

УДК 621.7.014.2

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ТЕКСТУРОЙ: ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫЕ АНИЗОТРОПНЫЕ КРИСТАЛЛИТЫ

*Лавров И. В.¹*PERMITTIVITY OF COMPOSITE MATERIAL WITH TEXTURE: ELLIPSOIDAL ANISOTROPIC
INCLUSIONS

Lavrov I. V.

Using the Maxwell-Garnett theory and the rotation group representations theory, the effective permittivity tensor of composite material with texture is calculated. The composite material is assumed to consist of isotropic host and anisotropic ellipsoidal inclusions oriented by some probability law and having the permittivity tensor principal axes coinciding with those of the ellipsoid.

Keywords: composite material, Maxwell-Garnett theory, texture, inclusion, permittivity, representation, rotation group, orientation, ellipsoid, anisotropic.

Введение

В последнее время большое внимание уделяется изучению упругих, электрических, оптических и других свойств поликристаллических и композиционных материалов, включая наноконпозиты [1, 2]. Задачи вычисления эффективных диэлектрической проницаемости и электропроводности неоднородных сред по праву относятся к числу классических, поскольку, начиная с конца 19 века, многие исследователи, в том числе и такие выдающиеся как Максвелл и Рэлей, предлагали свои варианты решения этих задач. И всё же, несмотря на обилие работ по данной тематике и разнообразие моделей неоднородных сред (хороший обзор представлен, например, в [2, 3]), ощущается недостаток теорий, в которых рассматриваются неоднородные среды со случайной ориентацией входящих в их состав включений (кристаллитов), обладающие одновременно и текстурой, т.е. распределение ориентаций включений отличается от равномерного.

Последние исследования показывают, что образование текстуры в поликристаллах, композитах и наноконпозитах происходит очень часто как под действием внешних причин (деформация, осаждение на ориентирующие подложки и т.д.), так и при их отсут-

ствии [4, 6]. В связи с этим, построение адекватных теорий для объяснения электрических, оптических и других свойств случайно-неоднородных сред с текстурой представляется актуальным.

Среди попыток построения таких теорий можно отметить работы [3, 7, 8]. В [3] авторы применили подход Максвелла-Гарнетта для вычисления тензора эффективной диэлектрической проницаемости композиционного материала, состоящего из однородной изотропной матрицы и анизотропных одноосных сферических включений (кристаллитов) одного типа, ориентированных в пространстве по некоторому вероятностному закону. В [7] решается задача вычисления тензора эффективной диэлектрической проницаемости для гораздо более сложной в вычислительном плане модели: композиционный материал считается состоящим из однородной изотропной матрицы и изотропных эллипсоидальных включений одного типа, так же, как и в [3], ориентированных в пространстве по некоторому вероятностному закону. Сложность данной модели состоит в том, что для описания ориентации эллипсоида в пространстве требуются три скалярных параметра (например, углы Эйлера), в то время как для задания ориентации сферического кристаллита с одноосным тензором диэлек-

¹Лавров Игорь Викторович, старший преподаватель кафедры «Высшая математика № 2» Московского государственного института электронной техники (технического университета); e-mail: iglavr@mail.ru.

трической проницаемости требуются только два скалярных параметра. Для преодоления вышеупомянутой сложности в [7] используется аппарат теории представлений группы вращений трёхмерного пространства [9]. В работе [8] метод самосогласованного решения применяется для нахождения тензора эффективной электропроводности поликристаллической среды, состоящей из одноосных сферических кристаллитов, ориентированных в пространстве по некоторому вероятностному закону, предполагающему наличие выделенной оси (оси текстуры).

В настоящей работе предлагается развитие и обобщение метода вычисления тензора ϵ_e эффективной диэлектрической проницаемости композитов с текстурой, основы которого были заложены в [7], на материалы с анизотропными эллипсоидальными включениями (кристаллитами) при условии совпадения геометрических осей каждого кристаллита с главными осями его тензора диэлектрической проницаемости. Так же, как и в [7], этот метод основан на одной из модификаций подхода эффективной среды — приближении Максвелла–Гарнетта [3, 10] — и также используется аппарат теории представлений группы вращений. Получено в явном виде выражение для тензора ϵ_e как функции диэлектрических проницаемостей матрицы (скалярной) и включений (тензорной), доли включений в общем объёме материала, параметров, характеризующих форму включений, и параметров, описывающих распределение ориентаций включений в пространстве. Также подробно рассмотрены некоторые частные случаи распределения ориентаций кристаллитов и их формы, для которых вид тензора ϵ_e существенно упрощается.

