

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ БІОКОЛОЇДНОЇ ХІМІЇ

---

На правах рукопису

ЛЕБОВКА Микола Іванович

**РОЗПОДІЛ ВИПАДКОВИХ ПОЛІВ  
В ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМАХ**

СПЕЦІАЛЬНІСТЬ: 02.00.11—колоїдна та мембранна хімія  
01.04.14—теплофізика та молекулярна фізика

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття вченого ступеня  
доктора фізико-математичних наук

Київ—1994



00756216 (R)

А 6 31.661

роота виконана в ІНСТИТУТІ Біологічної хімії Національної  
Академії Наук України

Науковий консультант:

Доктор хімічних наук,

академік ІА України, професор

Манн В. В.

Офіційні опоненти:

Доктор хімічних наук,

академік РАПН, професор

Перцов М. В.

Доктор фізико-математичних наук,

член-кореспондент НАН України, професор

Матяш І. В.

Доктор хімічних наук

Цапук Е. А.

Провідна установа: Київський університет імені Тараса Шевченка

Захист відбудеться "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 1995 року о \_\_\_ год.

на засіданні Спеціалізованої вченої ради Д.02.41.01 в

Інституті біологічної хімії за адресою:

252080, Київ -80, вул. Фрунзе 85.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Інституту  
біологічної хімії НАН України

Автореферат розіслано "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 199 р.

Вчений секретар

Спеціалізованої вченої ради ЦДБ ім. В. Стефанника  
Воропаєнко В. А.  
АН України

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Реальні гетерогенні системи, як правило, характеризуються надзвичайно складною внутрішньою структурою. До таких систем належать матеріали, що знаходять широке використання на практиці - композиційні матеріали, пористі об'єкти, спечені порошки, глинисті суспензії, та багато інших. Для відображення фізико-хімічних явищ, що протікають в цих матеріалах, необхідно визначити взаємозв'язок між глобальними закономірностями процесів, їх фізичною природою та структурою, геометричними характеристиками, а також мікроскопічними властивостями гетерогенного середовища. В багатьох випадках фізико-хімічні процеси контролюються розподілом випадкових полів в неоднорідних середовищах. Знаходження функцій розподілу та екстремальних значень випадкових полів різної фізичної природи дозволяє прогнозувати закономірності розповсюдження тріщин, електричних розрядів, протікання рідин в пористих середовищах, та ряд інших пов'язаних процесів. Структури, які виникають при розвитку процесів такого роду, як правило, проявляють фрактальні властивості. Особливе значення мають явища виникнення специфічних структур в неоднорідних полях на межі поділу різних середовищ, а також в просторово-неоднорідних системах.

Проблема знаходження функції розподілу випадкового поля  $F(N)$  в загальному випадку є досить складною, що пов'язано з необхідністю врахування тензорного характеру потенціалу (принаймні для випадку деформаційного потенціалу), особливостей просторового розподілу джерел поля та характеристик, що враховують неоднорідність середовища. Останнім часом для розгляду задач такого типу починають широко використовувати

тись комп'ютерні методи, але все ще невирішеним залишається ряд проблем, пов'язаних з визначенням механізмів ініціалізації та розвитку процесів руйнування і пробую, визначенням оптимальних умов проведення процесів, умов руйнування просторово-неоднорідних систем. Дуже пов'язаною з цими питаннями є також проблема діаманітного розширення ліній ЯМР адсорбованих рідин, що фактично є проблемою знаходження функції розподілу випадкових магнітних полів в неупорядкованих середовищах.

Робота виконана у відповідності з проектом 05.41.01/029-92 "Наукові аспекти управління колоїдно-хімічними властивостями природних дисперсних мінералів та технологіям на їх основі", який є складовою частиною Державної науково-технічної програми 05.41.01 "Дисперсні мінерали України" (затвержена ДКНТ 4.05.1992), а також темою 2.16.1.4 "Міжфазні явища в дисперсних системах та їх роль у створенні прогресивних безвідходних технологій отримання нових матеріалів та комплексної переробки мінеральної сировини та харчових продуктів" (затвержена Бюро хімії та хімічних технологій АН України 27.11.1990, п.42, прот.№7)

Мета і основні завдання наукового дослідження. Метою даної роботи було дослідження закономірностей розподілу випадкових полів рівної фізичної природи (механічних, електричних, або магнітних) в гетерогенних та просторово - неоднорідних системах та вивчення різних фізико-хімічних процесів, які пов'язані з даними розподілами.

У відповідності з метою в роботі були поставлені та вирішувались такі задачі:

1. Визначення умов зародження та розповсюдження меха-

нічних руйнувань в залежності від величини зовнішнього навантаження та законів його зміни з плином часу, ступеню неоднорідності середовища, закономірностей розподілу неоднорідностей в просторі, вивчення скейлінгових, фрактальних та анізотропних характеристик процесів розповсюдження тріщин в гетерогенних системах.

2. Встановлення основних закономірностей розвитку процесів пробою в гетерогенних системах; пошук оптимальних умов електрообробки з метою досягнення максимального ступеню електроруйнування; розвиток уяв про механізми руйнування окремих елементів; врахування механізмів термічного руйнування та процесів дифузійної міграції вологи; вивчення закономірностей пробою анізотропних систем, а також зниження електричної міцності систем з граничними неоднорідними шарами.

3. Розробка термодинамічної теорії збурень для опису орієнтаційної структури неоднорідних полярних систем у зовнішньому електричному полі з врахуванням анізотропного базисного потенціалу, визначення профілю діелектричної проникності та параметрів порядку поблизу міжфазної границі, врахування внеску електростатичних взаємодій в поверхневий натяг та розклинюючий тиск.

4. Вивчення особливостей температурної зміни орієнтаційного упорядкування в різних системах позиційно-фіксованих диполів, дослідження "орієнтаційного плавлення" в однорідному ланцюгу рівновіддалених диполів та особливостей прояви орієнтаційних структур для ґраток диполів, згорнутих на поверхні циліндру.

5. Дослідження закономірностей розподілу магнітних по-

лів в гетерогенних системах при врахуванні різних просторових конфігурацій джерел поля, анізотропії їх форми та кутового розподілу. Теоретичне та експериментальне вивчення куткових залежностей спектрів ЯМР в синтетичних мембранах.

6. Дослідження розподілу просторових конфігурацій в агрегатах різного типу, встановлення взаємозв'язку між структурою агрегатів, їх фрактальними властивостями та характером зміни випадкових полів, проведення мультискейлінгового конфігураційного аналізу, вивчення фрактальних властивостей, конфігурацій крижкого розтріскування та пробок.

Наукова новизна. В роботі вперше одержано діаграму руйнування гетерогенних систем, що дозволяє розділити різні стани розвитку процесів руйнування в залежності від величини зовнішнього навантаження та ступеню неоднорідності системи. Одержано рівняння довговічності неоднорідних систем. Вивчені розмірні залежності основних параметрів розвитку тріщин. Для фрактальної вимірності тріщин одержано значення в інтервалі  $D_f = 1.15 \pm 0.05$ . Показано, що значення скейлінгового показника зменшення модулю пружності при наближенні до порогу перколяції відповідає класу універсальності направленої перколяції і значно менше, ніж у задачі неупорядкованого руйнування.

Вивчено особливості електроруйнування неоднорідних систем при різних режимах зміни зовнішнього навантаження і визначено оптимальні умови проведення процесу для одержання максимального руйнування. Проведено аналіз ефективності різних механізмів електроруйнування і показано, що термічний механізм та процеси дифузійної міграції вологи дають значний внесок в електроруйнування. Показано, що для ані-

вотропних систем при зміні параметру анізотропії в інтервалі значень  $\alpha \approx 2$  спостерігається критичний перехід від витягнутих вадовж поля кластерів пробою до структур, витягнутих в напрямі, перпендикулярному до поля. Вперше одержано діаграму електроруїнування просторово-неоднорідних систем і показано, що введення в систему навіть досить тонких неоднорідних граничних плівок (відносна товщина 2%) приводить до суттєвої втрати електричної міцності системи. Проведено аналіз залежності ступеню електроруїнування  $R_d$  від товщини граничних плівок  $l_{\text{bound}}$ .

Дано розвиток термодинамічної теорії збурень для орієнтаційної функції розподілу полярної рідини (повний набір мультипольних моментів) в зовнішньому електричному полі в неоднорідній області, і вперше одержано узагальнене самоузгоджене рівняння Кірквуда - Вертхайма для відображення профілю діелектричної проникності  $\epsilon(z)$  в просторово-неоднорідній системі. Одержано загальний вираз для енергії взаємодії полярної молекули в її "зображенням" поблизу плоскої границі розділу двох діелектриків, а також наближений вираз для дипольної молекули поблизу поверхні циліндру. Вивчено орієнтаційну структуру полярної рідини, адсорбованої на плоскій діелектричній підкладці. Проведено оцінку внеску електростатичних взаємодій в поверхневий натяг та розклинючий тиск для полярної рідини. Показано, що автоорієнтаційні полярні взаємодії можуть призводити тільки до притягання міжфазних границь в плівці. Вперше виявлено існування "розмазаного" орієнтаційного плавлення в одномірному ланцюгу рівновіддалених диполів з тривимірними взаємодіями. При звертанні ланцюгів в кільця їх термічна стабільність зрос-

тає. Вивчено залежність орієнтаційних структур позиційно фіксованих квадратних та гексагональних ґраток, скручених на поверхні циліндрів, від їх радіусу та температури.

Проаналізовано залежності функцій розподілу магнітного поля  $F(H)$  та їх других моментів  $M_2$  від структури гетерогенного середовища, яка враховується різними розподілами джерел поля по вузлам простої кубічної, щільної гексагональної, повністю неупорядкованої ґраток, а також від параметру заповнення середовища та функції просторової орієнтації для джерел анізотропної форми. Проведено оцінку внеску ефектів, пов'язаних з неоднорідністю магнітного поля, до часу поперечної релаксації ЯМР  $T_2$ . Виявлено теоретичні та експериментальні дослідження кутових залежностей спектрів ЯМР в синтетичних мембранах.

Вперше проведено конфігураційний аналіз розподілу сусідів для агрегатів різного типу і виявлено аномальну поведінку мультискейлінгового параметру  $D(x)$  (фрактальної вимірності) для конфігурацій з одним сусідом в кластерах, одержаних за допомогою механізму дифузійно-обмеженої агрегації (DLA).

Практичне значення роботи. Результати роботи поглиблюють уяву про розвиток процесів розповсюдження тріщин та пробоя в гетерогенних системах та дозволяють проводити оцінки механічної та електричної міцності гетерогенних і просторово-неоднорідних систем.

Досліджені в роботі закономірності електричного пробоя неоднорідних систем при врахуванні різних механізмів руйнування на локальному рівні в умовах нестационарного зовнішнього навантаження дали змогу визначити оптимальні пара-

метри електрообробки біологічних тканин. Запропоновані рекомендації використані при розробці способу попередньої електрообробки бурякової стружки, що дозволило збільшити ступінь плазмолізу  $P_d$  до значення 0.80-0.84. Одержані результати щодо механізмів діаманітного розширення ліній ЯМР адсорбованих рідин є дуже важливими для коректної інтерпретації експериментальних даних.

