

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

---

Физический факультет  
Кафедра магнетизма

# Моделирование магнитодиэлектрического эффекта в композитных магнитных эластомерах

Дипломная работа  
студента 619 группы  
Исаева Данила Алексеевича

**Научный руководитель:**  
к.ф.-м.н. ассистент  
Семисалова Анна Сергеевна

Зав. кафедрой магнетизма  
профессор Перов Н.С.

Москва 2014 г.

# Содержание

<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>1. Обзор литературы</b>	<b>4</b>
1.1. Магнитореологические эластомеры . . . . .	4
1.1.1. Механические свойства . . . . .	4
1.1.2. Электрические свойства . . . . .	5
1.1.3. Практическое применение . . . . .	6
1.2. Моделирование . . . . .	8
1.2.1. Структура . . . . .	8
1.2.2. Магнитное взаимодействие частиц . . . . .	9
1.2.3. Пластичность . . . . .	10
1.2.4. Моделирование упругих свойств . . . . .	11
1.2.5. Магнито-механические свойства феррогеля . . . . .	12
<b>2. Физическая и математическая модель</b>	<b>14</b>
2.1. Физическая модель . . . . .	14
2.2. Расчет магнитного поля . . . . .	14
2.3. Взаимодействие с упругой матрицей . . . . .	15
2.4. Численный метод . . . . .	15
2.4.1. Уравнение движения . . . . .	15
2.4.2. Алгоритм Верле . . . . .	15
2.5. Расчет емкости . . . . .	17
2.5.1. Приближение . . . . .	17
2.5.2. Метод заметающей линии . . . . .	18
<b>3. Результаты</b>	<b>20</b>
3.1. Реализация . . . . .	20
3.2. Зависимость от степени упорядоченности . . . . .	21
3.3. Зависимость от объемной концентрации . . . . .	22
3.4. Зависимость от внешнего магнитного поля . . . . .	25
3.5. Зависимость от толщины образца . . . . .	25
3.5.1. Образец А – Куб . . . . .	27
3.5.2. Образец В – Параллелепипед . . . . .	28

3.5.3. Образец С – Тонкая пластинка . . . . .	29
3.5.4. Обсуждение . . . . .	30
<b>Основные результаты</b>	<b>32</b>
<b>Список литературы</b>	<b>33</b>
<b>Список публикаций по результатам работы</b>	<b>36</b>

Данная работа посвящена изучению особенностей электрических свойств магнитореологических эластомеров. Они представляют собой класс "умных" композитных материалов, способных менять свои физические свойства под действием внешних факторов. Магнитореологические эластомеры отличаются рядом интересных свойств - эффект памяти формы, управляемые механические свойства и т.д. К настоящему времени собран внушительный экспериментальный и теоретический материал о влиянии магнитного поля на механические и деформационные свойства, в то время как работ по изучению изменения электрических характеристик данных эластомеров под действием магнитного поля не так много. Недавно экспериментально был обнаружен магнитодиэлектрический эффект в магнитореологических эластомерах - изучалось влияние магнитного поля на емкость плоского конденсатора, наполненного эластомером.

Целью данной работы является изучение влияния внешнего однородного магнитного поля на электрические свойства магнитореологического эластомера. В ходе выполнения решалась задача разработки компьютерной модели для расчета емкости плоского конденсатора, наполненного магнитореологическим эластомером, и с ее помощью изучалось влияние однородного магнитного поля на эффективную диэлектрическую проницаемость магнитореологического эластомера.

# 1. Обзор литературы

## 1.1. Магнитореологические эластомеры

Магнитореологические материалы являются относительно новым видом «умных» композитных материалов, способных менять свои физические свойства под действием внешних факторов: магнитного поля, температуры, внешних напряжений. Они состоят из магнитных микро- или наночастиц, распределенных в упругой полимерной матрице. По типу матрицы различают магнитореологические жидкости, гели и эластомеры. В зависимости от распределения частиц в матрице, материалы делят на изотропные и анизотропные. В первом случае частицы распределены по объему равномерно. Во втором во время полимеризации в магнитном поле, частицы образуют «цепочечную» структуру, выстраиваясь вдоль линий внешнего магнитного поля (рис. 1).

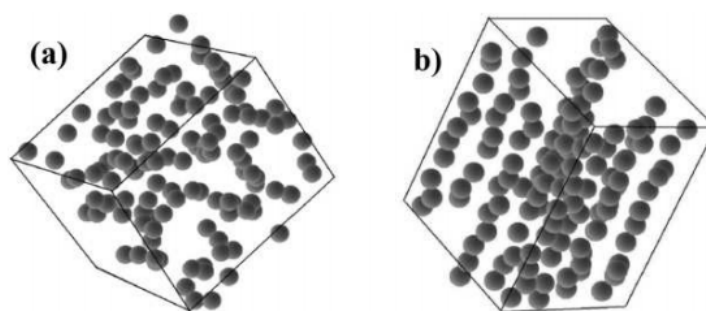


Рис. 1. Схематическое расположение магнитных частиц в полимерной матрице [1].

### 1.1.1. Механические свойства

В настоящее время влияние внешнего магнитного поля на механические свойства магнитореологических эластомеров достаточно хорошо изучено [2],[3],[4]. Одним из самых впечатляющих эффектов является магнитодеформационный эффект в эластомерах, часто называемый "магнитострикцией" по аналогии с магнитострикционным эффектом, наблюдаемым в ферромагнетиках. Он заключается в изменении формы образца под действием внешнего магнитного поля, однако, в отличие от традиционного, он связан не с изменением формы магнитных частиц, заполняющих эластомер. Под действием внешнего магнитного поля частицы стремятся выстроиться в цепочки вдоль направления внешнего поля. Однако упругая матрица мешает им, что приводит лишь к небольшому смещению частиц. Однако и его достаточно для того,

чтобы весь образец изменил форму (рис 2). Смещение частиц внутри эластомера

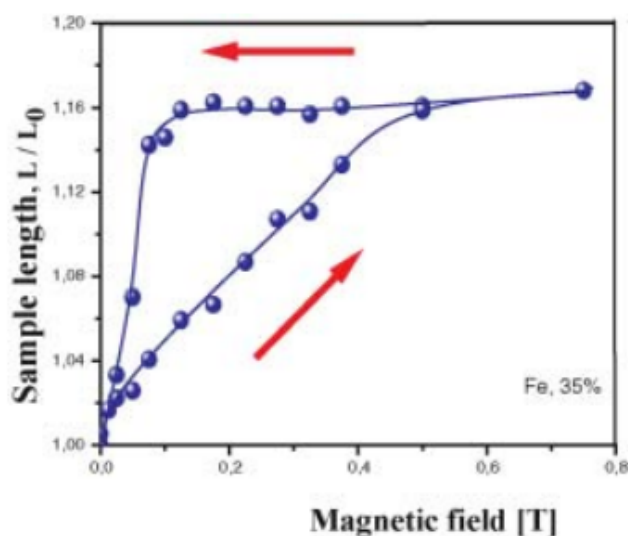


Рис. 2. Относительное изменение длины образца под действием внешнего однородного магнитного поля [2].

также является причиной другого примечательного эффекта – памяти формы. Если к магнитоологическому эластомеру приложить механическую силу, он, как правило, восстановит свою форму, после прекращения действия силы. Однако, если то же проделать во внешнем магнитном поле, эластомер останется деформированным и вернется в начальное состояние только после выключения внешнего магнитного поля.

### 1.1.2. Электрические свойства

В последние годы интерес к электрическим свойствам магнитоологических эластомеров достаточно сильно возрос. Ряд исследований посвящен изучению магнито-диэлектрического эффекта - относительному изменению диэлектрической проницаемости эластомера при помещении его в магнитное поле:

$$MDE = \frac{\epsilon_H - \epsilon_0}{\epsilon_0}$$

В работе А. Семисаловой и др. [5] был исследован магнито-диэлектрический эффект в магнитоологических эластомерах. Для проведения исследования образец помещался между обкладками плоского конденсатора. Это позволяло изучить влияние внешнего однородного постоянного магнитного поля на изменение эффективной

где  $\epsilon_H$  и  $\epsilon_0$  - эффективная диэлектрическая проницаемость эластомера в магнитном поле и его отсутствии соответственно.