1. Постановка задачи и вывод решения для общего случая

Рассмотрим композиционный материал, состоящий из однородной изотропной матрицы с диэлектрической проницаемостью ϵ_m и однородных анизотропных кристаллитов одного типа, имеющих эллипсоидальную форму, причём главные оси тензора ϵ_k диэлектрической проницаемости для каждого кристаллита совпадают с его геометрическими осями. Доля d включений в общем объёме материала предполагается не очень высокой, поэтому можно пренебречь вероятностью соприкосновения их между собой. Кристаллиты ориентированы в пространстве случай-

ным образом (по некоторому вероятностному закону, который обладает трансляционной инвариантностью), но так, что имеется некоторое выделенное направление — ось текстуры. Эффективная диэлектрическая проницаемость композита ϵ_e будет при этих условиях носить тензорный характер.

Пусть $\langle \mathbf{E} \rangle \equiv \langle \mathbf{E}(\mathbf{x}) \rangle$ — электрическое поле, усреднённое по некоторому объёму V , окружающему точку $\mathbf{x}$ и содержащему большое число включений. Тогда [10]

$$\langle \mathbf{E} \rangle = (1 - d) \langle \mathbf{E}_m \rangle + d \int w(k) \langle \mathbf{E}_k \rangle dk, \quad (1.1)$$

где $\langle \mathbf{E}_m \rangle$ — среднее поле в матрице внутри объёма V ; $\langle \mathbf{E}_k \rangle$ — среднее поле внутри включения, описываемого переменной k , которая содержит в себе все величины, характеризующие эллипсоид: форму, объём, тензор диэлектрической проницаемости и ориентацию; $w(k)$ — плотность распределения вероятностей включений с индексом k . Выражение для усреднённого вектора поляризованности даётся аналогичной формулой

$$\langle \mathbf{P} \rangle = (1 - d) \langle \mathbf{P}_m \rangle + d \int w(k) \langle \mathbf{P}_k \rangle dk. \quad (1.2)$$

Матрица и включения описываются материальными уравнениями вида

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{P}_m \rangle &= \epsilon_0 \chi_m \langle \mathbf{E}_m \rangle, \\ \langle \mathbf{P}_k \rangle &= \epsilon_0 \chi_k \langle \mathbf{E}_k \rangle, \end{aligned} \quad (1.3)$$

где $\chi_m = \epsilon_m / \epsilon_0 - 1$ есть восприимчивость матрицы, а $\chi_k = \epsilon_k / \epsilon_0 - \mathbf{I}$ — восприимчивость включений, ϵ_0 — электрическая постоянная, $\mathbf{I}$ — единичный тензор. Тензор эффективной восприимчивости χ_e составной среды определяется соотношением

$$\langle \mathbf{P} \rangle = \epsilon_0 \chi_e \langle \mathbf{E} \rangle. \quad (1.4)$$

Подставляя (1.1), (1.3), (1.4) в (1.2), получаем

$$\begin{aligned} &(1 - d)(\epsilon_e - \epsilon_m \mathbf{I}) \langle \mathbf{E}_m \rangle + \\ &+ d \int w(k)(\epsilon_e - \epsilon_k) \langle \mathbf{E}_k \rangle dk = 0. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Основное предположение в данной модели состоит в том, что поля $\langle \mathbf{E}_k \rangle$ и $\langle \mathbf{E}_m \rangle$ связаны линейным соотношением [10]

$$\langle \mathbf{E}_k \rangle = \lambda(k) \langle \mathbf{E}_m \rangle, \quad (1.6)$$

где тензор $\lambda(k) \equiv \lambda_k$ в системе главных осей эллипсоида имеет компоненты

$$\lambda'_{ii} \equiv \lambda'_i = \frac{\epsilon_m}{\epsilon_m + L_i(\epsilon'_i - \epsilon_m)}, \quad (1.7)$$

$$\lambda'_{ij} = 0, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j;$$

ε'_i — компоненты тензора ε_k в системе его главных осей; L_i — коэффициенты деполяризации [10]

$$L_i = \frac{a_1 a_2 a_3}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(a_i^2 + q)R(q)}, \quad i = 1, 2, 3,$$

где $R(q) = \prod_{i=1}^3 (a_i^2 + q)^{1/2}$; a_i — полуоси эллипсоида.

