

УДК 539.2; 533.9

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЛОЖНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ РЕНОРМАЛИЗАЦИОННОЙ ГРУППЫ

Н.Т. КВАСОВ<sup>1</sup>, А.В. ПУНЬКО<sup>1</sup>, В.М. АСТАШИНСКИЙ<sup>2</sup>, В.В. УГЛОВ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь,

<sup>2</sup>Институт молекулярной и атомной физики НАН Беларуси  
пр. Независимости, 70, 220072, Минск, Беларусь,

<sup>3</sup>Белорусский государственный университет  
пр. Независимости, 4, 220080, Минск, Беларусь

Поступила в редакцию 2 февраля 2007

При помощи теории перколяции на основе ренормализационной схемы и ее обобщения на трехмерный случай в работе предпринята попытка разработать алгоритм аналитического расчета коэффициентов перколяционного многочлена, оценена его эффективность; проведены вычисления для некоторых частных случаев. Для системы Fe–Si выполнен расчет упругих характеристик материалов и их критических индексов.

*Ключевые слова:* перколяция, ренормгруппа, упругие свойства, критические индексы.

### Введение

Сложные многокомпонентные материалы на сегодняшний день являются основой твердотельной нано- и микроэлектроники, космической техники, систем хранения и передачи информации и др. областей науки и техники. Однако отсутствие знаний о микроструктуре таких веществ не позволяет прогнозировать известными теоретическими методами их физические свойства, что представляет собой весьма существенную проблему современного материаловедения.

В представленной работе предпринята попытка теоретической оценки упругих характеристик системы Fe–Si, полученной в плотной компрессионной плазме. Этот оригинальный метод создания сложных материалов положительно зарекомендовал себя в ряде областей микро- и наноэлектроники и материаловедения. В основу расчета положено компьютерное моделирование физических свойств, базирующееся на идеях теории перколяции — геометрическом аналоге ренормализационного преобразования.

### Методика исследования

Моделирование структуры сложных материалов проводилось на базе решеток со случайным распределением параметров. Узлы моделируют компоненты системы в пространстве, связи между узлами — их контакты с соседями. Размерность решеток составляла  $n \times n$  и  $n \times n \times n$  для двух- и трехмерного случаев соответственно.

В исходной (квадратной или кубической) решетке размером  $l_0$  каждая связь существует с вероятностью  $P_0$ . Организовывался итерационный процесс, когда на следующем шаге каждая связь заменялась решеткой, полученной на предыдущем. Процесс заканчивается, когда свойства решетки перестают зависеть от номера итерации. В итоге получаем решетку, размеров много больше базовой, на которой можем определить макроскопические свойства.

Рассматривалась задача связей. Множество связей, образованное на каждом шаге, называлось *связывающим*, если существовала непрерывная цепочка из связей между противоположными сторонами (гранями) для  $d=2$  ( $d=3$ ) соответственно.

Вероятность  $P_n=R(l_{n-1}, P_{n-1})$  того, что на  $n$ -м шаге данное множество связывающее — полином степени  $N$  (числа связей на решетке), может быть определено с какой угодно точностью при любом  $P_0$ .

Траектория итерационного процесса заканчивается на  $n$ -м этапе в неподвижной точке 0 или 1.

$$P_n = \begin{cases} 1, & \text{если } R(P_0, l_0) > P_*, \\ 0, & \text{если } R(P_0, l_0) < P_*. \end{cases} \quad (1)$$

Неподвижная точка  $P_*$  может быть определена из уравнения

$$P_* = R(P_*, l_0) \quad (2)$$

и называется порогом протекания модели размера  $L_n$ , т.е. переход множества из несвязного в связанное происходит при  $P_n=P_*$ .

Целью работы было:

1. Определение полинома  $R_n$  аналитически для некоторых частных случаев.
2. Расчет некоторых физических (например упругих) свойств *реального* сложного вещества и критических индексов этих свойств.

### Теоретический анализ

Количество связей  $K$  в решетке размерностью  $n$  в  $d$ -мерном пространстве:

$$K=n^2+(n-1)^2 \text{ и } K=n^3+2n(n-1)$$

для  $d=2$  и 3 соответственно. В табл. 1 приведены  $K$  для нескольких решеток.

Таблица 1. Количество связей  $K$  в перколяционной решетке  $n \times n$  в пространстве размерности  $d$

$K$		Размерность решетки $n$				
		2	3	4	5	6
$d=$	2	5	13	25	41	61
	3	12	39	88	165	

Обозначим вероятность наличия каждой из связей перколяционной решетки  $p$ . Тогда вероятность наступления протекания в данной решетке есть следующий многочлен:

$$R(p) = \sum_{k=0}^n A_k p^k (1-p)^{n-k},$$

где  $A_k$  — количество протекающих решеток, в которых  $k$  целых связей (соответственно,  $n-k$  разорванных).

