

Билеты к ГосЭкзамену

25 мая 2023

Над написанием билетов работали: Беликова Д.Е., Капелюшников А.С., Каплина М.Д., Карпов И.А., Кирьянова А.В., Крот А.Д., Кузнецов К.М.

Над оформлением работали: Капелюшников А.С., Каплина М.Д., Карпов И.А.

Оглавление

1 Химия и технология материалов	9
1.1 Щелочные металлы и их соединения в технике и технологии. Щелочноземельные металлы и их соединения в современных материалах.	10
1.2 Бор, алюминий, галлий, индий, таллий и их соединения в современной технике и технологии.	11
1.3 Материалы на основе d- и f- элементов. Материалы на основе 3d-элементов	12
1.4 Точечные дефекты, квазихимическая модель. Дислокации (векторное и континуальное описание). Вектор Бюргерса. Упругая энергия и плотность дислокаций	13
1.5 Плоское скопление дислокаций. Дефекты упаковки, двойниковые дефекты. Оценка энергии дефекта упаковки по ширине растянутой дислокации	16
1.6 Взаимодействие различных дефектов. Модели строения границ зерен. Сегрегация примесей в поликристаллическом материале.	18
1.7 Механизмы зарождения и размножения дислокаций. Механизмы пластической деформации и разрушения материалов	21
1.8 Механизмы атомно-молекулярных процессов кристаллизации. Зависимости скорости роста от величины пересыщения в случае нормального роста, спирального роста (БКФ-механизм), механизма с образованием зародышей (ФКС-механизм).	24
1.9 Развитие граней кристалла: теорема Гиббса-Вульфа, габитус кристалла с точки зрения РВС-теории.	25
1.10 Термодинамика выделения фазы, принцип Данкова-Конобеевского. Гетерогенное зародышеобразование. Переохлаждение и кривизна ростового фронта	27
1.11 Распределение примеси по длине растущего из расплава кристалла. Техническое оформление основных методов роста кристаллов из расплава.	28
1.12 Направленная кристаллизация. Условие стабильности интерфейса при направленной кристаллизации. Теория эвтектического роста.	30
1.13 Фазовые равновесия. Основные понятия: система, компонент, фаза, степень свободы. Условия равновесия фаз. Правило фаз Гиббса. Фазовые диаграммы Т-х двухкомпонентных систем.	33

1.14 Основные виды конгруэнтных и инконгруэнтных равновесий. Правило рычага. Способы графического изображения фазовых диаграмм трехкомпонентных систем. Квазибинарные разрезы. Принцип триангуляции.	34
1.15 Фазовая диаграмма и микроструктура материала. Микроструктура эвтектических и перитектических композитов. Ликвация и ее влияние на микроструктуру материала	36
1.16 Закалка без полиморфного превращения. Закалка на мартенсит. Кристаллогеометрия и термодинамика мартенситного превращения.	38
1.17 Мартенситные превращения в металлических и неметаллических системах, их влияние на механические свойства материалов (изменение механических характеристик сталей при закалке, трансформационное упрочнение керамики на основе ZrO ₂).	39
1.18 Фазовые превращения с нормальной кинетикой. Перлитное превращение в сталях. TTT-диаграмма. Основные разновидности отжига 2 -го рода	40
1.19 Отжиг 1-го рода. Рекристаллизация. Основные модели процесса спекания.	43
1.20 Распад пересыщенного твердого раствора по спинодальному механизму и механизму образования и роста зародышей. Термодинамика процессов распада, роль упругой энергии. Старение материалов естественное и искусственное (на примере дуралюмина).	46
1.21 Зональная стадия распада твердого раствора; термодинамика и кинетика образования и строение зон Гинье-Престона. Природа упрочнения при дисперсионном старении.	49
1.22 Принципы химико-термической обработки. Виды термомеханической обработки материалов.	51
2 Физика материалов	53
2.1 Колебания атомов одномерной двухатомной решетки. Акустические и оптические фононы, температура Дебая. Колебания атомов трехмерной решетки (зоны Бриллюэна, законы дисперсии и поверхности постоянной частоты).	54
2.2 Спектральная плотность фононов. Модели Эйнштейна и Дебая. Теплоемкость кристаллической решетки.	56
2.3 Приближение почти свободных электронов. Поверхности Ферми металлов. Метод Харрисона.	58
2.4 Предположения и следствия метода сильной связи. Заполнение энергетических зон электронами (металлы, полупроводники и диэлектрики, полуметаллы).	61
2.5 Волновая функция электрона в кристалле. Теорема Блоха. Квазимпульс электрона в кристалле. Зоны Бриллюэна.	65

2.6	Закон дисперсии, изоэнергетическая поверхность, эффективная масса электрона в кристалле	67
2.7	$k \cdot p$ -метод. Энергетический спектр электрона в однозонном приближении. Правила сумм. Взаимодействие энергетических зон	67
2.8	Параметры зонной структуры полупроводников. Зонная структура основных полупроводниковых материалов.	70
2.9	Прямой и инверсный спектры Кейна для полупроводников A^3B^5 и A^2B^6	75
2.10	Энергетические уровни дефектов в полупроводниках. Водородоподобная модель примеси. Примесные зоны.	77
2.11	Уравнение электронейтральности. Статистика носителей заряда в полупроводнике с одним типом примеси.	81
2.12	Неравновесные носители заряда (время жизни, механизмы рекомбинации). Уравнение непрерывности и примеры его использования.	85
2.13	Контакт металл-полупроводник (контактная разность потенциалов, энергетические диаграммы, вольтамперная характеристика).	89
2.14	Электронно-дырочный переход (энергетические диаграммы, идеальная ВАХ, ток насыщения).	92
2.15	Поверхностные состояния. Поверхностная проводимость. Эффект поля.	94
2.16	Классификация кинетических явлений. Электропроводность. Эффективная масса проводимости. Температурные зависимости подвижности носителей заряда в полупроводниках.	98
2.17	Оптические характеристики полупроводников. Определение параметров полупроводников по спектрам оптического поглощения.	104
2.18	Сверхпроводимость. Критическая температура, магнитное поле, ток. Эффект Мейсснера.	109
2.19	Глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник. Сверхпроводники 1-го и 2-го рода. Вихри Абрикосова.	111
2.20	Физические свойства сверхпроводников. Размагничивающий фактор. Промежуточное состояние, разрушение сверхпроводимости током и магнитным полем.	113
2.21	Электрон-фононное взаимодействие. Куперовские пары. Основные положения теории сверхпроводимости Бардина-Купера-Шриффера.	116
2.22	Закон дисперсии. Энергетическая щель. Плотность состояний элементарных возбуждений. Зависимость щели от температуры.	117
2.23	Спиновый и орбитальный магнитные моменты атомов. Влияние кристаллического поля на магнетизм атомов. Магнитные моменты атомов переходных и редкоземельных элементов	120
2.24	Парамагнетизм. Функции Ланжевена и Бриллюэна. Закон Кюри-Вейса.	123
2.25	Парамагнетизм электронов проводимости	126

2.26	Ферромагнетизм. Основные характеристики магнитного состояния ферромагнетика. Приближение молекулярного поля. Зонный ферромагнетизм. Доменная структура. Магнитный гистерезис.	128
2.27	Природа магнетизма в твердых телах. Обменное взаимодействие. Типы магнитного упорядочения (ферромагнетизм, антиферромагнетизм, ферримагнетизм)	133
2.28	Размерное квантование в двумерных системах. Энергетический спектр, плотность состояний, концентрация двумерных электронов. Примеры двумерных структур.	136
2.29	Целочисленный квантовый эффект Холла. Энергетический спектр и волновые функции электронов в двумерных системах в квантующем магнитном поле. Перенос заряда. Краевые состояния	141
2.30	Сверхрешетки. Энергетический спектр электронов, минизоны. Проводимость вдоль и перпендикулярно оси сверхрешётки. Осцилляции Блоха. Отрицательная дифференциальная проводимость. Резонансное туннелирование	149
2.31	Графен. Структура графена. Точки Дирака. Закон дисперсии для электронов и дырок. Целочисленный квантовый эффект Холла в графене.	155
3	Механика материалов	160
3.1	Законы Ньютона для материальной точки и твёрдого тела. Законы сохранения энергии, импульса, момента импульса.	161
3.2	Теоремы об изменении количества движения материальной системы; об изменении главного момента количества движения материальной системы; об изменении кинетической энергии материальной системы. . .	164
3.3	Относительное движение. Сложное движение. Силы инерции. Связи - идеальные, голономные, неголономные.	167
3.4	Уравнения Лагранжа второго рода.	170
3.5	Уравнения баланса массы, импульса, момента импульса, энергии в механике сплошной среды. Понятие о замкнутой системе уравнений. . .	171
3.6	Модель идеальной жидкости. Уравнения Эйлера. Полная система уравнений. Типичные граничные условия.	173
3.7	Идеальная жидкость. Уравнения Эйлера в форме Громеки-Лэмба. Интеграл Бернуlli. Интеграл Коши-Лагранжа. Примеры.	175
3.8	Модель линейно-вязкой несжимаемой жидкости. Уравнения Навье-Стокса. Полная система уравнений. Условие прилипания на границе с твердым телом. Понятие о ламинарном и турбулентном режимах течения.	178
3.9	Определяющие параметры явления. Класс систем единиц. Размерность физической величины. П-теорема теории размерностей. Моделирование физических процессов на основе П-теоремы. Критерии подобия. Примеры (число Рейнольдса).	180

3.10 Тензор деформаций Грина. Формулы выражения компонент тензора Грина через компоненты вектора перемещения. Вычисление с помощью тензора Грина: относительного изменения длины элементарного волокна; изменения угла между двумя элементарными волокнами; относительного изменения элементарного объема. Тензор малых деформаций Коши и тензор малых поворотов.	183
3.11 Формулы Чезаро. Уравнения совместности Сен-Венана.	187
3.12 Обобщенный изотермический линейный закон Гука. Потенциал линейно-упругого тела. Три общих типа симметрии упругих констант. Три специальных типа симметрии: ортотропный, трансверсально-изотропный и изотропный материалы. Материальные константы Ламе. Технические константы. Формулы, которые связывают константы Ламе и технические константы.	189
3.13 Общая постановка статической краевой задачи теории упругости при малых деформациях и малых поворотах: неизменность геометрической области, занятой деформируемым телом; система пятнадцати уравнений во внутренних точках области; объяснить необходимость условий Сен-Венана; три типа краевых условий. Принцип суперпозиции линейных задач. Теорема единственности решения статической задачи. Постановка задачи теории упругости в перемещениях. Уравнение Ламе.	194
3.14 Общая постановка статической краевой задачи теории упругости при малых деформациях и малых поворотах: неизменность геометрической области, занятой деформируемым телом; система пятнадцати уравнений во внутренних точках области; объяснить необходимость условий Сен-Венана; три типа краевых условий. Постановка задачи теории упругости в напряжениях. Уравнения Бельтрами-Митчелла.	199
3.15 Ослабление граничных условий: принцип Сен-Венана. Определение простейших задачах теории упругости. Формула Чезаро для простейших задач. Полуобратный метод Сен-Венана: решение задачи о растяжении призматического бруса под действием собственного веса.	205
3.16 Ослабление граничных условий: принцип Сен-Венана. Определение простейших задачах теории упругости. Формула Чезаро для простейших задач. Полуобратный метод Сен-Венана: решение задачи о кручении призматического бруса круглого сечения.	209
3.17 Ослабление граничных условий: принцип Сен-Венана. Определение простейших задачах теории упругости. Формула Чезаро для простейших задач. Полуобратный метод Сен-Венана: решение задачи о чистом изгибе призматического бруса.	212

3.18 Использование криволинейных координат: задача Ламе о деформировании толстостенной упругой однородной изотропной трубы под действием внешнего и внутреннего давления (кинематическая гипотеза; сведение задачи к краевой задаче обыкновенного дифференциального уравнения; уравнение Леви; формулы ненулевых компонент тензора напряжений)	215
3.19 Эффективные определяющие соотношения. Эффективный модуль Фойхта. Прямая формула смесей.	217
3.20 Эффективные определяющие соотношения. Эффективный модуль Рейсса. Обратная формула смесей.	219
3.21 Эффективные модули слоисто-волокнистого композита в плоско-напряженном состоянии в главных осях. Формула Акасаки для эффективного трансверсального модуля.	222

Глава 1

Химия и технология материалов

1.1 Щелочные металлы и их соединения в технике и технологиях. Щелочноземельные металлы и их соединения в современных материалах.

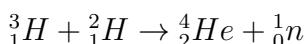
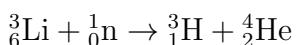
Щелочные металлы:

1) Na-K эвтектика (теплоносители в АЭС)

2) регенерация воздуха на подлодках: $4\text{KO}_2 + 2\text{CO}_2 = 2\text{K}_2\text{CO}_3 + 3\text{O}_2 \uparrow$

3) натриевые лампы (газовый разряд в парах Na)

4) Топливо в термоядерной бомбе:



5) калийные удобрения (KNO_3)

6) физраствор NaCl

7) цезиевые фотоэлементы

8) магнитогидродинамический генератор на цезиевой плазме (струя холодной 1000 К плазмы гонится по трубе в мощном поперечном магнитном поле, сила Лоренца раскидывает разноимённые заряды к разным сторонам трубы, мы снимаем напряжение)

9) стёкла ($\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{CaO} \cdot 6\text{SiO}_2$ - оконное, $+ \text{SiO}_2$ - пирекс)

10) Na-ионные батареи

Щелочноземельные металлы:

Be: в 1,5 раза легче Al \Rightarrow бериллиевые моторы для F-1

- бериллиевые бронзы ($\text{Cu}+2\text{-}3\% \text{ Be}$) - лёгкость, износостойчивость, упругость

- окна для рентгеновских трубок (слабо поглощает рентген)

- замедлитель нейтронов

- покрытия космических кораблей, берилизация стали (10-15 часов при 1000 ° С в порошке бериллия)

- Be_2O_3 - хорошо проводит тепло, при этом огнеупор.

Mg:

- лёгкие сплавы

- зажигательные снаряды, трассирующие пули, осветительные ракеты

- слабительное $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$

- реактивы Гриньяра, металлотермия (получение Ti, V, Cr, Zr)

- магнезиальный цемент (цемент Сорреля): $\text{MgCl}_2 + \text{MgO}$

бактерицидные, фунгицидные свойства, огнеупор, маслостойкость, солестойкость

Ca:

- гипс $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

- CaCl_2 - осушитель

- восстановитель

- геттер в вакуумной технике

- стёкла (CaO)
- цементы (CaO)
- $^{48}_{20}\text{Ca}$ для синтеза трансурановых элементов

Sr:

- пиротехника (ярко-красный)
- ^{90}Sr - бета-излучатель
- SrO хорошо поглощает рентгеновское излучение (добавка к стёклам старых телевизоров для защиты от излучения кинескопов)

Ba:

- BaSO_4 - поглотитель рентгеновских лучей (медицина)
- пиротехника (жёлто-зелёный)
- BaTiO_3 - сегнетоэлектрик
- ВТСП-керамика

1.2 Бор, алюминий, галлий, индий, таллий и их соединения в современной технике и технологии.