Розроблені вдосконалені комп'ютерні моделі для оптимального вивчення росту структур руйнування для задач крихкого розтріскування та електричного пробою, а також вдосконалений варіант проведення класифікації кластерів Хошена-Копельмана для задачі зв'язків, які можуть використовуватися для подальшого розвитку спеціальних випадків застосування даних задач.

На вахист виносяться такі основні положення:

1) Результати дослідження діаграми руйнування неоднорідного матеріалу, отриманої в межах використання детерміністичної комп'ютерної моделі, яка включає зону відсутності руйнування, зону вупинки росту тріщин, зону активного руйнування та зону початкового неупорядкованого руйнування. Рівняння довговічності неоднорідного матеріалу, яке пов'язує час до руйнування з коефіцієнтом деформації  $K$  та параметром неоднорідності матеріалу  $dG$ . Встановлений взаємозв'язок між низьким значенням скейлінгового показника пружності  $\tau=0.39\pm 0.17$ , значенням фрактальної вимірності  $D_f=1.10\pm 0.04$  та класом універсальності для росту тріщин, який визначається механізмом направленої перколяції.

3) Досліджені закономірності розподілу електричних полів та умови електропробую в неоднорідних матеріалах, тео-

ретичне обґрунтування оптимальних умов електропробою, взаємозв'язки скейлінгових параметрів  $\mu$  та  $s$  з параметрами, які контролюють пробій, одержану діаграму електропробою просторово-неоднорідних систем та результати досліджень закономірностей пробію при врахуванні механізмів електроруйнування на локальному рівні.

3) Розширений аналіз неоднорідної дипольної системи у зовнішньому електричному полі в межах методу теорії збурень, узагальнене самоузгоджене рівняння Онзагера-Кірквуда-Вертхайма для опису профілю діелектричної проникності в неоднорідній області, аналіз внеску електростатичних взаємодій в орієнтаційну структуру, поверхневий натяг та розклинючий тиск для полярних рідин. Обчислений профіль зміни латерального і азимутального коефіцієнтів поверхневого натягу поблизу міжфазної границі.

4) Аналіз температурних орієнтаційних переходів в однорідній дипольній системі при врахуванні трьохмірних дипольних взаємодій методом Монте-Карло та виявлений орієнтаційний перехід при  $T^*_c \approx 0.55$ , при якому має місце "поляризаційне плавлення". Залежність величини  $T^*_c$  для кільцевих ланцюгів від їх радіусу.

5) Отримані в межах методу Монте-Карло орієнтаційні структури для різних типів позиційно-фіксованих ґраток диполів на поверхні циліндру для загального випадку при врахуванні трьохмірних дипольних взаємодій та залежності параметрів орієнтаційного порядку від діаметру циліндру та температури

6) Взаємозв'язок між функцією розподілу поля в магнітно неоднорідних середовищах та характером просторового роз-

поділу джерел поля, їх скінченням розміром, анізотропією форми, встановлену залежність другого моменту  $M_2$  функції розподілу  $F(N)$  від характеру просторового розподілу, симетрії ґратки та об'ємної долі частинок в дисперсії, теоретичні та експериментальні дослідження кутової залежності спектрів ЯМР насичених вологою мембран. Залежності величини  $M_2$  для дифузійно-обмежених та балістичних агрегатів від їх агрегатів.

7) Мультискейлінговий аналіз двумірних DLA кластерів з класифікацією координації частинок, аномальну залежність  $D(x)$  для частинок з одним сусідом, закономірності зміни фрактальної вимірності структур механічного руйнування та електричного пробоя при рівних умовах навантаження.

Основний внесок автора складається з постановки задач, розробки моделей процесів та їх програмної реалізації, виконання теоретичних розрахунків та експериментальних досліджень, обробки та інтерпретації одержаних результатів.

Апробація роботи. Основні результати дисертаційної роботи були представлені та обговорювалися на: Всесоюзному семінарі "Зміна структури та властивостей водних систем під впливом фізико-хімічних факторів" (Київ, 1980); XIII-й Українській республіканській конференції по фізичній хімії (Одеса, 1980); IV-й Науковій Конференції ІКХХВ АН УРСР (Київ, 1982); Всесоюзному симпозіумі по реології (Рига, 1982); III Всесоюзній конференції по термодинаміці органічних сполук (Горький, 1982 р.); Всесоюзному семінарі "Ядерний магнітний резонанс в науці та практиці" (Київ, 1983); III-му Міжнародному симпозіумі по магнітному резонансу в колоїдній хімії та поверхневим явищам (Торунь, Польща, 1983); Всесо-

ваному семінарі "Молекулярна фізика та біофізика водних систем" ЛДУ (Ленінград, 1983, 1984); Всесоюзній робочій нараді "Властивості рідини в малих об'ємах" ІТФ АН УРСР (Київ, 1983, 1985); Всесоюзній конференції по квантовій хімії та спектроскопії твердого тіла (Свердловськ, 1984); Всесоюзній координаційній нараді "Зимостійкість сільськогосподарських культур" (Київ, 1984); Робочому семінарі ІТФ АН України (Київ, 1984); Колоквіумі Відділення поверхневих явищ ІФХ АН СРСР (Москва, 1985); Всесоюзній школі-семінарі "Використання ЯМР в хімії та хімічній промисловості" (Єреван, 1985); Сесії Наукової ради АН УРСР, присвяченій пам'яті А.В.Думанського (Київ, 1985); Всесоюзному семінарі "ЯМР-спектроскопія неорганічних сполук" (Київ, 1987 р.); Виїзній сесії наукових рад АН СРСР та АН УРСР по колоїдній хімії та фізико-хімічній механіці, (Ужгород, 1987); Семінарі по фізико-хімічній механіці дисперсних систем та матеріалів (Київ, 1987); Всесоюзній нараді по приладобудуванню в галузі колоїдної хімії та фізико-хімічної механіки (Уфа, 1988); Республіканському симпозіумі "Водний режим сільськогосподарських рослин" (Кишинів, 1988); Всесоюзній конференції "Використання магнітного резонансу у народному господарстві" (Казань, 1988 р.); VI-й Всесоюзній науково-технічній конференції "Електрофізичні засоби обробки харчових продуктів та с/г сировини" (Москва, 1989); VI, VII та VIII-й Міжнародних конференціях "Властивості рідин в малих об'ємах" (Київ, 1988 р., 1989 р., 1990 р.); Всесоюзній конференції "Колоїдно-хімічні проблеми екології" (Мінськ, 1990); Міжнародній конференції по поверхневим силам (Москва, 1990); Семінарі "Спектроскопія ЯМР та структурна теорія органічних

сполук" (Кацівелі, 1990 р.); Семінарі "Використання в народному господарстві природних матеріалів та відходів промислових підприємств" (Ужгород, 1990 р.); II Республіканській науково - технічній конференції "Розробка та впровадження високоефективних ресурсозберігаючих технологій та галузі переробки АПК" (Київ, 1991 р.); III-му науково-технічному семінарі "Електротехнологія пектинових речовин" (Київ, 1992 р.); 8-й Міжнародній конференції по механіці руйнувань (Київ, 1993); Міжнародній конференції "Віомолод-93" (Київ, 1993); На засіданнях наукової школи Країн Співдружності "Вібротехнологія -91(92)" (Одеса, 1991 р., 1992 р.); На науковій конференції "Колоїдна хімія та фізико-хімічна механіка природних дисперсних систем" (Одеса, 1993 р.); Першій Українській конференції "Структура і фізичні властивості неупорядкованих систем" (Львів, 1993); VI Науковому семінарі по фізиці магнітних явищ (Донецьк, 1993); XIII-й Європейській конференції по хімії поверхні (Київ, 1994); Міжнародній школі "Нелінійні аспекти фізико-хімічних явищ" (Жирона, Іспанія, 1994); Міжнародному колоквиумі "ЕВРОМЕХ" 326 (Кельце, Польща, 1994);

За темою дисертації опубліковано 44 роботи.

Структура та обсяг дисертаційної роботи. Дисертація складається з вступу, п'яти глав, заключення, додатку. Робота викладена на 265 сторінках машинописного тексту, містить 155 рисунків, 5 таблиць і список літератури, який включає 250 найменувань.

## ЗМІСТ РОБОТИ

### 1. Розподіл механічних полів в гетерогенних системах.

#### Діаграма руйнування та кінетика розвитку процесів при різних режимах навантаження.

У випадку механічного руйнування розподіл поля тензору напруг в гетерогенному середовищі визначається з рівнянь рівноваги пружного середовища і в загальному випадку обчислення функції розподілу є однією з найбільш складних проблем в механіці руйнування. В зв'язку з цим важливим є визначення та вибір моделі, а також обчислювальних методів, що застосовуються. В даній роботі використовується одна з найбільш простих, але все ж достатньо реалістичних моделей - детерміністична модель руйнування Такаюсу (Takayasu, 1984), та обговорюються розроблені прийоми підвищення точності обчислень і особливості застосування методу релаксації.

Гетерогенне середовище моделюється двумірною ґраткою  $N \times N$  вузлів, пов'язаних між собою крихкими стержнями, модулі пружності яких задаються випадковим чином в інтервалі  $G - G_m(1 \pm dG/100)$ , де  $G_m$  - середній модуль пружності, а  $dG(\%)$  - величина дисперсії функції розподілу  $G$ , яка характеризує ступінь неоднорідності системи. Вважається, що нижній ряд вузлів закріплено, а до верхнього ряду прикладено деформуюче зусилля у напрямі, перпендикулярному до площини. Це - добре відома задача антиплоского всуви. Ймовірність руйнування визначається пороговим критерієм - індивідуальний елемент руйнується в тому випадку, коли його деформація  $\Delta u$  перевищує деяку критичну величину  $u_c$ , і при цьому його пружний модуль сильно зменшується  $G(k,1,j) \rightarrow G(k,1,j)/\epsilon$ , де