Последнее выражение может быть переписано:

$$R(p) = \sum_{k=0}^n A_k p^k (1-p)^{n-k} = \sum_{k=0}^n A_k p^k \sum_{s=0}^{n-k} C_{n-k}^s (-p)^s = \sum_{k=0}^n \sum_{s=0}^{n-k} A_k C_{n-k}^s p^{k+s} (-1)^s,$$

т.е.  $R(p)$  — многочлен от  $p$ :  $R(p) = \sum_{q=0}^n B_q p^q$ .

Таким образом, если перебрать всевозможные протекающие решетки для выбранных  $d$  и  $n$ , можно точно определить коэффициенты  $A_k$ , а приведя подобные слагаемые, и  $B_q$  ( $k = \overline{1, n}$ ,  $q = \overline{1, n}$ ).

Решив аналитически уравнение  $R(p)=p$ , найдем точное значение порога протекания  $p=p^*$ .

Еще раз отметим, что, поскольку все действия (сложение, умножение) производятся с целыми числами, результаты будут точными. Представляет интерес аналитическое нахождение коэффициентов многочлена  $R(p)$  для решеток и пространств разных размерностей, так как они обычно рассчитываются приближенно методом Монте-Карло.

Для случая  $n=3$ ,  $d=3$  перколяционный полином брался в виде

$$R(p) = p^2(4 + 8p - 14p^2 - 40p^3 + 16p^4 + 288p^5 - 655p^6 + 672p^7 - 376p^8 + 112p^9 - 14p^{10}). \quad (3)$$

Согласно [1, 2], (3) обеспечивает достаточную точность, хотя получен не аналитически.

Порог протекания в этом случае (решение уравнения  $p=R(p)$ ) равен  $p_c=0,2085$ .

Для расчета упругих свойств микронеоднородных материалов использовалась формула Кернера [1].

Модуль объемной упругости связывающего множества (СМ) на  $k+1$  итерации:

$$K_c^{(k+1)} = \frac{[K_c^{(k)} p_k A^{(k)} + K_H^{(k)} (1-p_k) B^{(k)}]}{[p_k A^{(k)} + (1-p_k) B^{(k)}]}, \quad (4)$$

где

$$A^{(k)} = \frac{1}{3K_c^{(k)} + 4M_c^{(k)}}; \quad B^{(k)} = \frac{1}{3K_H^{(k)} + 4M_c^{(k)}}; \quad (5)$$

$K$  — модуль упругости;  $M$  — модуль сдвига; индексы  $c$  и  $n$  относятся к связанному (СМ) и несвязанному (НСМ) множеству соответственно.

Модуль сдвига СМ на  $k+1$  итерации:

$$M_c^{(k+1)} = M_c^{(k)} \frac{\left[ \frac{p_k}{N_c^{(k)}} + (1-p_k) \frac{M_H^{(k)}}{D^{(k)}} \right]}{\left[ \frac{p_k}{N_c^{(k)}} + (1-p_k) \frac{M_c^{(k)}}{D^{(k)}} \right]}, \quad (6)$$

$$N_c^{(k)} = 15(1-\nu_c); \quad D^{(k)} = (7-5\nu_c)M_c + (8-10\nu_c)M_H. \quad (7)$$

Коэффициент Пуассона СМ:

$$\nu^{(k)} = \frac{3K_c^{(k)} - 2M_c^{(k)}}{6K_c^{(k)} + 2M_c^{(k)}}. \quad (8)$$

Таким образом, выбрав некую  $p_0 \neq p^*$ , итеративно получаем  $p_{i+1}=R(p_i)$ ,  $\Phi_{i+1}=\Phi_i(p_i)$ , приходя, таким образом, к  $\Phi_n$ . Здесь  $\Phi$  — некоторая физическая величина.

Установлено [2], что в критической точке (пороге протекания)  $p^*$  физические величины имеют скейлинговую зависимость:

$$\Phi \approx (p - p_c)^\tau,$$

где  $\tau$  — критический индекс, зависящий только от размерности пространства  $d$ .

Получив набор пар  $(p_i, \Phi_i)$ , можем определить  $\tau$  и  $s$ :

$$\tau = \lim_{p \rightarrow p_c} \frac{\Delta(\lg \Phi)}{\Delta(\lg |p - p_c|)}, \quad (9)$$

В [3] описывалась ренормализационная схема, являющаяся, как было указано, очень точной для двумерной квадратной решетки.