B:

- борная кислота $\text{B}(\text{OH})_3$ - дезинфекция
- $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ - восстановитель, удобрения
- B_4C - абразивы, бронежилеты, поглотитель нейтронов
- BN - абразив
- BF_3 - катализатор в органическом синтезе (ядовит!)

Al:

- фольга
- лёгкие сплавы (дюраль, силумин, авиаиль)
- провода (трескаются, ибо металл хрупкий)
- керамические материалы, ювелирные изделия (шпинель MgAl_2O_4)
- сапфировые монокристаллические подложки
- катализатор Фриделя-Крафтса (AlCl_3)
- активный восстановитель
- анодированный алюминий для неорганических мембран, 1D-структур, катализаторов, корпусных материалов

Ga:

- полупроводники $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$
- сплавы с Bi, Pb, Sn, Cd в термопредохранителях
- высокотемпературные термометры ($T_{\text{пл}} < 100^\circ\text{C}$)
- покрытия для высокоотражающих зеркал
- легкоплавкие сплавы в термометрах вместо ртути (галинстан, $T_{\text{пл}} = -19,5^\circ\text{C}$)
- теплоноситель в АЭС

- материал для создания ионных пучков

In:

- полупроводники $A^{III}B^V$
- антифрикционные покрытия
- поглотитель нейтронов
- покрытия для высокоотражающих зеркал
- ITO (In Sn O) - прозрачный проводник
- легкоплавкий припой с высокой адгезией

Tl: крайне токсичен!

- полупроводники $A^{III}B^V$
- галогениды таллия - линзы в ИК-диапазоне
- низкотемпературные термометры ($Tl+Hg: T_{пл} = -61^{\circ}C$)
- ВТСП
- активатор в стинцилляторах на основе NaI

1.3 Материалы на основе d- и f- элементов.

Материалы на основе 3d-элементов

5f-элементы все радиоактивны. Большое практическое применение у ^{238}U (атомное топливо) и Ru (оружейный).

4f-элементы используются в люминесцентных материалах, магнитах, катализе (Ce), лазерных материалах

На основе d-металлов изготавливают магнитные материалы, катализаторы (Rh-Au), жаропрочные сплавы (W), высокопрочную керамику (ZrO_2), топливные элементы, легированные стали

3d

Sc: сплавы, высокотвёрдые материалы (легирование WC), рентгеновские зеркала Sc_2O_3 - жаростойкая прочная керамика, добавка в ртутные лампы, чтобы спектр был ближе к солнечному

Ti: импланты, корпуса подводок, геттер в вакуумной технике, нитинол ($Ni+Ti$), легированные стали, TiN (покрытия), TiO_2 (фотокатализатор, УФ-фильтр, белый пигмент), ячейки Гретцеля. Обладает рекордными значениями удельной прочности, коррозионно стоек, биосовместим.

V: прочные стали для военной техники, раскислитель сталей, катализатор окисления SO_2 , катодные материалы для Li-ion (ванадаты). Ядовит!

Cr: легирование сталей (нержавейка, 13 % Cr), сплавы (хромель, никром, фехраль), антикоррозионные покрытия, материалы для лопаток газовых турбин, Cr_2O_3 - зелёный пигмент, абразив, катализатор. $FeCr_2O_4$ - хрупкий огнеупор, $LaCrO_3$ - высокоточные нагреватели

Mn: легированные стали, манганин (слабая зависимость сопротивления от Т, материал для реостатов). MnO₂ - окислитель ("гопкалитовые патроны"), KMnO₄ - окислитель. LiMn₂O₄ - катоды в Li-ion. Сталь Гатфилда (танковые гусеницы).

Fe: стали, чугуны, коричневый пигмент (Fe₂O₃), магнитные материалы (ферриты)

Co: коррозионностойкие сплавы, γ -нож (⁶⁰Co), ⁵⁷Co в Мёссбауэрской спектроскопии, синие пигменты, катоды в Li-ion, производство витамина B12

Ni: монетные сплавы, тонкие защитные покрытия, металл-гидридные аккумуляторы, катализ, сплавы: мельхиор, никром, пермаллой (сплав с нулевой магнетострикцией, для трансформаторных пластин), инвар (не удлиняется при нагреве), монель-металл.

Cu: провода, сплавы (латунь, бронза, монетные сплавы), ювелирные изделия, фунгицид CuSO₄, поделочный камень малахит (Cu₂(OH)₂CO₃), CuO для окраски стекла, ВТСП, полупроводник - Cu₂O.

Zn: защитные покрытия, латунь, ZnO - белый пигмент, фотокатализатор, полупроводники ZnB^{VI}

1.4 Точечные дефекты, квазихимическая модель.

Дислокации (векторное и континуальное описание). Вектор Бюргерса. Упругая энергия и плотность дислокаций

Точечный дефект - локальное нарушение порядка в кристалле (отсутствие атома в узле решётки, атом в междоузлии, инородный атом в узле решётки). Выделяют точечные дефекты по Френкелю (атом из узла смещён в междоузлие с образованием пары "вакансия + атом в междоузлии") и по Шоттки (атом из узла удалён из кристалла, образовалась вакансия). В рамках квазихимической модели считается, что точечные дефекты образуют идеальный раствор в объёме кристалла (строго говоря, это не так, на самом деле дефекты взаимодействуют).

Обозначения по Крёгеру-Винку: V_M^X, V_X^X - незаряженная вакансия; M_i^-, X_i^+ - катион/анион в междоузлии; e^- - электрон, h^- - дырка.

С использованием этих обозначений записываются квазихимические уравнения, с помощью которых можно описывать процессы в твёрдом теле, зная константы соответствующих равновесий.

Доминирующий тип дефектов (Шоттки/Френкель) определяется структурой кристалла, соотношением размеров катиона и аниона. Точечные дефекты формируют в материале быстро затухающие поля напряжений и деформаций $\sigma, \varepsilon \sim \frac{1}{r^3}$.

Дислокация - протяжённый дефект, представляющий собой нарушение упорядоченного расположения атомных плоскостей в кристалле. Представить дислокацию удобно при помощи континуального описания (т.н. дислокации Вольтерра,

(рис. 1.1) Сдвигом упругого континуума к оси цилиндра мы получаем краевую

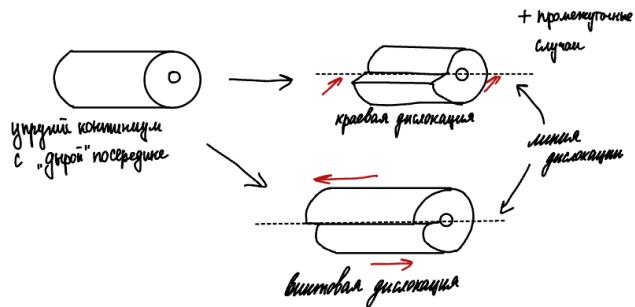


Рис. 1.1 – Дислокации Вольтерра

дислокацию, а сдвигом вдоль оси цилиндра - винтовую. Возможны и смешанные варианты.

Краевая дислокация представляет собой внедрение дополнительной атомной плоскости в кристалл (рис. 1.2). Вдоль линии дислокации разупорядочение структуры максимально.

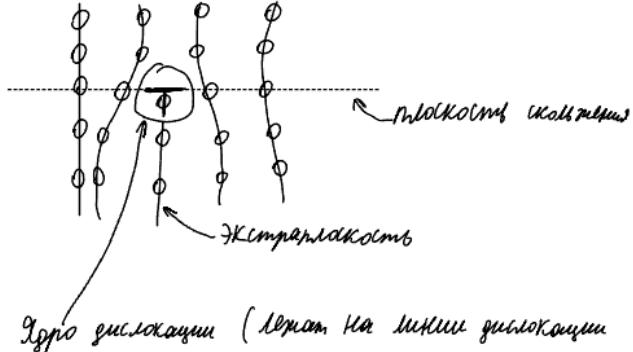


Рис. 1.2 – Краевая дислокация

Дислокации удобно описывать при помощи вектора Бюргерса \vec{b} . Это вектор невязки между завершённым контуром в идеальном кристалле и аналогичным ему завершённым контуром, захватывающим дислокацию в реальном кристалле (рис. 1.3).

Краевая дислокация: $\vec{b} \perp$ линии дислокации

Винтовая дислокация: $\vec{b} \parallel$ линии дислокации

Вдоль линии дислокации $\vec{b} = const \Rightarrow$ дислокация не может оборваться внутри кристалла, должна либо замкнуться, либо расщепиться, либо выйти на поверхность.

Дислокации существенным образом искажают решётку, вызывая значительное поле

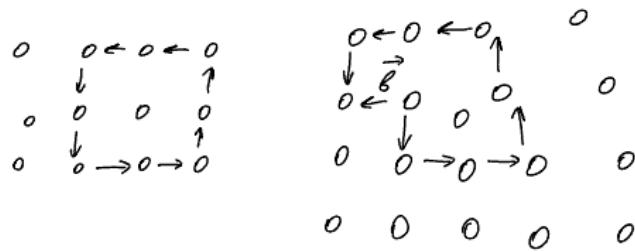


Рис. 1.3 – К определению вектора Бюргерса

напряжений и деформаций. Для винтовой дислокации

$$\varepsilon \sim \frac{b}{2\pi r}, \sigma \sim \frac{Gb}{2\pi r} \quad (1.1)$$

В случае краевой дислокации возникает зависимость ε и σ от угла, хотя в целом $\varepsilon, \sigma \sim \frac{1}{r}$, то есть, поле затухает медленно.

$$E_{\text{дислокации}} = E_{\text{ядра}} + E_{\text{упр}} \quad (1.2)$$

$$E_{\text{упр}} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{r}{r_0} \text{ для винтовой дислокации} \quad (1.3)$$

$$E_{\text{упр}} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r}{r_0} \text{ для краевой дислокации} \quad (1.4)$$

Здесь ν - коэффициент Пуассона, r_0 - размер ядра дислокации ($r_0 \sim 5 - 10b$).

Плотность дислокаций определяется выражением 1.5:

$$\rho = \frac{l}{V} \quad (1.5)$$

Здесь l - полная длина дислокаций в образце объёмом V . В хорошо отожжённых металлах $\rho \sim 10^6 - 10^8 \text{ см}^{-2}$. В полупроводниках $\rho \sim 10 - 10^5 \text{ см}^{-2}$. После пластической деформации металла плотность дислокаций может достигать $\rho \sim 10^{12} - 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Для определения ρ можно проплавить шлиф, определить число ямок травимости - это точки выхода дислокаций на поверхность - и посчитать $\rho = \frac{N}{S}$.

1.5 Плоское скопление дислокаций. Дефекты упаковки, двойниковые дефекты. Оценка энергии дефекта упаковки по ширине растянутой дислокации

Плоское скопление дислокаций - это структура, представляющая собой n дислокаций, расположенных в одной плоскости скольжения перед дефектом, тормозящим скольжение дислокаций (напр. - граница зерна). Математическое описание такой структуры составляет суть задачи Набарро-Херринга. Можно получить, что положениям дислокаций в плоском скоплении соответствуют нули полинома Лагера.



Рис. 1.4 – Плоское скопление дислокаций

Эта структура возникает вследствие отталкивания дислокаций одного знака. В головном скоплении на дислокацию действует сила $F = nF_d = n\tau b$, где τ - внешнее касательное напряжение, b - вектор Бюргерса, F_d - сила по формуле Мотта.

Это означает, что с ростом числа дислокаций существенно возрастает напряжение на границе зерна, так что при некотором значении τ дислокации начнут проскакивать через границу \Rightarrow наблюдаем предел текучести на кривой нагружения.

Можно получить, что число дислокаций $n \sim D\tau$, где D - размер зерна. Тогда напряжение на границе $\tau^* = n\tau \sim D\tau^2$

$$\Rightarrow \tau = \frac{k}{\sqrt{D}} + \tau_0 \quad (1.6)$$

Выражение 1.6 - это формула Холла-Петча. Описывает зависимость предела текучести в изотропном материале от размера зерна. Часто используется для оценки временного сопротивления разрыву. Слагаемое τ_0 описывает порог напряжений, необходимый, чтобы сдвинуть ядро дислокации (т.н. Барьера Пайерлса).

Дефект упаковки - это нарушение порядка следования атомных слоёв в структуре. Например - отсутствие, или, наоборот, дополнительный слой в ГЦК:

ABCAB:ABC - дефект вычитания

ABCACBCABC - дефект внедрения

Образование дефекта упаковки можно описать в терминах частичных дислокаций. Полная краевая дислокация в ГЦК обладает двойной экстраплоскостью, так что при

её скольжении в плоскости 111 последовательность укладки слоёв не нарушается (рис. 1.5). При движении полной дислокации атомы смещаются между симметрически

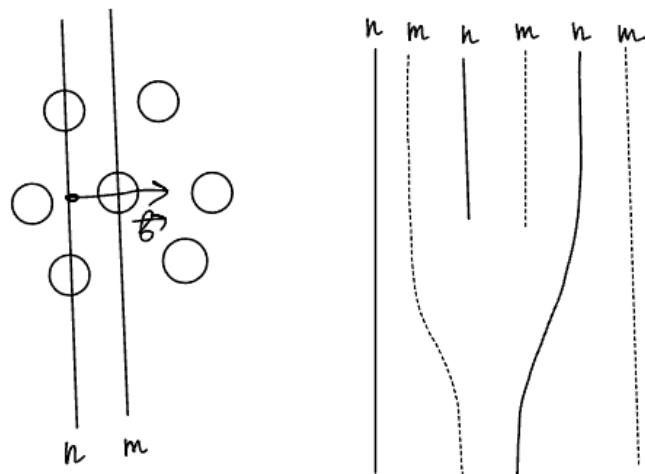


Рис. 1.5 – Строение и перемещение краевой дислокации в ГЦК

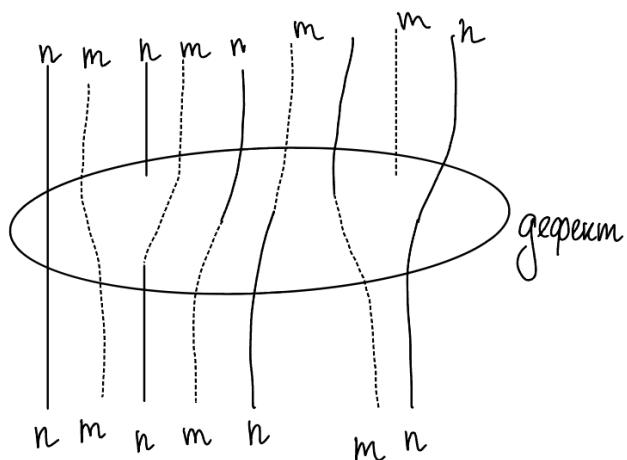


Рис. 1.6 – Дефект упаковки между двумя частичными дислокациями

эквивалентными положениями в структуре. Однако атомы экстраплоскости могут начать перемещаться, "перекатываясь" между ложбинками в укладке слоя. В результате нарушается порядок следования слоёв, образуется дефект упаковки, ограниченный двумя частичными дислокациями (рис. 1.6) с нетрансляционными векторами Бюргерса:

$$\vec{b} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2, \quad \vec{b}_1 \wedge \vec{b}_2 = 60^\circ \quad (1.7)$$

Образование дефекта упаковки (т.н. растянутой дислокации) энергетически выгодно,

суммарная энергия двух частичных дислокаций меньше, чем энергия одной краевой. Частичные дислокации отталкиваются, однако с увеличением размеров дефекта упаковки растёт его упругая энергия, в результате чего можно говорить о некотором "равновесном" размере дефекта. Упругую энергию дефекта упаковки можно оценить по формуле 1.8.

$$\gamma = \sigma_1 b_2 = \frac{G(\vec{b}_1, \vec{v}_2)}{2\pi l(1 - \nu)} \quad (1.8)$$

Здесь σ_1 - поле напряжений, создаваемое первой частичной дислокацией, l - размер дефекта, ν - коэффициент Пуассона.