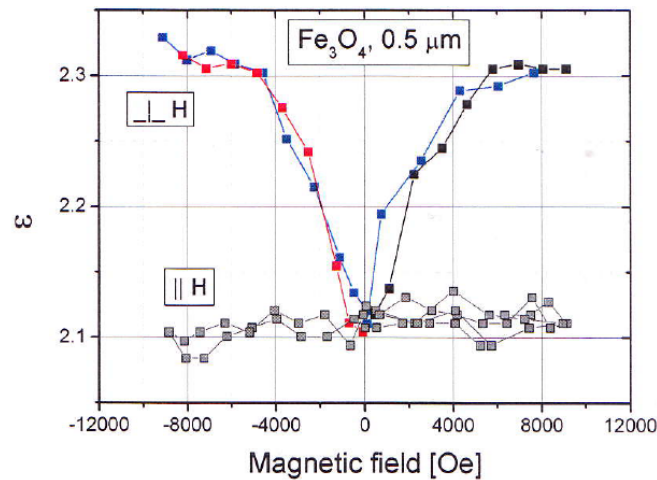


Рис. 3. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости образца с частицами  $Fe_3O_4$  от величины и направления внешнего поля. [5].

диэлектрической проницаемости образца. Было выявлено наличие анизотропного изменения емкости материала в зависимости от направления магнитного поля. Также было установлено, что при увеличении напряженности внешнего магнитного поля величина изменения емкости образца выходит на насыщение.

Схожий подход использовался в работах I.Vica и др. [6],[7]. Было получено, что емкость плоского конденсатора, заполненного эластомером, увеличивается почти в два раза при помещении его в магнитное поле величиной 1.1 кЭ. Также были проведены измерения для различных объемных концентраций частиц. Установлено, что увеличение концентрации ведет также и к увеличению магнитодиэлектрического эффекта.

### 1.1.3. Практическое применение

Способность менять свои свойства, под действием внешних факторов, позволяет применять магнитореологические эластомеры в самых разных областях: от медицины до машиностроения. Возможность создания магнитореологических эластомеров различной жесткости, позволяет использовать приборы на их основе в протезировании (рис. 4) для поглощения колебаний.

Также магнитореологические эластомеры широко применяются в автомобилестроении в качестве демпферов, систем контроля давления или поглощения ударов

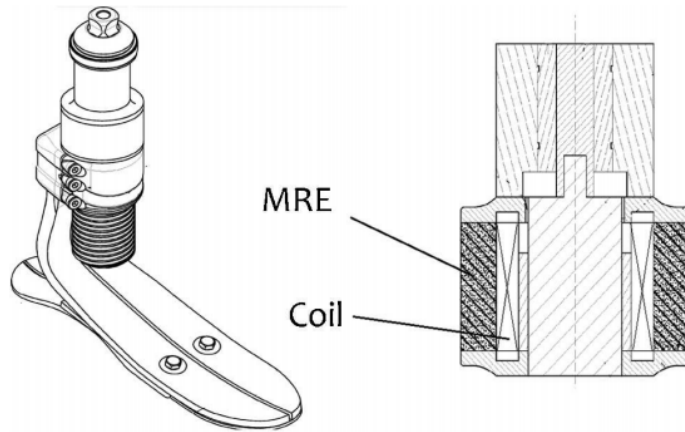


Рис. 4. Ножной протез [8].

(рис 5).

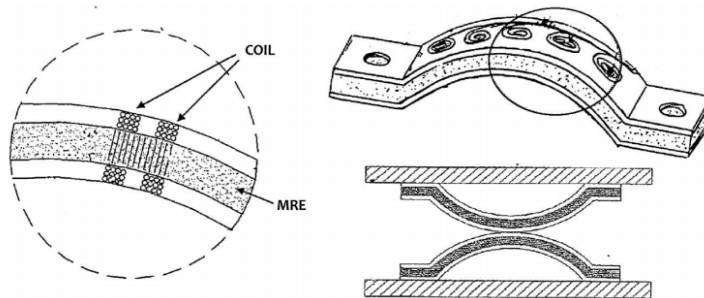


Рис. 5. Демпфер на основе магнитореологического материала[8].



## 1.2. Моделирование

Очень важной является задача моделирования свойств магнито-реологических эластомеров. В настоящий момент существует ряд подходов к моделированию как взаимодействия частиц внутри матрицы друг с другом, так и их взаимодействия с матрицей.

Существует два основных метода моделирования взаимодействия частиц с упругой матрицей. Первый – метод сплошной среды, в котором учитывается влияние частиц на упругие свойства материала. Вторым – метод, аналогичный молекулярной динамике. В этом случае учитывается взаимодействие каждой частицы с матрицей. Учет производится путем наложения различных связей на частицы: упругих стержней, цепочек частиц, пружинок.

Классической моделью взаимодействия магнитных частиц является модель диполь-дипольного взаимодействия. В этом случае магнитный момент каждой частицы полагается точечным и расположенным в ее центре.

### 1.2.1. Структура

Как уже говорилось выше, частицы в матрице стремятся выстроиться в "цепочки" вдоль направления внешнего магнитного поля. В работе [9] Хан и др. моделировали влияние микроструктуры эластомера на его механические свойства. В качестве численного метода использовался метод конечных элементов. Авторами была разработана модель упругой среды, заполненной металлическими частицами, для определения положения равновесия системы. В качестве структуры в данном случае была выбрана зигзагообразная (рис 6). Было исследовано изменение модулей сдвига и растяжения под действием магнитного поля.

Также в данной работе исследовались механические свойства вязкоупругих эластомеров и промоделировано влияние переменного магнитного поля на их свойства. Было получено, что при относительно низких частотах модуль упругости уменьшается по сравнению с более высокими частотами, а потери растут. Авторы объясняют это тем, что в этом случае большое влияние оказывает вязкость матрицы, что приводит к увеличению потерь энергии при релаксации.

Влияние распределения частиц внутри эластомера также было детально изучено в работе О. Столбова и др. [10]. Авторы изучали так называемый эффект "магнито-дипольной стрикции" – деформации, определяемой равенством магнитостатической

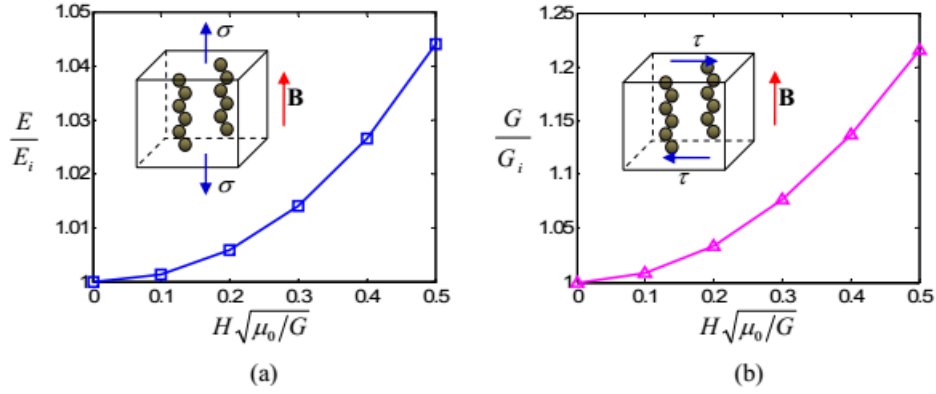


Рис. 6. Зависимость величины модуля растяжения (а) и сдвига (б) от величины внешнего магнитного поля для зигзагообразной структуры[9].

и упругой энергий. Было смоделировано влияние структуры на величину эффекта в тонких пленках и монослоях. Авторы разделяют эффект магнито-дипольной стрикции на внешний, определяемый внешним полем, и внутренний, обусловленный локальным взаимодействием частиц друг с другом и с матрицей. Установлено, что локальный эффект очень чувствителен к степени свободы частиц в матрице – расстояниям между частицами и их локальному порядку, и может как усиливать внешний эффект, так и подавлять его. Авторы разделяют частицы на два типа: "газовые" – изолированные частицы, чьи соседи находятся относительно далеко от них, и "кластерные" – близкорасположенные частицы, которые при приложении внешнего магнитного поля будут образовывать кластеры. Было показано, что большую роль играет отношение между этими типами частиц.

### 1.2.2. Магнитное взаимодействие частиц

Существенным недостатком модели диполь-дипольного взаимодействия является то, что она достаточно плохо работает, когда расстояния между частицами становятся близкими к их радиусу. В этом случае не учитывается влияние подмагничивания частиц друг другом. Этот вопрос подробно рассматривается в работе А. Биллер и др.[11]. Было исследовано парное магнито-статическое взаимодействие частиц на малых расстояниях. Получено, что взаимное влияние частиц приводит к возрастанию магнитного момента каждой из них. Также были определены области взаимного притяжения и отталкивания частиц и проведено сравнение анизотропии взаимодействия однородно намагниченных частиц и магнитнополяризующихся частиц.

