Спектральная теория Бергмана-Мильтона эффективной проводимости гетерогенных сред

Для неупорядоченных сред предполагается, что осредненный потенциал подчиняется уравнению

$$\varepsilon_{ij}^{eff} \frac{\partial}{\partial x_i \partial x_j} \varphi = 0 \tag{1}$$

а для нахождения ε_{ij}^{eff} в настоящее время предложено более десятка различных, так называемых, формул смешения. Все они имеют обоснование лишь на физическом уровне. Поэтому особый интерес вызывают строгие теории, хотя и не дающие формул смешения, но приводящие к некоторым строгим соотношениям и ограничениям для эффективных материальных параметров. Среди таких теорий следует выделить прежде всего спектральную теорию Бергмана-Милтона.

Введем для k-компонентной смеси следующие обозначения $E_0 = \langle \vec{E} \rangle$, $h_i = \varepsilon_i / \varepsilon_k$, $\vec{E}(\vec{r}) = -\left|\vec{E}_0\right| \nabla \psi$

$$\varepsilon(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i \theta_i(\vec{r})$$

где $\begin{cases} \theta_i(\vec{r}) = 1 & \text{если точка находится в } i\text{-ой фазе и} \\ \theta_i(\vec{r}) = 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases}$

$$m(h_1, \ldots, h_{k-1}) = \varepsilon^{eff} / \varepsilon_k, \qquad \theta_h = \varepsilon(\vec{r}) / \varepsilon_k = \sum_{i=1}^{k} h_i \theta_i(\vec{r})$$

Для определенности будем рассматривать геометрию плоского конденсатора, заполненного k-компонентной смесью, тогда задача примет вид:

$$\partial(\theta\, \partial\psi) = 0 \qquad (2)$$

$\psi = 0$ на одной плате и $\psi = L$, на боковых стенках $\dfrac{d\psi}{dn} = 0$

Аналогично можно сформулировать задачу при заданных зарядах на обкладках конденсатора для потенциала ϕ: $\nabla\left(\theta\nabla\phi\right)=0$ (3)

$$\vec{D}\left(\vec{r}\right)=-\left|D_0\right|\theta\nabla\phi \qquad \left\langle\theta_h\nabla\phi\right\rangle=1 \qquad D_0=\varepsilon_{ij}^{eff}E_0$$

Условие сохранения заряда принимает вид

$$\frac{1}{S}\int D_n dS=\frac{D_0}{S}\int\theta_h\frac{\partial}{\partial n}\phi dS=\left\langle D\right\rangle_S=\left\langle D\right\rangle=D_0\left\langle\theta_h\nabla\phi\right\rangle=D_0=\varepsilon_{eff}E_0$$

"Энергетическое" определение эффективной проницаемости можно записать в следующем виде

$$\varepsilon_{ij}^{eff}=\frac{1}{V}\int dV\varepsilon\left(r\right)\frac{E^2(r)}{E_0^2} \qquad \frac{1}{\varepsilon_{ij}^{eff}}=\frac{1}{V}\int dV\frac{D^2(r)}{\varepsilon\left(r\right)D_0^2}$$

Или во введенных ранее обозначениях

$$m\left(h_1,\ldots,h_{k-1}\right)=\frac{1}{V}\int\theta_h\left(\nabla\psi\right)^2 dV \qquad \tilde{m}\left(h_1,\ldots,h_{k-1}\right)=\frac{1}{m}=\frac{1}{V}\int\theta_h\left(\nabla\phi\right)^2 dV$$

Так как ψ и ϕ удовлетворяют одному и тому же уравнению, и одним и тем же граничным условиям – постоянство потенциала на обкладках конденсатора и нулевая нормальная производная на боковых стенках, отличаясь только множителем на верхней обкладке конденсатора, то это означает, что обе функции отличаются тем же множителем в любой точке $(\phi = k\psi)$, который можно найти из предыдущих выражений.