Двойниковый дефект - это зеркальное расположение атомных плоскостей относительно некоторой плоскости (т.н. двойниковой границы). Может возникать как в результате деформации хрупкого тела, так и непосредственно в ходе роста кристалла. Двойниковые границы называют специальными границами, искажения на таких границах минимальны, равно как и энергия таких границ.

АВСВА

1.6 Взаимодействие различных дефектов. Модели строения границ зерен. Сегрегация примесей в поликристаллическом материале.

Точечные и протяжённые дефекты взаимодействуют друг с другом. Движущая сила этого взаимодействия - минимизация упругой энергии деформации кристаллической решётки. точечные дефекты притягиваются друг к другу. Соприкосновение вакансий выгодно, поскольку снижает число разорванных в веществе связей. Дефекты по Френкелю притягиваются, так как сближение двух пар "междоузельный атом + вакансия" позволяет уменьшить деформацию, созданную каждым дефектом в отдельности. Точечные дефекты (в т.ч. атомы примеси) имеют тенденцию скапливаться вблизи протяжённых дефектов в сильно деформированных областях с образованием атмосферы Коттрелла вокруг дислокаций и атмосферы Судзуки вокруг дефектов упаковки. точечные дефекты могут осаждаться на экстраплоскость, вызывая её переползание перпендикулярно плоскости скольжения дислокации.

Дислокации взаимодействуют друг с другом, знак этого взаимодействия определяется положением дислокаций друг относительно друга. Если поля напряжений и деформаций двух дислокаций гасят друг друга, то такое взаимодействие энергетически выгодно, дислокации притягиваются. В противном случае дислокации отталкиваются. В одной плоскости скольжения дислокации одного знака отталкиваются, разных знаков - притягиваются. Возможны устойчивые конфигурации дислокаций - например, плоское скопление или стенка дислокаций (рис. 1.7).

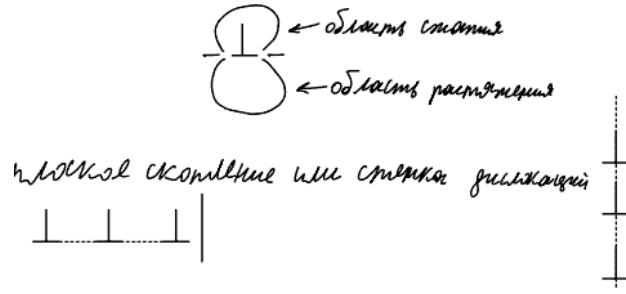


Рис. 1.7 – Примеры устойчивых конфигураций + напряжения вокруг краевой дислокации

Стенка дислокаций формирует так называемую малоугловую границу между зёрнами кристалла. Это т.н. граница наклона, когда два зерна развернуты друг относительно друга на угол разупорядочения θ (рис. 1.8).

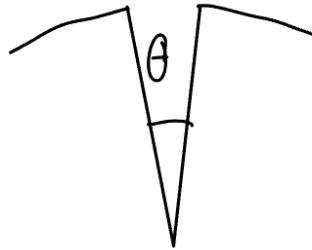


Рис. 1.8 – Угол разупорядочения

Существуют также малоугловые границы кручения, образованные серткой винтовых дислокаций.

При малых углах разориентировки для границ наклона справедлива формула Билби-Франка:

$$h \approx \frac{b}{\theta} \quad (1.9)$$

Здесь h – расстояние между соседними дислокациями в стенке. При малых $\theta < 15^\circ$ h велико, и ядра дислокаций не перекрываются. Удельная поверхностная энергия такой границы может быть описана формулой

$$\gamma = \frac{Gb\theta}{4\pi(1-\nu)} \left(\ln \frac{b}{r_0} - \ln \theta \right) \quad (1.10)$$

Для высокоугловых границ эта модель неприменима, энергия границы зависит от угла, как показано на рис. 1.9. Резкие минимумы энергии отвечают специальным, двойниковым высокоугловым границам. На таких границах наблюдается

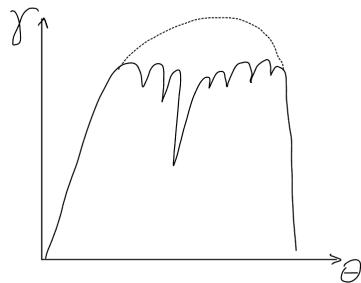


Рис. 1.9 – Энергия границы

решётка совпадающих узлов с некоторым периодом n . Специальные границы обозначают символом Σn , где n -период РСУ. Такое взаиморасположение зёрен требует значительно меньших деформаций, энергетически это выгодно. Между минимумами энергии расположены точки, соответствующие несовершенным высокоугловым границам, для них нет РСУ, просто часть узлов решётки должны совпасть.

Для описания высокоугловых границ часто используют понятие зернограницевых дислокаций, обеспечивающих скольжение зёрен друг относительно друга. Строится решётка зернограницевых сдвигов (часть узлов - пусты, в остальных узлах - все атомы, и входящие в РСУ, и не входящие в РСУ). Зернограницевые дислокации вводятся в этой решётке и перемещаются в ней.

Вследствие расхождения кристаллических решёток, на границе зерён есть множество мест, в которых энергетически выгодно расположиться крупным примесным атомам (рис. 1.10).

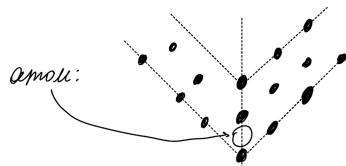


Рис. 1.10 – К размещению примеси на границе зерён

Не все примеси склонны сегрегировать к границам зёрен (преимущественно располагаться на них), хотя большинство примесей сегрегирует к границе, такие примеси называют горофильными. Сегregation примеси обычно описывается уравнением адсорбции Гиббса (c_i - объёмная концентрация вблизи границы):

$$\Gamma_i = -\frac{c_i}{RT} \left(\frac{\partial \gamma}{\partial c_i} \right)_S \quad (1.11)$$

Чем хуже растворима примесь в веществе, тем сильнее она сегрегирует к границам зёрен. В рамках чисто упругой модели концентрация примеси вблизи границы

рассчитывается по формуле

$$c_i = c_0 e^{-\frac{E}{kT}}, \text{ где } E \sim \varepsilon^2 \quad (1.12)$$

В более сложной модели среднего поля учитывается взаимодействие атомов примеси друг с другом. В этом случае используется изотерма Гугенхейма-Фаулера:

$$\frac{x}{1-x} = \frac{c_0}{1-c_0} \exp\left(-\frac{\Delta f + 2z\theta x}{kT}\right) \quad (1.13)$$

Здесь x - доля занятых позиций на границе, z - КЧ на границе, $\theta = \frac{1}{2}(E^{BB} + E^{AA} - 2E^{AB})$, Δf - энергия обмена атомом А на границе с атомом В в объёме.

В случае сильного взаимодействия атомов примеси может наблюдаться образование разных поверхностных фаз, напр. - кластеров.

1.7 Механизмы зарождения и размножения дислокаций. Механизмы пластической деформации и разрушения материалов

1) Дислокации могут возникать вследствие пластической деформации кристалла. Для того, чтобы породить дислокацию, необходимо преодолеть энергетический барьер Пайерлса. Для этого нужно приложить напряжение $\tau > \frac{Gb}{2\pi r_c}$, где r_c - некоторый критический размер ядра дислокации, по достижении которого дислокация образуется.

2) Дислокации могут порождаться вследствие структурного несоответствия двух контактирующих фаз (плёнка+подложка). Это так называемые дислокации несоответствия. Они возникают при превышении толщиной плёнки некоторого критического значения $h_c \approx \frac{b}{9.9f}$, где $f = \frac{\Delta a}{a}$ - параметр несоответствия.

3) Дислокации возникают при кристаллизации поликристалла с произвольной ориентацией центров кристаллизации вследствие структурного несоответствия на границах зёрен.

4) дислокации могут размножаться, например - по механизму источника Франка-Рида (рис. 1.11). В качестве такого источника выступает закреплённая в двух точках дислокация. Она выгибается под действием внешнего напряжения, пока не примет форму полуокружности при напряжении $\tau \approx \frac{Gb}{L}$, где L - расстояние между точками закрепления. После этого дислокация самопроизвольно расширяется, пока два участка петли не столкнутся и не с аннигилируют. В результате образуется дислокация между точками АВ и дислокационная петля вокруг источника. Эта петля распространяется по кристаллу, пока не выйдет на его поверхность.

5) Также дислокации могут расщепляться с образованием полных или частичных дислокаций, либо возникать в результате столкновения частичных или полных дислокаций.

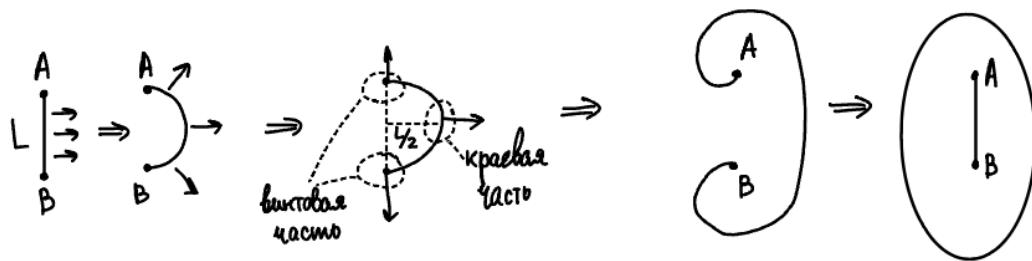


Рис. 1.11 – Источник Франка-Рида

Основной механизм пластической деформации - это скольжение дислокаций по плоскостям скольжения. В этом случае на поверхности деформируемого материала наблюдается серия полос (рис. 1.12). Хрупкие материалы деформируются за счёт двойникования. В случае пластической деформации по механизму скольжения

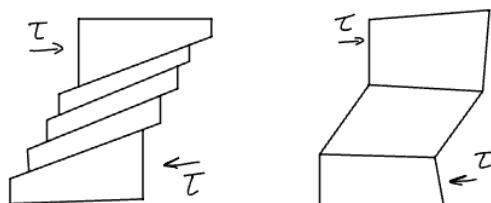


Рис. 1.12 – Пластический (слева) и хрупкий (справа) деформированный материал

дислокаций, могут активироваться разные системы скольжения. Число возможных систем скольжения определяется кристаллической структурой материала (12 в ГЦК, 3 или 6 в ГПУ). Чем больше возможных систем, тем пластичнее материал. Для каждой плоскости скольжения есть свой предел текучести:

$$\tau_R = \sigma \cos \varphi \cos \lambda \quad (1.14)$$

Это закон Шмида-Боаса (проекция внешнего напряжения на плоскость скольжения). Деформационное упрочнение соответствует образованию плоских скоплений дислокаций вблизи границ зёрен.

При высоких температурах может наблюдаться т.н. высокотемпературная ползучесть (creep), когда при постоянной нагрузке происходит увеличение ε , поскольку диффузия облегчена (рис. 1.14). На рисунке 1.14 область I соответствует неустановившейся ползучести (скольжение и генерации дислокаций), область II - установившаяся ползучесть (генерация), III - переползание дислокаций, материал разрушается.

В нанокристаллических материалах может наблюдаться сверхпластичность за счёт смещения зёрен друг относительно друга.

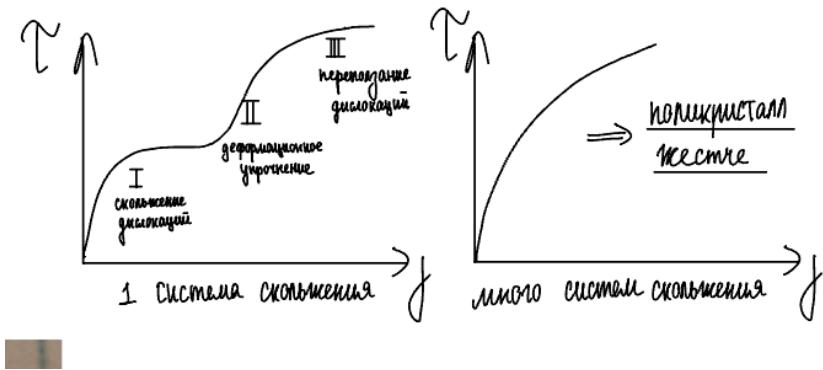


Рис. 1.13 – Кривые нагружения для одной системы скольжения и многих систем скольжения (поликристалл)

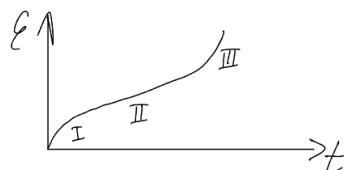


Рис. 1.14 – Зависимость деформации от времени

При существенном увеличении σ в пластических материалах может наблюдаться диффузионная ползучесть Коббла (по границам зёрен), а при $T \uparrow\uparrow$ - ползучесть Набарро-Херринга, когда деформация происходит за счёт массопереноса в зерне.

Разрушение материалов обычно протекает с образованием трещины. В пластичных материалах в области шейки копятся вакансии, образуются поры, сливаются в трещину, и происходит разрушение. Хрупкие тела разрушаются вокруг опасного дефекта (трещины), без образования шейки. Трещина - это концентратор напряжений, стремится раскрыться, чтобы снизить свою упругую энергию. Однако при раскрытии трещины повышается её поверхностная энергия, поэтому при относительно небольших напряжениях трещина достигает равновесного размера и далее не растёт.

$$\sigma_\Gamma = \sqrt{\frac{2E\gamma}{\pi a}}, \text{ где } 2a - \text{размер трещины}, \gamma - \text{пов. плотн. энергии}, E - \text{модуль Юнга} \quad (1.15)$$

Однако если в материале есть трещина длиной $2a$, а приложенное напряжение превышает критическое напряжение по Гриффитсу (ур. 1.15), то происходит резкий неконтролируемый рост трещины, материал разрушается. Прежде чем достигнуть критического размера, трещина медленно растёт за счёт эффекта среды - разрыва хим. связей в области трещины под малой нагрузкой.

Зародиться трещина может вследствие столкновения дислокаций.

Если материал подвергается знакопеременным нагрузкам, то возможно усталостное разрушение. В этом случае сперва происходит рост усталостной трещины, например, по механизму Вуда (рис. 1.15). Трещина достигает критического размера, после чего

происходит разрушение. Торец образца выглядит, как на рисунке 1.16.