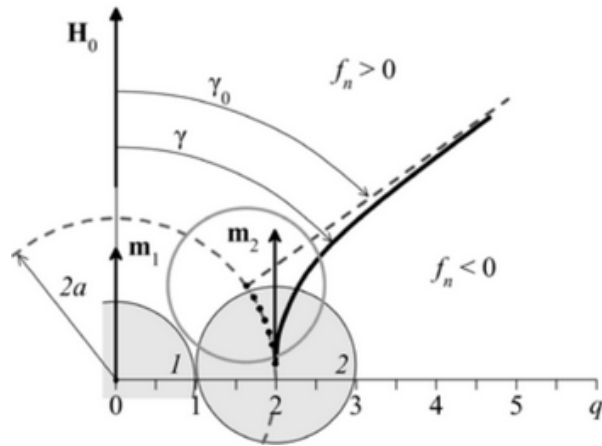


Рис. 7. Расположение областей взаимного притяжения и отталкивания частиц с однородной и неоднородной намагниченностью. Штриховая прямая линия отвечает нулевой силе притяжения диполей, сплошная – нейтральному положению магнито-поляризующихся частиц [11].

### 1.2.3. Пластичность

Моделированию и изучению пластичности магнитоологических эластомеров, вызванной приложением внешнего магнитного поля (магнитный эффект памяти), посвящены работы П. Меленева и др. [12], [13]. На основании качественного анализа экспериментальных данных, полученных в том числе самими авторами, ими предложена феноменологическая структурно-механическая модель описания пластичности: образец представляет собой сеть соединенных упругих элементов. Простейшая схема содержит две параллельные ветви: первая – линейная упругая пружина, отвечающая чистому эластомеру, вторая – последовательно соединенные пружина и элемент Сен-Венана, характеризуемый неким значением напряжения сдвига, отвечающий кластеру частиц. Соединение кластеров образует так называемую С-сеть, а чистый эластомер – Е-сеть. Во время образования С-сети она стремится растянуть образец вдоль направления поля, в то время как Е-сеть стремится сохранить форму образца. Таким образом, положение равновесия определяется балансом этих двух сетей. Авторы провели численное моделирование деформаций образца в рамках данной структурно-механической модели методом конечных элементов и получили хорошее соответствие экспериментальным данным.

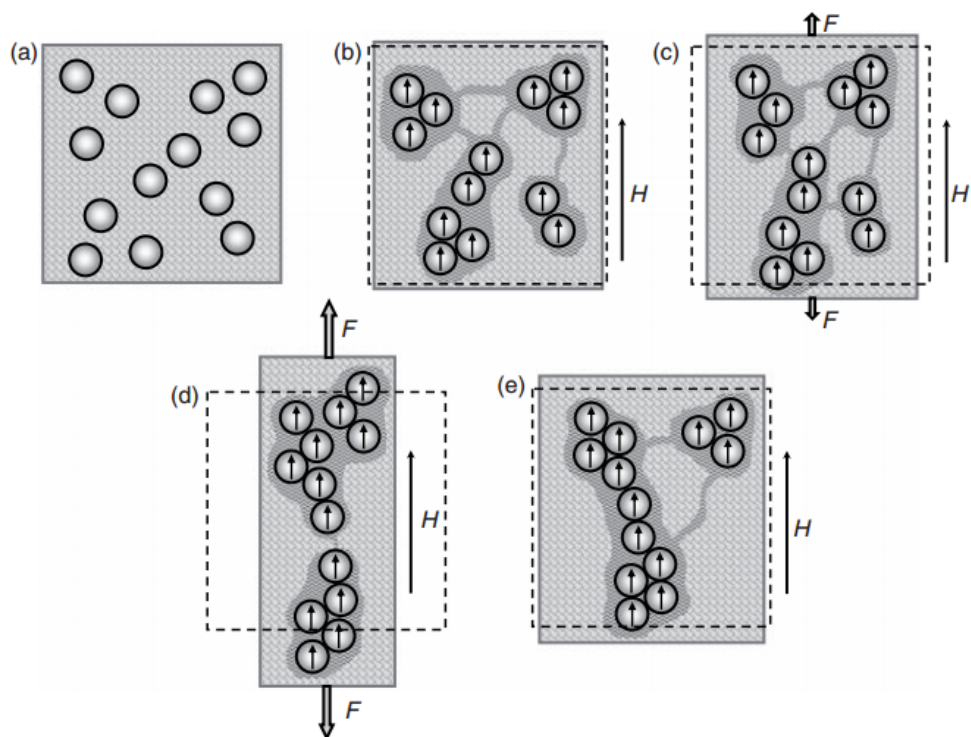


Рис. 8. Схематичное изображение изменения структуры частиц в магнитореологическом эластомере под действием внешнего магнитного поля. (а) - начальное состояние; (б) - включение внешнего поля, начинает образовываться С-сеть; (с) - прикладывается внешняя слабая сила. С- и Е- сети действуют против нее; (д) - внешняя сила увеличивается, кластеры частиц растягиваются и перестраиваются; (е) - внешняя сила снимается, однако образец не возвращается в начальное состояние (б) [13].

#### 1.2.4. Моделирование упругих свойств

В работах Ю. Райхера [14]-[16] проводилось численное моделирование свойств магнитореологических эластомеров в рамках подхода сплошной среды. В рамках этого подхода, эластомер представляется как мягкая магнитная сплошная среда. Для данной среды авторы получили полную теоретическую модель деформаций и провели моделирование для различных видов образцов: цилиндра, призмы, гантели и тонкой пленки [14]. Для последней было получено, что деформация – образование купола, наступает только в полях, больше некоторого критического значения, что качественно соответствует экспериментальным результатам. В работе [15] данный эффект был изучен более детально: были получены значения критического поля и зависимость высоты купола от внешнего магнитного поля. Результаты моделирования также сравнивались с экспериментальными. Авторы отмечают, что полученное ими расхождение с экспериментом в 15% объясняется простотой модели, не учитыва-

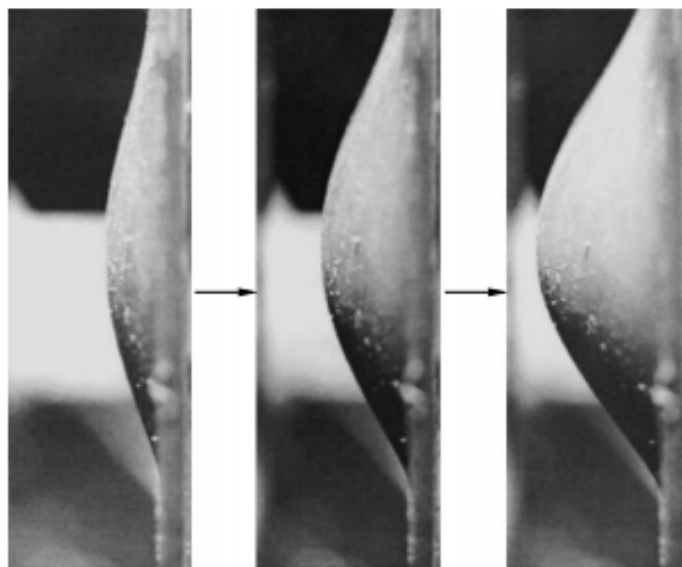


Рис. 9. Деформации мембраны под действием внешнего магнитного поля различной напряженности [16].

ющей, во-первых, неоднородность поля, вызывающую пондеромоторные силы внутри образца, а, во-вторых, анизотропию модуля упругости эластомера, возникающую под действием магнитного поля. В работе [16] авторами была также исследована зависимость величины критического поля от относительной толщины мембраны.

Иной подход к моделированию свойств применялся М. Jolly и др. [17],[18]. В своих работах они использовали приближение молекулярной динамики и рассматривали квази-статическую модель изменения механических свойств под действием магнитного поля. Они улучшили модель диполь-дипольного взаимодействия магнитных частиц, рассмотрев изменение плотности потока магнитного поля внутри эластомера и его влияния на свойства. Смоделированное в рамках модели значение максимального изменения модуля упругости эластомера хорошо совпало с экспериментальными данными.

#### **1.2.5. Магнито-механические свойства феррогеля**

В одной из последних работ А. Рыжкова и др. [19] моделировалось образование цепочек частиц в микроферрогеле. Авторы использовали подход молекулярной динамики, так как он позволяет учитывать большое число структурных единиц, движение и взаимодействие которых сильно влияет на свойства материала. Микроферрогель рассматривался, как кубическая решетка с 125 узлами. В каждом узле располагалась магнитная частица с магнитным моментом фиксированной величины. Цепочки, со-

единяющие узлы, состояли из немагнитных частиц, взаимодействующих как жесткие сферы (потенциал равен нулю при расстояниях больше расстояния взаимодействия, и постоянной величине при меньших). В рамках такой модели авторы исследовали изменения структуры системы под действием внешнего однородного и постоянного магнитного поля.

## 2. Физическая и математическая модель

### 2.1. Физическая модель

Представим рассматриваемый МРЭ, как систему магнитных частиц, распределенных в упругой матрице. Вся система помещена во внешнее постоянное однородное магнитное поле. Каждая частица в такой системе находится в поле диполь-дипольных сил, во внешнем поле и в поле упругих сил.

