приближении.

### 3. Фундаментальные модели нелинейной динамики применительно к композиционным материалам

Революционные изменения, проходящие в настоящее время в химии и технологии материалов, тесно связаны с изменением фундаментальных представлений о пространственно-временной эволюции последних [9].

При разработке и проектировании новых материалов особую роль играют процессы самоорганизации в физико-химических системах, как правило, эволюцио-

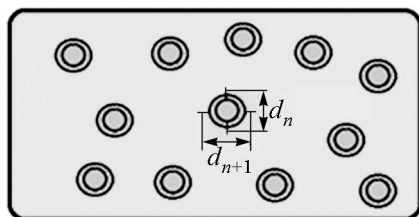


Рис. 6. Схема композиционного материала с шаровыми включениями в матрице

Эволюция включений описывается одномерным отображением

$$d_{n+1} = \mu \cos d_n + \varphi, \quad (2)$$

где  $d$  – диаметр включений;  $\mu, \varphi$  – параметры, характеризующие нелинейность системы (зависят от характера электромагнитного воздействия, термодинамических, кинетических факторов). Примеры систем, описываемых уравнением (2), рассмотрены в работах [2, 10–13].

Построена карта динамических режимов, по осям которой находятся параметры  $\mu, \varphi$ . Для каждого цикла периода построены соответствующие итерационные диаграммы (рис. 7).

Полученные результаты позволяют наблюдать интересные особенности динамики исследуемой системы, такие как бифуркации удвоения периода, области хаоса, квазипериодических движений, линии циклов максимальной устойчивости. Эволюция рассматриваемой системы является чувствительной к начальным условиям. Параметры, характеризующие нелинейность системы, являются основообразующими,

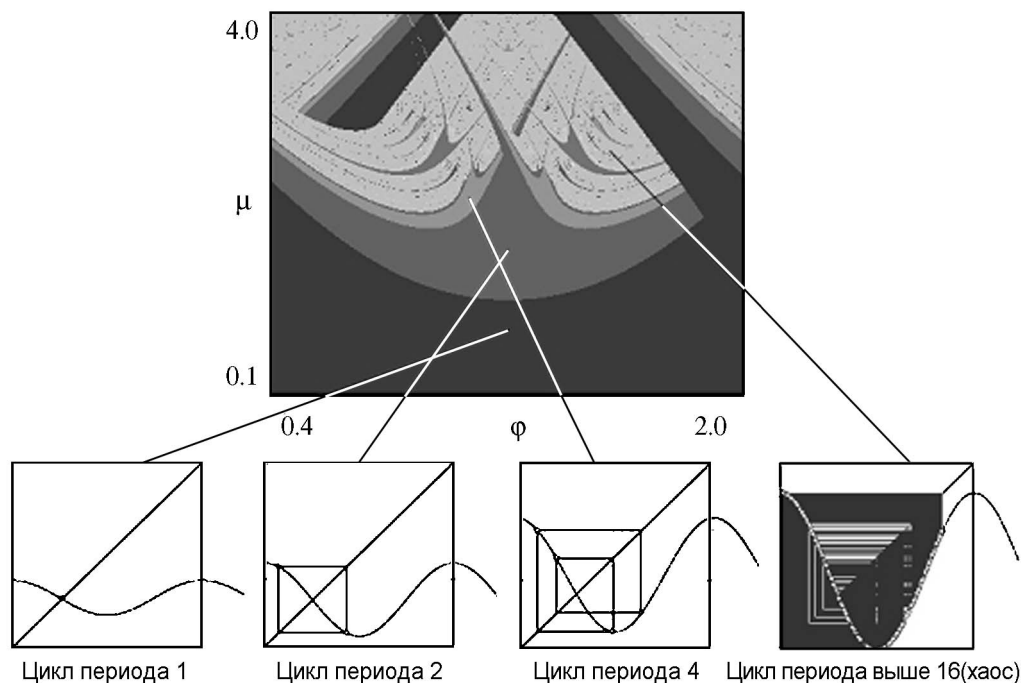


Рис. 7. Карта динамических режимов системы, описываемой отображением (2)

незначительное изменение которых может качественно влиять на динамику формирования композиционного материала и, как следствие, на изменение его функциональных и конструкционных свойств. Другие примеры применимости моделей нелинейных динамических систем в области композиционных материалов можно найти в работах [2, 14, 15]. Таким образом, опираясь на модели нелинейной динамики, материаловеды, связанные с созданием совершенно разных материалов, в действительности имеют возможность выделить единый алгоритм описания сложных физико-химических систем, позволяющий контролировать происходящие в них процессы эволюции на пути от прекурсоров к целевым твердофазным продуктам.