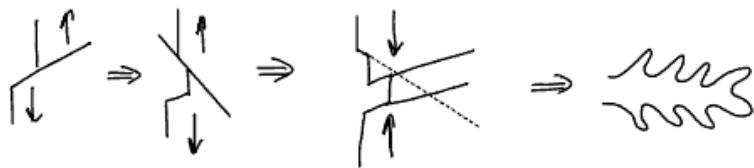


Рис. 1.15 – Механизм Вуда

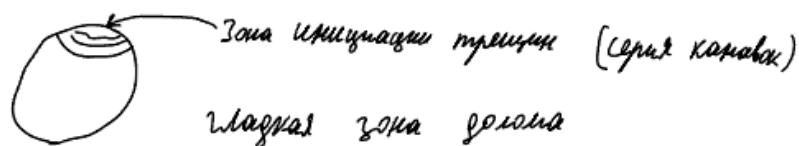


Рис. 1.16 – Шлиф образца, разрушенного по усталостному механизму

1.8 Механизмы атомно-молекулярных процессов кристаллизации. Зависимости скорости роста от величины пересыщения в случае нормального роста, спирального роста (БКФ-механизм), механизма с образованием зародышей (ФКС-механизм).

Выделяют 3 механизма атомно-молекулярных процессов кристаллизации:

- 1) нормальный рост (подошедшие к поверхности атомы сразу же садятся на шероховатости пов-ти)
- 2) рост с образованием зародышей (ФКС-механизм, кристалл растёт слой за слоем)
- 3) спиральный рост (БКФ-механизм, атомы садятся во внутренние углы ступенек вышедшей на поверхность винтовой дислокации, кристалл растёт послойно с образованием ростового холма)

В случае нормального роста изменение энтропии при кристаллизации невелико, $\Delta_f S < R$. Для этого поверхность кристалла должна быть шероховатой на атомном

уровне. Считая, что скорость роста определяется скоростью соударений атомов с поверхностью, можно получить следующее выражение для скорости роста:

$$v = \frac{D_L}{d} \left(1 - e^{-\frac{\Delta G_f}{kT}}\right) \quad (1.16)$$

Это уравнение Вилсона-Френкеля. Здесь D_L - коэффициент диффузии, d - молекулярный/атомный диаметр, ΔG_f - энергия Гиббса кристаллизации.

При малых величинах переохлаждения оно может быть записано в виде

$$v = \frac{D_L \Delta H_f}{dkT^2} \Delta T \sim \Delta T \quad (1.17)$$

В случае спирального роста, скорость роста

$$u \sim f_g \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta H_f \Delta T}{T_m RT}\right)\right) \quad (1.18)$$

где $f_g \approx \frac{\Delta T}{2\pi T_m}$ - доля предпочтительных для зародышеобразования мест (сайтов). При малых ΔT скорость роста $u \sim \Delta T^2$

В случае ФКС-механизма (образование зародышей на поверхности, изменение энтропии при кристаллизации весьма велико), атомы могут садиться только в выборочных сайтах. Рост кристалла начинается только при достаточно больших пересыщении, зависимость скорости роста от ΔT нелинейная.

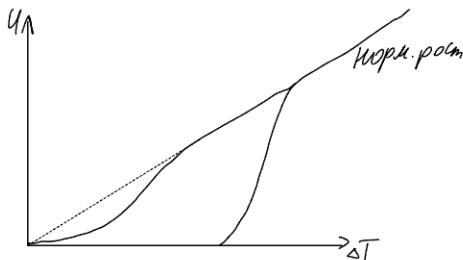


Рис. 1.17 – Зависимость скорости роста кристалла от пересыщения для разных механизмов

1.9 Развитие граней кристалла: теорема Гиббса-Вульфа, габитус кристалла с точки зрения РВС-теории.

Скорость роста граней кристалла может быть описана законом Браве: "скорость роста грани обратно пропорциональна плотности её узловой сетки". Огранка кристалла определяется гранями с наименьшими скоростями роста. Быстрорастущие грани как бы «вытягивают» медленные (рис. 1.18). Медленнорастущие грани обладают

малыми значениями индексов Миллера hkl . Можно рассмотреть термодинамически

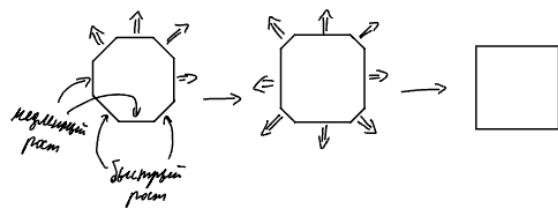


Рис. 1.18 – Влияние скорости роста граней на огранку кристалла

равновесную огранку кристалла. Для этого решается вариационная задача по минимизации энергии Гиббса образующегося кристалла. В результате можно получить, что

$$\frac{\sigma_i}{r_i} = \text{const} \text{ для каждой грани} \quad (1.19)$$

Здесь r_i - расстояние от центра кристалла до i -й грани, σ_i - удельная поверхностная энергия грани. Это условие носит название теоремы Гиббса-Вульфа.

В то же время в условиях относительно больших пересыщений включается не термодинамический, а кинетический контроль, существенную роль начинает играть шероховатость растущей грани, определяющая механизм и, следовательно, скорость её роста. Реальная огранка кристалла может отличаться от равновесной. Для описания кинетически контролируемого роста кристаллов построена теория периодической цепи связей (PBC-Theory). В структуре растущего кристалла можно выделить цепочки наиболее интенсивных химических связей, так называемые PBC-цепочки. Чем больше PBC-цепочек в грани, тем более гладкой является грань. Вводится классификация граней:

- 1) 2 и более PBC-цепочки \Rightarrow F-грани, гладкие, медленнорастущие (ФКС-механизм)
- 2) 1 PBC-цепочка \Rightarrow S-грани, менее гладкие, реже встречаются в огранке, ибо растут быстрее
- 3) ни одной PBC-цепочки \Rightarrow K-грани, высокотермошероховатые, быстро растут по нормальному механизму, в огранке не встречаются.

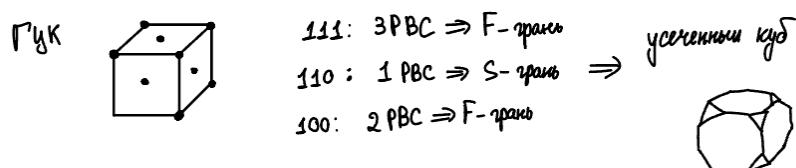


Рис. 1.19 – Пример применения PBC-теории для оценки огранки кристалла

1.10 Термодинамика выделения фазы, принцип Данкова-Конобеевского. Гетерогенное зародышеобразование. Переохлаждение и кривизна ростового фронта

Выделение новой фазы - это фазовый переход I рода, сопровождается скачком первых производных термодинамических потенциалов по интенсивным параметрам:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S; \quad \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V \quad (1.20)$$

Движущая сила процесса - минимизация энергии Гиббса системы. При этом может наблюдаться образование метастабильных фаз, если кинетический фактор (энергетический барьер, связанный с перестройкой структуры) играет значительную роль. Это так называемое правило ступеней Оствальда.

Изменение энергии Гиббса складывается из объёмной, поверхностной и упругой составляющих:

$$\Delta G = \underset{<0}{\Delta G_{\text{объёмн.}}} + \underset{>0}{\Delta G_{\text{поверхн.}}} + \underset{>0}{\Delta G_{\text{упр.}}} \quad (1.21)$$

Поскольку образование новой фазы неизбежно связано с возникновением новых границ раздела, $\Delta G_{\text{поверхн.}} > 0$. Для минимизации вклада поверхностной энергии зерно новой фазы стремится к такой ориентации по отношению к исходной фазе, чтобы рассогласование кристаллических решёток было минимальным. В этом и заключается так называемый принцип Данкова-Конобеевского. При образовании новой фазы из расплава $\Delta G_{\text{упр.}} = 0$, поэтому конкурируют только объёмная и поверхностная энергии. В случае гетерогенного зародышеобразования в системе изначально присутствуют поверхности, обладающие избытком свободной энергии. В результате $\Delta G_{\text{поверхн.}}$ меньше, чем в случае гомогенного зародышеобразования, и рост кристаллов происходит при меньших значениях переохлаждения ΔT .

При гомогенном зародышеобразовании $\Delta G_{\text{объёмн.}}$ не сразу может преодолеть вклад от $\Delta G_{\text{поверхн.}}$, в результате зародыш обладает избытком энергии Гиббса, и кристаллизация идёт через потенциальный барьер (см. рис. 1.20):

$$\Delta G_c \sim \frac{1}{\Delta T}, r_c \sim \frac{1}{\Delta T} \quad (1.22)$$

$r > r_c \Rightarrow$ кристалл растёт, $r < r_c \Rightarrow$ зародыш растворяется.

При гетерогенном зародышеобразовании r_c не меняется, а величина барьера уменьшается и становится равной

$$\Delta G_{het} = \Delta G_c(2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta) \quad (1.23)$$

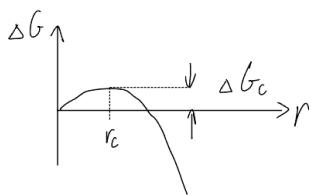


Рис. 1.20 – Потенциальный барьер кристаллизации

Здесь θ - это угол смачивания между зародышем и подложкой. Необходимо добиться такой величины ΔT , чтобы случайно образующиеся зародыши могли вырасти.

В то же время, высокие значения ΔT способны привести к нестабильности ростового фронта. Для роста искривлённой поверхности требуется меньшее пересыщение, чем для роста прямой поверхности. Малые выступы, образующиеся на ростовом фронте, превышают критический размер и начинают расти, поверхность роста искривляется. Чем сильнее изгибаются фронт, тем меньшие переохлаждения требуются для его дальнейшего роста. Соответственно, тем больше получается актуальное переохлаждение вблизи границы. В результате происходит рост дендритов (рис. 1.21) с последующим отрывом их от ростовой поверхности кристалла. Процесс нежелательный.

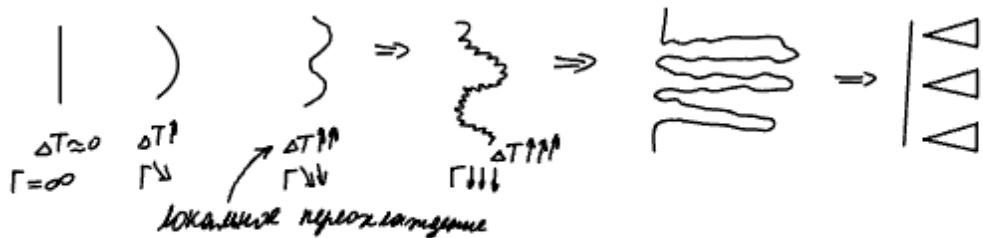


Рис. 1.21 – Рост дендритов

1.11 Распределение примеси по длине растущего из расплава кристалла. Техническое оформление основных методов роста кристаллов из расплава.

Вследствие несовпадения составов расплава и растущего кристалла (линии ликвидуса и солидуса на фазовой диаграмме не совпадают), состав расплава по мере роста кристалла непрерывно меняется (рис. 1.22). В результате непрерывно меняется и состав растущего кристалла, так что в конечном итоге распределение примеси по кристаллу имеет вид, показанный на рис. 1.23.

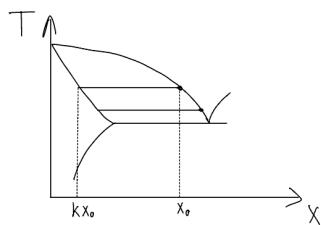


Рис. 1.22 – Причина непостоянства концентрации примеси в кристалле

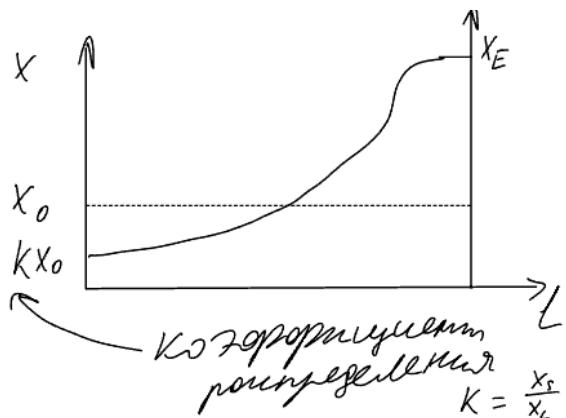


Рис. 1.23 – Зависимость концентрации примеси в кристалле от координаты

Коэффициент распределения $k = \frac{x_s}{x_L} \approx const$ для линейных ликвидуса и солидуса. Вид кривой $x(l)$ получается при интегрировании выражения

$$(x_L - x_S)df_S = (1 - f_S)dx_L \text{ - принцип сохранения примеси} \quad (1.24)$$

Здесь f_S - объёмная доля кристалла (по сути - координата границы раздела). В результате получаем уравнение темпа кристаллизации:

$$x_S = kx_0(1 - f_S)^{k-1} = kx_0(1 - l)^{k-1} \quad (1.25)$$

Для того, чтобы избежать столь существенных неоднородностей состава (рис. 1.23), можно осуществлять подпитку расплава примесью, загружая в расплав шихту смеси компонентов состава x_0 . В этом случае с учётом диффузии в расплаве получаем следующее распределение примеси по расплаву (рис. 1.24):

И, как следствие, такое распределение примеси по кристаллу (рис 1.25):

Начальная и конечная области отрезаются, остаётся однородный кристалл.

Основные методы роста кристаллов из расплава:

- 1) Бриджмен-Стокбаргер (движение расплава в температурном градиенте, рис. 1.26)
- 2) Чохральский (вытягивание врачающейся затравки из расплава, рис. 1.26)
- 3) Зонная плавка (рис. 1.27)
- 4) Вернейль (в пламени, для тугоплавких материалов, рис. 1.27)
- 5) Массовая и спонтанная кристаллизация

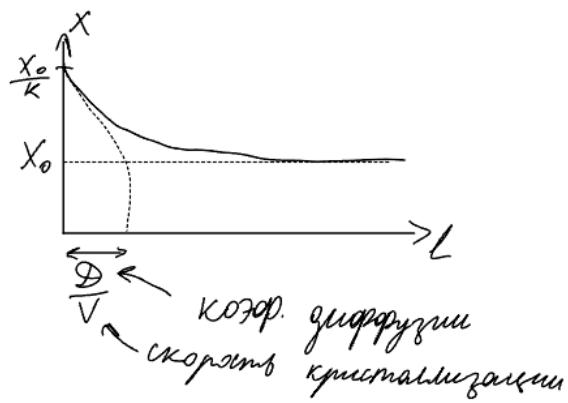


Рис. 1.24 – Зависимость концентрации примеси в расплаве от координаты

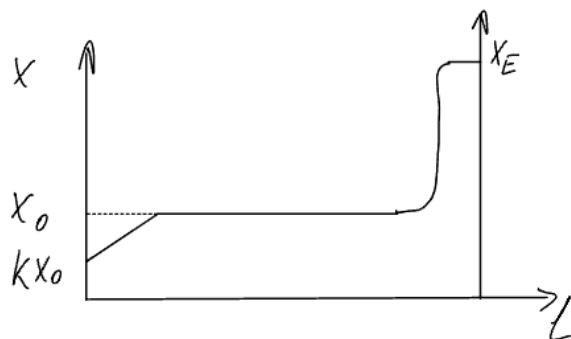


Рис. 1.25 – Зависимость концентрации примеси в кристалле от координаты с учётом диффузии в расплаве

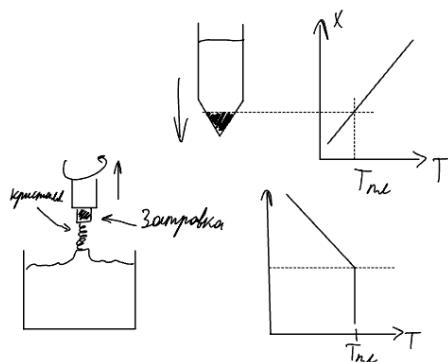


Рис. 1.26 – Метод Бриджмена (сверху) и Чохральского (снизу)

1.12 Направленная кристаллизация. Условие стабильности интерфейса при направленной кристаллизации. Теория эвтектического роста.