Внешнее постоянное однородное магнитное поле только ориентирует магнитный момент частицы, который в каждый момент времени направлен вдоль эффективного поля, которое является суперпозицией внешнего поля и градиентного поля, создаваемого ближайшими соседями данной частицы.

Частицы двигаются под действием градиентного поля, создаваемого ближайшими соседями, и поля упругих сил, возникающих при смещении частицы относительно ее положения равновесия.

### 2.2. Расчет магнитного поля

Градиентное магнитное поле, действующее на частицу, является суперпозицией магнитных полей ближайших соседних диполей. Напряженность поля, действующее на произвольную частицу:

$$\vec{H} = \sum_{k=1}^N \vec{H}_k = \sum_{k=1}^N \frac{3(\vec{m}^k \vec{R}_k) - R_k^2 \vec{m}^k}{R_k^5},$$

где  $\vec{m}^k$  - магнитный момент  $k$ -ого соседа, а  $\vec{R}_k$  - расстояние от  $k$ -го соседа до рассматриваемой частицы.

Можно записать выражение для проекции  $\vec{F}^{magn}$  на ось  $Ox_j$ :

$$F_{x_j}^{magn} = \sum_{x_i} m_{x_i}^p \frac{dH_{x_i}}{dx_j}; \quad (1)$$

$$\frac{dH_{x_i}}{dx_j} = \sum_{k=1}^N \frac{A_k R_k^2 - 5B_k(x_j - x_j^k)}{R_k^7},$$

$$A_k = 3m_{x_j}^k(x_i - x_i^k) + 3(\vec{m}^k \vec{R}_k)\delta_{ij} - 2(x_j - x_j^k)m_{x_i}^k,$$

$$B_k = 3(\vec{m}^k \vec{R}_k)(x_i - x_i^k) - R_k^2 m_{x_i}^k,$$

где  $x_i$  и  $x_j$  независимо принимают значения  $\{x, y, z\}$ ,  $\delta_{ij}$  - символ Кронекера,  $m^p$  - магнитный момент частицы,  $x$  и  $x^k$  - координаты частицы и ее  $k$ -го соседа соответственно.

## 2.3. Взаимодействие с упругой матрицей

Для расчета взаимодействия частиц с упругой матрицей был применен подход "виртуальных пружин". Каждая частица, представлялась соединенной со своим начальным положением пружиной.

Для определения силы взаимодействия, мы использовали модуль Юнга:

$$E = \frac{F/S}{\delta l/l} = \frac{Fl}{S\delta l}$$

где  $F$  – нормальная составляющая силы,  $S$  – площадь поверхности,  $l$  – длина деформируемого материала,  $\delta l$  – изменение длины.

Взяв в качестве  $S$  площадь полусферы  $S = 2\pi r^2$ , а в качестве  $l$  – характерное расстояние между двумя частицами, равное двум средним диаметрам частиц, получим итоговую силу, с которой упругая матрица действует на частицу:

$$F^k = E \frac{\pi r}{2} \delta l \quad (2)$$

где  $E$  - модуль Юнга упругой матрицы,  $r$  - радиус частицы,  $\delta l$  - смещение относительно начального положения.

## 2.4. Численный метод

### 2.4.1. Уравнение движения

Уравнение движения частицы в системе выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} &= \vec{F}^{magn} + \vec{F}^k \\ \vec{r}(0) &= \vec{r}_0 \\ \frac{d\vec{r}(0)}{dt} &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\vec{F}^{magn}$  - сила действующая на частицу со стороны ее ближайших соседей,  $\vec{F}^k$  - сила, действующая на частицу со стороны матрицы,  $m$  - масса частицы.

Для каждой частицы задано ее начальное положения. Скорость каждой частицы в нулевой момент времени равна нулю.

### 2.4.2. Алгоритм Верле

Для решения данной задачи используется алгоритм Верле [20]-[22]. Алгоритм назван в честь французского физика Лу Верле, использовавшего этот алгоритм в



1967 году для моделирования системы 864 частиц. Основная идея метода заключается в вычислении следующего положения частицы в пространстве по текущему и предыдущему положению без использования скорости. Фактически задача сводится к интегрированию уравнения движения частицы - дифференциального уравнение второго порядка:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = F(t),$$

где  $m$  - масса частицы,  $r$  - ее координата,  $t$  - время,  $F$  - сумма сил, действующих на частицу.

Чтобы численно получить решение данного уравнения, разложим функцию  $r(t)$  в ряд Тейлора в  $h$ -окрестности точки  $t$  ( $h$  мало):

$$\begin{aligned} r(t+h) &= r(t) + \frac{dr}{dt}h + \frac{1}{2} \frac{d^2 r}{dt^2} h^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 r}{dt^3} h^3 + O(h^4), \\ r(t-h) &= r(t) - \frac{dr}{dt}h + \frac{1}{2} \frac{d^2 r}{dt^2} h^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3 r}{dt^3} h^3 + O(h^4). \end{aligned} \quad (4)$$

Сложив два уравнения и, подставляя вместо второй производной  $\frac{1}{m}F(t)$ , получим:

$$r(t+h) = 2r(t) - r(t-h) + \frac{1}{m}F(t)h^2 + O(h^4). \quad (5)$$

Если представить  $h$  в виде  $h = t_{i+1} - t_i$  можно переписать (5) в сеточном виде:

$$r_{i+1} = 2r_i - r_{i-1} + \frac{1}{m}F_i h^2 + O(h^4). \quad (6)$$

Данное выражение и есть, так называемый, алгоритм Верле.

Точность данной схемы равна  $O(h^4)$ . Порядок точности определяется порядком первого отброшенного члена в разложении. К основным преимуществам данного метода относятся его простота и малое потребление памяти. Данный алгоритм является одним из наиболее быстрых методов решения уравнений движения в системах многих частиц. Поэтому алгоритм Верле получил достаточно широкое распространение при решении задач моделирования молекулярной динамики.

Существенным достоинством данной реализации алгоритма Верле является отсутствие необходимости расчета скоростей частиц, что значительно ускоряет процесс вычисления и уменьшает ошибку в случае стационарных задач.

Главным недостатком является относительно невысокая точность алгоритма. Однако это не является существенным в данной задаче.

Применим алгоритм Верле для решения задачи (3). Распишем уравнения движения по компонентам в декартовой системе координат. На  $i + 1$  шаге частица будет

иметь координаты:

$$\begin{aligned}
 x_{i+1} &= 2x_i - x_{i-1} + \frac{1}{m_p}(((F_x^{magn})_i - (F_x^k)_i)h^2, \\
 y_{i+1} &= 2y_i - y_{i-1} + \frac{1}{m_p}(((F_y^{magn})_i - (F_y^k)_i)h^2, \\
 z_{i+1} &= 2z_i - z_{i-1} + \frac{1}{m_p}(((F_z^{magn})_i - (F_z^k)_i)h^2.
 \end{aligned} \tag{7}$$

## 2.5. Расчет емкости

Важной частью задачи является определение емкости плоского конденсатора, заполненного магнитореологическим эластомером.

### 2.5.1. Приближение

При решении данной задачи мы полностью пренебрежем полями рассеяния, граничными эффектами и электрическим взаимодействием частиц. В этом случае, задача может рассматриваться как чисто геометрическая. Представим рассматриваемый материал, как систему параллельно соединенных последовательных соединений плоских конденсаторов. Емкость плоского конденсатора:

$$C = \epsilon_0 \epsilon \frac{S}{d} \tag{8}$$

где  $\epsilon_0$  - диэлектрическая постоянная,  $\epsilon$  - диэлектрическая проницаемость материала, заполняющего конденсатор,  $S$  - площадь обкладки конденсатора,  $d$  - расстояние между обкладками.

Аппроксимируем частицы вписанными в них кубами. Данное приближение является достаточно грубым, поскольку фактически участвующий в расчетах объем значительно отличается от реального. Однако, в силу того, что в первую очередь нас интересует качественное поведение магнитодиэлектрического эффекта, это допущение не играет существенной роли и мы принимаем его.

Разобъем объем на области вдоль оси  $Oz$  так, что каждая частица либо полностью пересекает область, либо не пересекает. Для этого рассмотрим проекции кубов на плоскость обкладки  $(xy)$ . Задача сводится к определению пересечений этих проекций. Другими словами, требуется разбить плоскость на прямоугольники так, чтобы любой прямоугольник либо полностью принадлежал той или иной проекции, либо полностью не принадлежал ей. В итоге, мы получаем разбиение плоскости обкладки на прямоугольные области. Далее, для каждой из получившихся областей, мы идем

в ее пределах вдоль оси  $Oz$  и считаем итоговую толщину металлических включений. Емкость каждого получившегося вертикального среза считается как емкость плоского конденсатора, частично заполненного металлическими включениями. Для  $i$ -ой области площади  $S_i$  и суммарной толщиной металлических включений  $d_i$  получаем итоговую емкость:

$$C_i = \epsilon_0 \epsilon \frac{S_i}{D - d_i} \quad (9)$$

где  $D$  - толщина всего образца.