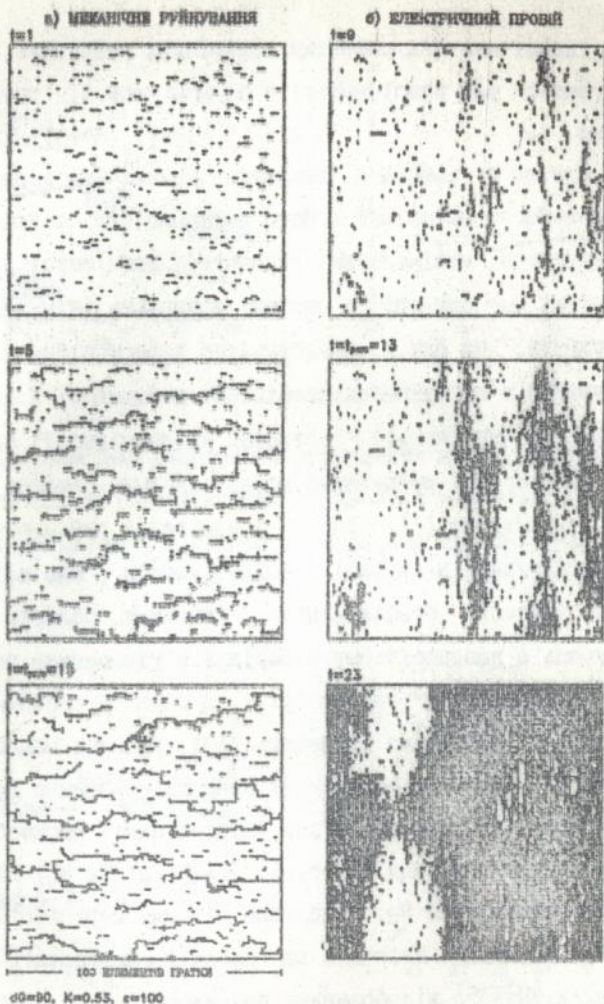
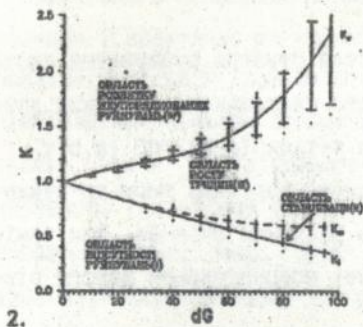


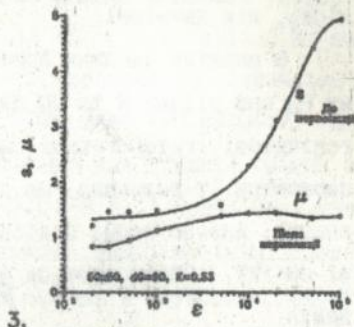
Рис. 1. Еволюція картин механічного руйнування (а) та електропробу (б) в неоднорідних системах.  $t=t_{perc}$  - час виникнення перколяційного кластеру.

$\epsilon > 1$ . Типові картини розвитку механічних руйнувань, що спостерігаються для даної моделі в певний час  $t$ , представлені на рис. 1а.

Однією з найбільш важливих механічних характеристик гетерогенного матеріалу є його деформаційна стійкість, яка визначається мінімальним значенням зовнішньої деформації матеріалу  $u$ , при якій в системі починають ініціалізуватися руйнування. На рис. 2. представлено деформаційну діаграму руйнування в координатах: коефіцієнт деформації  $K$  (що визначається як  $K = u / (N \cdot u_c)$ ) - ступінь неоднорідності середовища  $dG$ . На діаграмі руйнування можна виділити область відсутності руйнування (I); область локалізації руйнувань (II), в якій руйнування в системі ініціалізуються, але не розвиваються (область стабілізації); звичайну область розвитку руйнувань в неоднорідному матеріалі з утворенням анізотропних перколяційних тріщин (III) та область розвитку неупорядкованих надшвидких руйнувань (IV). Границя областей I-II (лінія  $K_1$ ) визначає мінімальні критичні значення деформації руйнування, які необхідні для ініціалізації процесу руйнування ґратки; границя областей III-IV (лінія  $K_0$ ) відповідає ступеню руйнування  $P_d$ , приблизно рівному перколяційній межі  $(-1/2)$  для задачі зв'язків на плоскій квадратній ґратці. Для аналітичного відображення залежностей  $K_1$  в роботі використовувалися наближення лінійних ланцюгів (ЛЛ) та наближення ефективного поля Кіркпатрика (Kirkpatrick, 1973), (ЕП). Показано, що метод ЕП є більш точним ніж метод ЛЛ. Проведені дослідження діаграм руйнування для трьохмірних систем розмір,  $24 \times 24 \times 24$  та відзначено, що трьохмірні неоднорідні системи при інших рівних умовах мають більшу стій-

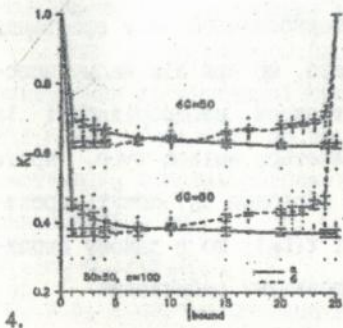


2.

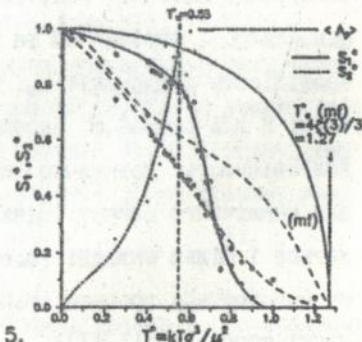


3.

Рис.2. Діаграма деформаційного руйнування неоднорідних систем.  
Рис.3. Залежності скейлінгових показників  $\epsilon$  і  $\mu$  від параметру збільшення провідності елемента при руйнуванні  $\epsilon$ .



4.



5.

Рис.4. Залежності мінімальних значень коефіцієнту напруги  $K_1$  від товщини поверхневого шару  $j_{bound}$ .

Рис.5. Температурні залежності параметрів порядку  $S_1^0$  і  $S_2^0$  для одновимірного дипольного ланцюжка.  $\langle A_p \rangle$  - амплітуди флуктуацій поляризації вдовж осі ланцюжка.

кість, ніж двумірні.

З аналізу часових залежностей ступеня руйнування системи  $P_d$  при різних  $K$  та  $dG$  отримано узагальнене рівняння довговічності гетерогенних систем  $\tau - \tau_0 \exp(a - bK) / dG$  ( $a, b, \tau_0$  - параметри,  $\tau$  - величина, що приблизно дорівнює часу-до-руйнування), яке по формі подібне до рівняння Журкова, при заміні  $dG \rightarrow kT$ . Обговорюються фізичні обґрунтування даного рівняння.

В умовах нестационарного зовнішнього навантаження особливо чітко проявляються три фази часової еволюції руйнування: інкубаційний період накопичення окремих зруйнованих елементів, активна фаза руйнування, яка супроводжується зростанням магістральних тріщин, та фаза втрати суцільності матеріалу. Показано, що тривалість інкубаційного періоду та періоду активної фази зростає із збільшенням ступеню неоднорідності системи  $dG$  та характеристичного часу зростання коефіцієнту деформації  $t_p$ . Виявлено, що при лінійному зростанні  $K$  для систем з високим ступенем неоднорідності їх довговічність практично контролюється зміною  $\tau \sim t_p$ , проте для циклічного закону зміни  $K$  (з періодом  $t_p$ ) можуть проявлятися і більш складні залежності  $\tau(t_p)$ , що в даному випадку пояснюється проявом процесів розвитку руйнування області стабілізації (II).

Вивчено закономірності зменшення ефективного модулю пружності системи поблизу точки перколяції, що описуються, за допомогою скейлінгового співвідношення типу

$$G \propto (1 - P_d / P_{00})^\tau$$

де  $P_{00} - P_d$  в точці перколяції  $t - t_{perc}$ . Показано, що значення

скейлінгового показника  $\tau$  для даної задачі є досить універсальним і практично не залежить від  $dG$ , умов зміни  $K$  та розміру системи  $N$  (при  $N \geq 30-40$ ). Усереднене по різних ініціалізаціям значення показника  $\tau$  складає  $\tau = 0.39 \pm 0.17$ , що значно нижче скейлінгового показника для пружних ґраток в випадково вилученими зв'язками ( $\tau \approx 3.3-3.5$ ). Поведінка, яка спостерігається, може бути пояснена тим, що ініційоване зовнішнім навантаженням зростання тріщин в неупорядкованому середовищі можна віднести до задачі направленої перколяції, тобто, до іншого класу універсальності. Зокрема, ступінь руйнування системи для даної задачі в точці перколяції не перевищує  $P_d \approx 0.25$  (як правило, набагато нижче), хоча для сітки випадково зруйнованих зв'язків на квадратній ґратці  $P_d = 1/2$ . Низьке значення  $\tau = 0.22 \pm 0.06$  одержано також для модельного руйнування ґратки по зв'язкам у поперечному до прикладеного навантаження напрямі вздовж лінії  $j = N/2$ .

Досліджено закономірності зміни основних характеристик руйнування гетерогенної системи при зростанні  $dG$  вздовж лінії  $K-K_m$ . Показано, що при таких умовах ступінь руйнування системи  $F_d$  зростає. Параметр анізотропії форми тріщин, який визначається як

$$\delta = (b_x - b_y) / (b_x + b_y)$$

( $b_x$  і  $b_y$  - середньоквадратичні товщини тріщин в поперечному і повздовжньому напрямках до прикладеного навантаження) при зростанні  $dG$  зменшується, і для сильно неоднорідних систем  $dG = 90$  одержано значення  $\delta \approx 0.65$ , що відповідає утворенню сильно розгалужених тріщин. Відзначимо, що при цьому на локальному рівні форма тріщин при всіх  $dG$  є близькою до лінійної.

Обговорюються залежності виду діаграм руйнування, ступеню руйнування  $P_d$ , довговічності  $\tau$  та ряду інших параметрів процесу руйнування від розміру системи  $N$ . Показано, що практично всі залежності достатньо добре описуються степеневим законом типу  $\propto N^b$ . Зокрема, довговічність системи зростає при збільшенні розмірів системи приблизно по закону  $\propto \sqrt{N}$ , а число елементів в максимальному перколяційному кластері  $N_c \propto N^{D_f}$ , де значення  $D_f \approx 1.18$ , можна розглядати як наближену оцінку фрактальної вимірності.

Проведено вивчення особливостей руйнування системи з однорідними граничними плівками та неоднорідною центральною областю та визначено відповідну діаграму руйнувань для систем з рівними значеннями товщини плівок  $j_{\text{bound}}$ . Характер розвитку руйнувань в системах такого типу принципово залежить від значень  $K$ . Показано, що при відносно малих значеннях коефіцієнту деформації (в інтервалі  $K_m < K < 1$ ) руйнування в основному мають місце в неоднорідній області і тріщини не переходять через межу розділу двох матеріалів. З ростом  $j_{\text{bound}}$  довговічність системи збільшується приблизно по експоненціальному закону  $\tau = \tau_0 \exp(a + b * j_{\text{bound}} - c * K)$ . При достатньо великих  $K \approx 1$ , руйнування також розповсюджуються на область однорідних плівок та порушують досить протяжні ділянки поблизу границь розділу з неоднорідними областями.