Подставляя (1.6) в (1.5) и выражая ε_e , получим

$$\varepsilon_e = [(1-d)\varepsilon_m \mathbf{I} + d \langle \kappa \rangle] \times \\ \times [(1-d)\mathbf{I} + d \langle \lambda \rangle]^{-1}, \quad (1.8)$$

где введён тензор $\kappa_k \equiv \varepsilon_k \lambda_k$, связанный с k -м кристаллитом, причём его главные значения равны (в силу совпадения главных осей тензоров ε_k и λ_k)

$$\kappa'_{ii} \equiv \kappa'_i = \frac{\varepsilon'_i \varepsilon_m}{\varepsilon_m + L_i(\varepsilon'_i - \varepsilon_m)}, \quad (1.9) \\ i = 1, 2, 3;$$

$$\langle \kappa \rangle \equiv \int w(k) \kappa_k dk, \quad (1.10) \\ \langle \lambda \rangle \equiv \int w(k) \lambda_k dk.$$

В случае, когда тензоры $\langle \lambda \rangle$ и $\langle \kappa \rangle$ имеют диагональный вид, ε_e также будет диагональным с компонентами

$$(\varepsilon_e)_{ii} = \frac{\varepsilon_m + r \langle \kappa_{ii} \rangle}{1 + r \langle \lambda_{ii} \rangle}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (1.11)$$

где $r = \frac{d}{1-d}$ — отношение объёмных долей включений и матрицы.

Если все кристаллиты имеют подобную эллипсоидальную форму, то у них одинаковы компоненты тензоров $\lambda(k)$ и $\kappa(k)$ в собственной системе главных осей $O\xi\eta\zeta$. Но в системе координат $Oxyz$, связанной с текстурой композита (ось Oz направлена по оси текстуры), компоненты этих же тензоров зависят от ориентации кристаллита относительно $Oxyz$. Поэтому, чтобы из (1.8) получить эффективное значение тензора диэлектрической проницаемости ε_e , необходимо произвести усреднение тензоров $\lambda(k)$ и $\kappa(k)$ по всем ориентациям кристаллитов в системе $Oxyz$; $w(k)$ в

(1.10) есть плотность распределения ориентаций кристаллитов в системе $Oxyz$, т. е.

$$w(k) \equiv p(\psi, \theta, \varphi) \equiv p(g),$$

где ψ, θ, φ — углы Эйлера поворота g от $Oxyz$ к $O\xi\eta\zeta$ в системе $Oxyz$. В связи с этим компоненты тензоров $\langle \lambda \rangle$ и $\langle \kappa \rangle$ определяются выражениями

$$\langle \lambda_{lj} \rangle = \iiint \lambda_{lj}(g) p(g) d\psi d\theta d\varphi, \quad (1.12) \\ \langle \kappa_{lj} \rangle = \iiint \kappa_{lj}(g) p(g) d\psi d\theta d\varphi,$$

где $l, j = 1, 2, 3$; интегрирование производится по всей группе $SO(3)$ вращений трёхмерного пространства; подразумевается, что в составе плотности распределения $p(g)$ учтён множитель инвариантной меры $\sin \theta$.

Для усреднения тензоров λ и κ в системе $Oxyz$ будем использовать метод, разработанный акад. К. А. Валиевым [11]. Как известно [9], любое тензорное представление 2-го ранга группы вращений $SO(3)$ раскладывается в прямую сумму неприводимых представлений группы $SO(3)$ весов 0, 1 и 2. Поскольку тензоры λ и κ — симметричные, то в этих разложениях компоненты с весом 1 отсутствуют. Представим λ_{lj} и κ_{lj} в виде

$$\lambda_{lj} = \lambda_{lj}^I + \lambda_{lj}^{II}, \quad (1.13) \\ \kappa_{lj} = \kappa_{lj}^I + \kappa_{lj}^{II}, \quad l, j = 1, 2, 3,$$

$$\lambda_{lj}^I = \frac{\delta_{lj}}{3} \sum_{n=1}^3 \lambda_n, \quad \kappa_{lj}^I = \frac{\delta_{lj}}{3} \sum_{n=1}^3 \kappa_n \quad (1.14)$$

— тензоры, кратные единичному и не меняющимся при переходе к другим координатным системам (преобразуются по неприводимому представлению веса 0); δ_{lj} — символ Кронекера;

$$\lambda_{lj}^{II} = \lambda_{lj} - \lambda_{lj}^I, \quad \kappa_{lj}^{II} = \kappa_{lj} - \kappa_{lj}^I \quad (1.15)$$