Тогда итоговая емкость образца получится равной сумме емкостей отдельных областей:

$$C_{total} = \epsilon_0 \epsilon \sum_i \frac{S_i}{D - d_i} \quad (10)$$

### 2.5.2. Метод заметающей линии

Для решения задачи использовался метод заметающей линии [24]. Суть метода заключается в использовании виртуальной линии, параллельной одной из осей координат и двигающейся в заданном направлении, для разбиения плоскости на заданные области.

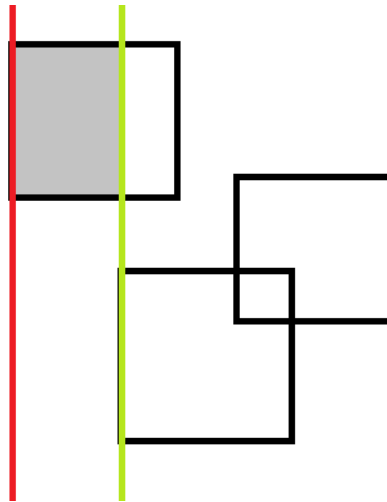


Рис. 10. Зеленая линия - текущее положение заметающей линии, красная - предыдущее. Серый прямоугольник - выделенная область.

Пусть линия параллельная оси  $Oy$  двигается вдоль оси  $Ox$  (рис.10). При движении линии регистрируются события - линия достигает начала или конца частицы. При регистрации события выделяется область плоскости в виде полосы, ограниченной текущим положением заметающей линии и ее положением при последнем событии. Выделенная область анализируется аналогичной линией, только параллельной

оси  $Ox$  и движущейся вдоль оси  $Oy$ . Таким образом выделяются области пересечения исходного набора прямоугольников.

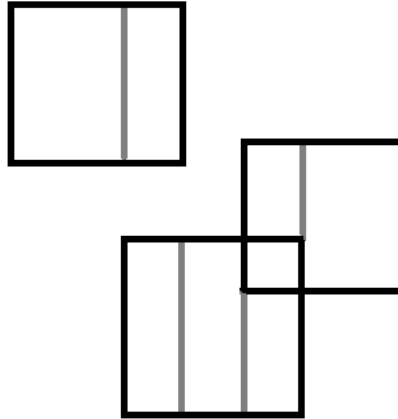


Рис. 11. Итоговое разбиение плоскости на прямоугольники.

Итоговый алгоритм является расширением алгоритма Бентли-Оттмана [23] на случай прямоугольников со сторонами параллельными осям координат.

Достоинством такого подхода является скорость работы итогового алгоритма (порядка 4000 раз быстрее определения пересечений путем полного перебора). Как видно из рис. 11, разбиение происходит неоптимальным образом - могут появляться участки, которые при оптимальном разбиении не были бы разделены. Это приводит к тому, что итоговое количество прямоугольников больше, чем могло бы быть, однако это не оказывает влияния на итоговое значение емкости.

## 3. Результаты

### 3.1. Реализация

Для решения поставленной задачи была специально разработана программа на языке C++.

Визуализация системы была реализована двумя способами. На раннем этапе работы визуализация положения частиц производилась с помощью открытой библиотеки Cairo. Полученное изображение представляло собой двухмерную картинку с изображением проекций частиц на плоскость  $(xy)$ . На более позднем этапе работы была реализована трехмерная визуализация системы с помощью открытых библиотек OpenGL и Boost.

Так как целью работы является качественное исследование магнитодиэлектрического эффекта в магнитореологических эластомерах, все вычисления производились в условных единицах. При этом параметры системы подбирались наиболее оптимальным образом.

Общими для всех нижеследующих вычислений являются следующие параметры системы (если не оговорено обратное):

- 1) Внешнее постоянное однородное магнитное поле направлено перпендикулярно обкладкам конденсатора
- 2) Все частицы одного размера
- 3) Радиус магнитного взаимодействия равен 3 средним диаметрам частиц.
- 4) В начальный момент времени магнитные моменты всех частиц ориентированы случайным образом.
- 5) В каждый момент времени магнитный момент каждой частицы направлен вдоль направления эффективного магнитного поля, равного сумме внешнего поля и поля ближайших соседей. Магнитной анизотропии нет.
- 6) Магнитострикции нет – частицы не меняют форму при приложении внешнего магнитного поля.
- 7) Частицы не могут покинуть фиксированную область расчетов. Размеры самой области могут меняться.

- 8) Количество шагов по времени между вычислением величины эффекта фиксировано и равно 80.

### 3.2. Зависимость от степени упорядоченности

Первым было проведено исследование зависимости эффекта от степени упорядоченности частиц в матрице. Как известно, под действием внешнего однородного магнитного поля, частицы стремятся выстроиться в цепочки вдоль направления поля. Иными словами, система стремится перейти в более упорядоченное состояние. В рассматриваемой нами системе, если частицы упорядочиваются вдоль направления, перпендикулярного обкладкам конденсатора, емкость последнего будет увеличиваться и магнитодиэлектрический эффект будет иметь положительный знак. Если же частицы будут выстраиваться параллельно, то емкость будет уменьшаться, а эффект иметь отрицательный знак.

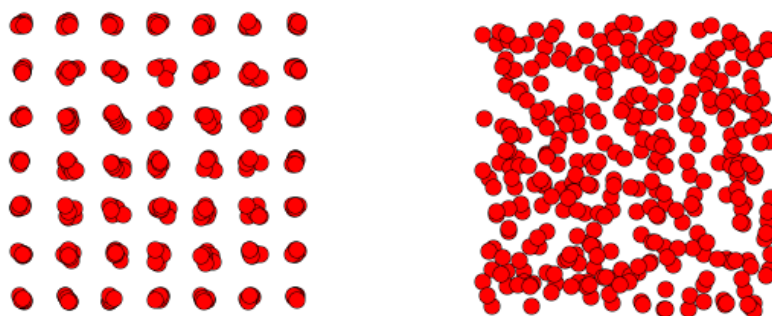


Рис. 12. Распределение частиц в матрице. Слева - псевдослучайная система. Справа - случайная.

Для проверки этого утверждения нами рассматривалась система из 343 частиц. Моделирование проводилось для трех различных случаев:

- 1) Периодическая система. В данном случае, частицы помещены в узлы кубической решетки размерами  $7 \times 7 \times 7$  и система полностью упорядочена.

- 2) Псевдослучайная система. Частицы смещены относительно узлов правильной решетки на случайное расстояние, не превышающее диаметр одной частицы, в произвольном направлении (Рис. 12).
- 3) Случайная система. Начальное положение каждой частицы выбирается случайным образом и не зависит от положения других частиц.

Таблица 1. Зависимость величины эффекта от степени упорядоченности для различных значений жесткости матрицы и величины магнитного поля. Данные нормированы.

	Периодическая	Псевдослучайная	Случайная
Малая жесткость. Слабое поле.	-3,04	1	0,54
Малая жесткость. Сильное поле.	-2,13	1,43	0,74
Большая жесткость. Слабое поле.	-1,45	0,76	0,53
Большая жесткость. Сильное поле.	-0,78	1,25	0,71

Результаты моделирования представлены в Таблице 1.

Рассмотрим периодическую систему. В этом случае система изначально упорядочена - частицы уже находятся в цепочках. Очевидно, что перестроиться в другие цепочки они не смогут, так как под действием внешнего поля магнитные моменты частиц коллинеарны, что означает, что магнитные силы, действующие на них, будут направлены вдоль ребер заданной кубической решетки. Это, в свою очередь означает, что система будет переходить в менее упорядоченное состояние. Это значит, что эффект в этом случае будет отрицательным. В остальных случаях, система упорядочивается и эффект положительный, как и ожидалось.

Отличие величины эффекта почти в два раза для случаев псевдослучайной и случайной систем легко объяснить. В псевдослучайной системе частицам проще перейти в упорядоченное состояние. В случайной системе чтобы образовать цепочки частицам необходимо сильно сместиться, чему мешает сопротивление матрицы.

### 3.3. Зависимость от объемной концентрации

Для исследования влияния объемной концентрации частиц на величину эффекта использовалось два подхода.

На первом этапе работы изменение концентрации достигалось путем изменения объема образца, при постоянном числе частиц. При этом, линейные размеры образца изменялись пропорционально так, чтобы отношение площади обкладок конденсатора к расстоянию между ними оставалось неизменным. Исследовалась случайно распределенная система из 500 моноразмерных частиц. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2. Зависимость величины эффекта от объемной концентрации частиц

Концентрация, %	Величина эффекта, а.е.
2.22	1
13.80	6.88
27.70	16.07

На данном этапе был сделан вывод о том, что увеличение объемной концентрации частиц увеличивает степень их влияния на конечную емкость, что приводит к увеличению величины эффекта.