## 2. Особливості електроруйнування гетерогенних систем. Моделі електроруйнування біологічних тканин та їх компонентів.

В даному розділі основну увагу приділено розгляду задач електропробов, які пов'язані з процесами електрообробки

біологічних тканин, особливо в процесах електроплазмолізу, які широко використовуються в харчовій та медичній промисловостях. Обговорюються різні механізми електроруйнування індивідуальних елементів і електроруйнування гетерогенних систем різної структури. Розглянуто моделі електроруйнування поодиноких елементів гетерогенного середовища та одержано співвідношення для електричної енергії сферичної оболонки скінченної товщини у провідному середовищі, яка може слугувати моделлю біологічної клітини. Дане співвідношення є придатним для найбільш загального випадку, характерного для реальної ситуації, коли провідні та діелектричні властивості сферичної оболонки, внутрішнього та зовнішнього середовищ мають довільні характеристики.

Методологія знаходження функції розподілу електричних полів в принципі простіша, ніж у випадку механічного аналогу даної задачі, який розглядався раніше. Функція розподілу скалярного електричного потенціалу  $u$  в гетерогенному середовищі визначається шляхом розв'язання дискретизованого певним чином рівняння Лапласа, а відповідні поля звуться ласлівськими. Схема електропробою, що використовується в даному випадку, практично не відрізняється від моделі розповсюдження пружних пошкоджень, однак в суттєву різницю в тому, що провідність елементів при руйнуванні значно зростає, тобто, при досягненні деякої критичної різниці потенціалів на індивідуальному структурному елементі гетерогенного середовища,  $\Delta u > u_c$ , його провідність змінюється по закону  $G(k, i, j) \rightarrow \epsilon G(k, i, j)$ , де  $\epsilon > 1$ . На рис.16 наведено типові картини еволюції пробою в гетерогенній системі. Найбільш характерною відмінною електропробою від розтріскування є те,

що електропробій не закінчується утворенням перколяційного кластеру, а продовжується, доки ступінь руйнування системи не досягне значних величин  $P_d \approx 0.8-0.85$ . Детальні дослідження показали, що загальна діаграма електропробів в координатах  $K-dB$  практично повністю ідентична діаграмі механічного руйнування. При вивченні часових залежностей ступеню руйнування  $P_d$  та його зведеного опору  $R^* (=R(t)/R(1))$  виявлені різні фази пробів. Проведено детальний аналіз кореляційних залежностей  $R^*$  і  $P_d$  та показано, що спостерігаються значні відхилення у відображенні цих залежностей за допомогою моделі перколяційних сіток в межах наближення Кіркпатрика. Досліджено залежності скейлінгових показників  $s$  і  $\mu$ , що характеризують поведінку провідності системи поблизу точки перколяції

$$G \propto (P_{perc} - P_d)^{-s} \quad \text{при } P_d < P_{perc} \text{ , до перколяції}$$

$$G \propto (P_d - P_{perc})^{\mu} \quad \text{при } P_d > P_{perc} \text{ , після перколяції}$$

від значення параметру  $\epsilon$  (рис.4). Одержані значення відрізняються від значень  $\mu \approx 1.1-1.3$  та  $s \approx 1.1$ , що характерні для двумірних ґраток в випадково-вилученими зв'язками. Показано, що сильне збільшення доперколяційного показника  $s$  при збільшенні  $\epsilon$  корелює із збільшенням ступеню направленої перколяції.

Обговорюються особливості електроруйнування та умови досягнення максимальної ефективності електрообробки при різних режимах зміни зовнішнього навантаження (лінійне збільшення, циклічна зміна). Для лінійного режиму показано, що найбільш ефективно система руйнується, якщо швидкість наростання  $K$  знаходиться в інтервалі  $1/t_p \approx 0.02-0.1 t_s^{-1}$ , де  $t_s$ -час пробую поодинокого елемента. Ступінь руйнування сис-

теми  $P_d$  при цьому становить 0.81-0.85, причому ця величина є максимальною для найбільш неоднорідних систем. Для циклічного режиму максимальна ефективність електропробою досягається при використанні високочастотних навантажень  $\omega \approx 0.1t_s^{-1}$  з високою амплітудою. Відзначено, що при даних частотах також зменшується час перколяції та зростає швидкість процесу. Дані міркування були використані як теоретична основа при розробці вдосконаленої електричної схеми подачі біполярних синусоїдально-подібних імпульсів для апарату попередньої електрообробки бурякової стружки перед екстрактом. Застосування цього методу дозволило збільшити ступінь плазмололіу  $P_d$  до значення 0.80-0.84, що дещо вище за значення  $P_d \approx 0.75-0.8$ , яке отримувалось при використанні стаціонарних електронавантажень, та значно перевищує значення  $P_d \approx 0.41-0.43$ , яке отримується без використання електротехнологій.

Досліджено рівні механізми електроруйнування на локальному рівні. Обговорюються процеси омичного розігріву та термічного електроруйнування біологічних тканин. Показано, що прямий внесок в термічне руйнування біологічної тканини при звичайних умовах електрообробки бурякової стружки є незначним, що пояснюється високою ефективністю процесів вирівнювання температури. Проте, при локальному перегріві і руйнуванні елементів поблизу елемента, що був зруйнований в результаті пробою, загальна картина електропробою може суттєво змінитися. Для опису даного явища запропоновано просту комп'ютерну модель та показано, що загальний ступінь руйнування системи при включенні цього механізму до розгляду може підвищуватися до значень 0.9-0.95. Обговорюється

також вплив на кінетику пробую процесів дифузійної міграції вологи, яка звільняється з зруйнованих елементів. Зазначено, що дані процеси можуть суттєво уповільнювати кінетику електропробую.

Досліджено процеси електропробую анізотропних гетерогенних систем, при розгляді яких приймали, що для повдовжених елементів ( які спрямовані вздовж осі прикладення напруги) напруга пробую дорівнює  $u_c$ , а для поперечних -  $u_c/\alpha$ , де  $\alpha$  є параметром анізотропії. Показано, що при збільшенні  $\alpha$  при деякому значенні  $\alpha \approx 2$  спостерігається критичний перехід, пов'язаний із зміною анізотропії форми кластерів  $\delta$ ; при малих значеннях  $\alpha$  кластери витягнуті переважно у напрямку поля, а при великих - у поперечному напрямку. Ступінь руйнування системи  $P_{00}$  суттєво збільшується при збільшенні  $\alpha$ : від значень  $P_{00} \approx 0.5$  при  $\alpha = 10^{-2}$  до  $P_{00} \approx 0.95-0.98$  при  $\alpha = 10$ .

Розмірні ефекти в електроруйнуванні проявляються значно слабкіше, ніж при крижкому розтріскуванні. При збільшенні  $N$  практично не змінюються найбільш важливі характеристики пробую, наприклад, такі величини, як  $P_{00}$ ,  $t_{pred}$ ; при цьому спостерігається зменшення розкиду значень, що обчислюються. Відзначимо, що дана поведінка кардинально відрізняється від поведінки, яка спостерігається для крижкого розтріскування.

Проведено дослідження простої моделі просторово-неоднорідної системи з зовнішньою (а) та внутрішньою (б) неоднорідністю. Діаграми нижньої гілки електропробую  $K_1$  даних систем в залежності від товщини граничного шару  $l_{bound}$  для систем з двома значеннями  $dG=50$  і  $dG=90$  в неоднорідній об-

ласті приведені на рис.4. Слід зазначити, що наявність неоднорідної поверхневої плівки значно знижує міцність всієї системи. Вже при відносній товщині плівки, яка дорівнює  $2\lambda(j_{\text{bound}}=1)$ , спостерігається зниження електричної міцності системи до  $K_1 \approx 0.47(dG=90)$  у порівнянні з  $K_1=1$  при відсутності неоднорідної плівки. Вивчено залежності  $t_{\text{perc}}$  і  $P_{\infty}$  від коефіцієнту напруги та показано, що при збільшенні  $K$  для просторово-неоднорідних систем ступінь руйнування зменшується значно сильніше, ніж для просторово-однорідних систем. Ефект, що спостерігається, пояснюється особливостями протікання процесу пробоя в системах з неоднорідною поверхневою плівкою. В просторово-неоднорідних системах пробій ініціалізується в межах неоднорідного граничного шару, і в плином часу кластери пробоя починають проникати до однорідного шару. Кластери пробоя для даних систем характеризуються явно вираженою просторовою неоднорідністю. При цьому однорідна частина системи включає переважно лінійні ланки, а компактні зони сконцентровано поблизу неоднорідних границь. В результаті, утворення лінійних ділянок пробоя в поперечному напрямі дещо екранується, і внаслідок цього ефекту остаточний ступінь руйнування системи значно знижується.

### 3.Орієнтаційне упорядкування в просторово - неоднорідних та низьковимірних полярних системах

Орієнтаційна структура полярних систем в просторово - неоднорідних областях та поблизу границь розділу фаз може значно відрізнятись від структури об'ємних систем. В роботі проаналізовано різні наближення для обчислення профілів ефективного потенціалу  $u_{\text{ef}}(z, \theta)$  орієнтаційної функції роз-

поділу  $f(z, \theta)$  та орієнтаційного параметру порядку  $S_2^0(z)$  для сильнополярної рідини поблизу міжфазної границі. Повний набір орієнтаційних параметрів порядку визначається в загальному випадку як

$$S_k^m = \text{Re} \langle Y_k^m \rangle \cdot (2 - \delta_{m0}) / \sqrt{4\pi(2k+1)},$$

де  $\theta$  - це кут між дипольним моментом та нормаллю до границі розподілу,  $Y_k^m$  - сферична гармоніка,  $\langle \dots \rangle$  означає статистичне усереднення по ансамблю. В даному контексті термін "сильнополярна рідина" означає, що зведений дипольний момент (безрозмірна величина) молекул рідини  $\mu^* = \mu / 4\pi\epsilon_0 b^3 kT$  ( $\epsilon_0$  - електрична постійна,  $b$  - діаметр молекул,  $k$  - постійна Больцмана,  $T$  - температура) є достатньо великим, щонайменше порівняльним з одиницею. Наприклад, для молекул води  $\mu^* \approx 2.1$  при  $T = 273$  К. Для врахування більш високих мультиполярних взаємодій (диполь-квадрупольних ( $\mu\theta$ ), квадруполь-квадрупольних ( $\theta\theta$ )) розвинута термодинамічна теорія збурень неоднорідних мультиполярних рідин у зовнішньому електричному полі  $E$  та обчислено профілі повного набору параметрів порядку  $S_1^0 - S_2^2$  поблизу міжфазної границі та в тонких шарах. Показано, що в тонких шарах включення електричного поля призводить до асиметризації розподілу параметрів порядку поляризаційного ( $S_1^0 = \langle \cos\theta \rangle$ ) та неполяризаційного ( $S_2^0 = \langle P_2(\theta) \rangle = \langle 3\cos^2\theta - 1 \rangle / 2$ ) типів. На основі використання термодинамічної теорії збурень в анізотропним дипольним твердосферним базисним потенціалом одержано самоузгоджене рівняння типу Кірквуда-Вертхайма

$$(\epsilon(z) - 1)(2\epsilon(z) + 1) / 9\epsilon(z) = y [1 + 2S_2^0(z, \epsilon(z)) / g_{kw}],$$

де  $\epsilon(z)$  - е профіль діелектричної проникності,  $y = 4\pi\mu^* \rho^* g_{kw} / \theta$ ,  $\rho^* = \rho b^{-3}$ ,  $\rho$  - густина,  $g_{kw}$  - фактор Кірквуда-Вертхайма.