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{V}\int \theta_h \left(\nabla\phi\right)^2 dV = \frac{k^2}{V}\int \theta_h \left(\nabla\psi\right)^2 dV = mk^2 \quad \Rightarrow \qquad k = \tilde{m}$$

Последнее равенство легко доказать, заметив, что

$$\theta_h \nabla\phi \cdot \nabla\phi = \nabla\left(\phi\theta_h\nabla\phi\right) - \phi\nabla\left(\theta_h\nabla\phi\right) = \nabla\left(\phi\theta_h\nabla\phi\right)$$

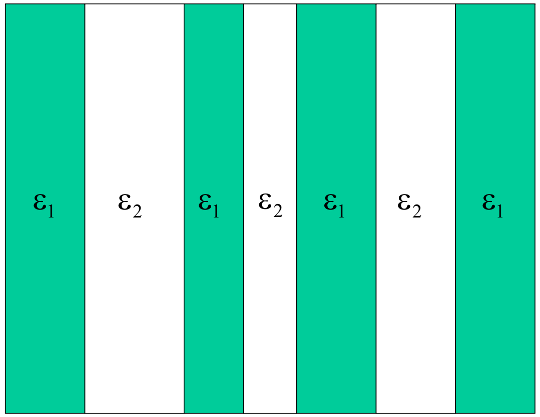
$$\tilde{m} = \frac{1}{V}\int \nabla\left(\phi\theta_h\nabla\phi\right) dV = \frac{1}{V}\int \left(\phi\theta_h\nabla\phi\right) dS = \frac{\phi\left(L\right)\int \left(\theta_h\nabla\phi\right)_{x=L} dS}{V} = \frac{\phi\left(L\right)}{L}$$

$$= \phi\left(L\right)/\psi\left(L\right)$$

Аналитические свойства

Прежде всего отметим, что данные задачи имеют единственное решение лишь при положительно определенном операторе т.е при $\theta_h > 0$.

Если задачи (2) и (3) имеют единственные решения, то в силу конечности граничных условий ϕ , ψ и их производные ограничены. Следовательно, ограничены и аналитичны от своих параметров m и $\tilde{m}$. Рассмотрим условия, когда (2) или (3) имеет неединственное решение. Очевидно, что это условия совпадают с условиями существования нетривиального решения однородной, т.е. с нулевыми граничными условиями, задачи (2). Рассмотрим это условие для одномерной бинарной задачи протекания тока.



В этом случае $m(h_1)$ является проводимостью, а -- $\tilde{m}(h_1)$ сопротивлением образца. В каждом слое потенциал меняется линейным образом с тангенсом наклона $t_i = -E_{ni}$, зависящим только от локальных свойств материала и внешних условий, но не от толщины слоя. В силу непрерывности нормальной составляющей тока на границе слоев $h_{i+1}t_{i+1} = h_i t_i$ или $t_i = t_k / h_i$.
Нетривиальное решение есть, если $\sum_i d_i t_i = 0$. Для бинарной смеси имеем, выбирая второй материал в качестве матрицы $h_1 t_1 = t_2$ и $t_1 D_1 = -t_2 D_2$, где D_i суммарная толщина слоев, занимаемых *i*-ым материалом. Соотношение $h_1 = -D_1 / D_2$ или

$$\varepsilon_1 = -\frac{p}{1-p}\varepsilon_{mat}$$

обеспечивает для концентраций включений

$$p = D_1 / (D_1 + D_2)$$

существование нетривиального решения.

Заметим, что полученное условие существования нетривиального решения однородной задачи означает, что сопротивления системы $\tilde{m}\left(h_1\right)=\dfrac{D_1\tilde{h}_1+D_2}{D}=1-p+p\tilde{h}_1$ равно нулю, а проводимость $m\left(h_1\right)=\dfrac{h_1/(1-p)}{h_1+p/(1-p)}$ обращается в бесконечность. Это утверждение остается справедливым для любой размерности.