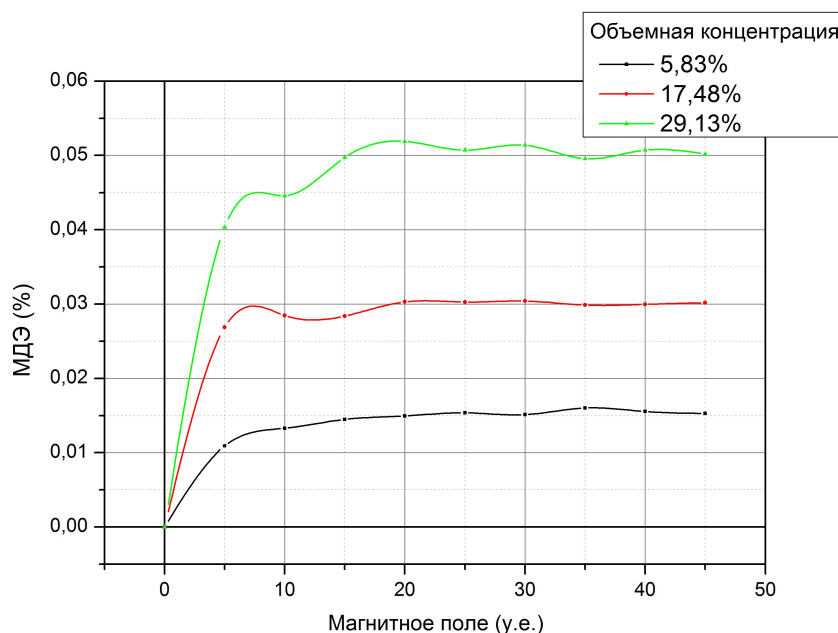


Рис. 13. Зависимость магнитоэлектрического эффекта от величины внешнего магнитного поля для трех различных концентраций.

На более позднем этапе работы изменение концентрации достигалось путем изменения числа частиц в системе. Объем и геометрия образца оставались постоянными. Образец представлял собой кубик размерами 165x165x165, диаметр частиц



равен 10, частицы моноразмерные и случайно распределены по объему. На рисунке 13 представлены полевые зависимости для трех значений объемной концентрации. Было подтверждено увеличение величины эффекта при увеличении концентрации, что совпадает с экспериментальными данными [5].

Далее была изучена зависимость величины эффекта от концентрации с учетом начального распределения частиц по объему.

Для того, чтобы получить случайное распределение по объему использовался генератор псевдослучайных чисел (гпсч) использующий алгоритм "Вихрь Мерсенна"[24] из открытой библиотеки STL с использованием равномерного распределения значений. Стоит отметить, что псевдослучайная последовательность чисел, выдаваемая генератором, зависит от входного параметра – начального "зерна". Меняя значение "зерна" можно получить различные последовательности. Используя это, была получена зависимость величины эффекта от начального распределения частиц по объему образца.

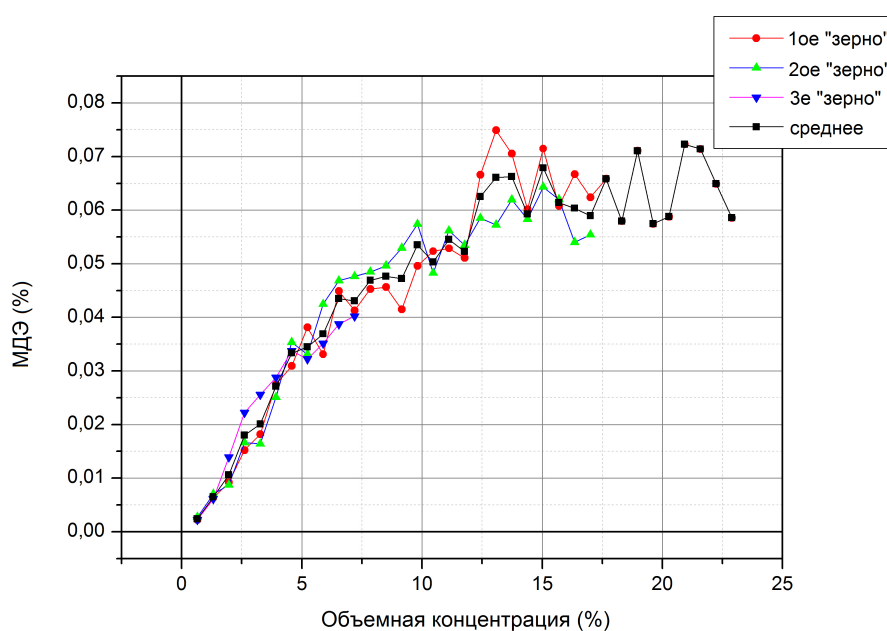


Рис. 14. Зависимость магнитодиэлектрического эффекта от объемной концентрации для различных начальных распределений частиц по объему образца.

Из полученных результатов видно, что эффект достаточно сильно зависит от начального распределения частиц по объему. Однако рост величины эффекта и общий характер зависимости остается неизменными.

### 3.4. Зависимость от внешнего магнитного поля

На начальном этапе работы полевые зависимости изучались исключительно для систем моноразмерных частиц. На рисунке 15 представлена характерная кривая намагничивания для системы 500 частиц диаметра 10 равномерно распределенных в образце размерами 145x145x45. В целом ход кривой намагничивания достаточно хорошо качественно совпадает с экспериментальными данными [5], [25].

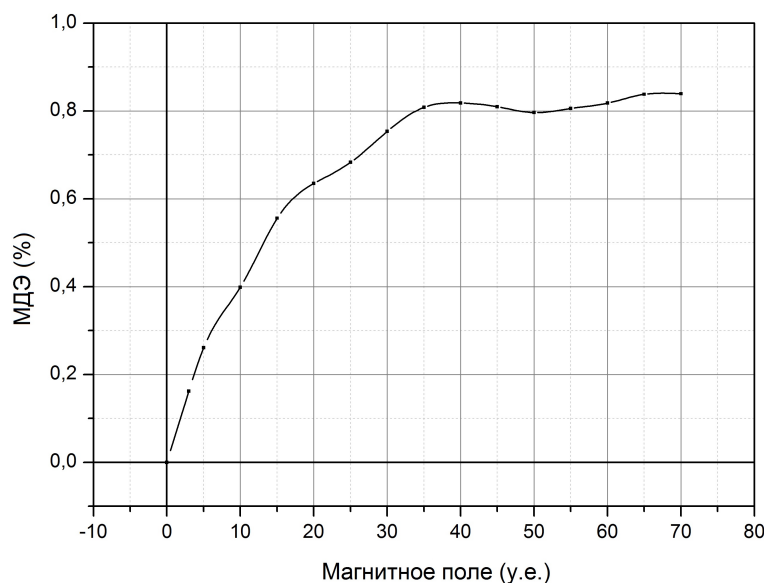


Рис. 15. Зависимость магнитоэлектрического эффекта от величины внешнего магнитного поля.

### 3.5. Зависимость от толщины образца

В дальнейшем было интересно изучить толщины образца на величину магнитоэлектрического эффекта и ход кривой намагничивания. На данном этапе работы было реализована возможность создавать размерное распределение частиц.

Распределение частиц по размерам задается логнормальным распределением. Функция плотности вероятности логнормального распределения:

$$p(x|\mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma x \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right), x \geq 0 \quad (11)$$

где  $\mu$  – среднее,  $\sigma$  – стандартное отклонение. Логнормальное распределение использовалось как модулирующее: полученное значение умножалось на заданный харак-

терный радиус и итоговое значение бралось за радиус частицы. При этом размер частицы ограничивался сверху и не превышал четыре характерных радиуса.

В данном эксперименте фиксировались все параметры системы за исключением формы образца. Основные параметры системы представлены в таблице 3.

Таблица 3. Параметры системы

Число частиц	500
Объем системы	$(135 \pm 10) * 10^{-12}$
Характерный радиус частицы	$5 * 10^{-4}$
Среднее распределения	0.5
Стандартное отклонение распределения	0.4
"Зерно" гпсч	41

Кривая намагничивания снималась следующим образом – поле увеличивалось от нуля до максимального значения и далее уменьшалось до нуля. Для каждой формы также проводились расчеты для моноразмерных частиц. Радиус частиц в этом случае брался равным характерному радиусу. Расчеты проводились для трех различных образцов.

### 3.5.1. Образец А – Куб

Образец представляет собой куб размерами (в единицах  $10^{-4}$ )  $110 \times 110 \times 110$ . Объемная концентрация составляет 29% для случая с размерным распределением частиц и 19,9% для моноразмерных частиц.