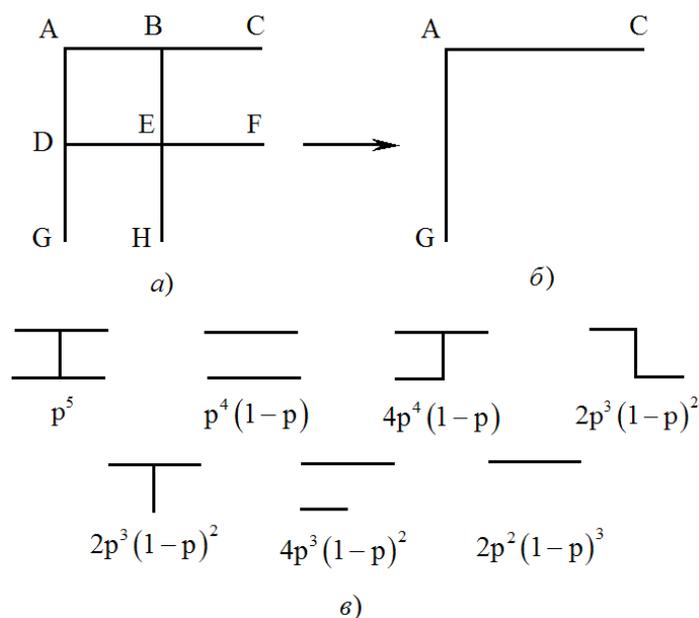


Рис. 1 Ренормализационное преобразование для перколяции связей на квадратной решетке: а) исходная  $2 \times 2$  ячейка из восьми связей; б) ренормализованная ячейка с двумя связями; в) части оригинальной ячейки, которые замещают ренормализованную связь AC с соответствующими вероятностями)

Данная схема обобщалась также на трехмерный случай; при этом в качестве базового элемента использовался уголок на рис. 1, б с добавленным к нему дополнительным отрезком, перпендикулярным плоскости рисунка с вершиной в А.

В соответствии со всем вышесказанным был разработан следующий алгоритм:

1. Выбор размерностей пространства  $d=2, 3$  и решетки  $n$ . Построение перколяционной решетки.
2. Расчет аналитически коэффициентов перколяционного полинома, если это возможно; в противном случае используется готовое выражение типа (3) или метод Монте-Карло. Факт протекания довольно быстро устанавливается при помощи волнового алгоритма (алгоритм поиска кратчайшего пути).
3. Определение порога (порогов) протекания  $p^*$  из уравнения  $R(p)=p$ .
4. Выбор  $p \neq p^*$ . Нахождение физической величины  $\Phi_n(p^*)$  в ходе осуществления итеративного процесса:  $p_{i+1}=R(p_i)$ ,  $\Phi_{i+1}=\Phi_i(p_i)$ .
5. Расчет критических индексов.

### Результаты и их обсуждение

Был проведен аналитический расчет коэффициентов перколяционного полинома для решеток с  $n=2, 3, 4$  для  $d=2$ . Результаты приведены в табл. 2, 3.

Использовался класс CLongInt, созданный Томасом Холте. Класс инкапсулирует целое, длина которого задается; обеспечивает весь набор арифметических и битовых операций, в том

числе в нотации C++: +=, -=, ++ и т.д. Реализована возможность представления объекта класса как UInt, Int, Long, ULONG или как строки.

В качестве длины целого было выбрано 128, т.е. получили 16-байтовое знаковое целое.

Правильность работы класса была проверена на уже рассчитанных с типом unsigned int задачах; проверка приведения подобных слагаемых велась в Mathematica.

Было замечено, что при  $d=2$ ,  $n=4$  в случае использования unsigned int слагаемые приводились неправильно. Как оказалось, данного типа еще хватало для  $A_k$ , но в ходе приведения слагаемых  $B_q$  выходит за его границы. Это еще более убедило в необходимости использования CLongInt. В табл. 3 приводятся результаты, полученные при помощи CLongInt.

Таблица 2. Коэффициенты  $A_k$

$A_k$	$n$		
	2	3	4
0			
1			
2	2		
3	8	3	
4	5	38	4
5	1	209	102
6		627	1230
7		1089	9272
8		1078	48718
9		677	188512
10		283	553496
11		78	1252416
12		13	2198498
13		1	3001802
14			3204984
15			2715264
16			1854463
17			1032857
18			471428
19			175870
20			53028
21			12646
22			2300
23			300
24			25
25			1

Таблица 3. Коэффициенты  $B_q$

$B_q$	$n$		
	2	3	4
0			
1			
2	2		
3	2	3	
4	-5	8	4
5	2	2	18
6		-37	30
7		-10	-38
8		39	-188
9		149	-154
10		-352	128
11		298	1456
12		-117	658
13		18	-3252
14			-4952
15			-1212
16			37621
17			-1082
18			-213712
19			483698
20			-565880
21			414334
22			-198122
23			60628
24			-10850
25			868

В качестве материала, на котором исследовался описанный подход, был выбран Fe-Si.