Действительно, если сопротивление системы равно нулю, нулевая разность потенциалов на противоположных обкладках конденсатора может вызвать ненулевой полный ток. Полный ток через систему равен $\int \theta_h \dfrac{\partial}{\partial n}\psi_0 dS$, где интеграл берется по любой плоскости, параллельной обкладкам конденсатора. Следовательно, ψ_0 не тождественна нулю. Иными словами функция $m\left(h_1\right)$ имеет полюса там, где $\tilde{m}\left(h_1\right)$ имеет нули и наоборот.

Для оценки местоположения этих полюсов рассмотрим тождество

$$0=\int\phi^*\nabla\left(\theta_h\nabla\phi\right)dV=\int\left[\nabla\left(\phi^*\theta_h\nabla\phi\right)-\theta_h\left(\nabla\phi^*\nabla\phi\right)\right]dV=$$

$$=\int\phi^*\theta_h\nabla\,\phi dS\Big|_{x=0}^{x=L}-\int\left(\theta_1 h+\theta_2\right)\left(\nabla\phi^*\nabla\phi\right)dV=$$

$$=\phi^*(L)\left\langle D_n\right\rangle-\int\left(\theta_1 h+\theta_2\right)\left(\nabla\phi^*\nabla\phi\right)dV=$$

$$=\tilde{m}^*L\left\langle D_n\right\rangle-\int\left(\theta_1 h+\theta_2\right)\left(\nabla\phi^*\nabla\phi\right)dV$$

Если $\tilde{m}=0$, то $\int\left(\theta_1 h+\theta_2\right)\left(\nabla\phi^*\nabla\phi\right)dV=0$

Последнее возможно если h действительно и отрицательно.

Докажем, что все полюса m имеют вычеты первого порядка. Для этого рассмотрим производную $\partial\tilde{m}\left(\tilde{h}_1\right)/\partial\tilde{h}_1$.
Для этого перейдем к переменной $\theta_{\tilde{h}} = 1/\theta_h = \theta_1\tilde{h}_1 + \theta_2$

$$\theta_{\tilde{h}}\theta_h = 1 \qquad \tilde{m} = \frac{\int\theta_h\left(\theta_{\tilde{h}}\theta_h\nabla\phi\right)^2 dV}{V} = \frac{\int\theta_{\tilde{h}}\left(\theta_h\nabla\phi\right)^2 dV}{V}$$

$$\frac{\partial\tilde{m}}{\partial\tilde{h}_1} = \frac{1}{V}\int dV\left[\frac{\partial\theta_{\tilde{h}}}{\partial\tilde{h}_1}\left(\theta_h\nabla\phi\right)^2 + \theta_{\tilde{h}}\frac{\partial\left(\theta_h\nabla\phi\right)^2}{\partial\tilde{h}_1}\right] =$$

$$= \frac{1}{V}\int dV\left[\theta_1\left(\theta_h\nabla\phi\right)^2 + 2\underbrace{\theta_{\tilde{h}}\theta_h}_{=1}\nabla\phi\frac{\partial}{\partial\tilde{h}_1}\left(\theta_h\nabla\phi\right)\right] =$$