Направленная кристаллизация осуществляется следующим образом. на границу раздела кристалл/расплав подаётся температурный градиент, через который с некоторой скоростью v протягивается образец. v соответствует скорости

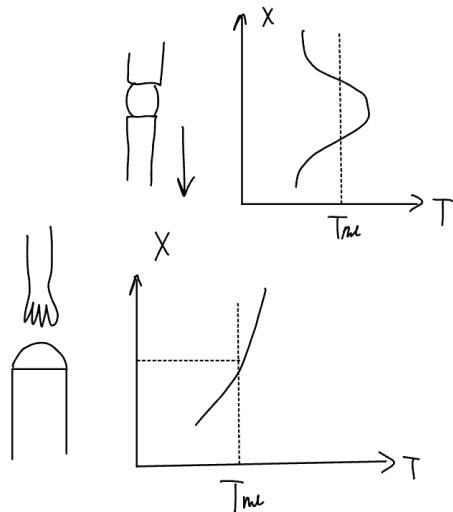


Рис. 1.27 – Метод зонной плавки (сверху) и Вернейля (снизу)

криSTALLизации. Важно, чтобы переохлаждение вблизи границы раздела было невелико, в противном случае можно получить нестабильность ростового фронта ($R \sim \frac{1}{\Delta T}$, R - радиус кривизны, ΔT - локальное переохлаждение). Для этого тепло должно отводиться через кристалл.

В случае направленной кристаллизации распределение примеси по расплаву имеет следующий вид (рис. 1.28):

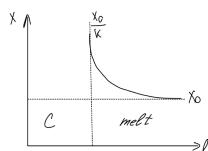


Рис. 1.28 – Распределение примеси в кристалле и в расплаве вблизи границы раздела

Каждой концентрации примеси можно сопоставить равновесную температуру, отвечающую данному составу на фазовой диаграмме. Если наложенный температурный градиент слишком мал (рис. 1.29), то вблизи поверхности раздела раствор пересыщен, наблюдается так называемое концентрационное переохлаждение, которое способно привести к нестабильности ростового фронта точно также, как и обычное термическое.

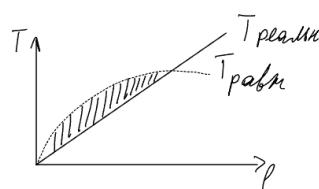


Рис. 1.29 – К понятию концентрационного переохлаждения

Для стабильности ростового фронта важно, чтобы при росте кристалла

скорость кристаллизации и температурный градиент были сбалансированы во избежание концентрационного переохлаждения. Условие стабильности ростового фронта записывается следующим образом:

$$\frac{\nabla T}{v} \geq \frac{-m_L x_0 (1 - k)}{D_L} \quad (1.26)$$

Здесь D_L - коэффициент диффузии в расплаве, $k = \frac{x_S}{x_L}$ - коэффициент распределения, $m_L < 0$ - наклон ликвидуса (в линейной модели ликвидуса и солидуса).

Кристаллизация эвтектик описывается теорией Джексона-Ханта. В рамках этой теории распределение примеси по кристаллу описывается уравнением

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{v}{D} \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (1.27)$$

Это означает, что распределение примеси по кристаллу в направлении z периодично. При кристаллизации эвтектики расплав пересыщен относительно обеих фаз сразу (рис. 1.30), так что обе фазы кристаллизуются одновременно с образованием стопки пластин-ламелей с дифференцировкой λ .

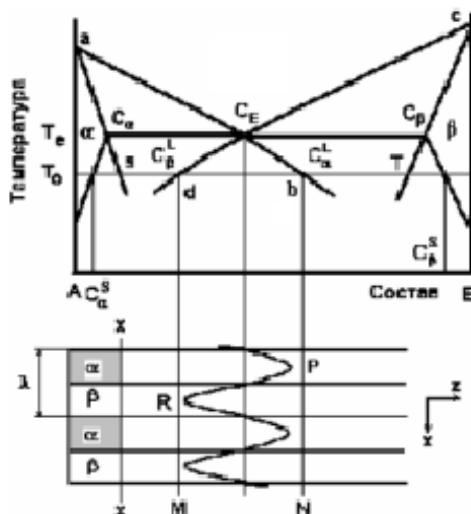


Рис.1.1.1 Изменение состава жидкости на фронте эвтектической кристаллизации

Рис. 1.30 – Переохлаждение и кристаллизация эвтектики

Для того, чтобы движущая сила кристаллизации была отлична от нуля, требуется некоторое переохлаждение на границе, которое складывается из концентрационного переохлаждения (при образовании пластины одной фазы раствор обогащается вторым компонентом) и переохлаждения, связанного с кривизной ростового фронта:

$$\Delta T = Av\lambda + \frac{B}{\lambda} \quad (1.28)$$

Первое слагаемое отвечает концентрационному переохлаждению, второе - переохлаждению за счёт кривизны ростового фронта.

Условие планарности ростового фронта эвтектического кристалла ($\Delta T \rightarrow \min$):

$$\lambda^2 v = \text{const} \quad (1.29)$$

$$\frac{(\Delta T)^2}{v} = \text{const} \quad (1.30)$$

$$\Delta T \lambda = \text{const} \quad (1.31)$$

1.13 Фазовые равновесия. Основные понятия: система, компонент, фаза, степень свободы.

Условия равновесия фаз. Правило фаз Гиббса.

Фазовые диаграммы Т-х двухкомпонентных систем.

Фазовые равновесия - это равновесия между фазами в термодинамической системе. Термодинамическая система - это материальный объект, выделенный из окружающей среды с помощью реально существующей или воображаемой границы. Компонентами называют минимальный набор составляющих (реальные вещества/частицы, образующие систему), достаточный для описания состава системы.

Пр. CO, CO₂, O₂ \Rightarrow 3 составляющих, 2 компонента (ибо CO + $\frac{1}{2}$ O₂ = CO₂)

Фаза - гомогенная часть гетерогенной системы, отделённая от других частей границей раздела, при переходе через которую свойства системы меняются скачком.

Степень свободы - это параметр, который можно независимо менять, оставаясь при этом в пределах одной и той же фазы. Число степеней свободы (ЧСС) - количество таких независимых параметров.

С течением времени система может прийти в состояние термодинамического равновесия, когда внутри системы не будет наблюдаться потоков вещества и энергии, и характеристики системы станут постоянными. В этом случае для фаз, составляющих систему, можно записать частные условия равновесия:

$$T^\alpha = T^\beta; p^\alpha = p^\beta; \mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad (1.32)$$

То есть, во всех фазах должно соблюдаться равенство температур (термическое равновесие), давлений (механическое равновесие) и химических потенциалов каждого из компонентов (химическое равновесие).

Правило фаз Гиббса связывает число степеней свободы f с количеством равновесных

фаз Φ в K -компонентной системе:

$$f = K - \Phi + N \quad (1.33)$$

Здесь N - число внешних управляющих факторов (p , T , \vec{B} , \vec{g} ...). Обычно $N=2$, так как ключевую роль играют p и T .

Для описания двухкомпонентных систем часто прибегают к использованию T - x диаграмм, представляющих собой сечения p - T - x диаграмм при постоянном давлении (обычно 1 атм.). В этом случае $f = K - \Phi + 1$. Общий вид T - x диаграммы показан на рисунке 1.31. Для примера приведена T - x диаграмма, описывающая систему двух

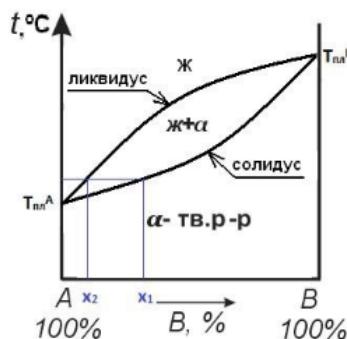


Рис. 1.31 – Фазовая диаграмма двухкомпонентной системы

неограниченно растворимых друг в друге компонентов. В областях ж и α $\Phi = 1 \Rightarrow f = 2$, можно менять T и состав. В области двухфазного равновесия $f = 1$, независимо можно менять только температуру, составы фаз жёстко связаны друг с другом.

1.14 Основные виды конгруэнтных и инконгруэнтных равновесий. Правило рычага. Способы графического изображения фазовых диаграмм трехкомпонентных систем. Квазибинарные разрезы. Принцип триангуляции.

Равновесие называется конгруэнтным, если составы равновесных фаз совпадают. В противном случае равновесие называют инконгруэнтным. Трёхфазные равновесия делят на два больших типа: эвтектические (фаза при охлаждении распадается на две) и перитектический (фаза при нагревании распадается на две). В зависимости от состояния фаз (тв., ж., г.) различают следующие равновесия (рис. 1.32):

Правило рычага позволяет найти соотношение между количеством двух равновесных фаз и их составом (рис. 1.33, n - количество фазы, моль. x - мольная доля одного из компонентов):

Эвтектического типа		Перитектического типа	
Название	$1 \leftrightarrow 2+3$	Название	$1+2 \leftrightarrow 3$
Эвтектика	$L \leftrightarrow \alpha + \beta$	Перитектика	$L + \alpha \leftrightarrow \beta$
Эвтектоид	$\gamma \leftrightarrow \alpha + \beta$	Перитектоид	$\gamma + \alpha \leftrightarrow \beta$
Монотектика	$L \leftrightarrow \alpha + L$	Синтектика	$L + L \leftrightarrow \alpha$
Газоэвтектическое	$L \leftrightarrow \alpha + V$	Газоперетектическое	$L + V \leftrightarrow \alpha$
Газоэвтектоидное	$\gamma \leftrightarrow \alpha + L$		

Рис. 1.32 – Типы трёхфазных равновесий

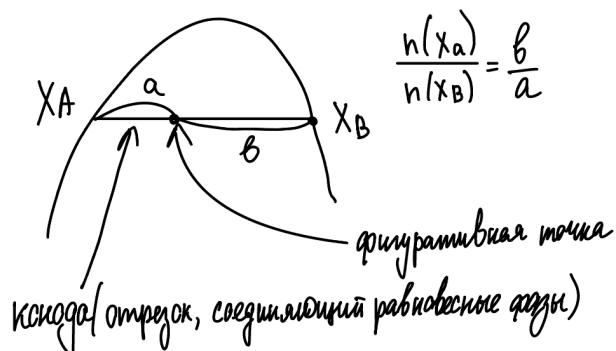


Рис. 1.33 – Правило рычага

Для изображения фазовых диаграмм трёхкомпонентных систем часто используют треугольник составов Гиббса-Розенбома, который помещают в основание трёхмерной T-x1-x2-x3 диаграммы при $p=\text{const}$ (обычно 1 атм.). Чаще всего пользуются изотермическими сечениями таких диаграмм. Ещё используют развертки трёхмерных диаграмм, а также их политермические разрезы.

Квазибинарный разрез - это политермический разрез, построенный вдоль отрезка, соединяющего на треугольнике составов два конгруэнтно плавящихся соединения, существующих в данной системе (рис. 1.34).

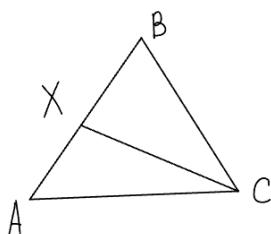


Рис. 1.34 – Квазибинарный разрез

Можно показать, что смещением С и Х можно получить только точки, принадлежащие отрезку CX, так что квазибинарное сечение по сути представляет собой двухкомпонентную фазовую диаграмму. При этом важно, чтобы фазы С и Х могли сосуществовать при данных условиях (т.н. термодинамический критерий выбора квазибинарного разреза). В отдельных случаях при превышении некоторого температурного предела квазибинарный разрез может перестать быть таковым, ибо пройдут процессы химического превращения С и Х с образованием новых фаз.

Для изотермических сечений используется принцип триангуляции. Поскольку $p = const$, $T = const$, то $f = K - \Phi \Rightarrow \max \Phi = K = 3$. Это означает, что в равновесии может находиться не более трёх фаз. Если в результате некоторого процесса в системе K1-K2-K3 (рис. 1.35) получен образец (точка M), содержащий фазы A, B и C, отвечающие некоторым конгруэнтно плавящимся соединениям, присутствующим в данной системе, то треугольник ABC представляет собой область нонвариантного равновесия и не содержит иных фаз, кроме A, B и C.

Такой подход к изучению фазовых диаграмм позволяет разбивать их на простейшие треугольники с тройной эвтектикой, проводить триангуляцию. Этот метод требует больших временных затрат, но позволяет максимально подробно описывать систему.

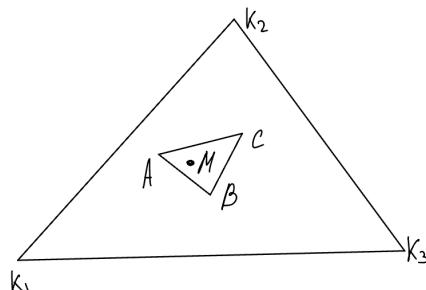


Рис. 1.35 – Процесс триангуляции

1.15 Фазовая диаграмма и микроструктура материала. Микроструктура эвтектических и перитектических композитов. Ликвация и ее влияние на микроструктуру материала

По фазовой диаграмме системы можно понять последовательность процессов, происходящих при охлаждении расплава заданного состава x_0 . Например, если кристаллизация проводится в системе с эвтектикой по пути, показанному на рис. 1.36, то сперва кристаллизуются зёрна фазы α , причём состав зерна меняется от ядра к поверхности. По достижении температуры эвтектики между зёренами фазы

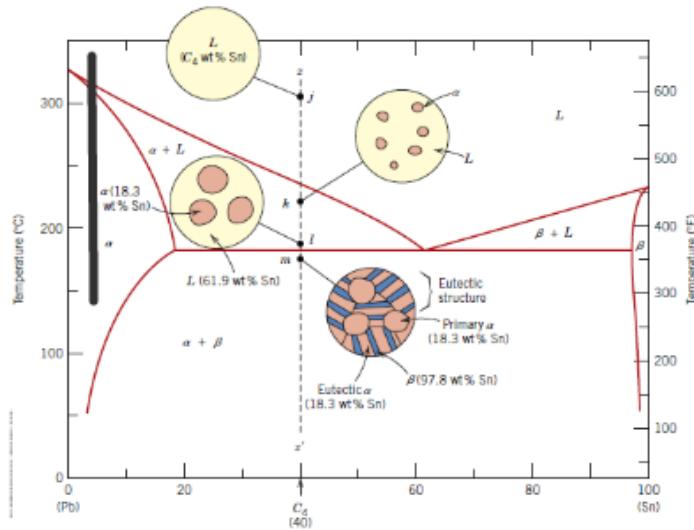


Рис. 1.36 – Кристаллизация сплавов в системе с эвтектикой

α кристаллизуется композит эвтектического состава. В результате сплав обладает микроструктурой, показанной на рис. 1.36 и характеризуется повышенной прочностью.