— симметричные с равным нулю следом, могут быть преобразованы посредством неприводимого представления веса 2. Введём тензоры 1-го ранга $\tilde{\lambda}$ и $\tilde{\kappa}$ с пятью компонентами по формулам

$$\tilde{\alpha}_{\pm 2} = \frac{1}{2} (\alpha_{11}^{II} - \alpha_{22}^{II}) \mp i \alpha_{12}^{II}, \quad (1.16) \\ \tilde{\alpha}_{\pm 1} = \mp \alpha_{13}^{II} + i \alpha_{23}^{II}, \quad \tilde{\alpha}_0 = \sqrt{\frac{3}{2}} \alpha_{33}^{II},$$

где α_{lj}^{II} , $\tilde{\alpha}_m$ ($l, j = 1, 2, 3, m = -2, \dots, 2$) суть λ_{lj}^{II} , $\tilde{\lambda}_m$ (если вычисляются $\tilde{\lambda}_m$) или κ_{lj}^{II} , $\tilde{\kappa}_m$ (если вычисляются $\tilde{\kappa}_m$).

Так как в системе $O\xi\eta\zeta$ тензоры λ и κ — диагональные с компонентами λ'_i, κ'_i ($i = 1, 2, 3$), то из (1.15) и (1.16) найдём компоненты тензоров $\tilde{\lambda}$ и $\tilde{\kappa}$ в этой системе

$$\begin{aligned}\tilde{\lambda}'_{\pm 2} &= \frac{1}{2} (\lambda'_1 - \lambda'_2), \quad \tilde{\kappa}'_{\pm 2} = \frac{1}{2} (\kappa'_1 - \kappa'_2), \\ \tilde{\lambda}'_0 &= \frac{1}{\sqrt{6}} (2\lambda'_3 - \lambda'_1 - \lambda'_2), \quad \tilde{\lambda}'_{\pm 1} = 0, \\ \tilde{\kappa}'_0 &= \frac{1}{\sqrt{6}} (2\kappa'_3 - \kappa'_1 - \kappa'_2), \quad \tilde{\kappa}'_{\pm 1} = 0,\end{aligned}\quad (1.17)$$

где $\lambda'_i, \kappa'_i, i = 1, 2, 3$ определяются из (1.7) и (1.9). При переходе от $O\xi\eta\zeta$ к $Oxyz$ компоненты тензоров $\tilde{\lambda}$ и $\tilde{\kappa}$ преобразуются по закону

$$\begin{aligned}\tilde{\lambda}_m &= \sum_{s=-2}^2 T_{ms}^2(g) \tilde{\lambda}'_s, \\ \tilde{\kappa}_m &= \sum_{s=-2}^2 T_{ms}^2(g) \tilde{\kappa}'_s, \\ m &= -2, \dots, 2,\end{aligned}\quad (1.18)$$

где $T_{ms}^2(g)$, $m, s = -2, \dots, 2$ — обобщённые сферические функции [9]:

$$\begin{aligned}T_{mn}^l(g(\psi, \theta, \varphi)) &= e^{-im\psi} P_{mn}^l(\cos \theta) e^{-in\varphi}, \\ l &= 0, 1, 2, \dots; \quad m, n = -l, -l+1, \dots, l;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}P_{mn}^l(\mu) &= A(1-\mu)^{-\frac{n-m}{2}}(1+\mu)^{-\frac{n+m}{2}} \times \\ &\times \frac{d^{l-n}}{d\mu^{l-n}} \left[(1-\mu)^{l-m}(1+\mu)^{l+m} \right],\end{aligned}\quad (1.19)$$

$$A = \frac{(-1)^{l-m} i^{n-m}}{2^l (l-m)!} \sqrt{\frac{(l-m)!(l+n)!}{(l+m)!(l-n)!}}.$$

Найдём компоненты $\langle \tilde{\lambda}_m \rangle$ и $\langle \tilde{\kappa}_m \rangle$ ($m = -2, \dots, 2$). Из (1.18), (1.12) имеем

$$\begin{aligned}\langle \tilde{\lambda}_m \rangle &= 2 \sum_{s=-2}^2 \tilde{\lambda}'_s \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} T_{ms}^2(g) p(g) d\varphi,\end{aligned}\quad (1.20)$$

$$\begin{aligned}\langle \tilde{\kappa}_m \rangle &= 2 \sum_{s=-2}^2 \tilde{\kappa}'_s \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} T_{ms}^2(g) p(g) d\varphi.\end{aligned}$$

В (1.20) учтены геометрическая симметрия эллипсоидов и симметрия их электрических свойств относительно плоскостей, перпендикулярных их главным осям, поэтому интегрирование по θ производится от 0 до $\pi/2$ с удвоением результата.