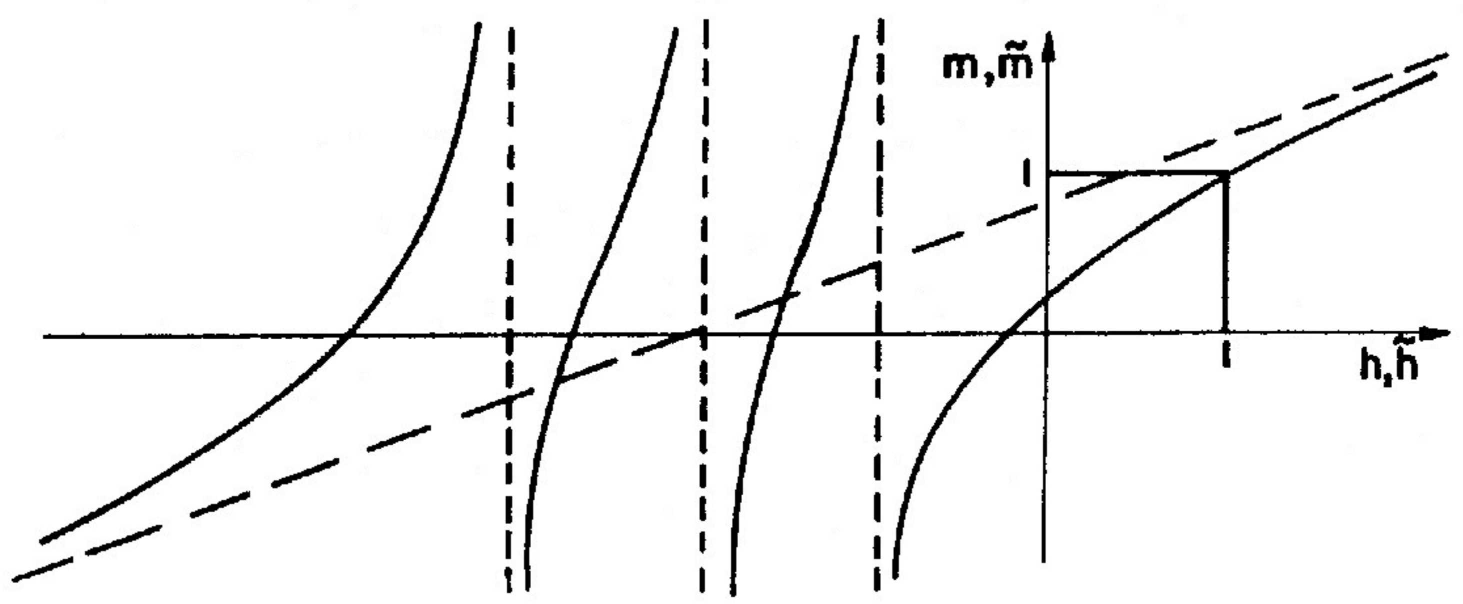
$$= \frac{1}{V}\int dV\left[\theta_1\left(\theta_h\nabla\phi\right)^2 + 2\nabla\left(\phi\frac{\partial}{\partial\tilde{h}_1}\left(\theta_h\nabla\phi\right)\right) - 2\phi\frac{\partial}{\partial\tilde{h}_1}\underbrace{\nabla\left(\theta_h\nabla\phi\right)}_{=0}\right] =$$

$$= \frac{1}{V}\int dV\left[\theta_1\left(\theta_h\nabla\phi\right)^2\right] + \frac{2\phi(L)}{V}\frac{\partial\overbrace{\int\theta_h\nabla\phi dS}^{=0}}{\partial\tilde{h}} = \frac{1}{V}\int dV\left[\theta_1\left(\theta_h\nabla\phi\right)^2\right]$$

$$\left\langle\theta_h\nabla\phi\right\rangle = 1$$

Из положительности производной вытекает, что все нули $\tilde{m}\left(\tilde{h}_1\right)$ некратные, а следовательно полюса $m\left(h_1\right)$ простые. Если $\partial\tilde{m}\left(\tilde{h}_1\right)/\partial\tilde{h}_1 > 0$ существует везде, то нули $\tilde{m}\left(\tilde{h}_1\right)$ не имеют точек сгущения. В частности точка $h_1 = \infty$, соответствующая точке $\tilde{h}_1 = 0$, не является точкой сгущения. Т.о., $m\left(h_1\right)$ имеет не более чем счетное число полюсов и является мероморфной.

Очевидно, что нули и полюса чередуются. Но так как функция $\tilde{m}\left(\tilde{h}_1\right)$ имеет конечное число нулей в окрестности нулевой точки, то функция $m\left(h_1\right)$ имеет конечное число полюсов в окрестности бесконечно удаленной точки. Следовательно полюсов и нулей конечное число.