Дане співвідношення використано для оцінки профілю діелектричної проникності в поверхневому шарі. Показано, що далеко від границі розділу для діелектричної проникності справедливим є асимптотичний розклад

$$\epsilon(z) = \epsilon_{\infty} - 3(3\gamma - 1) \cdot \mu^2 z^{-3} / 80, \text{ де } z = z/b.$$

В роботі одержано узагальнене співвідношення для енергії взаємодії мультиполярних молекул в їх "зображенням" поблизу плоскої границі розділу двох діелектриків  $\epsilon_1, \epsilon_2$ , яке було використано для оцінки профілів параметрів порядку адсорбованої рідини в нульовому та першому порядках по густині. Для випадку води показано, що в фазі з великою діелектричною проникністю дипольні моменти орієнтуються переважно в площині границі розділу в напрямом поляризації дипольних моментів в бік цієї фази (визначається вибором  $\theta_{zz} > 0$ ) та характеризуються слабкою анізотропією в переважній орієнтації площини молекули НОН на площині границі розділу.

Виконано аналіз внеску електростатичних взаємодій в поверхневий натяг  $\gamma$  для води. Особливу увагу приділено визначенню від'ємного внеску в  $\gamma$ , пов'язаного з автополяризацією молекул в поверхневому шарі. Показано, що даний внесок в  $\gamma$  є досить незначним і не перевищує декількох процентів. Розвинуто мікроскопічну теорію розклинюючого тиску  $\Pi$  при врахуванні електростатичної частини міжмолекулярного потенціалу. Дипольні взаємодії призводять до притягання міжфазних границь, і залежність їх вкладу в  $\Pi$  від товщини плівки виявляється такою ж, як і для дальнодіючих дисперсійних сил  $\Pi_{\text{дв}} \sim h^{-3}$ . Показано, що для води загальний внесок дипольних взаємодій в константу Гамакера може бути досить значним. За

допомогою теорії збурень отримано загальний розклад для розклинюючого тиску тонкої плівки диполь-квадрупольної рідини. Відзначено, що сумарний внесок електростатичних взаємодій в розклинюючий тиск є завжди від'ємним.

Вивчено особливості орієнтаційного порядку в одноірних ланцюгах рівновіддалених та позиційно фіксованих дипольних систем (для трьохмірного диполь-дипольного потенціалу). На рис.5 представлені температурні залежності ( $T^* - \mu^{*-2}$ ) поляризаційного ( $S_1^0 - \langle P_1(\theta) \rangle - \langle \cos\theta \rangle$ ) та неполяризаційного ( $S_2^0 - \langle P_2(\theta) \rangle - \langle 3\cos^2\theta - 1 \rangle / 2$ ) параметрів порядку, одержаних за допомогою наближення теорії середнього поля ( $m_f$ ) та при застосуванні методу Монте-Карло (дані, одержані для 512 частинок при застосуванні періодичних граничних умов представлено крапками) (тут,  $\theta$  - це кут між напрямом дипольного моменту та віссю ланцюга). Згідно з даними теорії середнього поля, при  $T^* = 4\zeta(3)/3 \approx 1.27$  ( $\zeta(3)$  - дзета-функція Рімана), параметри порядку  $S_1^0, S_2^0$  перетворюються на нуль. Згідно з даними методу Монте-Карло, орієнтаційні переходи для даної системи виявляються більш складними, і вони "розмавані" в деякому інтервалі температур. При певній критичній температурі  $T^* = T_c^* \approx 0.55$  спостерігається "поляризаційне плавлення". В цій точці руйнується однонаправлена монодоменна орієнтаційна структура ланцюга та поляризаційний параметр порядку перетворюється на нуль, але загальна неполяризаційна упорядкованість, що описується ненульовим значенням  $S_2^0$ , ще зберігається в деякому інтервалі температур до  $T^* < 1.2$ . В точці  $T^* = T_c^*$  також зростає до максимуму усереднена амплітуда флуктуацій поляризації вздовж осі ланцюга  $\langle A_p \rangle$ . Показано, що точка  $T_c^*$  зсувається в область більш

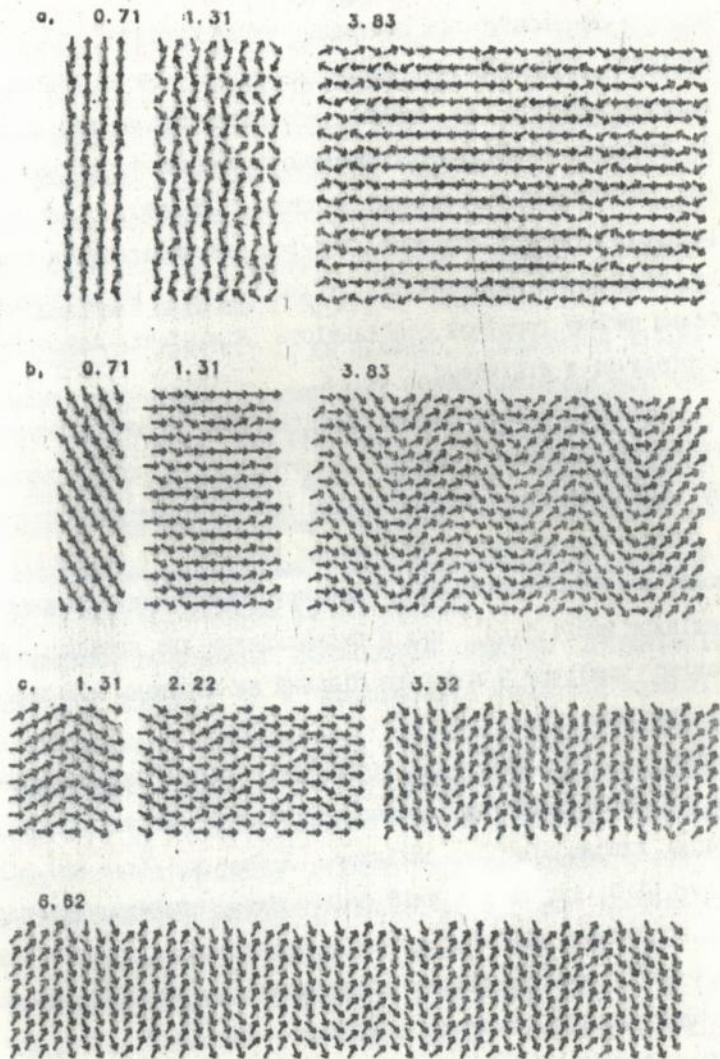


Рис.6. Розгортки орієнтаційних структур для квадратної (а) і гексагональних (б,с) ґраток диполів, позиційно-фіксованих на поверхнях циліндрів. Дані одержані за допомогою методу Монте Карло при  $T^* = 0.04$ , радіуси циліндрів приведені на рисунках.

низьких температур при обмеженні числа сусідів, які взаємодіють. Обговорюється вплив граничних умов на кінцях дипольних ланцюгів на профіль розподілу параметрів порядку по ланцюгу. Розглянуто особливості протікання орієнтаційних переходів для кільцевих дипольних ланцюгів. Для малих радіусів кінцевих ланцюгів ( $R \approx 1-26$ ) спостерігається помітне збільшення величини  $T^*_c$  ( $T^*_c \approx 0.7-0.8$ ), що свідчить про більш високу термічну стабільність кільцевих ланцюгів у порівнянні з лінійними.

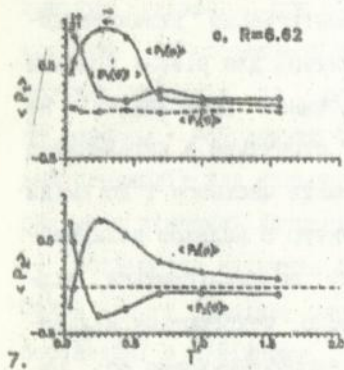
Проведено дослідження орієнтаційних структур дипольних ґраток на поверхні циліндру. З метою грубої оцінки характеру орієнтаційного упорядкування використовувалося одержане в роботі наближене співвідношення для енергії взаємодії диполя з його "зображенням" поблизу поверхні діелектричного циліндру  $u_{ци}(1,1_{im})$ , яке є справедливим для випадку, коли радіус циліндру  $R$  набагато більший за відстань між диполем та поверхнею  $z$ :

$$u_{ци}(1,1_{im}) = (\lambda c^2 / 32z^3 \pi \epsilon_1 \epsilon_0) [1 + \cos^2 \theta - (z/2R) \sin^2 \theta \sin^2 \varphi], z/R \ll 1,$$

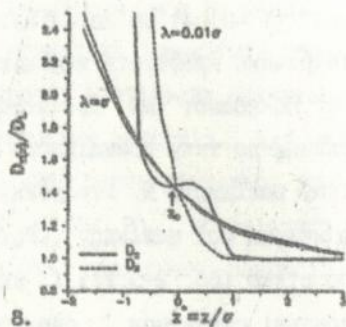
де азимутальний ( $\theta$ ) та латеральний ( $\varphi$ ) кути визначають орієнтацію диполю відносно циліндру,  $\lambda = (\epsilon_1 - \epsilon_2) / (\epsilon_1 + \epsilon_2)$ . При  $\epsilon_1 > \epsilon_2$  ( $\lambda > 0$ , диполь в рідкій фазі поблизу циліндричної парової порожнини) мінімуму енергії відповідає орієнтація  $\theta = 90^\circ$  та  $\varphi = 90^\circ$ , тобто, найбільш вірогідною є орієнтація диполю в площині циліндру перпендикулярно до його осі. При  $\epsilon_1 < \epsilon_2$  ( $\lambda < 0$ , диполь в паровій фазі поблизу діелектричного циліндру) мінімуму енергії відповідає орієнтація  $\theta = 0^\circ$  и  $\varphi = 0^\circ$ , тобто, найбільш вірогідною є орієнтація диполю перпендикулярно площині циліндру з переважним спрямуванням вздовж його осі.

Одержані за допомогою методу Монте-Карло низькотемпературні ( $T^* = 0.04$ ) орієнтаційні структури для рівних моделей циліндричних кластерів дипольних частинок представлені на рис.6. Показано, що орієнтаційні структури є надзвичайно чутливими до типу позиційного пакування частинок і до зміни радіусу циліндрів  $R$ . Утворення структур з великою поляризацією вдовж осі циліндру ( $\langle P_2(\theta) \rangle \gg 0$ ) спостерігається відносно рідко ( $66, R=0.71$ ) і, як правило, утворюються кільцеві доменні структури, спрямовані перпендикулярно осі циліндру ( $\langle P_2(\theta) \rangle \approx 0$ ), або структури з чергуванням поляризації, для яких  $\langle P_2(\theta) \rangle \approx 0$ , але  $|\langle P_2(\theta) \rangle| \gg 0$ . При підвищенні температури для даних систем є можливим прояв переходів між поляризаційними структурами, спрямованими вдовж осі циліндру та перпендикулярно до неї (рис.7).