Выразив из (1.16) компоненты тензоров $\langle \lambda_{lj}^{II} \rangle$ и $\langle \kappa_{lj}^{II} \rangle$ в системе $Oxyz$ через $\langle \tilde{\lambda}_m \rangle$ и $\langle \tilde{\kappa}_m \rangle$ и учтя (1.13), (1.14), получим формулы для вычисления компонент $\langle \lambda_{lj} \rangle$ и $\langle \kappa_{lj} \rangle$ в системе координат $Oxyz$

$$\begin{aligned}\langle \alpha_{11} \rangle &= \frac{D}{3} + \sum_{s=-2}^2 \tilde{\alpha}'_s \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} p(g) \times \\ &\times \left[T_{-2,s}^2(g) + T_{2,s}^2(g) - \sqrt{\frac{2}{3}} T_{0,s}^2(g) \right] d\varphi,\end{aligned}\quad (1.21)$$

$$\begin{aligned}\langle \alpha_{22} \rangle &= \frac{D}{3} - \sum_{s=-2}^2 \tilde{\alpha}'_s \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} p(g) \times \\ &\times \left[T_{-2,s}^2(g) + T_{2,s}^2(g) + \sqrt{\frac{2}{3}} T_{0,s}^2(g) \right] d\varphi,\end{aligned}\quad (1.22)$$

$$\begin{aligned}\langle \alpha_{33} \rangle &= \frac{D}{3} + \\ &+ \sqrt{\frac{8}{3}} \sum_{s=-2}^2 \tilde{\alpha}'_s \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} p(g) T_{0,s}^2(g) d\varphi,\end{aligned}\quad (1.23)$$

$$\begin{aligned}\langle \alpha_{12} \rangle &= \langle \alpha_{21} \rangle = i \sum_{s=-2}^2 \tilde{\alpha}'_s \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ &\times p(g) [T_{2,s}^2(g) - T_{-2,s}^2(g)],\end{aligned}\quad (1.24)$$

$$\begin{aligned}\langle \alpha_{13} \rangle &= \langle \alpha_{31} \rangle = \sum_{s=-2}^2 \tilde{\alpha}'_s \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ &\times p(g) [T_{-1,s}^2(g) - T_{1,s}^2(g)],\end{aligned}\quad (1.25)$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{23} \rangle &= \langle \alpha_{32} \rangle = \\ &= -i \sum_{s=-2}^2 \tilde{\alpha}'_s \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ &\quad \times p(g) [T_{-1,s}^2(g) + T_{1,s}^2(g)], \quad (1.26) \end{aligned}$$

где $D = \alpha'_1 + \alpha'_2 + \alpha'_3$. В формулах (1.17)–(1.26) $\alpha_{lj}, \alpha'_j, \tilde{\alpha}'_m$ ($l, j = 1, 2, 3, m = -2, \dots, 2$) суть $\lambda_{lj}, \lambda'_j, \tilde{\lambda}'_m$ (если вычисляются $\langle \lambda_{lj} \rangle$) или $\kappa_{lj}, \kappa'_j, \tilde{\kappa}'_m$ (если вычисляются $\langle \kappa_{lj} \rangle$); $\tilde{\lambda}'_m, \tilde{\kappa}'_m, m = -2, \dots, 2$ определяются из (1.17).

Таким образом, решение задачи по нахождению тензора ϵ_e эффективной диэлектрической проницаемости композиционного материала, состоящего из матрицы с диэлектрической проницаемостью ϵ_m и включений, имеющих подобную эллипсоидальную форму, с тензором диэлектрической проницаемости ϵ_k , ориентированных случайным образом по вероятностному закону $p(\psi, \theta, \varphi)$, даётся выражением (1.8) (или (1.11), если тензоры $\langle \lambda \rangle$ и $\langle \kappa \rangle$ диагональные), где $\langle \lambda_{lj} \rangle$ и $\langle \kappa_{lj} \rangle$ определяются из соотношений (1.21)–(1.26).