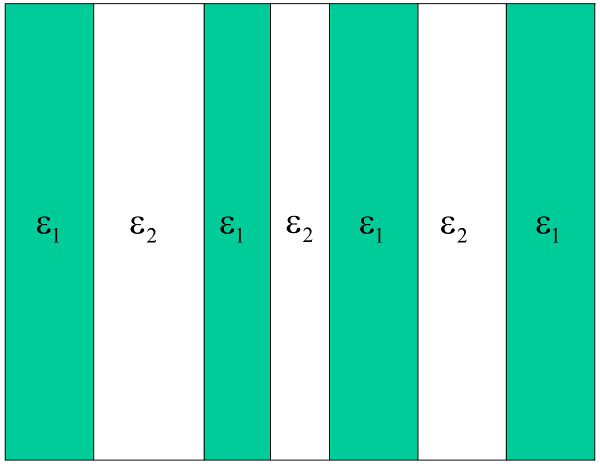


$$\varepsilon_{eff} = p_1\varepsilon_1 + (1 - p_1)\varepsilon_2$$

$$m(h) = p_1 h + (1 - p_1)$$

Полюс на

∞



$$\frac{1}{\varepsilon_{eff}} = p_1\frac{1}{\varepsilon_1} + (1 - p_1)\frac{1}{\varepsilon_2}$$

$$m(h) = \frac{h}{p_1 + (1 - p_1)h}$$

Полюс в

$$-\frac{p_1}{(1 - p_1)}$$

Гарнетт

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_2 + 3p\frac{\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2) - p(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}$$

$$m(h) = 1 + \frac{p_1(h-1)}{p_1 + (1 - p_1)(h-1)/3}$$

Полюс в

$$1 - \frac{3}{(1 - p_1)}$$

$$m(h) =$$

ТЭС

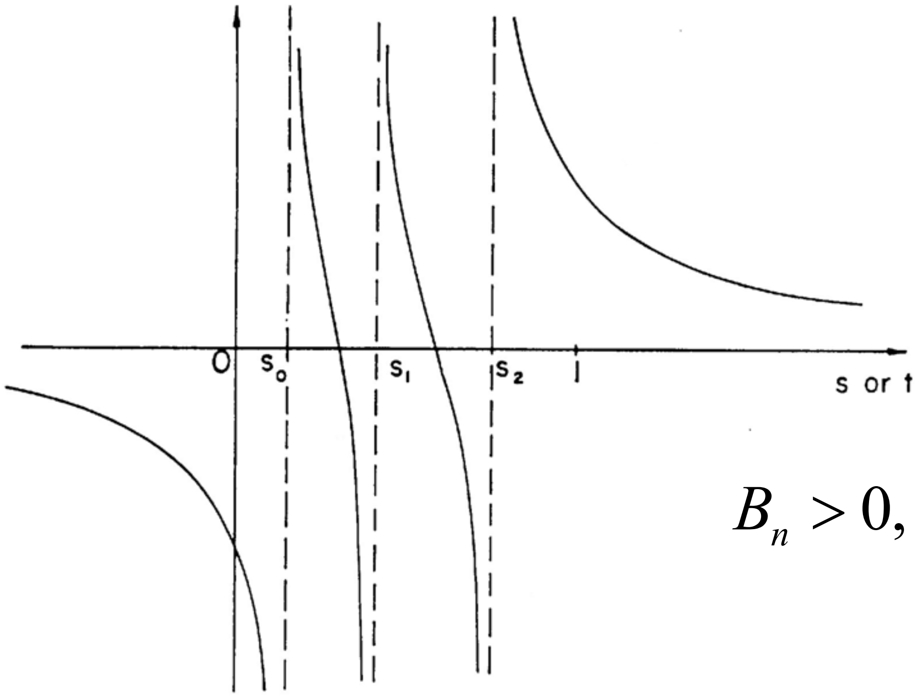
$$= \frac{1}{2(d-1)}\left\{(dp_1 - 1)h + (dp_2 - 1) \pm \begin{bmatrix}(dp_1 - 1)^2 h^2 + 2(d - 1 + d^2 p_1 p_2)h + \\ +(dp_2 - 1)^2\end{bmatrix}^{1/2}\right\}$$