### Выводы

На сегодняшний день разработка и синтез новых поколений материалов развивается довольно высокими темпами. Мировое научное сообщество проявляет особый интерес к данной области. Об этом свидетельствует рост количества публикаций по текущей тематике и проведение крупнейших научных конференций в сфере композиционных материалов, таких как «SAMPE China» (Китай), «Композит» (Россия), «ACS Nano» (США), «TICEAS» (Япония) и прочие. Это связано с острой потребностью общества в современных высокотехнологичных материалах. Как уже было отмечено, математическое и компьютерное моделирование на данном этапе играет существенную роль. На примере композита со сферическими включениями в матрице авторами был показан комплексный подход, включающий в себя фундаментальные модели нелинейной динамики, модель эффективной среды и теорию электрических эквивалентов. Показаны достоинства методов для выполнения той или иной задачи на примере композита кремния с включениями углерода. С использованием моделей эффективной среды смоделирована зависимость действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости от длины волны воздействия внешнего поля. Построены графики зависимостей комплексной диэлектрической проницаемости от доли включений углерода в матрице кремния. Методом электронных эквивалентных схем смоделирована зависимость комплексной диэлектрической проницаемости от частоты внешнего воздействия. Проведено сравнение результатов моделирования указанным методом с результатами, полученными на основе прямого решения волнового уравнения и эксперимента. Рассмотрена динамическая система эволюции шаровых включений в матрице композита, описываемая отображением (2). Для анализа динамической системы построена карта динамических режимов, позволяющая наблюдать интересные особенности динамики приведенной системы применительно к композиционному материалу. Междисциплинарный подход моделирования исследуемого объекта позволяет получить более подробную информацию о композите и учесть возможные взаимосвязи.

### Библиографический список

1. *Никитин А.С.* Перспективы применения композиционных материалов // Экономика и жизнь. 2012. Янв.(№ 4). С. 6.
2. *Третьяков Ю.Д.* Процессы самоорганизации в химии материалов //Успехи химии. 2003, № 72 (8). С. 731.