2. Некоторые частные случаи задачи

1. Если распределение ориентаций обладает вращательной симметрией относительно оси текстуры, а также не зависит от φ , т. е.

$$p(g) = p(\theta) \equiv \frac{1}{8\pi^2} f(\theta), \quad (2.1)$$

где одномерная плотность $f(\theta)$ удовлетворяет условию нормировки

$$\int_0^{\pi/2} f(\theta) d\theta = 1,$$

тогда тензоры $\langle \lambda \rangle$ и $\langle \kappa \rangle$ диагональные с компонентами

$$\begin{aligned} \langle \lambda_{11} \rangle &= \langle \lambda_{22} \rangle = \frac{\lambda'_1 + \lambda'_2}{4} (1 + I_1) + \\ &\quad + \frac{\lambda'_3}{2} (1 - I_1), \quad (2.2) \end{aligned}$$

$$\langle \lambda_{33} \rangle = \frac{\lambda'_1 + \lambda'_2}{2} (1 - I_1) + \lambda'_3 I_1,$$

$$\begin{aligned} \langle \kappa_{11} \rangle &= \langle \kappa_{22} \rangle = \frac{\kappa'_1 + \kappa'_2}{4} (1 + I_1) + \\ &\quad + \frac{\kappa'_3}{2} (1 - I_1), \quad (2.3) \end{aligned}$$

$$\langle \kappa_{33} \rangle = \frac{\kappa'_1 + \kappa'_2}{2} (1 - I_1) + \kappa'_3 I_1.$$

Тогда и тензор ϵ_e в системе $Oxyz$ также будет диагональным, компоненты его получим, подставив (2.2), (2.3) в (1.11)

$$\begin{aligned} (\epsilon_e)_{11} &= (\epsilon_e)_{22} = \\ &= \frac{\frac{\epsilon_m}{r} + \frac{\kappa'_1 + \kappa'_2}{4} (1 + I_1) + \frac{\kappa'_3}{2} (1 - I_1)}{\frac{1}{r} + \frac{\lambda'_1 + \lambda'_2}{4} (1 + I_1) + \frac{\lambda'_3}{2} (1 - I_1)}, \quad (2.4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\epsilon_e)_{33} &= \\ &= \frac{2\epsilon_m r^{-1} + (\kappa'_1 + \kappa'_2) (1 - I_1) + 2\kappa'_3 I_1}{2r^{-1} + (\lambda'_1 + \lambda'_2) (1 - I_1) + 2\lambda'_3 I_1}. \end{aligned}$$

В (2.2), (2.3), (2.4) и далее принято обозначение

$$I_1 = \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta f(\theta) d\theta;$$

λ'_i и κ'_i определяются из (1.7) и (1.9). В частности, при равномерном распределении ($f(\theta) = \sin \theta$, $I_1 = 1/3$) из (2.4) следует, что среда является изотропной со скалярной диэлектрической проницаемостью

$$\epsilon_e = \frac{3\epsilon_m + r(\kappa'_1 + \kappa'_2 + \kappa'_3)}{3 + r(\lambda'_1 + \lambda'_2 + \lambda'_3)}. \quad (2.5)$$

При рассмотрении других случаев также будем предполагать, что распределение ориентаций имеет форму (2.1).

2. В случае одноосных сфероидов ($\epsilon'_1 = \epsilon'_2$, $\lambda'_1 = \lambda'_2$, $\kappa'_1 = \kappa'_2$)

$$\begin{aligned} (\epsilon_e)_{11} &= (\epsilon_e)_{22} = \\ &= \frac{2\epsilon_m + r[(\kappa'_3 + \kappa'_1) - (\kappa'_3 - \kappa'_1) I_1]}{2 + r[(\lambda'_3 + \lambda'_1) - (\lambda'_3 - \lambda'_1) I_1]}, \quad (2.6) \end{aligned}$$

$$(\epsilon_e)_{33} = \frac{\epsilon_m + r[\kappa'_1 + (\kappa'_3 - \kappa'_1) I_1]}{1 + r[\lambda'_1 + (\lambda'_3 - \lambda'_1) I_1]}.$$

3. Пусть кристаллиты являются изотропными иглами с диэлектрической проницаемостью ϵ , тогда

$$\begin{aligned} L_1 &= L_2 = \frac{1}{2}, L_3 = 0, \\ \lambda'_1 &= \lambda'_2 = \frac{2\epsilon_m}{\epsilon_m + \epsilon}, \lambda'_3 = 1, \\ \kappa'_1 &= \kappa'_2 = \frac{2\epsilon\epsilon_m}{\epsilon_m + \epsilon}, \kappa'_3 = \epsilon, \end{aligned} \quad (2.7)$$

и, подставив (2.7) в (2.6), получим

$$(\varepsilon_e)_{11} = (\varepsilon_e)_{22} = \varepsilon_m + \frac{d[\varepsilon(1 - I_1) + \varepsilon_m(3 + I_1)]}{2h - d(1 + I_1)}, \quad (2.8)$$

$$(\varepsilon_e)_{33} = \varepsilon_m + \frac{d[\varepsilon I_1 + \varepsilon_m(2 - I_1)]}{h - d(1 - I_1)},$$

где $h = (\varepsilon + \varepsilon_m)/(\varepsilon - \varepsilon_m)$. Это обозначение используется и далее.