Основные соотношения

В дальнейшем удобно перейти к новым переменным $s = 1/(1-h) = \varepsilon_2/(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$

$$F(s) = 1 - m(h) = \left(\varepsilon_2 - \varepsilon_{eff}\right)/\varepsilon_2$$

Функция $F(s)$ также как и $m(h)$ имеет конечное число полюсов, причем все они сосредоточены на сегменте $s \in [0,1)$
По теореме Коши $F(s)$ можно представить в виде



$$F(s) = \sum_{\alpha} \frac{B_\alpha}{s - s_\alpha}$$

$$B_n > 0, \quad 1 > s_0 > s_1 > ... > s_n$$

Гарнетт

$$F(s)=\int\frac{B(x)}{s-x}dx=\frac{p}{s-(1-p)/3}$$

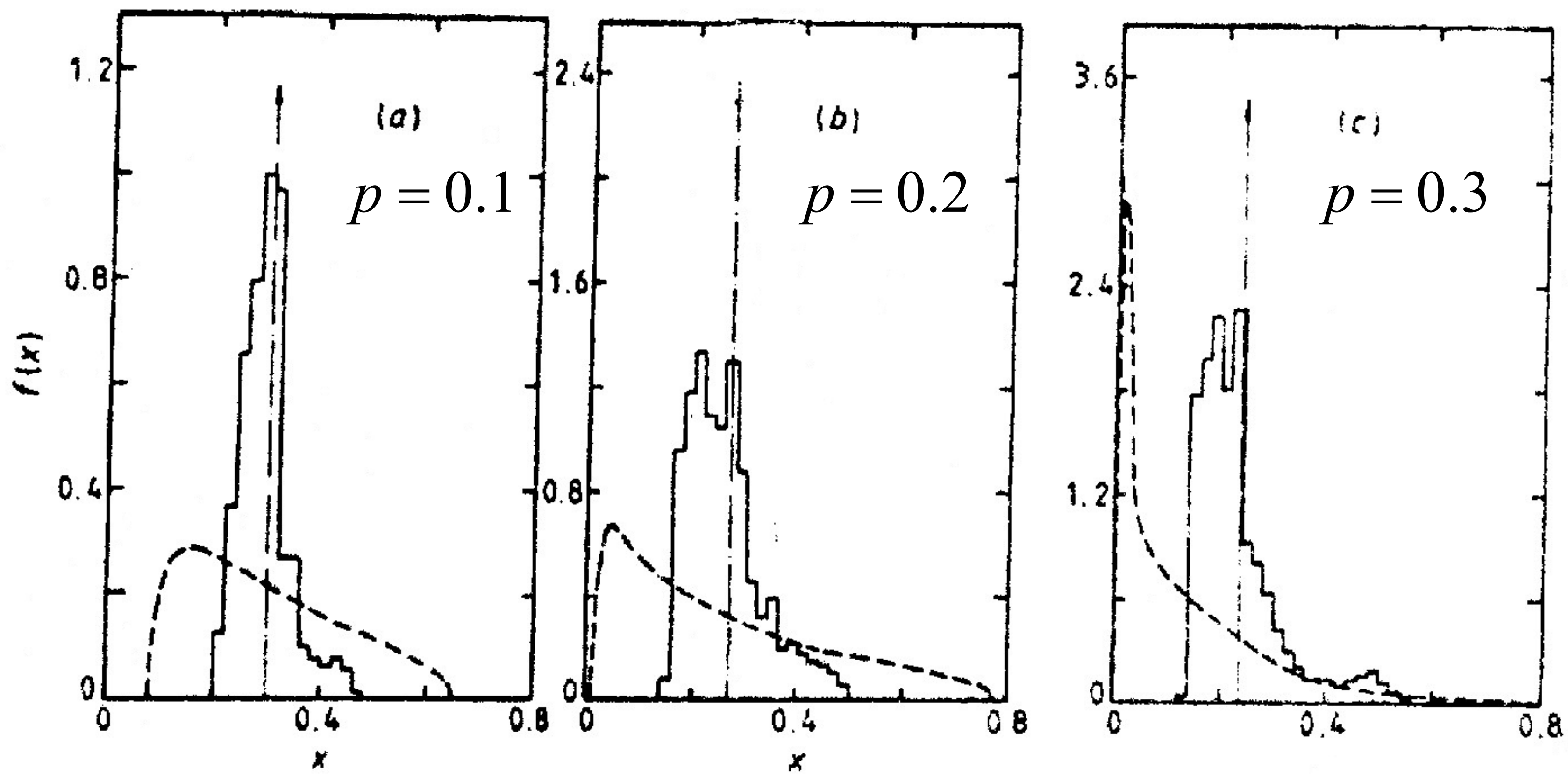
$$B(s)=p\delta\left(s-(1-p)/3\right)$$

ТЭС

$$F(s)=\frac{1}{4s}\left\{3s+sp-1-\left[9s^2-6(1+p)s+(1-3p)^2\right]^{1/2}\right\}$$

$$B(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{4\pi x}\left(-9x^2+6(1+p)x-(1-3p)^2\right)^{1/2} & x_1\le x\le x_2\\ 0 & x\notin[x_1,x_2]\end{cases}$$

$$x_{1,2}=\frac{1}{3}\left(1+p\pm 2\sqrt{2p(1-p)}\right)$$



Пунктир –ТЭС, штрих-пунктир – Гарнетт, сплошная линия – численный эксперимент (Y. Kantor, D. J. Bergman “The optical properties of cermets from the theory of electrostatic resonance” J. Phys. C. 15, (1982) 2033-2042)

$$h = 0 \qquad m(0) \geq 0 \qquad h = 1 - \frac{1}{s} \qquad F(1) = \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}}{1 - s_{\alpha}} = 1 - m(0) \leq 1$$

В точке $h = 1$ ($s = \infty$) функция $m = 1$, следовательно

$$F(\infty) = 1 - m = 0$$

