КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.21:620.19

ОБРАТИМАЯ ФРАКТАЛЬНАЯ АГРЕГАЦИЯ В ПОЛИКЛАСТЕРНЫХ АМОРФНЫХ ТЕЛАХ: РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КЛАСТЕРОВ ПО МАССАМ

А.А.Шиян

287320, ул. 1-го Мая, 58–23, Хмельник, Винницкая обл., Украина
(Поступило в Редакцию 27 сентября 1994 г.)

Поликластерные аморфные тела (металлические сплавы, многокомпонентные полупроводники, композиционные и полимерные материалы) находят все большее применение в современных технологиях. Многие физические свойства таких материалов определяются параметрами, характеризующими фрактальные свойства дисперсной фазы. Например, механические свойства поликластерного аморфного тела зависят от функции распределения кластеров по массам [1], эффективная энергия активации поверхностных химических реакций определяется соотношением площадей дисперсной фазы и наполнителя [2], а энергия разлома сталей зависит от фрактальных свойств поверхности разлома и изменяется с температурой одновременно с изменением фрактальных характеристик поверхности, т.е. с изменением состояния фрактальной агрегации дисперсных частиц — кластеров [3].

В данном сообщении предложена точно решаемая модель для расчета распределения масс дисперсных включений при обратимой фрактальной агрегации в поликластерных аморфных телах.

Обратимость фрактальной агрегации означает [4], что одновременно необходимо производить учет процессов как агрегации частиц во фрактальные кластеры, так и распада кластеров, что приводит к установлению определенного динамического равновесия (устойчиво-неравновесного состояния). Сказанное можно выразить уравнением

$$\dot{N} = cN^a - dN^b, \quad 0 \leqslant a < b. \tag{1}$$

Здесь первый член описывает процесс фрактальной агрегации, а второй — процесс распада кластера из N частиц-«мономеров». Стационарное состояние достигается при $N_s = (c/d)^{1/(b-a)}$, причем при уменьшении степени неравновесности $N_s \to \infty$. Выражение (1) можно рассматривать как обобщение уравнения для роста плотных включений (с учетом истощения) [5,6] на случай необратимой фрактальной агрегации кластеров. Отметим, что уравнением (1) при $a = 1/3$ и $b = 4/3$ описывается обычный диффузионный рост плотных включений [6], а при $a = 2/3$ и $b = 5/3$ — кинетический режим роста [5].

Изменчивость окружающей агрегат среды, имеющая вероятностную природу [1,4] (ею, например, может моделироваться внешнее воздействие), приводит к необходимости перехода от (1) к соответствующему стохастическому уравнению. Такую изменчивость можно свести к шумовому вкладу либо в процесс агрегации, либо в процесс распада. Для определенности рассмотрим шумовой вклад в процесс агрегации, когда (1) принимает вид

$$\dot{N} = \lambda N^a - N^b + \xi_t N^a, \quad \lambda = \langle c \rangle / d. \tag{2}$$

Шумовая добавка ξ_t описывает, например, флуктуации текущего значения неравновесности системы или же пространственные неоднородности аморфного тела.

В предположении малых времен корреляции величину ξ_t можно представить как белый шум интенсивности $\langle \xi_t^2 \rangle = \sigma^2$. Тогда от (2) удобно перейти к соответствующему уравнению Фоккера–Планка для плотности вероятности $P(N,t)$, записанному в отвечающей условиям нашей задачи интерпретации Стратоновича, причем $P(N,t)$ с течением времени стремится к стационарной $P_s(N)$ [7]. Для последней легко находится аналитическое выражение