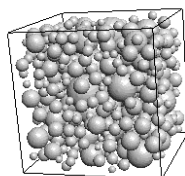


Рис. 16. Визуализация распределения частиц по объему образца А.

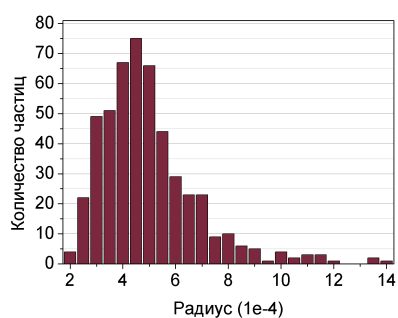


Рис. 17. Распределение частиц по размерам для образца А.

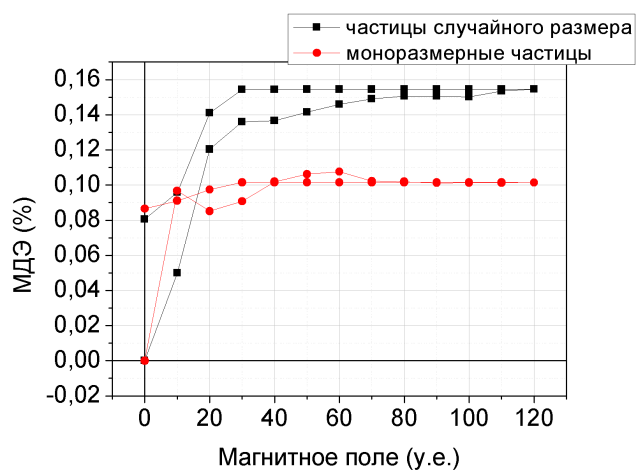


Рис. 18. Зависимость магнитоэлектрического эффекта от величины внешнего магнитного поля для образца А.

### 3.5.2. Образец В – Параллелепипед

Образец представляет собой пластинку размерами (в единицах  $10^{-4}$ )  $150 \times 150 \times 60$ . Объемная концентрация составляет 25,9% для случая с размерным распределением частиц и 19,4% для моноразмерных частиц.

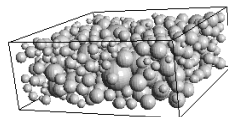


Рис. 19. Визуализация распределения частиц по объему образца В.

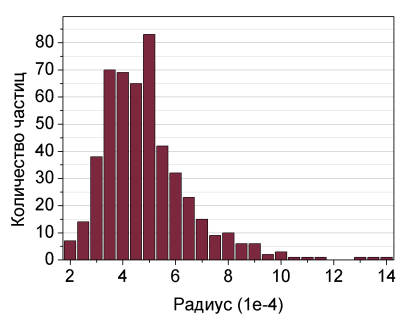


Рис. 20. Распределение частиц по размерам для образца В.

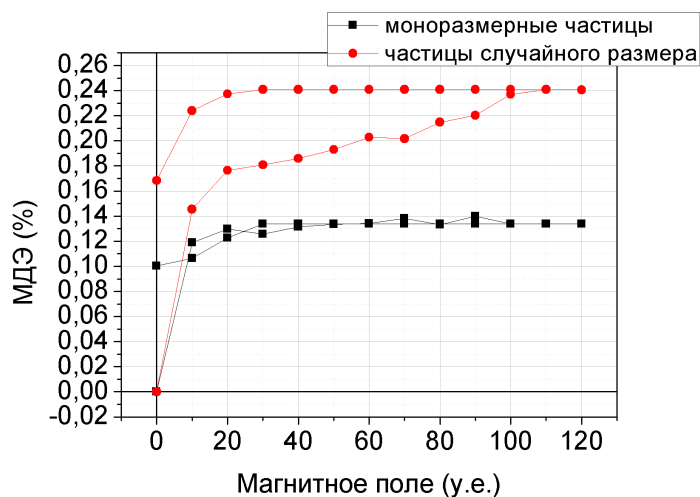


Рис. 21. Зависимость магнито-диэлектрического эффекта от величины внешнего магнитного поля для образца В.

### 3.5.3. Образец С – Тонкая пластинка

Образец представляет собой тонкую пластину размерами (в единицах  $10^{-4}$ )  $200 \times 200 \times 30$ . Объемная концентрация составляет 25,3% для случая с размерным распределением частиц и 21,8% для моноразмерных частиц.

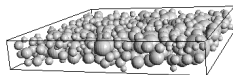


Рис. 22. Визуализация распределения частиц по объему образца С.

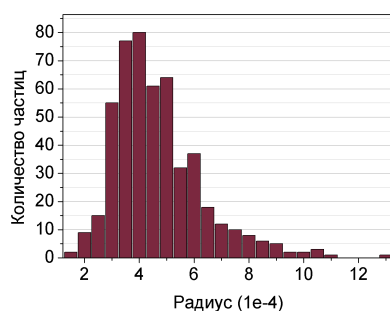


Рис. 23. Распределение частиц по размерам для образца С.

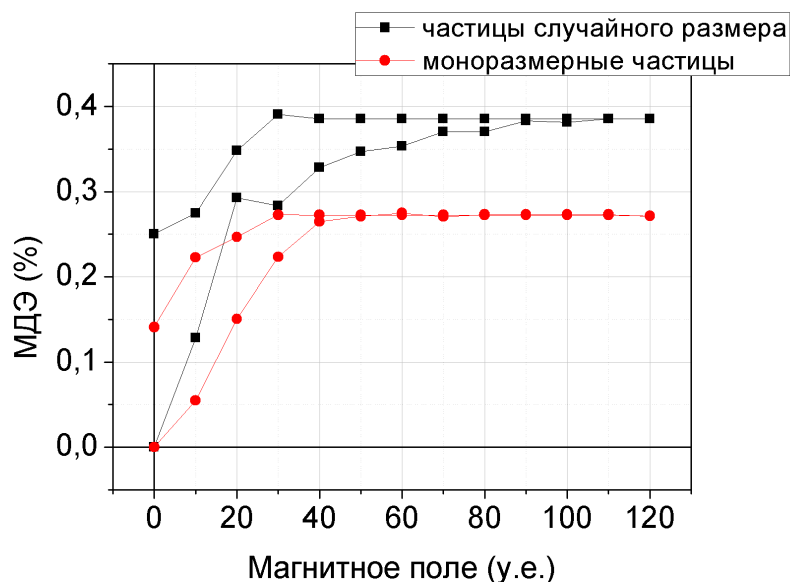


Рис. 24. Зависимость магнитоэлектрического эффекта от величины внешнего магнитного поля С.

### 3.5.4. Обсуждение

Хорошо видно, что для всех трех образцов для случая моноразмерных частиц эффект существенно меньше. Это объясняется существенно меньшей объемной концентрацией частиц в этом случае. Также при наличии размерного распределения частиц большие частицы в значительной степени определяют характер движения частиц в системе в целом, что также сильно влияет на итоговое значение эффекта.

Стоит отдельно пояснить отличия в концентрации для образцов **A** и **B(C)**. Несмотря на то, что объем образцов практически одинаковый и число частиц не меняется концентрация отличается на существенную величину. Это связано с тем, что при заданных параметрах систем в них появляется некоторое количество очень больших частиц, которые сравнимы по размерам с толщиной образца и плохо укладываются в объеме. Это приводит к тому, что размеры частиц в разных образцах не равны друг другу и несколько отличаются, что и приводит к разнице в объемной концентрации.

На рисунке 25 представлено сравнение кривых намагничивания для трех геометрий.

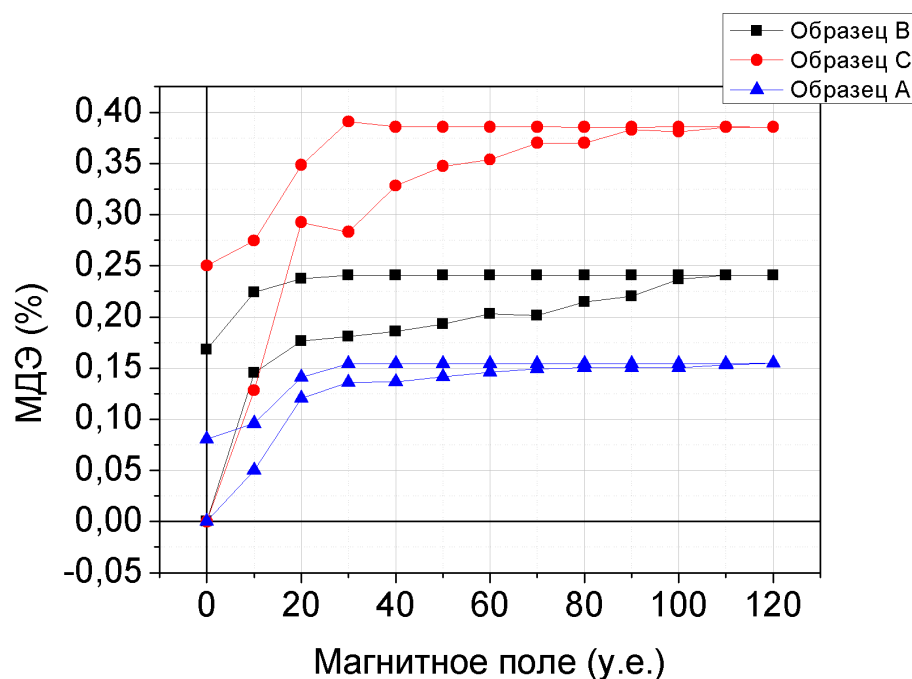


Рис. 25. Зависимость магнитоэлектрического эффекта от величины внешнего магнитного поля для трех образцов. Частицы имеют случайный размер.