в этой точке $\psi = -x$ и $\dfrac{\partial m\left(h_1\right)}{\partial h_1} = \dfrac{\left(\int \theta_1 \left(\nabla\psi\right)^2 dV\right)_{h=1}}{V} = \dfrac{\left(\int \theta_1 dV\right)}{V} = p$

$$\frac{\partial}{\partial h} m(h) = -\frac{\partial}{\partial h} F(s) = -s^2 \frac{\partial}{\partial s} F(s) = s^2 \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}}{\left(s - s_{\alpha}\right)^2} \xrightarrow[s \to \infty]{} \sum_{\alpha} B_{\alpha}$$

$$\boxed{\sum_{\alpha} B_{\alpha} = p}$$

Варьируя параметры B_α, s_α в $F(s) = \sum_\alpha \frac{B_\alpha}{s - s_\alpha}$, получим

$$\delta F(s) = \sum_\alpha \left(\frac{\delta B_\alpha}{s - s_\alpha} + \frac{B_\alpha \delta s_\alpha}{\left(s - s_\alpha\right)^2} \right)$$

Так как $\sum_\alpha B_\alpha = p$, то

$$\delta B_0 = -\sum \delta B_\alpha$$

Окончательно

$$\delta F(s) = \sum_{\alpha>0} \left(\delta B_\alpha \frac{\left(s_\alpha - s_0\right)}{\left(s - s_\alpha\right)\left(s - s_0\right)} + \delta s_\alpha \frac{B_\alpha}{\left(s - s_\alpha\right)} \right)$$

$s > 1,\ s < 0$ $\qquad < 0 \qquad > 0$

$$B_n > 0, \quad 1 > s_0 > s_1 > \ldots > s_n$$

Чтобы увеличить $F(s)$ надо уменьшать B_α. Верхний предел достигается, когда все $B_\alpha = 0$ $(\alpha > 0)$

$$\sum_\alpha B_\alpha = p \Rightarrow B_0 = p$$

Из $\sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}}{1-s_{\alpha}} \leq 1$ следует, что $\frac{p}{1-s_0} \leq 1$ или $s_0 \leq 1-p$