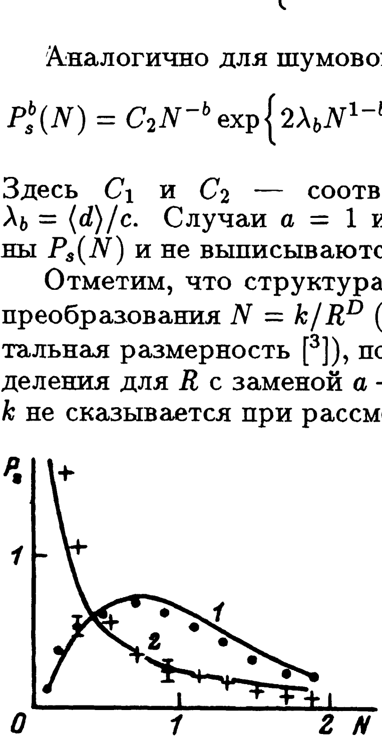
$$P_s^a(N) = C_1 N^{-a} \exp\left\{ 2\lambda N^{1-a} \left[1 - (1-a) N^{b-a} / \lambda(b+1-2a)\right] / (1-a)\sigma^2 \right\}. \tag{3}$$

Аналогично для шумовой добавки в процесс распада получаем

$$P_s^b(N) = C_2 N^{-b} \exp\left\{ 2\lambda_b N^{1-b} \left[1 - (b-1) N^{b-a} / \lambda_b(2b-a-1)\right] / (b-1)\sigma^2 \right\}. \tag{4}$$

Здесь C_1 и C_2 — соответствующие нормировочные множители, $\lambda_b = \langle d \rangle / c$. Случаи $a = 1$ или $b = 1$ приводят к иному виду величины $P_s(N)$ и не выписываются в целях экономии места.

Отметим, что структура уравнения (1) инвариантна относительно преобразования $N = k/R^D$ (где R — радиус кластера, а D — его фрактальная размерность [3]), поэтому (3) и (4) справедливы и как распределения для R с заменой $a \to aD/(D-1)$ и $b \to bD/(D-1)$ (множитель k не сказывается при рассмотрении стационарного решения).



Функция распределения кластеров по массам. Результаты численного моделирования [4] (точки и кресты) и расчета по формуле (3) при $a = 3/4$, $b = \lambda = 1$, $\sigma^2 = 0.21$ (*1*) и $\sigma^2 \gg 1$ (когда $P_s^a(N) \simeq 0.3 \cdot N^{-3/4}$) (*2*).

При $a < 1$ распределение $P_s^a(N)$ с ростом интенсивности шума σ^2 изменяет форму от одномодальной до монотонно спадающей, т.е. демонстрирует индуцированный шумом переход. На рисунке представлены результаты численного моделирования обратимой агрегации [4] и результаты расчета $P_s^a(N)$ при $a = 3/4$ и $b = \lambda = 1$ при двух разных значениях интенсивности шума (большей подвижности кластеров в [4] соответствует в нашей модели бóльшая интенсивность шума). Полученное хорошее количественное совпадение указывает на перспективность использования предложенной модели для прогнозирования свойств поликластерных аморфных тел различного происхождения. Так, некоторые характеристики этих материалов являются критическими по отношению к размерам дисперсной фазы (проводимость, хрупкость и т.п.). Тогда вероятность изменения свойств данного образца может быть рассчитана по формуле $P^{a,b} = \int_{kR_c^D}^{\infty} dN\, P_s^{a,b}(N)$, где R_c — критическое значение размеров кластера (например, толщины аморфной пленки). Перспективным является также использование $P_s^{a,b}(N)$, как для описания изменения свойств таких материалов от предыстории их приготовления и использования, так и для моделирования процесса их старения.

В заключение отметим, что аналогичным образом может быть описана обратимая фрактальная агрегация пор в твердом теле.

Автор благодарен Фонду Сестер Кожухарь за поддержку настоящей работы, а О.Н. Баевой — за долготерпение.

Список литературы

[1] Бакай А.С. Поликластерные аморфные тела. М. (1987). 192 с.
[2] Селиванов С.Е., Шиян А.А. Хим. физика **11**, *2*, 285 (1992).
[3] Федер Е. Фракталы. М. (1991). 254 с.
[4] Кольб М. Фракталы в физике /Под ред. Л. Пьетронеро и Э. Тозатти. М. (1988). С. 365–369.
[5] Шиян А.А. Изв АН СССР. Энергетика и трансп., *1*, 164. (1989).
[6] Шиян А.А. Металлофизика **10**, *4*, 80 (1988).
[7] Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. М. (1987). 400 с.