Если кристаллизацию вести по другому пути (рис. 1.36, жирная чёрная линия слева), то будет получен однофазный пластичный материал из зёрен фазы α . Если кристаллизуется эвтектический состав, будет получен чисто эвтектический композит (*микроструктура как на рисунке, только без зёрен фазы α , просто пластинки в зёрнах*)

Если в системе есть перитектическое равновесие (например - перитектоид, как на рис. 1.37), то по мере охлаждения расплава сперва будут образовываться зёرны фазы α , а затем в них произойдёт выделение мелких зёрен фазы β , в результате чего прочность материала вырастет, а микроструктура будет иметь вид, показанный на рис. 1.37.

Вследствие несовпадения составов расплава и растущего кристалла (линии солидуса и ликвидуса не совпадают) состав кристалла по мере роста непрерывно меняется (рис. 1.38). В результате ядро зерна обогащено компонентом В, а внешняя область - обеднена, чтобы в среднем состав соответствовал x_0 . Неоднородность распределения примеси, вызванная различной растворимостью примеси в кристалле и расплаве, наз. ликвиацией. Особенно заметно это явление в массивных отливках, где кристаллизация идёт от стенок и дна формы к верхней части. Ликвация приводит к снижению прочности материала, бороться с ней можно путём диффузионного отжига либо замедленного литья.

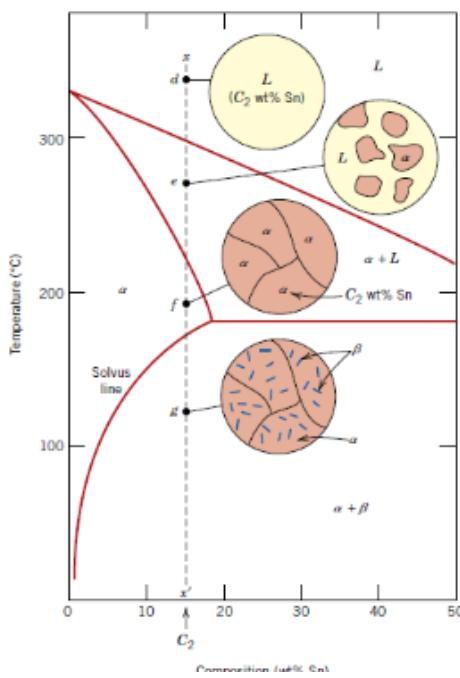


Рис. 1.37 – Кристаллизация сплавов в системе с перитектоидом

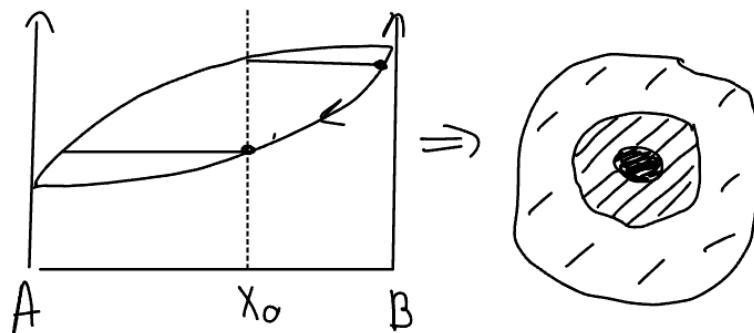


Рис. 1.38 – Ликвация

1.16 Закалка без полиморфного превращения. Закалка на мартенсит. Кристаллогеометрия и термодинамика мартенситного превращения.

Закалка без полиморфного превращения - это резкое охлаждение образца, при котором замораживаются диффузионные процессы и фиксируется высокотемпературный фазовый и химический состав, а также распределение дефектов. Для достижения этого эффекта металлические сплавы обычно закаляют со скоростями $\sim 1000^{\circ}\text{C}/\text{сек}$. для сохранения метастабильной аморфной структуры стекла требуются значительно меньшие скорости закалки. Закалка, проводимая непосредственно из

расплава, позволяет избежать ликвации.

В некоторых случаях (γ -Fe, ZrO_2) при закалке происходит бездиффузионное, деформационное превращение с образованием новой фазы того же хим. состава. Кристаллы новой фазы растут со скоростями порядка скорости звука в твёрдом теле. Такое превращение называют мартенситным переходом. Этот процесс наблюдается в определённом интервале температур $T_h - T_k$ и полностью протекает только при достижении T_k , что не всегда возможно.

Мартенситный переход (МП) - деформационный, связан с малыми смещениями атомов кристаллической решётки исходной фазы. Соответственно, мартенситная фаза строго ориентирована по отношению к исходной. Плоскость сопряжения кристаллический решёток фаз при этом не деформируется (МП - т.н. "превращение с инвариантной плоскостью"). В зависимости от того, какой последовательностью деформаций описывается МП, вводятся различные ориентационные соотношения, связывающие некоторые направления и плоскости в исходной и мартенситной фазе. В частности, известны ориентационные соотношения Бейна, Курдюмова-Закса, Нишиямы и т.д.

Пр. Соотношения Курдюмова-Закса: $(111) \parallel (101)$, то есть плоскости плотнейшей упаковки в ГЦК и ОЦТ параллельны.

Энергия Гиббса МП может быть записана в виде

$$\Delta G_{MP} = \underset{<0}{\Delta G_{объёмн.}} + \underset{>0}{\Delta G_{поверхн.}} + \underset{\gg 0}{\Delta G_{упр.}} \quad (1.34)$$

В равновесии $\Delta G_{объёмн.} + \Delta G_{поверхн.} = -\Delta G_{упр.}$. Управляя внешней нагрузкой, наложенной на материал, можно управлять количеством мартенситной фазы (через изменение T_h).

1.17 Мартенситные превращения в металлических и неметаллических системах, их влияние на механические свойства материалов (изменение механических характеристик сталей при закалке, трансформационное упрочнение керамики на основе ZrO_2).

МП - это резкий ($v \sim 1$ км/с) рост кристаллов новой метастабильной фазы внутри зёрен исходной фазы, протекающий при закалке материала ниже некоторой температуры T_h . Мартенситное превращение имеет деформационный характер, связано с малыми смещениями атомов в кристаллической решётке исходной фазы.

Зёरна мартенситной фазы имеют вид протяжённых плоскостей

(высокоуглеродистые стали) или плотноупакованных реек (легированные малоуглеродистые стали), разрезающих зерно исходной фазы. В результате происходит существенное повышение прочностных характеристик материала, таких как твёрдость по Бринеллю или временное сопротивление разрыву.

Механизм упрочнения: 1) По Холлу-Петчу 2) дислокационное упрочнение на границах зёрен (МП приводит к значительному увеличению количества дислокаций и двойниковых дефектов в материале).

С ростом доли углерода в сталях прочность и твёрдость растут, но при выходе за эвтектоидный состав выходят на плато, а прочность может демонстрировать даже падение. Это вызвано образованием зёрен хрупкого цементита Fe_3C (закалка ведётся из двухфазной области, если $x > x_E$).

Закалённая сталь - очень напряжённый и потому хрупкий материал. Для дальнейшего использования сталь обычно старивают, вследствие чего доля мартенсита снижается, равно как и твёрдость с прочностью. зато получается менее хрупкий материал.

МП могут протекать не только в сталях. Примеры: графит \rightarrow алмаз, NiTi (ОЦК \rightarrow ромбоэдр), BN(гекс. \rightarrow куб.), β -Sn \rightarrow α -Sn (тетрагон. \rightarrow куб. при 13,2 °C).

В некоторых случаях такие МП вредны (оловянная чума), но могут быть и весьма полезны. Например, МП приводит к деформационному упрочнению ZrO_2 . В диоксида циркония возможен МП от тетрагональной фазы к моноклинной. Когда в керамике на основе ZrO_2 начинает распространяться трещина, вблизи её края деформации вызывают МП в зёдрах ZrO_2 . В результате трещина упирается в зерно мартенситной моноклинной фазы, образующееся вследствие МП под упругих напряжений стремится схлопнуть трещину, и её рост замедляется. Это позволяет использовать ZrO_2 в качестве шаров в шаровых мельницах, керамических режущих инструментов и т.д.

1.18 Фазовые превращения с нормальной кинетикой.

Перлитное превращение в сталях. ТТТ-диаграмма. Основные разновидности отжига 2 -го рода

К фазовым превращениям с нормальной кинетикой (не деформационное, а относительно медленное превращение) относится перлитное превращение в сталях. Это переход аустенита в перлит (эвтектический композит феррита α -Fe и цементита Fe_3C) при охлаждении. Если распадается аустенит гипо- или гиперэвтектоидного состава, то помимо эвтектоидного композита будут наблюдаться крупные зёдра α -Fe или пластинчатые зёдра Fe_3C , соответственно. Пластиинки цементита играют роль концентраторов напряжений, поэтому для заэвтектоидных сталей характерно снижение прочности (хотя в доэвтектоидных с ростом доли С прочность растёт).

Положением эвтектоидной точки можно управлять, добавляя легирующие добавки.

Mn, Ni, Co: $T_E \downarrow$

Cr, Ti, W, Mo, Si: $T_E \uparrow$

Ti: $x_E \Downarrow \Downarrow$

Ni, Cr: $x_E \downarrow$

$$\Delta G_{\text{МП}} = \underset{<0}{\Delta G_{\text{объемн.}}} + \underset{>0}{\Delta G_{\text{поверхн.}}} + \underset{>0}{\Delta G_{\text{упр.}}} \quad (1.35)$$

Необходимо, чтобы $|\Delta G_{\text{объемн.}}|$ было достаточно велико. Для этого требуются пониженные температуры ($T \ll T_E$). Но при низких Т заторможены процессы диффузии! В результате Э некая оптимальная Т, при которой скорость превращения максимальна (рис. 1.39).

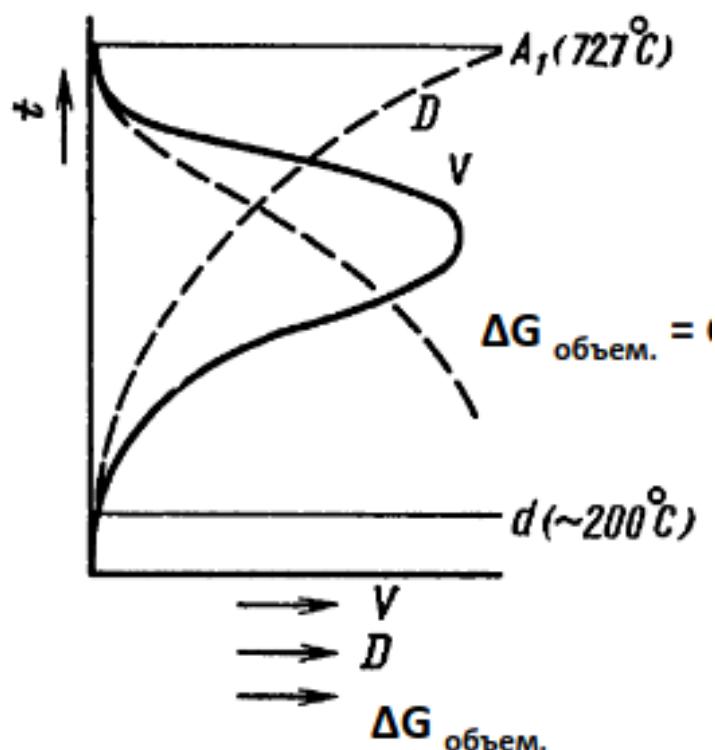


Рис. 1.39 – Зависимость скорости перлитного превращения (сплошная линия) от температуры

Кинетика перлитного превращения описывается уравнение Колмогорова-Аврами (JMAK):

$$y = 1 - e^{-kt^n} \quad (1.36)$$

Здесь y - степень превращения, t - время, n - эмпирический параметр.

Для описания фазовых превращений часто используют изотермические TTT-диаграммы (time-transformation-temperature), выглядящие следующим образом (рис. 1.40). На рисунке использованы следующие обозначения: н - кривая начала перлитного

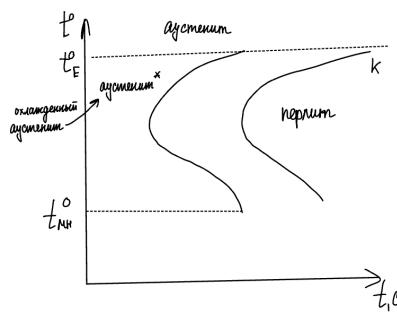


Рис. 1.40 – Общий вид ТТТ-диаграммы

превращения, k - кривая завершения перлитного превращения, t_{MP}^o - температура начала мартенситного перехода.

На ТТТ-диаграммах удобно выбирать режимы термообработки. Если кривая охлаждения не заходит в перлитную область, то осуществляется закалка на мартенсит. Дифференцировка перлита (перлит, сорбит, троостит - $\lambda \downarrow$) зависит от профиля охлаждения (рис. 1.41). По ТТТ-диаграммам удобно иллюстрировать различные виды



Рис. 1.41 – Дифференцировка перлита и профиль охлаждения

отжига 2-го рода (рис. 1.42). На рисунке 1.42 1 - полный отжиг (медленно, в грубый

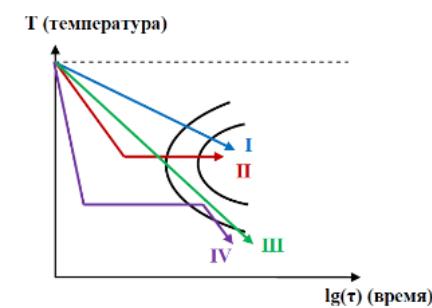


Рис. 1.42 – Основные виды отжига 2-го рода

перлит), 2 - изотермический отжиг (в грубый перлит), 3 - нормализация (в сорбит), 4 - патентирование (в троостит).

ИМХО, автор рисунка ошибся с 3 и 4. Кривые следует аккуратно заканчивать в перлитной области, а то это ужсе не троостит с сорбитом, а бейнит какой-то

1.19 Отжиг 1-го рода. Рекристаллизация. Основные модели процесса спекания.

Отжиг первого (I) рода — без фазовой перекристаллизации — применяется для приведения металла в более равновесное структурное состояние: снимается наклёт, понижается твёрдость, возрастают пластичность и ударная вязкость, снимаются внутренние напряжения (в связи с процессами отдыха и рекристаллизации). **отжиг первого (I) рода** направлен на возвращение в равновесное состояние металла, подвергнутого предварительной пластической деформации.

Виды + характеристика на примере стали

1. Диффузионный (гомогенизирующий) отжиг. Применяется для устранения ликвации, выравнивания химического состава сплава. В его основе — диффузия. В результате нагрева выравнивается состав. Применяется, в основном, для легированных сталей. Полностью снимает внутренние напряжения. Температура гомогенизации должна быть достаточно высокой, однако нельзя допускать пережога, оплавления зерен.

Недостаток: Сопровождается ростом зерна и окалиной. Температура нагрева зависит от температуры плавления, $T_h = 0,8 \cdot T_{пл}$, $t = 1100 - 1200^\circ\text{C}$. Продолжительность выдержки: $\tau \approx 8 - 20$ ч (десятки часов).