т.е

$$\boxed{F(s) < \frac{p}{s-(1-p)}}$$

Для получения оценки снизу, мы должны положить все

$s_{\alpha} = s_0$ и $s_0 = 0$

$$\sum_{\alpha} B_{\alpha} = p \Rightarrow B_0 = p$$

$$\boxed{F(s) > \frac{p}{s}}$$

Подставляя проводимости, получим ограничения Фойгта-Ройса

Для изотропно распределенных включений

$$\left(\frac{\partial^2 m(h)}{\partial h^2}\right)_{h=1} = \frac{2p(1-p)}{d} \qquad \sum_\alpha s_\alpha B_\alpha = \frac{p(1-p)}{d}$$

$$\sum_\alpha s_\alpha B_\alpha = \frac{p(1-p)}{d} \Rightarrow \sum_\alpha \left(s_\alpha \delta B_\alpha + B_\alpha \delta s_\alpha\right) = 0$$

Исключая $\delta B_0, \delta s_0$ $\quad B_n > 0, \quad 1 > s_0 > s_1 > \ldots > s_n$

$$\delta F(s) = \sum_{\alpha>0}\left(\delta B_\alpha \frac{\left(s_\alpha - s_0\right)^2}{\left(s - s_\alpha\right)\left(s - s_0\right)^2} + \delta s_\alpha \frac{B_\alpha\left(s_0 - s_\alpha\right)\left(s_0 + s_\alpha - 2s\right)}{\left(s - s_\alpha\right)^2\left(s - s_0\right)^2}\right)$$

$s > 1,$ $\qquad > 0 \qquad < 0$

Для получения оценки снизу, мы должны найти конфигурацию, когда $\delta F(s) > 0$. Для этого надо положить все $B_\alpha = 0 \; (\alpha > 0)$

$$\sum_{\alpha} B_{\alpha} = p \Rightarrow B_0 = p$$

$$\sum_{\alpha} s_{\alpha} B_{\alpha} = \frac{p(1-p)}{d} = s_0 B_0 \Rightarrow s_0 = (1-p)/d$$

$$\boxed{F(s) > \frac{p}{\left(s-(1-p)/d\right)}}$$

Для получения оценки сверху, введем новые переменные.

$$t = 1 - s, \;\; G(t) = (1 - sF(s))/(1-s)$$

$$\boxed{G(t) > \frac{(1-p)}{(t-p/d)}}$$

Подстановка в эти выражения диэлектрических проницаемостей дает ограничения со значениями Хашина-Штрикмана

$$\varepsilon_1 + \frac{1-p}{1/\left(\varepsilon_2-\varepsilon_1\right)+p/(d\varepsilon_1)} < \varepsilon_{\text{eff}} < \varepsilon_2 + \frac{p}{1/\left(\varepsilon_1-\varepsilon_2\right)+\left(1-p\right)/(d\varepsilon_2)},$$

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_2$$

1. *Санчес-Паленсия Э.*, Неоднородные среды и теория колебаний, Мир, Москва 1984
2. *Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П.* Осреднение процессов в периодических средах Наука, Москва 1984
3. *Bergman D. J.* // Phys. Rep. 1978 V. **43**, №9, P. 377
4. *Bergman D. J.* // Ann. Phys. 1982. V. 138, P. 78
5. *Bergman D. J.* in Homogenization and Effective Media eds. J.L. Ericksen, D. Kinderlehrer, R. Kohn and J.-L. Lions Springer-Verlag, NY 1986 p.27
6. *Bergman D. J.* // Phys. Rev. B. 1989 V. 39, P. 4598
7. *Bergman D. J.*, *Stroud D.* // Solid State Phys 1992. V. 46, P. 147
8. *Bergman D. J. Stroud D.* // Phys. Rev. B 1980. V. 22, P. 3527
9. *Milton G. W.* // Appl. Phys. A 1981. V. 26, P. 207
10. *Milton G. W.* // J. Appl Phys. 1981. V. 52, P. 5294