3. *Виноградов А.П.* Электродинамика композитных материалов. М.: Эдиториал УРСС, 2001. 208 с.
4. Свидетельство № 2014615533 РФ. Программный комплекс «Математическое моделирование и многокритериальный анализ нелинейных свойств композиционных материалов на основе эффективной среды»: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ: заявитель и патентообладатель Романчук С.П., Терин Д.В. -№ 2014612918/69; заявл. 02.04.2014; зарегистр. 28.05.2014. [1] с.
5. *Примаченко В.Е., Кононец Я.Ф., Булах Б.М., Венгер Е.Ф., Каганович Э.Б., Кизяк И.М., Кириллова С.И., Манойлов Э.Г., Цыркунов Ю.А.* Электронные и излучательные свойства пористого кремния, легированного золотом// Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39. Вып. 5. С. 595.
6. *Пукинский Ю.Ж., Филиппов А.В.* Эквивалентная схема двухфазного магнито-стрикционно-пьезоэлектрического композита в области электромеханического резонанса // Вестник Новгородского государственного университета. 2010. № 55. С. 44.
7. *Поклонский Н.А., Горбачук Н.И.* Основы импедансной спектроскопии композитов: Курс лекций. Минск: БГУ. 2005. С. 102.
8. *Butko L.N., Buchel'nikov V.D., Bychkov I.V.* Absorption of electromagnetic waves in a nonmagnetic conductor-ferromagnet structure // Physics of the Solid State. 2010. Vol. 52. № 10. P. 2154.
9. *Walgraef D.* Spatio-Temporal Pattern Formation. Springer. New York, 1997.
10. *Buchelnikov V.D., Louzguine-Luzgin D.V., Xie G., Li S., Yoshikawa N., Sato M., Anzulevich A.P., Bychkov I.V., Inoue A.* Heating of metallic powders by microwaves: Experiment and theory // J. of Applied Physics. 2008. Vol. 104. P. 113505-1-113505-10.
11. *Головань Л.А., Тимошенко В.И., Кашкаров П.К.* Оптические свойства нанокompозитов на основе пористых систем // Успехи физических наук. 2007. Т. 177, № 6. С. 620.
12. *Кольцова Э.М., Третьяков Ю.Д., Гордеев Л.С., Вертегел А.А.* Нелинейная динамика и термодинамика необратимых процессов в химии и химической технологии. М.: Химия, 2001. С. 193.
13. *Кузнецов С.П.* Динамический хаос. М.: Физматлит, 2001. С. 80.
14. *Timashev S.F. et al.* Evolution of dynamical dissipative systems as a temporal «colour» fractal // In: Mathematical Models of Non-Linear Excitations. New York, 1999. P. 17.
15. *Терин Д.В., Корчагин С.А., Романчук С.П., Оносов И.А.* Влияние глубины фрактальности на частотную зависимость импеданса при построении моделей композиционных материалов // Актуальные проблемы электронного приборостроения (АПЭП–2014): Материалы Международной научно-технической конференции. В 2 т. Т. 1. Саратов. 25–26 сентября 2014 г. Саратов: ООО «Буква», 2014. С. 258.



## References

1. *Nikitin A.S.* Prospects for the use of composite materials // *Business and Life*. 2012. Jan. (№ 4). P. 6. (In Russian)
2. *Tret'yakov Yu.D.* Self-organization processes in the chemistry of materials // *Russian Chemical Reviews*. 2003, № 72 (8). S. 651.
3. *Vinogradov A.P.* *Electrodynamics of composite materials*. M.: Editorial URSS, 2001. P. 208. (In Russian)
4. The certificate of registration of the computer program № 2014615533 Russian Federation, The software package «Mathematical modeling and multi-criteria analysis of the nonlinear properties of composite materials based on the effective protection»: Applicant and patentee Romanchuk S.P., Terin D.V. № 2014612918/69; apr. 02.04.2014; reg. 28.05.2014. [1] s. (In Russian)
5. *Primachenko V.E., Kononets Ya. F., Bulah B.M., Venger E.V., Kaganovich E.B., Kizyak I.M., Kirillova S.I., Manoilov E.G., Tsyrkunov U.A.* Electronic and radiative properties of porous silicon doped with gold // *Semiconductor Physics and Technology*. 2005. Vol. 39 (5). (In Russian)
6. *Pukinskii U.Zh., Filippov A.V.* The equivalent circuit of a two-phase magnetostrictive – piezoelectric composites in the field of electromechanical resonance // *Vestnik Novgorodskogo Gos. Universiteta*, 2010, 55, s. 44. (In Russian)
7. *Poklonskiy N.A., Gorbachuk N.I.* *Osnovy impedanchnoi spektroskopii kompositov: Lektsii*. Minsk: BSU, 2005. S. 102. (In Russian)
8. *Butko L.N., Buchelnikov V.D., Bychkov I.V.* Absorption of electromagnetic waves in a nonmagnetic conductor–ferromagnet structure // *Physics of the Solid State*. 2010. Vol. 52. № 10. S. 2154.
9. *Walgraef D.* *Spatio-Temporal Pattern Formation*. New York, 1997.
10. *Buchelnikov V.D., Louzguine-Luzgin D.V., Xie G., Li S., Yoshikawa N., Sato M., Anzulevich A.P., Bychkov I.V., Inoue A.* Heating of metallic powders by microwaves: experiment and theory // *J. of Applied Physics*. 2008. 104. P. 113505-1-113505-10.
11. *Golovan' L.A., Timoshenko V.I., Kashkarov P.K.* Optical properties of porous-system-based nanocomposites // *Physics-Usp*. 2007. Vol. 50. P. 595.
12. *Kol'tsova E.M., Tret'yakov U.D., Gordeev L.S., Vertegel A.A.* *Nonlinear Dynamics and Thermodynamics of Irreversible Processes in Chemistry and Chemical Technology*. M.: Khimiya, 2001. S. 193. (In Russian)
13. *Kuznetsov S.P.* *Dynamical chaos*. M.: Fizmatlit, 2001. S. 80. (In Russian)
14. *Timashev S.F. et al.* Evolution of Dynamical Dissipative Systems as a Temporal «Colour» Fractal // In: *Mathematical Models of Non-Linear Excitations*. New York, 1999. P. 17.
15. *Terin D.V., Korchagin S.A., Romanchuk S.P., Onosov I.A.* Effect of depth fractal on the frequency dependence of impedance is in the construction of models of composite materials // *Urgent problems of electronic instrument (APEP 2014): Proceedings of the International Scientific Conference: v.1, Saratov. 25–26 Sept 2014 – Saratov: Bukva, 2014. S. 258. (In Russian)*