Запропоновано метод розрахунків ступеню анізотропії коефіцієнту дифузії  $D$  в неоднорідній міжфазній області, який базується на використанні наближення Кірквуда-Райза для величини  $D$ . Даний метод використано для оцінки профілю латерального  $D_x$  та азимутального  $D_z$  коефіцієнтів дифузії поблизу границі розділу рідина - пар для простого лонд-дженсовського флюїда. Показано, що в рідині коефіцієнт дифузії в азимутальному напрямі є вищим, ніж в латеральному, а в парі - навпаки. (рис.8.). Коефіцієнти дифузії  $D_z(z)$  та  $D_x(z)$  зрівнюються в об'ємних фазах, а також в точці  $z=z_0$ , яка лежить в паровій фазі поблизу точки  $z=0$ . Розглянуто прості фізичні міркування, що дозволяють пояснити поведінку, яка спостерігається.



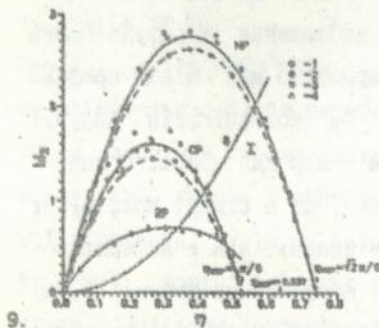
7.



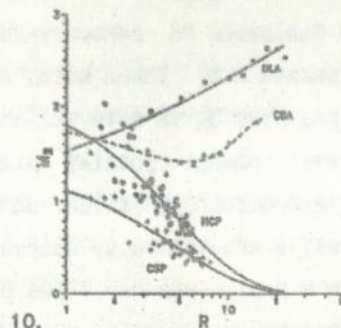
8.

Рис.7. Температурні залежності параметрів порядку, що характеризують орієнтаційні структури для циліндричного кластеру дипольних частинок типу с (радіус  $R=6.62$ ).

Рис.8. Профілі латерального  $D_x$  та азимутального  $D_z$  коефіцієнтів дифузії поблизу границі розділу рідина-пар при рівних значеннях товщини перехідного шару  $\lambda$ .



9.



10.

Рис.9. Залежності другого моменту  $M_2$  функції розподілу магнітних полів  $F(H)$  від коефіцієнту упаковки сферичних джерел випадкових полів  $\eta$  для різних моделей упаковок.

Рис.10. Залежності  $M_2$  від радіусу кластера  $R$  для різних типів кластерів.

4. Розподіл магнітних полів в діамагнітних неоднорідних системах. Неоднорідне розширення ліній ЯМР адсорбованих рідин

Розглянуті вище рівні класи фізичних задач пов'язані з розподілами деформаційних та електричних полів в гетерогенних та просторово-неоднорідних системах. Особливий інтерес становить вивчення функції розподілу магнітних полів  $F(H)$  в діамагнітних неоднорідних системах. Цей інтерес зумовлений, в одного боку, відносною простотою вивчення функції  $F(H)$  та можливістю ефективною реалізацією комп'ютерних методів, а в другого боку - надзвичайною практичною важливістю даної проблеми, оскільки вона дуже близько пов'язана з проблемою діамагнітного (неоднорідного) розширення ліній ЯМР та посиленої релаксації рідин в гетерогенних системах. Велика важливість даних питань виявилася нещодавно в зв'язку з визначенням умов підвищення роздільної здатності методики магнітно-резонансної візуалізації біологічних об'єктів та насичених водою систем.

В роботі проаналізовано особливості неоднорідного розширення для мікрогетерогенних систем (тобто, коли розмір пор є меншим за  $10^3$  нм) та обговорюються межі придатності гаусового континуального наближення для обчислення функції розподілу. Зокрема, розглянуто проблему визначення функції розподілу для джерел поля з скінченними розмірами. В якості джерел поля розглядалися сферичні частинки, діамагнітна сприйнятливості яких відрізнялась від діамагнітної сприйнятливості  $\chi_2$  матеріалу гетерогенної матриці,  $\Delta\chi = \chi_1 - \chi_2$ . Представлено результати комп'ютерного моделювання функції  $F(H)$  для різних моделей діамагнітно-неоднорідних систем.

Джерела поля випадково розподілялися по вузлам простої кубічної (CP) та щільної гексагональної (HP) ґраток, а також по вузлам ґратки, що була одержана за допомогою алгоритму випадкового пакування твердих сфер (RP) при різних значеннях коефіцієнту упаковки  $\eta$ . Досліджено вплив радіусу сфери, в межах якої враховується розподіл джерел поля, на вигляд функції  $F(N)$  та її другий момент  $M_2$ . Показано, що при врахуванні розподілу джерел поля в двох або більше координаційних сферах вигляд функції  $F(N)$  наближається до гаусового. Проаналізовано різні елементарні конфігурації частинок в першій координаційній сфері для пакувань типу CP та HP. Показано, що вигляд функції розподілу визначається статистикою розподілу елементарних конфігурацій, і більш як 90% внеску в  $M_2$  визначаються розподілом сусідів в першій координаційній сфері. Залежності  $M_2(\eta)$  проходять через максимум (рис. 9) при  $\eta = \eta_{\max}/2$  ( $\eta_{\max} = \eta_{\text{CSP}}, \eta_{\text{HCP}}, \eta_{\text{RCP}}$  - максимально можливі коефіцієнти упаковки для простої кубічної (CSP), щільної гексагональної (HCP) та щільної випадкової (RCP) упаковок, відповідно). Різними символами на рис. 9 показано дані, одержані при врахуванні різної кількості координаційних сфер (1-4). При однакових значеннях  $\eta$ , для упаковки HP спостерігаються максимальні значення  $M_2$ , а для упаковки RP - мінімальні. Це вказує на те, що при оцінці  $M_2$  важливо враховувати не лише усереднене значення коефіцієнту упаковки, але й симетрію взаємного розміщення частинок. Квадратична залежність  $M_2 = 6.4\eta^2$  (рис. 9, пунктирна лінія 5) відповідає звичайному наближенню суцільного середовища без врахування ближнього координаційного порядку.

Проведено також аналіз вигляду функції розподілу  $F(N)$

та величин  $M_2$  в кластерах скінченних розмірів з різним пакуванням частинок. Вивчено залежності  $M_2$  від радіусу кластеру  $R$  для скінченних сферичних агрегатів з простим кубічним (SCP) та щільним гексагональним (HCP) пакуванням, а також одержаних за допомогою механізмів дифузійно-обмеженої агрегації (DLA) та балістичної агрегації (CBA) (рис.10). Виявлено взаємозв'язок між характером залежностей  $M_2(R)$  та статистикою розподілу конфігурацій частинок для даних пакувань в найближчих координаційних сферах.

Проведено теоретичне обчислення функції розподілу  $F(N)$  для систем з джерелами поля анізотропної (сфероїдальної) форми для деяких найпростіших випадків функцій орієнтаційного розподілу джерел поля у зразку. Одержані результати використовуються для пояснення кутових залежностей спектрів ЯМР адсорбованих рідин в синтетичних мембранах. Показано, що сигнали ЯМР рідин в анізотропних гетерогенних об'єктах можуть мати досить складну структуру, яка залежить від орієнтації гетерогенного об'єкту в магнітному полі, форми та орієнтації магнітних неоднорідностей, вологості, та ряду інших характеристик.

Проведено оцінку внеску броуновської дифузії частинок в вільнодисперсних системах під час поперечної магнітної релаксації та показано, що цей ефект може спостерігатися в емульсійних системах.

#### 5. Аналіз неоднорідних фрактальних структур в гетерогенних системах.

Більшість структур росту, що досліджуються в даній роботі, виявляють фрактальні властивості. Зростання масштаб-

но-інваріантних структур керується правилами приєднання нових елементів до остову кластеру, який зростає. Фрактальна вимірність характеризує глобальні геометричні властивості системи, але нічого не говорить про деталі структури. При моделюванні крихкого розтріскування виявлено, що фрактальна вимірність тріщин є достатньо універсальною величиною, що дорівнює  $D_f = 1.10 \pm 0.04$ , і практично не залежить від умов навантаження (значень  $K_{IC}, \Delta K, t_p$ ) та ступеню неоднорідності матеріалу  $dG$ . Таке низьке значення  $D_f$  узгоджується з одержаними даними щодо високого ступеню анізотропії форми тріщин, і воно добре узгоджується з даними деяких експериментальних робіт. Неоднорідність фрактальних структур форми тріщин виявляється в їх самоафінності, і для них характерні різні скейлінгові властивості в перпендикулярному та паралельному до прикладеного розтягуючого зусилля напрямках. Одержане в даній роботі при розрахунках значення  $D_f$  є суттєво нижчим за одержане Такаясу  $D_f = 1.65 \pm 0.05$ , яке скоріше є характерним для моделей DLA-подібного утворення тріщин з слабо вираженою анізотропією (Meakin, 1990).

Для електричного пробю неоднорідність фрактальних структур є вираженою сильніше. Фрактальна вимірність структур пробю безперервно зростає при розвитку пробю, проходячі характерні значення  $D_f \approx 1$  для зародків фази пробю,  $D_f \approx 1.1-1.6$  в точці перколяції і  $D_f \approx 2$  на заключній стадії пробю. Внутрішня частина перколяційного кластеру характеризується більш високими значеннями фрактальної розмірності ( $D_{f1}$ ), аніж ділянки на периферії. Кореляційна залежність між значенням  $D_{f1}$  та ступенем руйнування  $P_d$  в точці перколяції  $t-t_{perc}$  представлена на рис.11. Фрактальна вимірність

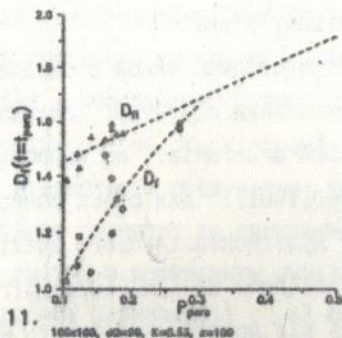
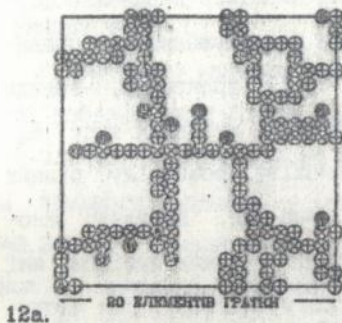
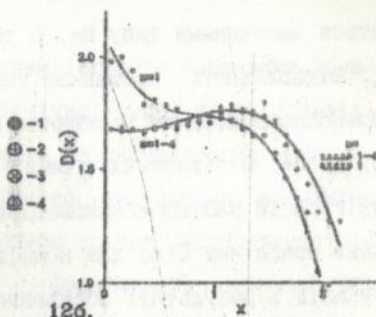


Рис.11. Залежності між фрактальними вимірностями кластерів електропробою  $D_f$  (усереднене по кластеру значення) і  $D_{f1}$  (значення для внутрішньої частини кластеру) від ступеню руйнування системи  $p_{perc}$  при  $t=t_{perc}$ .