Получено, что огромное влияние на величину магнитоэлектрического эффекта оказывает толщина образца. Это можно объяснить следующим образом. Поле в данных расчетах приложено перпендикулярно плоскости конденсатора. Соответственно

и частицы стремятся выстроиться в цепочки в данном направлении. При малой толщине образца длина цепочек меньше, что приводит к тому, что даже небольшое смещение частиц в цепочке относительно друг друга приводит к более сильному изменению емкости. Чем цепочки частиц длиннее, тем меньше влияние смещения одной частицы на величину емкости.

Стоит отметить, что при заданных размерных соотношениях частиц и конденсатора толщина образца играет более важную роль чем концентрация. Величина эффекта в образце **С** с объемной концентрацией частиц 25,3% в 2,4 раза больше, чем в образце **А** с объемной концентрацией 29%. Таким образом получается, что при наличии в системе частиц, чьи размеры сравнимы с размерами образца, определяющим фактором, влияющим на величину магнитоэлектрического эффекта, оказывается именно толщина образца. В реальных системах это явление почти полностью нивелируется за счет того, что размер частиц много меньше размера конденсатора.



- 1) Была разработана качественная модель магнитодиэлектрического эффекта на основе изменения положений частиц внутри образца. Для проведения моделирования была специально разработана программа на языке C++.
- 2) Показано, что перераспределение частиц в объеме образца под действием внешнего однородного магнитного поля приводит к изменению емкости конденсатора, заполненного магнитореологическим эластомером.
- 3) Получены качественные зависимости величины магнитодиэлектрического эффекта от величины внешнего магнитного поля, объемной концентрации частиц и формы образца.
- 4) Изучено влияние размерного распределения частиц на характер эффекта. Установлено, что в системах с логнормальным распределением размеров частиц эффект существенно больше по величине, чем в моноразмерных системах.
- 5) Показано, что для систем с определенным размерным соотношением частиц и конденсатора толщина образца играет более важную роль, чем объемная концентрация частиц.
- 6) Результаты моделирования качественно совпадают с полученными ранее экспериментальными данными.

## Список литературы

- [1] D. Ivanenko, V. Toshchevnikov, D. Borin, M. Saphiannikova, G. Heinrich: Mechanical properties of magneto-sensitive elastomers in a homogenous magnetic field: Theory and Experiment. *Macromol. Symp.* 2014, 96-107.
- [2] S. Abramchuk, E. Kramarenko, G. Stepanov, L. V. Nikitin, G. Filipcsei, A. R. Khokhlov and M. Zrinyi: Novel highly elastic magnetic materials for dampers and seals: Part II. Material behavior in a magnetic field. *Polymers for advanced technologies.* 18. 2007
- [3] S. Abramchuk, E. Kramarenko, G. Stepanov, L. V. Nikitin, G. Filipcsei, A. R. Khokhlov and M. Zrinyi: Novel highly elastic magnetic materials for dampers and seals: Part I. Preparation and characterization of the elastic materials. *Polymers for advanced technologies.* 18. 2007
- [4] Marke Kallio - The elastic and damping properties of magnetorheological elastomers, VTT, 2005
- [5] Anna S. Semisalova, Nikolai S. Perov, Gennady V. Stepanov, Elena Yu. Kramarenko and Alexey R. Khokhlov: Strong magnetodielectric effect in magnetorheological elastomers. *Soft matter.* 2013
- [6] Ioan Bica - Influence of magnetic field upon the electric capacity of a flat capacitor having magnetorheological elastomer as a dielectric, *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 15 (2009) 605–609
- [7] I. Bica, Y. D. Liu и H. J. Choi, «Magnetic field intensity effect on plane electric capacitor characteristics and viscoelasticity of magnetorheological elastomer» *Colloid and Polymer Science*, т. 290, № 12, pp. 1115-1122, 2012.
- [8] Ubaidillah, Joko Sutrisno, Agus Purwanto and Saiful Amri Mazlan - Recent Progress on Magnetorheological Solids: Materials, Fabrication, Testing, and Applications, *Advanced Engineering Materials* 2014
- [9] Yi Han, Zihou Zhang, LeAnn E. Faidley, Wei Hong: Microstructure-based modeling of magneto-rheological elastomers. *Behavior and Mechanics of Multifunctional Materials and Composites* 2012

- [10] Oleg V. Stolbov, Yuriy L. Raikher and Maria Balasoiu - Modelling of magnetodipolar striction in soft magnetic elastomers, *Soft Matter*, 2011, 7
- [11] А.М. Биллер, О.В. Столбов, Ю.Л. Райхер: Силовое взаимодействие намагничивающихся частиц, помещенных в эластомер. *Вычислительная механика сплошных сред*. 7 2014
- [12] P. V. Melenev, Yu. L. Raikher, and V. V. Rusakov - Plasticity of Soft Magnetic Elastomers, *Polymer Science, Ser. A*, 2010, Vol. 52, No. 4
- [13] P. Melenev, Yu L Raikher, G. Stepanov, V. Rusakov, L. Polygalova - Modeling of the Field-Induced Plasticity of Soft Magnetic Elastomers *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, Vol. 22—April 2011
- [14] Yu L Raikher and O V Stolbov - Numerical modeling of large field-induced strains in ferroelastic bodies: a continuum approach, *Journal of physics: Condensed matter* (20), 2008
- [15] Yu L Raikher, O V Stolbov and G V Stepanov - Shape instability of a magnetic elastomer membrane, *Journal of physics D: Applied physics*, 2008
- [16] Yu. L. Raikhera, O. V. Stolbov, and G. V. Stepanov - Deformation of a Circular Ferroelastic Membrane in a Uniform Magnetic Field, *Technical Physics*, 2008, Vol. 53, No. 9
- [17] Mark R Jolly, J David Carlson and Beth C Munoz: A model of the behaviour magnetorheological materials. *Smart Matter*. 5. 1996
- [18] Mark R Jolly, J David Carlson, Beth C Munoz and Todd A. Bullions: The magnetoviscoelastic response of elastomer composites consisting of ferrous particles embedded in a polymer matrix. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. Vol 7. 1996
- [19] Ryzhkov A.V., Melenev P.V., Holm C., Raikher Yu L: Simulation of chains in microferrogels using coarse-grained molecular dynamics. Abstracts of 2nd International Summer School and Workshop "Complex and magnetic soft matter systems: Physico-mechanical properties and structures"(CMSMS'14) p. 41-42.
- [20] Loup Verlet: Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review*. 159. 1967

- [21] D. Beeman: Some Multistep Methods for Use in Molecular Dynamics Calculations. *Journal of computational physics* 20, 1976
- [22] Markus J. Buehler: Introduction to classical molecular dynamics. Lecture 3. Massachusetts Institute of Technology. 2007
- [23] Кормен, Т., Лейзерсон, Ч., Ривест, Р., Штайн, К. Алгоритмы: построение и анализ = *Introduction to Algorithms* / Под ред. И. В. Красикова. — 2-е изд. — М.: Вильямс, 2005. — 1296 с. — ISBN 5-8459-0857-4
- [24] M. Matsumoto, T. Nishimura: Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator. *ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations*. 8, 1998.
- [25] Хайруллин М.Ф. Дипломная работа. Физический Факультет МГУ. 2013
- [26] Scott Meyers. *Effective STL*. 2002

## Список публикаций по результатам работы

- 1) Isaev D.A., Semisalova A.S., Khajrullin M.F., Loginova L.A., Kramarenko E.Yu., Perov N.S. Simulation of magnetodielectric effect in magnetorheological elastomers. Book of Abstracts of Moscow International Symposium on Magnetism MISM-2014 (29 June – 3 July, 2014, Moscow) p. 814.
- 2) Isaev D.A., Semisalova A.S., Khairullin M.F., Loginova L.A., Kramarenko E.Yu., Perov N.S. Modeling of capacitor with magnetorheological media. Abstracts of 2nd International Summer School and Workshop "Complex and magnetic soft matter systems: Physico-mechanical properties and structures" (CMSMS'14, 29 September - 3 October, 2014, Dubna) p. 15-16.