// Это необязательно// Если допустить пережог, то кислород воздуха окисляет железо, проникая в толщу его, образуются кристаллиты, разобщенные окисными оболочками. Пережог устраниить нельзя, поэтому пережженные заготовки являются окончательным браком. Диффузионный отжиг стали обычно приводит к слишком сильному укрупнению зерна, что следует исправлять последующим полным отжигом (на мелкое зерно). В стальных слитках в результате диффузионного отжига достигается более равномерное распределение фосфора, углерода и легирующих элементов в объеме зерен твердого раствора. Если температура отжига достаточно высока, отжиг приводит к более благоприятному распределению сульфидов.

2. Рекристаллизационный отжиг. Проводится для снятия напряжений после холодной пластической деформации. Цель: устранение наклена, созданного холодной пластической деформацией, понижение прочности и восстановление пластичности деформированного металла, получение определенной кристаллографической текстуры, создающей анизотропию свойств, и получение заданного размера зерна. Отжиг первого рода проходит в две стадии: 1) возврат, 2) рекристаллизация.

1) Возврат — нагрев металла до относительно низких температур. Результат искаженная форма кристаллов сохраняется, снимаются внутренние напряжения в структуре. В результате твердость и прочность незначительно уменьшаются, уменьшается склонность к хрупкому разрушению.

2) Рекристаллизация — нагрев до высоких температур: **чистые металлы** — до $t_p = 0,2 - 0,3 \cdot T_{пл}$; **чистые сплавы** — до $t_p = 0,5 - 0,6 \cdot T_{пл}$; **технические сплавы** — до

$t_p = 0,8 - 0,9 \cdot T_{пл}$. Под действием высоких температур происходит полная перестройка кристаллической структуры металла. Вместо деформированных кристаллов в твердом состоянии происходит зарождение и рост новых равновесных кристаллов. Свойства металла возвращаются к исходным — бывшим до деформации.

В процессе рекристаллизационного отжига происходит образование зародышей новых зерен и последующий рост этих зародышей. Постепенно старые деформированные зерна исчезают. Количество дефектов в кристаллической решетке уменьшается, наклеп устраняется, и металл возвращается в исходное состояние.

3. Отжиг на полигонизацию проводят при температуре, которая ниже температуры начала рекристаллизации. Соответственно при такой температуре происходит лишь частичное устранение наклена за счет процессов возврата второго рода, т.е. происходит уменьшение плотности дефектов кристаллической решетки, образование ячеистой дислокационной структуры без изменения формы зерен. Степень уменьшения наклена зависит, прежде всего, от температуры. Чем ближе температура к порогу рекристаллизации, тем меньше наклен, тем больше пластичность и наоборот.

4. Отжиг для снятия напряжений Устранение внутренних напряжений производится с помощью специальных видов отжига. Этот отжиг проводится при температурах ниже температуры рекристаллизации: $T_n = 0,2 - 0,3 \cdot T_{пл}$. Повышенная температура облегчает скольжение дислокаций и, под действием внутренних напряжений, происходит их перераспределение, т.е. из мест с повышенным уровнем внутренних напряжений дислокации перемещаются в области с пониженным уровнем. Происходит как бы разрядка внутренних напряжений. При нормальной температуре этот процесс будет длиться в течение нескольких лет. Увеличение температуры резко увеличивает скорость разрядки, и продолжительность такого отжига составляет несколько часов.

Спекание

Спекание — уплотнение поликристаллических веществ при термообработке (Исключение уменьшение плотности при аномальном росте зерен при рекристаллизации, например керамических и «литых» образцов Bi2212 ВТСП при «спекании» за счет роста длинных игольчатых кристаллов) Процессы, протекающие при спекании (повышение прочности и плотности):

- Уменьшение объема пор,
- Увеличение площади контакта между кристаллами
- Рост зёрен, изменение их формы и укладки

Основной вклад в движущую силу — уменьшение свободной энергии межфазных границ σ (кристалл–газ, жидкость–кристалл, кристалл–кристалл).

Основные механизмы

Жидкостное спекание: плавни, минерализаторы, эвтектики, перитектики (стягивание частиц за счет высокого радиуса кривизны жидкостной прослойки —

перешейка между частицами, быстрый диффузионный перенос компонентов через жидкость, рекристаллизация кристаллитов, изменение реологических свойств во время спекания ползучесть и пр., часто — понижение температуры спекания)

Стадии жидкофазного спекания:

1. Перегруппировка частиц путем взаимного проскальзывания
2. Перенос материала через жидкую фазу, при этом насыщение жидкой фазы происходит за счет растворения мелких частич и контактных участков, химический потенциал которых повышен из-за напряжений и пр.
3. Образование жесткого скелета, залечивание пор

Твердофазное спекание (пластическая деформация частиц (обычно эффективен при приложении внешнего давления), испарение-конденсация - перемещение вещества с поверхности к вогнутой поверхности перешейка между кристаллитами и его «залечивание» - может протекать практически без усадки, диффузионный перенос вещества через перешеек - важно наличие Пространственных и точечных дефектов)

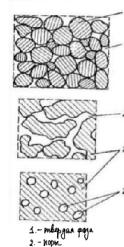
Спекание под давлением («горячее прессование»)

Реакционное спекание (протекание химической реакции и образование новых фаз).

Ниже представлены основные стадии спекания.

Стадии спекания

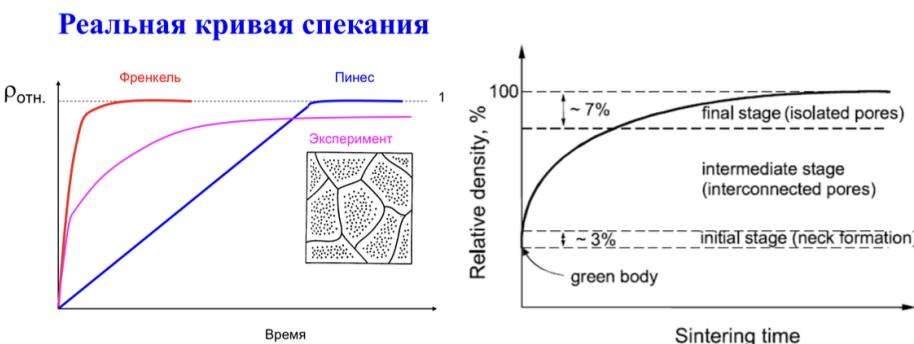
1. стадия. **Припекание.** Создаются и увеличиваются контакты между соседними частицами, но границы зёрен сохраняются.
Движущая сила спекания — избыток свободной энергии, связанной с дисперсностью порошка.
2. стадия. **Обособление «фазы вещества» и «фазы пустоты».** Частицы как бы сливаются, но замкнутых пор ещё не образуется. *Движущая сила спекания* — избыток энергии свободных поверхностей пор и межзёренных границ.
3. стадия. Образуются замкнутые поры. *Движущая сила спекания* — уменьшение протяжённости границы раздела пор кристалла и удаление пор.
4. стадия. Удаления замкнутых пор.



Явления, сопровождающие отжиг 1-го рода:

1. Возврат (recovery) — совокупность процессов самопроизвольного изменения плотности и распределения дефектов (и соответствующих им полей напряжений) в неравновесных (в частности, деформированных) кристаллах до начала рекристаллизации

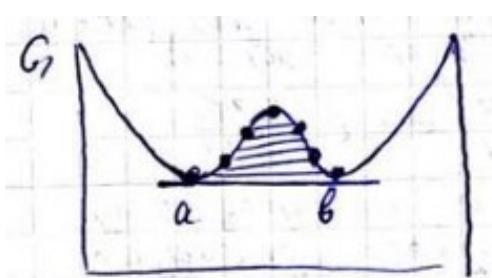
- (a) возврат 1-го рода (отдых) — без миграции малоугловых границ (дислокаций)
- (b) возврат 2-го рода (полигонизация) — миграция малоугловых границ (дислокаций)
2. Рекристаллизация — возникновение новых зерен, рост зерен (grain growth), сопровождающиеся движением высокоугловых границ
 3. Уплотнение (densification) — уменьшение доли и размера пор
 4. Коалесценция пор (coarsening) — укрупнение пор без изменения их общего объема



1.20 Распад пересыщенного твердого раствора по спинодальному механизму и механизму образования и роста зародышей. Термодинамика процессов распада, роль упругой энергии. Старение материалов естественное и искусственное (на примере дуралюмина).

Термодинамика: фазовая диаграмма и зависимость G от состава. Если в пересыщенном растворе возникает флуктуация состава (в точке K), то в дальнейшем процесс будет происходить самопроизвольно (неустойчивое равновесие в очке K).

Флуктуация состава неравновесна, термодинамически выгоден распад: будет спонтанный постепенный распад на а и б — **спинодальный распад** (граница растворимости в твердом состоянии):



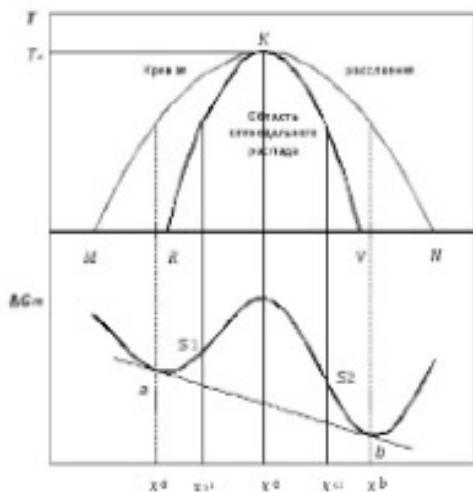


Рис. 8.2.2.
Т-х диаграмма с кювилом расления и спинодалью,
и кривая свободной энергии

Процесс протекает по механизму восходящей диффузии (против градиента концентраций). Справа — состав, каким он будет по прошествии бесконечно большого интервала времени.

Образование и рост зародышей

Если происходит распад раствора, отвечающего точке X_0 , то видно, что малые флуктуации состава термодинамически не выгодны, энергия системы кристаллов выше, чем у исходного раствора (ситуация 1).

Для распада (на b и состав от a до X_0) надо преодолеть некий энергетический барьер, необходимо присутствие зародышей новой фазы. Зародыши могут образовываться за счет сегрегации одного из компонентов на дислокациях, границах зерен и других дефектов. Этот процесс не захватывает весь объем, протекает по механизму нисходящей диффузии (по градиенту концентрации).

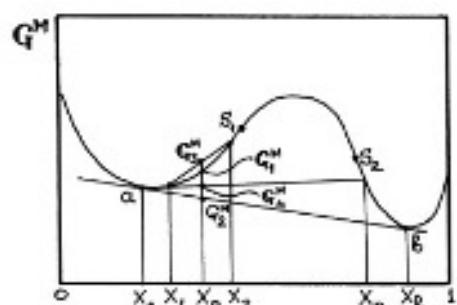
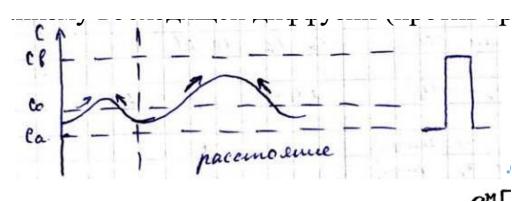


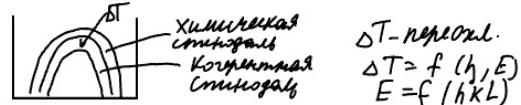
Рис. 8.3.1.
Распад по механизму образования и роста
зародышей в сплаве состава x_0 в системе с
непрерывным рядом твердых растворов

Сравнение двух процессов

Спинодальный распад	Образование и рост зародышей
Флуктуации возникают где угодно	Рост зародыша происходит в выделенной зоне (поверхность границы зёрен)
$\frac{\partial^2 C}{\partial C^2} = 0$	$0 = \frac{\partial G}{\partial C} \leftarrow C \frac{\partial^2 C}{\partial C^2}$
$D < 0$, против градиента концентрации восходящая диффузия	$D > 0$, по градиенту концентрации нисходящая диффузия
Малые флуктуации состава	Зародыш новой фазы
Состав фазы меняется	$C_a, C_b = const$
Размытая граница	Резкая граница
Когерентная граница (сопряжение двух кристаллических решёток)	±
±	Наступает термодинамическое равновесие
Закономерная пространственная ориентация фаз	±

Термодинамика процессов распада, роль упругой энергии

Энергетика процесса спинодального распада определяется вкладом 3х компонент: объемной, поверхностной и упругой: $G = G^{об} + G^{пов} + G^{упр}$. Чем больше удельное изменение параметров решётки, с изменением состава $= 1/a \cdot da/dc$ и чем жестче решётка (жесткость решётки определяется E — модулем Юнга(!)), тем больше вклад $G^{упр}$. Энергия, выделяющаяся при распаде тратится на деформацию, поскольку изменяются параметры кристаллической решётки. Поэтому в реальности вместо химической спинодали наблюдается когерентная, которая лежит ниже по температуре.



Старение материалов:

- Естественное старение: при комнатной температуре, рост выделений внутри зерен.
- Искусственное старение: при комнатной температуре, рост выделений по границам зерен.

На примере дюралюминия (Сплав Cu-Al)

Только что приготовленный дюралюминий мягкий. При выдерживании его в течение некоторого времени (старении) происходит распад твёрдого раствора (спинодальный), при этом возникают мелкие области ($20-50 \text{ \AA}$ неоднородности), обогащенные медью — зоны Гинье-Престона (зоны Гинье-Престона — см. следующий

билет) (медь собирается в кластеры — дискообразные частицы). Медь локализуется в дискообразных кластерах, решетка деформируется. Попадание внутрь купола (см. ниже) — появление зон Гинье-Престона. Состав неравновесных кластеров может сильно различаться. При остаривании материал упрочняется. Сплав Cu-Al обладает повышенной твердостью и тягучестью (после остаривания).

Реальная морфология:

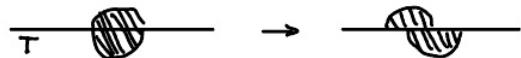


1.21 Зональная стадия распада твердого раствора; термодинамика и кинетика образования и строение зон Гинье-Престона. Природа упрочнения при дисперсионном старении.

Остаривание — (в билете 20) выдерживание материала при невысокой температурах длительное время.

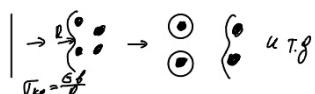
2 основных механизма:

1. **химический:** при пластической деформации некоторые дислокации проходят через область зоны, поэтому будет осуществляться пластический сдвиг



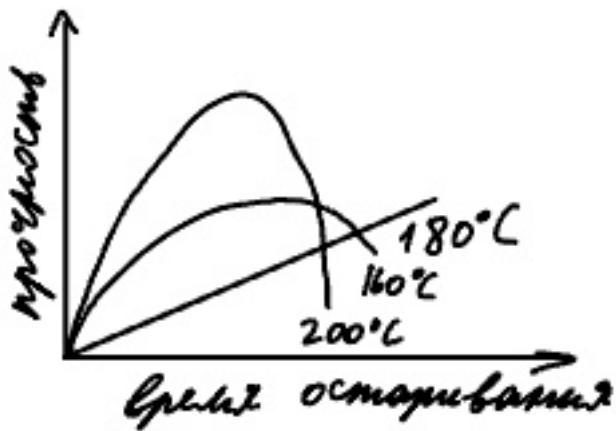
(дислокация «перерезает» зону)

2. **механизм Орована:** образуется скопление частиц — дислокация подходит к частицам и «выгибается».