12а.



12б.

Рис.12. Схема конфігураційного аналізу двовимірного кластеру DLA в розділенні частинки по рівному числу найближчих сусідів(1-4) (а) і результати мультискейлінгового аналізу кластеру з врахуванням даних конфігураційного аналізу;  $z=1$  для частинки в одному сусідом,  $z=1-4$  - для всіх типів конфігурацій (б).

перколяційних кластерів виявилась чутливою характеристикою рівних режимів зміни зовнішнього навантаження та механізмів руйнування на локальному рівні.

В даній роботі проведено також дослідження неоднорідності класичних фрактальних структур, одержаних за допомогою моделі росту DLA агрегатів, що виростили на квадратній ґратці (Witten, Sander, 1981). Для більш тонкого аналізу використано процедуру мультискейлінгового аналізу залежностей чисельної густини (Amitrano та інш., 1991)  $\rho(r, R) \sim r^{-(d-D(x))} \cdot C(x)$  (де  $r$  - відстань від початку координат,  $R$  - радіус ґратці агрегату,  $d=2$  - вимірність простору,  $D(x)$  - безперервна фрактальна вимірність,  $C(x)$  - скейлінгова функція,  $x=r/R$ ) в розділеннях частинок по числу найближчих сусідів.

Центральна частина одного з вирощених кластерів DLA з явним розподілом частинок по різних типам конфігурацій приведена на рис.12а. Чорними колами позначено периферійні частинки, які мають 1 сусіда; остов кластеру переважно формується частинками типу  $N_2$ , а точки розгалуження, як правило, відповідають частинкам типу  $N_3$  і, практично, завжди - висококоординованим частинкам з чотирма сусідами типу  $N_4$ . Результати мультискейлінгового аналізу розподілу різних конфігурацій частинок показані на рис.12б. Виявлено аномальну поведінку  $D(x)$  для конфігурацій з одним сусідом, які виникають в результаті обривання росту кластеру. Для частинок з більшим числом найближчих сусідів спостерігається поведінка, яка не відрізняється значно від тої, що характерна для загального числа частинок.

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. В межах детерміністичної комп'ютерної моделі зростання тріщин в гетерогенних матеріалах одержано узагальнену діаграму руйнування в координатах: коефіцієнт деформації  $K$  - параметр неоднорідності  $dG$ . На діаграмі виділено 4 області: 1) область відсутності руйнування; 2) область ініціалізації, початкового розвитку та припинення руйнування; 3) область розвитку тріщин з порушенням суцільності матеріалу (по типу направленої перколяції); 4) область неупорядкованого руйнування (по типу ізотропної перколяції). Кількісно охарактеризовано різні фази руйнування та запропоновано узагальнене рівняння довговічності неоднорідних систем, яке описує залежність часу до руйнування  $\tau$  від коефіцієнту деформації  $K$  у вигляді аналогу рівняння Журкова:  $\tau = \tau_0 \exp((a - bK)/dG)$ , де  $\tau_0, a, b$  - параметри. Показано, що довговічність зростає із збільшенням розміру системи приблизно по закону  $\tau \propto \sqrt{N}$ .

2. Одержано значення для скейлінгового показника пружності поблизу порогу втрати механічної суцільності матеріалу  $\tau = 0.39 \pm 0.17$ , що є значно нижчим за скейлінговий показник для пружності ґраток з випадково видлученими зв'язками ( $\tau \approx 3.3 - 3.5$ ). Геометрична структура тріщин характеризується також низьким значенням фрактальної вимірності  $D_f = 1.15 \pm 0.05$ , що є універсальним параметром для даної моделі росту тріщин і не залежить від властивостей гетерогенного середовища ( $dG$ ) та умов навантаження. Проведені дослідження закономірностей руйнування систем з неоднорідним внутрішнім шаром та однорідними плівками на границях. Показано, що при помірних навантаженнях зростання тріщин відбу-

вається лише в неупорядкованих шарах та довговічність росте із зростанням товщини однорідних плівок  $J_{\text{bound}}$  приблизно по експоненціальному закону  $\tau \sim \exp(b \cdot J_{\text{bound}})$ .

3. За допомогою комп'ютерної моделі вивчено закономірності електропробю гетерогенних систем при різних умовах зміни зовнішнього навантаження, проаналізовано часові фази пробю та визначено оптимальні параметри проведення процесу. Досліджено залежності скейлінгових показників провідності  $\mu$  та  $s$  від параметру  $\epsilon$ , який характеризує зростання провідності елементу при пробі та виявлено кореляції між значеннями  $s$ , фрактальної вимірності  $D_f$  та ступенем руйнування  $P_d$  в точці перколяції. Включення різних механізмів електроруйнування на локальному рівні призводить до суттєвої зміни кінетики пробю та дозволяє досягнути більш високих ступенів електроруйнування. Досліджено діаграму електропробю просторово-неоднорідних систем та показано, що при наявності тонких неоднорідних поверхневих плівок електрична міцність всієї системи суттєво знижується.

4. Показано, що в одновірному дипольному ланцюгу рівновіддалених дипольних моментів при врахуванні трьохмірних дипольних взаємодій спостерігається "розмитий" орієнтаційний перехід. При температурах  $T > kT_b^3/\mu^2$  вище деякого критичного значення в інтервалі  $T_c \approx 0.55$  має місце втрата спонтанної поляризації ("поляризаційне плавлення"), а неполяризаційний параметр порядку  $S_2^0 = \langle P_2(\cos\theta) \rangle$  поступово зменшується до нуля в більш широкому інтервалі температур (0.55-1.2). При зменшенні числа найближчих сусідів, які приймають участь у взаємодії, нижче за  $z=4-5$  спостерігається помітне зменшення величини  $T_c$ . Вивчено закономірності

орієнтаційних переходів для кільцевих ланцюгів диполів і встановлено, що величина  $T^*_{c}$  зростає при зменшенні радіусу ланцюга; досягаючи значень  $T^*_{c} \approx 0.7-0.8$  при  $R=1-25$ . Досліджено масштаби впливу граничних умов для фіксованої та вільної поляризації на кінцях ланцюгів.

5. Методом Монте-Карло визначено закономірності поляризації для позиційно-фіксованих квадратної та гексагональної ґраток диполів, згорнутих на поверхні циліндру при врахуванні трьохвимірних дипольних взаємодій. Досліджено температурні залежності повного набору орієнтаційних параметрів порядку. Показано, що визначальний вплив на характер поляризаційних структур диполів на поверхні циліндрів справляють тип ґратки, напрям осі згортання, радіус циліндру та температура. Найбільш характерними для вказаного типу систем є кільцеві поляризаційні структури у напрямі, перпендикулярному до осі циліндру. Визначено умови виникнення поляризаційних-структур вздовж осі циліндру та показано, що, як правило, реалізуються структури з флуктуацією напрямку поляризації при переміщенні по поверхні циліндру в аксіальному напрямі.

6. Проведено аналіз закономірностей розподілу випадкових полів в різних типах діаманітних гетерогенних систем. Для систем з сферичними джерелами поля скінченних розмірів проаналізовано залежність форми функції розподілу  $F(N)$  та її другого моменту від характеру розподілу джерел по вузлах упорядкованих та неупорядкованих пакувань джерел поля, їх об'ємної частки в дисперсії, конфігурації розміщення джерел в найближчих координаційних сферах. Проведено аналіз поведінки  $F(N)$  та  $M_2$  в скінченних кластерах, одержаних по меха-

нізмам дифузійно-обмеженої та балістичної агрегації. Виявлено взаємозв'язок між характером поведінки  $M_2$  та типами різних елементарних конфігурацій для пакувань найближчих сусідів. В межах розвинутих уявлень про взаємозв'язки між закономірностями розподілу магнітного поля та структурою гетерогенної системи, характером розподілу джерел поля, їх об'ємної частки в дисперсії, конфігурації розміщення джерел в найближчих координаційних сферах, анізотропією форми джерел поля та кутовою функцією їх просторового розподілу, запропоновано пояснення ефекту кутової залежності спектрів ЯМР рідин в мембранах та тонких плівках, а також факторів, що визначають час поперечної релаксації рідин в гетерогенних системах.

9. Виконано аналіз неоднорідності фрактальних структур, що формуються в процесах крихкого розтріскування та електропробою, а також двовимірної моделі росту кластерів по механізму дифузійно-обмеженої агрегації. Виявлено аномальну поведінку мультискейлінгового показника  $D(x)$  в моделі DLA для конфігурацій обриву росту кластерів.

#### ПЕРЕЛІК РОБІТ, ОПУБЛІКОВАНИХ ПО ТЕМІ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Манк В.В., Лебовка Н.И. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса воды в гетерогенных системах. -Киев: Наукова Думка, 1988.- 204 с.
2. Манк В.В., Лебовка Н.И. ЯМР-спектроскопия воды и водных систем. - Киев: из-во "Знание" УССР.1981. - 24 с.
3. Гулий И.С., Лебовка Н.И., Манк В.В., Купчик М.П., Бажал М.И., Матвиенко А.В., Палченко А.Я. Научные и практические принципы электрической обработки пищевых продук-

4. Лебовка Н.И., Овчаренко Ф.Д., Манк В.В. Хрупкое разрушение и уравнение долговечности для неоднородной плоской квадратной решетки. // Доклады АН СССР. - 1990. - 315, N 1. - с.140-143.
5. Лебовка Н.И., Манк В.В., Выгорницкий Н. В. Размерные эффекты при моделировании процессов разрушения малых неоднородных систем. // В сб.: "Физика жидкого состояния" - Киев, 1992. - с. 62-71.
6. Лебовка Н.И., Овчаренко Ф.Д., Манк В.В. Проявление деформационного разупорядочения при моделировании разрушения плоской неоднородной квадратной решетки в условиях нестационарной деформации. // Доклады АН СССР. -1991. - 321, N 1. - , с.131-135.
7. Лебовка Н.И., Манк В.В., Пивоварова В.В. Моделирование разрушения неоднородной системы в условиях нестационарной деформации. // ФТТ. - 1992. - 34, N7.- с. 2007-2015.
8. Lebovka N.I., Mank V.V. Phase diagram and kinetics of inhomogeneous square lattice brittle fracture. // Physica A.. -1992. - 181A. - 346-363.
9. Лебовка М.И., Манк В.В. Особливості формування фрактальних конфігурацій при моделюванні руйнування гетерогенних систем. // Тези конференції "Структура і фізичні властивості неупорядкованих систем" . - Львів, 1993. - с.215.
10. N.I.Lebovka, V.V. Mank, I.I.Marczin, N.S. Pivovarova Fracture of heterogeneous two-dimensional lattices under the different regimes of loading. Analysis of the fractal pattern. // Proceeding of the 8th Int. Conf. on

Mechanics of Fracture. - 1993. - Hyderabad: P.O. Kanchanbagh - p. 285-295.