Поступила в редакцию 22.05.2015

## SYNERGETICS OF MATHEMATICAL MODELS FOR ANALYSIS OF COMPOSITE MATERIALS

*S. A. Korchagin<sup>1</sup>, D. V. Terin<sup>1,2</sup>, S. P. Romanchuk<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Engels Technological Institute of Yuri Gagarin State Technical University of Saratov

<sup>2</sup>Saratov State University

The authors propose a complex approach for the analysis of composite materials, including the fundamental models of the nonlinear dynamics, model of effective medium and the theory of electrical circuits. The composite consisting of spherical inclusions in the matrix is considered. The simulation of composite material is carried out by various methods.

*Keywords:* Composite materials, mathematical modeling, synergy, the effective medium model, nonlinear dynamics, electronic equivalent circuits.



*Корчагин Сергей Алексеевич* – родился в г. Энгельсе (1991). Окончил факультет нелинейных процессов Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского по специальности «Физика открытых нелинейных систем» (2013). С 2013 г. аспирант Саратовского государственного технического университета им. Ю.А. Гагарина. С 2013 г. также работает ассистентом кафедры «Техническая физика и информационные технологии» Энгельского технологического института. Область научных интересов: математическое и компьютерное моделирование, композиционные материалы.

413100 Саратовская область, г. Энгельс, пл. Свободы, 17  
Энгельский технологический институт  
E-mail: korchaginser@gmail.com



*Терин Денис Владимирович* – окончил Саратовский колледж радиоэлектроники им. П.Н. Яблочкова (1995). В 2000 г. защитил диплом по специальности «инженер-физик» на физическом факультете Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского. В 2001 получил степень магистра техники и технологий, защитил диссертацию на соискание степени кандидата физико-математических наук (2004). Доцент кафедры материаловедения, технологии и управления качеством факультета нано- и биомедицинских технологий СГУ. С 2011 г. возглавляет кафедру «Техническая физика и информационные технологии» Энгельского технологического института. Область научных интересов: исследование свойств наноструктур, математическое моделирование микро- и нанoeлектромеханических систем. Автор более 100 научных статей, научно-методических пособий и руководств.

413100 Саратовская область, г. Энгельс, пл. Свободы, 17  
Энгельский технологический институт  
E-mail: tfi@techn.sstu.ru



*Романчук Сергей Петрович* – родился в 1987 году. Окончил Энгельский технологический институт (филиал) Саратовского государственного технического университета им. Ю.А. Гагарина по специальности «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем». С 2012 года – ассистент кафедры «Техническая физика и информационные технологии» ЭТИ (филиал) СГТУ им. Ю.А. Гагарина. Область научных интересов: математическое моделирование распространения электромагнитного поля в гетерогенных средах, информационные технологии.

413100 Саратовская область, г. Энгельс, пл. Свободы, 17  
Энгельский технологический институт  
E-mail: romanchuk\_sergey@bk.ru