Применим выражение (2.8) для некоторых конкретных вариантов распределения ориентаций игл.

а) при равномерном распределении ($I_1 = 1/3$): $(\varepsilon_e)_{ii} \equiv \varepsilon_e$, $i = 1, 2, 3$,

$$\varepsilon_e = \varepsilon_m + \frac{d(\varepsilon + 5\varepsilon_m)}{3h - 2d};$$

б) при малом разбросе в ориентациях игл относительно оси текстуры ($s^2 \ll 1$) $I_1 \approx 1 - 2s^2$, где s^2 имеет смысл половины начального момента второго порядка случайной величины $\lg \theta$ [8]

$$(\varepsilon_e)_{11} = (\varepsilon_e)_{22} \approx \varepsilon_m + \frac{2d\varepsilon_m}{h - d} + s^2 \frac{d(1 - d)(\varepsilon + \varepsilon_m)}{[h - d]^2},$$

$$(\varepsilon_e)_{33} \approx \varepsilon_m + d(\varepsilon - \varepsilon_m) - 2s^2 \frac{d(1 - d)(\varepsilon - \varepsilon_m)^2}{(\varepsilon + \varepsilon_m)};$$

в) иглы лежат в плоскости Oxy ($\theta \equiv \pi/2$, $I_1 = 0$)

$$(\varepsilon_e)_{11} = (\varepsilon_e)_{22} = \varepsilon_m + \frac{d(\varepsilon + 3\varepsilon_m)}{2h - d},$$

$$(\varepsilon_e)_{33} = \varepsilon_m + \frac{2d\varepsilon_m}{h - d};$$

г) при конусном распределении ($\theta \equiv \theta_0$, $I_1 = \cos^2 \theta_0$)

$$(\varepsilon_e)_{11} = (\varepsilon_e)_{22} = \varepsilon_m + \frac{d[\varepsilon \sin^2 \theta_0 + \varepsilon_m(3 + \cos^2 \theta_0)]}{2h - d(1 + \cos^2 \theta_0)}, \quad (2.9)$$

$$(\varepsilon_e)_{33} = \varepsilon_m + \frac{[\varepsilon \cos^2 \theta_0 + \varepsilon_m(1 + \sin^2 \theta_0)]}{h/d - \sin^2 \theta_0}.$$

4. Пусть кристаллиты являются шарами ($L_i = 1/3$) с трёхосным тензором диэлектрической проницаемости ε_k . Ориентацию кристаллита в этом случае будем связывать с ориентацией главных осей тензора ε_k . Тогда компоненты тензора ε_e определяются из (2.4), причём

$$\lambda'_i = 3\varepsilon_m / (2\varepsilon_m + \varepsilon'_i), \quad (2.10)$$

$$\kappa'_i = 3\varepsilon'_i \varepsilon_m / (2\varepsilon_m + \varepsilon'_i), \quad i = 1, 2, 3.$$

В случае однонаправленного распределения ($\theta \equiv 0$, $I_1 = 1$) получим

$$(\varepsilon_e)_{11} = (\varepsilon_e)_{22} = \frac{2\varepsilon_m + r(\kappa'_1 + \kappa'_2)}{2 + r(\lambda'_1 + \lambda'_2)}, \quad (2.11)$$

$$(\varepsilon_e)_{33} = \frac{\varepsilon_m + r\kappa'_3}{1 + r\lambda'_3}.$$

Если тензор ε_k — одноосный, то, учитывая, что $\varepsilon'_1 = \varepsilon'_2$ из (2.10) и (2.11) найдём:

$$(\varepsilon_e)_{11} = (\varepsilon_e)_{22} = \varepsilon_m + \frac{3d\varepsilon_m(\varepsilon'_1 - \varepsilon_m)}{(1 - d)(\varepsilon'_1 - \varepsilon_m) + 3\varepsilon_m},$$

$$(\varepsilon_e)_{33} = \varepsilon_m + \frac{3\varepsilon_m(\varepsilon'_3 - \varepsilon_m)}{(1 - d)(\varepsilon'_3 - \varepsilon_m) + 3\varepsilon_m},$$

что совпадает с результатом, полученным в [3].