11. Лебовка Н.И., Манк В.В., Пивоварова Н.С. Моделирование разрушения гетерогенных материалов при циклическом нагружении. // Фізико-хімічна механіка матеріалів. - 1993. - №6. - с.88-96.
12. Lebovka N.I. Simulation of crack propagation in inhomogeneous materials: Fractal and anisotropic properties. // Abstracts of the EUROMECH Colloquium 326. - Kielce(Poland): Univ. of Technology, 1994. - p.15.
13. Лебовка Н.И., Манк В.В., Овчаренко Ф.Д., Купчик М.П., Гулый И.С. Особенности образования перколяционных кластеров при электрическом пробое плоской квадратной решетки. // Доклады АН СССР. - 1990. - 310, N 5. - с.1170-1173.
14. Лебовка Н.И., Манк В.В., Купчик М.П., Бажал М.И., Гулый И.С. Моделирование процессов электрообработки свекловичной ткани. // Известия ВУЗов, пищевая технология. - 1990. - N 4. - с. 56-58.
15. Лебовка Н.И., Манк В.В., Купчик М.П., Бажал М.И., Гулый И.С. Электрическая энергия сферической оболочки конечной толщины в проводящей среде. // Электронная обработка материалов (Кишинев). - 1991. - N1(157). - 35-38.
16. Бажал М.И., Гулый И.С., Купчик М.П., Лебовка Н.И. Математическое моделирование процесса электроплазмолиза растительного сырья. // Тез. докл. II Республиканская научн. техн. конференции "Разработка и внедрение высокоэффективных ресурсосберегающих технологий и перерабатывающие отрасли АПК". - Киев. - 1991. - с.53-54.
17. Бажал М.И., Гулый И.С., Купчик М.П., Лебовка Н.И., Манк

- В.В. Моделирование процессов разрушения биологической ткани при наличии процессов диффузионной миграции влаги. // Электронная обработка материалов (Кишинев). -1992. - №2. - с. 62-67.
18. Лебовка Н.И., Манк В.В., Купчик М.П., Важал М.И., Гулый И.С. Моделирование электрического пробоя неоднородных систем в нестационарных полях. // Электронная обработка материалов (Кишинев). -1992. - №4. - с. 56-62.
19. Лебовка Н.И., Манк В.В., Овчаренко Ф.Д., Купчик М.П., Гулый И.С., Важал М.И. Структура и фрактальные свойства конфигураций пробоя при электрическом разрушении анизотропных систем //Доп.АН України.-1992.-№5.-с.125-129.
20. Лебовка Н.И., Манк В.В., Купчик М.П., Гулый И.С., Важал М.И. Моделирование пробоя неоднородных систем под действием циклических электронагрузок. // Электронная обработка материалов (Кишинев).-1993. - №1. - с.66-73.
21. Важал М.И., Гулый И.С., Купчик М.П., Лебовка М.И., Манк В.В. Математичне моделювання електроплазмової бурякової сировини // Теми доп. Міжнародно. науково-технічної конференції "Розробка та впровадження нових технологій та обладнання у харчову та переробні галузі АПК". - Київ. - 1993. - с.43-44.
22. Lebovka N.I., Mank V.V. Simulation of anisotropic systems dielectric breakdown. // Proc. of the Intern School "Nonlinear Aspects of Physicochemical Phenomena". - Girona, Spain. - 1994. p. 292.
23. Лебовка Н.И., Овчаренко Ф.Д., Манк В.В. Об ориентационном упорядочении молекул воды. // Доклады АН УССР, сер. В. - 1979. - №11. - с. 924-927.

24. Лебовка Н.И., Манк В.В. Оценка вклада электростатических взаимодействий в поверхностное натяжение воды.// Укр. физ. журн. - 1981. - 26, N3. - с.508-511.
25. Лебовка Н.И., Манк В.В. Взаимодействие мультipoлярных молекул с их изображением вблизи границы двух диэлектриков.// Коллоидн.ж. - 1985. - 47, N2. - с.402-404.
26. Лебовка Н.И., Манк В.В. Структура мультipoлярных адсорбированных жидкостей. - Коллоидн.ж. - 1985. - 47, N3. - с.505-511.
27. Лебовка Н.И., Манк В.В. Диэлектрический профиль полярной жидкости вблизи межфазной границы. - Доклады АН СССР. - 1985. - 285, N3. - с.393-398.
28. Лебовка Н.И., Манк В.В. Об ориентационном упорядочении молекул мультipoлярной жидкости во внешнем электрическом поле вблизи границы раздела фаз.// Коллоидн.ж. - 1986. - 48, N3. - с.483-486.
29. Лебовка Н.И., Манк В.В. Расклинивающее давление в тонких пленках.// Коллоидн.ж. -1986. - 48, N5. - с.923-926.
30. Лебовка Н.И., Манк В.В. Об ориентационной структуре воды вблизи границы раздела фаз.// В сб.: "Молекулярная физика и биофизика водных систем". -1986, вып.6. - с.84-90
31. Лебовка Н.И., Манк В.В. Анизотропия коэффициента трансляционной диффузии вблизи границы раздела жидкость пар для простых жидкостей.//Коллоидн.ж.-1990.-52.-с.791-794.
32. Лебовка Н.И., Манк В.В. Моделирование диффузии по неоднородной поверхности. Тез. докл. IX Международной конференции по поверхностным силам.-М.: - 1990 г.- с.46.
33. Lebovka N.I., Mank V.V. Diffusion coefficient

- anisotropy near the liquid-vapor interface for simple fluid.// Chem. Phys. Letters. - 1990. -170, N 4. - p.373-376.
34. Lebovka N.I., Mank V.V. Orientational structure of dipole-lattice on the surface of cylinder. The results of Monte-Carlo simulations.// Abstracts of the XIII-th European Chemistry at Interfaces Conference. -Kiev. - 1994.
35. Лебовка Н.И., Манк В.В. Угловая зависимость спектров ЯМР воды в синтетических мембранах.// Укр.физ.журн. - 1983. - 28, N10. - с.1503-1509
36. Lebovka N.I., Mank V.V. Effect of magnetic inhomogeneity in NMR spectroscopy of disperse systems.//Plenary lectures of III Inter.Symposium on Magnetic Resonance in Colloid & Interface Sci. - Torun. -1983. -p.11.
37. Mank V.V., Lebovka N.I. On the structure of water NMR spectra in membranes.// Chem.Phys.Lett. - 1983. - 96, N6. - p.626-629.
38. Лебовка Н.И., Манк В.В. Оценка неоднородного уширения линий ЯМР и поперечного времени магнитной релаксации жидкости в микрогетерогенных системах.//Коллоидн.ж. - 1984. - 46, N2. - с.268 -271.
39. Манк В.В., Лебовка Н.И., Исследование структурных и динамических свойств граничных слоев воды методом ЯМР.// В сб.: "Физ.-хим.механика и лиофильность дисп. систем", N16. - К.:Наукова Думка,1984. - с. 38-45.
40. Лебовка Н.И., Манк В.В. О некоторых особенностях неоднородного уширения спектров ЯМР в гетерогенных систе-

- мах. // В сб. трудов : "Квантовая химия и радиоспектроскопия твердого тела". - Свердловск: УНЦ, 1984. - с.39-42.
41. Манк В.В., Лебовка Н.И. Взаимодействие воды с гидрофильной поверхностью по данным ЯМР. // В кн.: "Вода в дисперсных системах". - М.: Химия, 1989. - с.229-242.
42. Манк В.В., Лебовка Н.И. Оценка протяженности слоев связанной воды в дисперсных системах по данным различных экспериментальных методов. // В сб.: "Зимостойкость сельскохозяйственных растений"/Редкол.: В.И. Луговой /Отв. ред./ и др. - Харьков: ИПКИК АН Украины, 1991. - с.70-85.
43. N.I. Lebovka, V.V. Mank NMR spectroscopic study of water distribution in ion-exchange resins. // Proceeding of the International Conference on Membrane Electrochemistry. 20th Spring Meeting: Ion-Exchange Membranes From Synthesis to Applications. - Anapa. - 1994. - p. 200-202.
44. N.I. Lebovka, V.V. Mank. Analysis of near-neighbour distributions in DLA and ballistic clusters growth on the simple cubic lattices. // Proc. of the International School "Nonlinear Aspects of Physicochemical Phenomena". - Girona, Spain. - 1994. - p.293.

*N.I. Lebovka*

Лобовка Н.И. Распределение случайных полей в гетерогенных системах.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.11 - коллоидная и мембранная химия и 01.04.14 - теплофизика и молекулярная физика, Институт биокolloидной химии НАН Украины, Киев, 1995.

Защищается 44 научных работы, которые содержат теоретические исследования по проблеме определения функций распределения случайных полей в гетерогенных системах, результаты изучения механизмов трещинообразования, электропробоя, диамагнитного уширения линий ЯМР, а также ориентационных структур в пространственно-неоднородных системах. Получены диаграммы разрушения гетерогенных и пространственно-неоднородных систем, обсуждаются особенности изменения скейлинговых и фрактальных характеристик данных процессов, определены закономерности формирования дипольных ориентационных структур в пространственно-неоднородных и низкоразмерных системах, предложены методики интерпретации данных ЯМР адсорбированных жидкостей в гетерогенных системах.

**Ключові слова:**

гетерогенні, неупорядковані та просторово-неоднорідні системи, випадкові поля, моделювання механічного руйнування та електропробоя, скейлінгові показники, фрактальна вимірність, ЯМР-спектроскопія.

Lebovka N. I. Random fields distribution in heterogeneous systems

Doctoral thesis for a scientific degree of a doctor of physico-mathematical sciences in speciality 02.00.11 - colloid and membrane chemistry and 01.04.14 - thermal and molecular physics, Biocolloid Chemistry Institute, NAS of Ukraine, Kyiv, 1995.

The thesis is based on 44 scientific papers, including theoretical investigations on the problem of random field distribution functions in heterogeneous systems, results of the mechanism study for the processes of crack formation, electric breakdown, NMR lines diamagnetic broadening, as well as investigation of orientational structures in spatially inhomogeneous systems. The failure diagrams for heterogeneous and spatially inhomogeneous systems are obtained, the characteristic features of those processes scaling and fractal parameters variations are discussed, the mechanisms of dipole orientational structure formation in low-dimensioned and spatially-inhomogeneous systems are defined, the methods of NMR data interpretation are proposed for liquids absorbed in heterogeneous systems.

**Key words:**

heterogeneous, disordered and spatially inhomogeneous systems, random fields, modelling of mechanical fracture and dielectric breakage, scaling exponents, fractal dimension, NMR-spectroscopy

28.12.94р. Формат 60x84/16. Об'єм 3,0 д.л.  
Зам. 275 Тираж 100 прим.  
УкрНДІП "МАСМА". Київ-180, пр.Палладіна, 46.

456734

AB 31.661