Расчет его упругих свойств в зависимости от концентрации "жесткого" компонента (железа) велся по формулам (4)–(8) с использованием итеративной схемы (3).

На рис. 2 и 3 горизонтальными пунктирными линиями обозначены соответствующие модули для каждого из компонентов в отдельности.

Из рис. 2 следует, что при изменении объемной концентрации железа в интервале 0,1–0,6 упругие модули материала меняются. В случае превышения порога ~0,6 наступает "насыщение" и значения модулей становятся близки к соответствующим "железным".

Зависимость коэффициента Пуассона от концентрации "жесткого" компонента имеет предсказуемый характер, за исключением некоторой особенности — наличия минимума при  $p \approx 0,14$ .

Критический индекс  $\tau$  для упругих модулей, рассчитанный в соответствии с (9), составил:  $\tau \approx 2,82$ , что согласуется с диапазоном, указанным в [1].

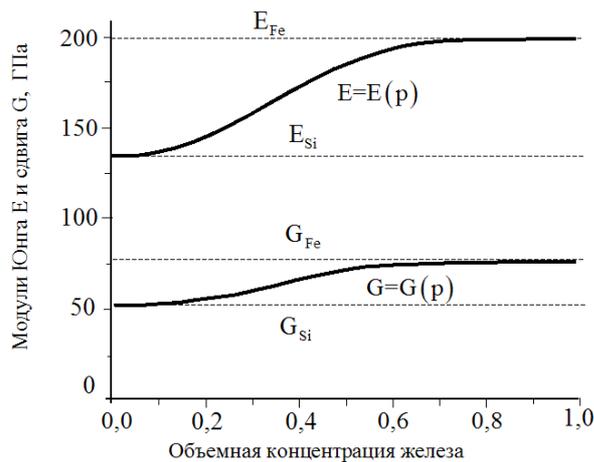


Рис. 2. Зависимость модулей Юнга и сдвига от объемной концентрации железа

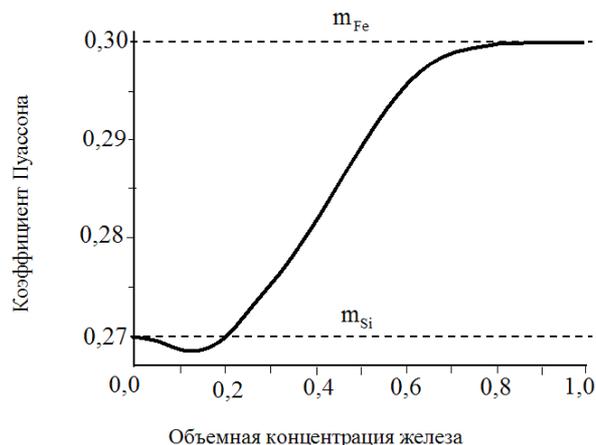


Рис. 3. Зависимость коэффициента Пуассона от объемной концентрации железа

### Заключение

Разработан алгоритм для точного расчета коэффициентов перколяционного многочлена  $R(p)$ , по которому выполнены расчеты для ряда частных случаев.

На основе приближенного перколяционного многочлена (3) для Fe–Si определены упругие свойства в широком диапазоне концентраций компонентов. Для реальной физической системы вычислен критический индекс  $\tau$ , определяющий поведение упругих модулей вблизи особой точки.

## MODELLING OF PHYSICAL PROPERTIES OF COMPLEX MATERIALS OBTAINED BY INFLUENCE OF COMPRESSION PLASMA FLOW (PERCOLATION THEORY AND RENORMALIZATION METHOD)

N.T. KVASOV, A.V. PUNKO, V.M. ASTASHYNSKI, V.V. UGLOV

### Abstract

Algorithm of analytical calculation of percolation polynomial coefficients is developed by means of percolation theory in terms of renormalization scheme from [3] and its generalization to three-dimensional case. Efficiency of algorithm was estimated. Calculations for several special cases were performed. Fe–Si system elastic properties and their critical indexes were calculated.

### Литература

1. Новиков В.В. // ФММ. 1997. Т.83, № 4. С.27-40.
2. Новиков В.В. // ФТТ. 1999. Т.41, № 12. С.2147-2153.
3. Stauffer D., Aharony A. // Introduction to Percolation Theory. London: Taylor & Francis, 1992.