При равномерном распределении одноосных сферических кристаллитов можно воспользоваться формулой (2.5), подставив в неё (2.10). Тогда

$$\varepsilon_e = \varepsilon_m \left(1 + \frac{r \left[2 \frac{(\varepsilon'_1 - \varepsilon_m)}{(2\varepsilon_m + \varepsilon'_1)} + \frac{(\varepsilon'_3 - \varepsilon_m)}{(2\varepsilon_m + \varepsilon'_3)} \right]}{1 + \frac{r \varepsilon_m (6\varepsilon_m + \varepsilon'_1 + 2\varepsilon'_3)}{(2\varepsilon_m + \varepsilon'_1)(2\varepsilon_m + \varepsilon'_3)}} \right),$$

что также соответствует результату, приведённому в [3].

Замечание 1. При выводе формулы (1.8) диэлектрическая проницаемость исчислялась в абсолютных единицах системы СИ, однако во все выражения для компонент тензора ε_e она входит в виде однородной функции, поэтому полученные формулы справедливы и для относительных диэлектрических проницаемостей.

Замечание 2. Полученные результаты справедливы также для комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0(1 + \chi(\omega)) + i\sigma(\omega)/\omega$ в переменном электромагнитном поле при условии, что размеры включений значительно меньше длины волны этого поля [10].

Основной результат данной работы представляется формулами (1.8) и (1.21)–(1.26),

описывающими в явном виде компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости композита в системе $Oxyz$, связанной с текстурой материала, при любой эллипсоидальной форме включений с любым тензором диэлектрической проницаемости этих включений (при условии совпадения главных осей тензора и эллипсоида) и при любом распределении ориентаций включений в пространстве. Также важным результатом являются выражения (2.4) для компонентов тензора ϵ_e в случае, когда распределение ориентаций не зависит от углов Эйлера φ и ψ .

Литература

1. Нанотехнологии в электронике / Под ред. Чаплыгина Ю.А. М.: Техносфера, 2005. 448 с.
2. Физика композиционных материалов / Под ред. Н.Н. Трофимова. М.: Мир, 2005. Т. 2. 344 с.
3. *Levy O., Stroud D.* Maxwell Garnett theory for mixtures of anisotropic inclusions: Application to conducting polymers // *Phys. Rev. B.* 1997. Vol. 56, No. 13. P. 8035–8046.
4. Колесников В.И., Бардушкин В.В., Булах И.И., Сычёв А.П., Яковлев В.Б. О методе моделирования текстурообразования в поликристаллах при различных внешних напряжениях // *Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества.* 2006. № 2. С. 33–36.
5. Колесников В.И., Чекакина И.И., Бардушкин В.В., Сычёв А.П., Яковлев В.Б. Энергетический подход при моделировании формирования текстуры в поликристаллах под влиянием внешних напряжений // *Вестник Южного научного центра РАН.* 2008. Т. 4. № 3. С. 3–8.
6. Максимов С.К., Максимов К.С. Проблемы текстурированности в нанотехнологии. Контроль текстур // *Изв. вузов. Электроника.* 2008. № 1. С. 49–55.
7. Иванов Е.Н., Лавров И.В. Теория диэлектрической проницаемости композиционных материалов с текстурой. Ч. 1. Обор. комплекс – научн.-техн. прогрессу России. М.: ФГУП ВИМИ. 2007. № 1. С. 73–78.
8. Лавров И.В. Теория электропроводности неоднородных материалов с текстурой // *Изв. вузов. Электроника.* 2008. № 1. С. 3–9.
9. Гельфанд И.М., Минлос Р.А., Шапиро З.Я. Представления группы вращений и группы Лоренца. М.: Гос. издат. физ.-мат. литературы, 1958. 294 с.
10. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986. 660 с.
11. Валиев К.А., Эскин Л.Д. О вращательной диффузии молекул и рассеянии света в жидкостях // *Опт. и спектр.* 1962. Т. XII. Вып. 6. С. 758–764.

Ключевые слова: композиционный материал, приближение Максвелла–Гарнетта, текстура, кристаллит, диэлектрическая проницаемость, представление, группа вращений, ориентация, эллипсоид, анизотропный.

Статья поступила 4 марта 2009 г.

Московский государственный институт электронной техники (технический университет), г. Москва

© Лавров И. В., 2009