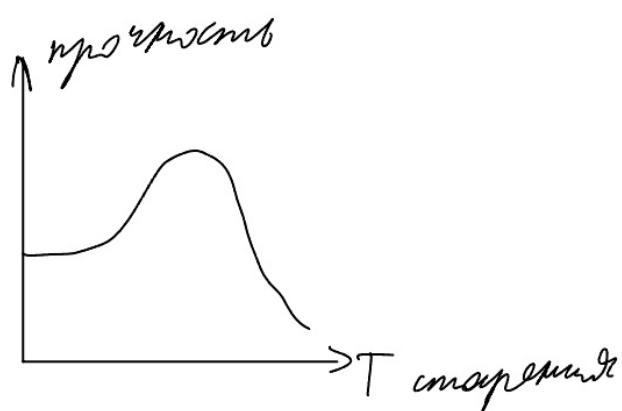
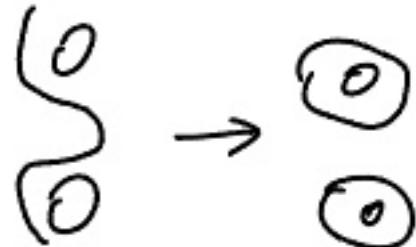
При высоких температурах зависимость проходит через максимум. Увеличивается количество частиц, они разрастаются и коалируют.

При высоких температурах механизм Орована вносит незначительный вклад, так как при коалировании уменьшается общее число частиц.



Упрочнение:

- Выделяющаяся частица имеет больший модуль сдвига, что останавливает дислокации.
- Количество выделений (механизм Орована). Дислокации могут остановиться и могут пройти (схема на рисунке).
- Зависимость от температуры: сначала прочность растет (выделение мелких частиц), затем снижается (рост включений).



1.22 Принципы химико–термической обработки. Виды термомеханической обработки материалов.

Типичные виды химико–термической обработки

1. цементация (закалка) (насыщение стали углеродом на поверхности). Закалка осуществляется в разной степени в зависимости от содержания углерода.
2. азотирование (насыщение стали азотом).
3. цеонирование (азотирование и цементация).

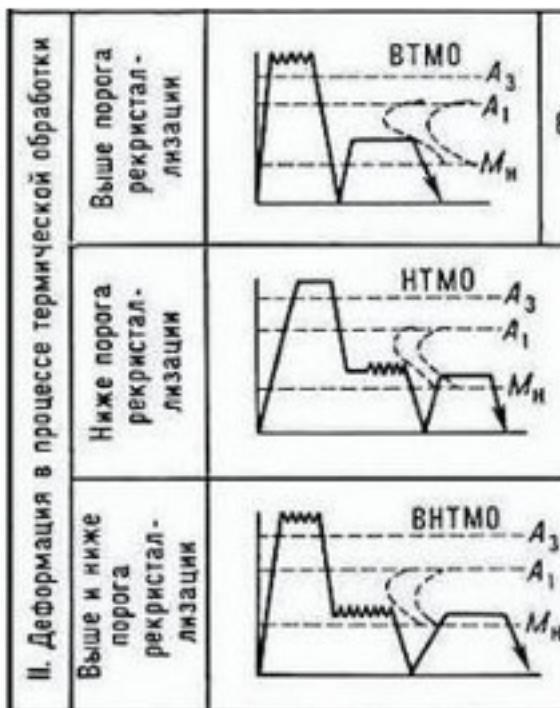
Механизм ХТО

1. выдерживание стальной болванки в соответствующей атмосфере.
2. Происходит насыщение металла углеродом и (или) азотом — диффузионный процесс.
3. В результате получаем градиентный материал (состав разный на разном расстоянии от поверхности).

Виды термомеханической обработки (ТМО) материалов

1. ВТМО — высокотемпературная ($T > T_{\text{аустект}}$) — непосредственно после горячего воздействия давлением (пока аустенитная структура), проводится закалка. Не успевает произойти рекристаллизация.
 - *Наклён* — упрочнение металлов и сплавов в процессе пластической деформации при температуре ниже температуры рекристаллизации.
 - *Штамповкой* — способ изготовления деталей давлением при металлических формах, очертания которых соответствуют очертаниям изготавляемых деталей.
 - *Прокаткой* — обработка давлением путем пропускания его в горячем или в холодном состоянии между вращающимися валками прокатного станка.
 - *Рекристаллизация* — процесс образования и роста (или только роста) одних кристаллических зёрен (кристаллитов) поликристалла за счёт других.

Наклеп и упрочнение не устраняются и остаются в материале после его остывания. Чем короче промежуток времени между окончанием всех процессов, когда сталь имеет высокую температуру, тем больше сохранится дислокаций и тем больше будет эффект упрочнения.



2. НТМО — низкотемпературная ($T < T_{\text{эвтект}}$) При низкотемпературной термомеханической обработке металл нагревают до аустенитного состояния, затем охлаждают ниже температуры рекристаллизации, но выше температуры начала мартенситного превращения, то есть температурный интервал пластической деформации составляет примерно 400–600 °C.

Деформация, как и при ВТМО, вызывает наклеп аустенита, рекристаллизации же в этих условиях не происходит. Затем проводится закалка: образуется мартенсит, который, как и в предыдущем способе, наследует дислокации, а значит и упрочнение, полученное при низкотемпературной термомеханической обработке стали. Здесь устранен недостаток первого способа, так как рекристаллизация практически отсутствует и потому наиболее полно используется эффект упрочнения от наклена.

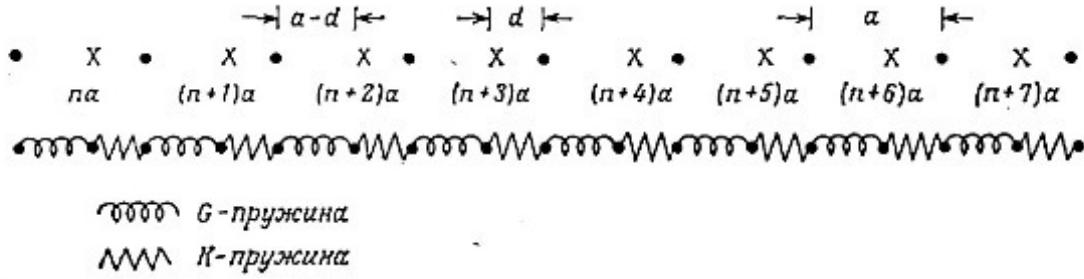
ТМО позволяет получить достаточно высокую прочность ($\sigma_b = 2200 - 3000$ МПа) при хорошей пластичности и вязкости ($\delta = 6 - 8\%$, $\psi = 50 - 60\%$).

Глава 2

Физика материалов

2.1 Колебания атомов одномерной двухатомной решетки. Акустические и оптические фононы, температура Дебая. Колебания атомов трехмерной решетки (зоны Бриллюэна, законы дисперсии и поверхности постоянной частоты).

Рассмотрим одномерную решетку Бравэ с двумя ионами в элементарной ячейке, равновесные положения которых есть na и $na + d$. Считаем, что оба иона идентичны, но что $d \leq a/2$, поэтому сила между соседними ионами зависит от того, равно ли это расстояние между ними d или же $a - d$.



Предположим, что взаимодействуют ближайшие соседи, причем сила взаимодействия больше для пар с расстоянием d , чем для пар с расстоянием $a - d$. Гармоническую потенциальную энергию можно представить в виде:

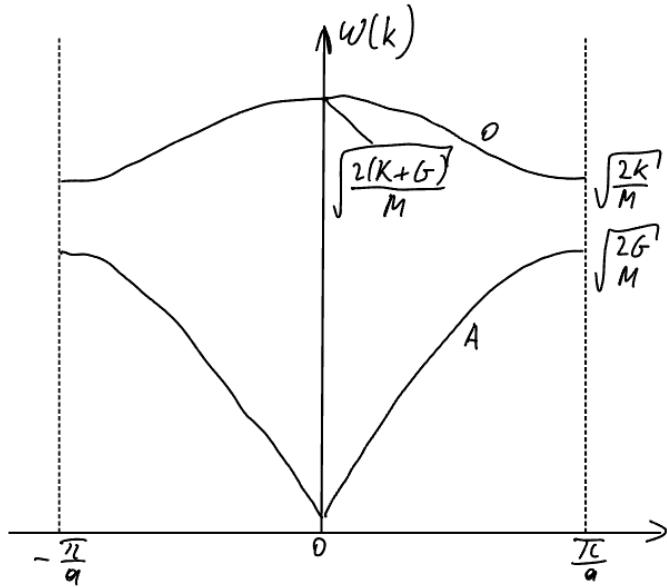
$$U^{\text{harm}} = \frac{K}{2} \sum [u_1(na) - u_2(na)]^2 + \frac{G}{2} \sum [u_2(na) - u_1([n+1]a)]^2 \quad (2.1)$$

где через $u_1(na)$ обозначено смещение иона, совершающего колебания вблизи узла na , а через $u_2(na)$ — смещение иона, колеблющегося вблизи узла $na+d$. Положим $K \geq G$. Уравнения движения

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_1(na) &= -\frac{\partial U^{\text{harm}}}{\partial u_1(na)} = -K [u_1(na) - u_2(na)] - G [u_1(na) - u_2([n-1]a)] \\ M\ddot{u}_2(na) &= -\frac{\partial U^{\text{harm}}}{\partial u_2(na)} = -K [u_2(na) - u_1(na)] - G [u_2(na) - u_1([n+1]a)] \end{aligned} \quad (2.2)$$

Ищем решение, представляющее собой волну с частотой ω и волновым вектором k : $u_1(na) = \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)}$ и $u_2(na) = \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)}$. Здесь ϵ_1 и ϵ_2 — требующие определения постоянные, отношение которых дает относительные амплитуды и фазу колебаний ионов в каждой элементарной ячейке. Как и в моноатомном случае, периодическое граничное условие Борна-Кармана приводит к N неэквивалентным значениям k .

$$k = \frac{1\pi}{a} \frac{n}{N} \quad (2.3)$$



Границное условие (формулировка для линейной цепочки): соединяем два противоположных конца цепочки с помощью одной же «пружинки», как и те, которые соединяют ионы внутри цепочки.

Из полученных выше выражений получим

$$\begin{aligned} [M\omega^2 - (K + G)]\varepsilon_1 + (K + Ge^{-ika})\varepsilon_2 &= 0 \\ [M\omega^2 - (K + G)]\varepsilon_2 + (K + Ge^{ika})\varepsilon_1 &= 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Данная пара уравнений имеет решение, если обращается в нуль детерминант, составленный из их коэффициентов, т.е. если выполняется условие

$$[M\omega^2 - (K + G)]^2 = |K + Ge^{-ika}|^2 = K^2 + G^2 + 2KG \cos ka \quad (2.5)$$

Данное уравнение выполняется для двух положительных значений ω , для которых

$$\omega^2 = \frac{K + G}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos ka} \quad (2.6)$$

Причем $\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = \mp \frac{K + Ge^{-ika}}{|K + Ge^{-ika}|}$

Для каждого из N значений k имеется, таким образом, 2 решения, что дает в целом $2N$ нормальных мод, ка и должно быть при $2N$ степенях свободы (по 2 иона в каждой из N элементарных ячеек). Две кривые зависимости ω от k носят название 2 ветвей закона дисперсии.

Частота первой ветви ω пропорциональна k при малых k , а на краях зоны Бриллюэна кривая становится почти горизонтальной. Эту ветвь называют акустической, так как ее закон дисперсии при малых k имеет форму $\omega = ck$,

характерную для звуковых волн. Вторая ветвь начинается при $k = 0$ от значения $\omega = \sqrt{2(K + G)/M}$ и опускается вниз с ростом k , достигая значения $\sqrt{2K/M}$ на границе зоны. Ее называют оптической ветвью, поскольку длинноволновые оптические моды в ионных кристаллах могут взаимодействовать с электромагнитным излучением.

Модель Дебая

- Колебания решетки рассматриваются как фононный газ
- Закон дисперсии фононов предполагается изотропным и линейным, то есть $\omega = u_s k$ ($u_s = \text{const}$)
- Первая зона Бриллюэна, которая представляет собой многогранник в пространстве волновых векторов, заменяется на шар того же объема. Его радиус q_0 находится из условия равенства объемов: $V_{\text{з.Бр.}} = \frac{4\pi q_0^3}{3} \Rightarrow q_0 = \left(\frac{6\pi^2}{V_{\text{яч.}}}\right)^{1/3}$
- $0 < \omega < \omega_{max} = \omega_D$

Для сплошной среды число состояний на элемент dk :

$$\frac{V4\pi k^3 dk}{(2\pi)^3} \quad (2.7)$$

При $T \gg \Theta_D$, где $\Theta_D = \hbar\omega_D$, температура Дебая, все осцилляторы допускают классическое описание.

$T \ll \Theta_D$, всегда найдутся осцилляторы, чье движение можно описывать классическими формулами, но остальные требуется описать квантово.

2.2 Спектральная плотность фононов. Модели Эйнштейна и Дебая. Теплоемкость кристаллической решетки.

Спектральная плотность колебаний решетки (фононов) или плотность фононных состояний: $v(\omega) = \frac{1}{V} \frac{dN_\omega}{d\omega}$, где dN_ω — число фононных мод с частотами, лежащими в интервале $(\omega; \omega + d\omega)$.

Спектральная плотность удовлетворяет условию нормировки $\int_0^\infty v(\omega)d\omega = \frac{3N}{V_{\text{ячейки}}}$ (здесь N — число атомов в элементарной ячейке $3D$ кристалла, то есть $3N$ — число степеней свободы). Зная законы дисперсии фононных ветвей, можно определить плотность фононных состояний как $v(\omega) = \sum_p \int \frac{d^3\bar{k}}{(2\pi)^2} \delta(\omega - \omega_p(\bar{k}))$, где $\delta(\omega)$ — дельта-функция Дирака. Интеграл взят по первой зоне Бриллюэна.

$$\delta(\omega) = \begin{cases} +\infty, x = 0 \\ 0, x \neq 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

Модель Эйнштейна

- Атомы в решетке ведут себя как $3N_a$ гармонических осцилляторов, не взаимодействуя друг с другом; Частота колебаний всех осцилляторов одинакова: $\omega_p(\bar{k}) = \omega_E = const$. Модель качественно описывает оптические ветви, для которых $\omega_{\min} < \omega_p(\bar{k}) < \omega_{\max}$, причем ω_{\min} и ω_{\max} — величины одного порядка
- Для акустических ветвей модель Эйнштейна в области низких температур неприменима
- $\hbar\omega_p(\bar{k}) \geq T$. Так как $\omega_E = const$, $\nu(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_E)$

Теплоемкость:

Вычислим среднюю энергию осциллятора с частотой ω_i и полную энергию набора осцилляторов, так как фононы подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна.

$$\bar{\varepsilon}_l = \frac{\hbar\omega_i}{e^{\hbar\omega_i/T} - 1}; \quad E_{\text{полн}} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hbar\omega_i}{e^{\hbar\omega_i/T} - 1} \quad (2.9)$$

Среднее число заполнения: $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{T}} - 1}$

$$E_{\text{полн}} = \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega_i}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{T}} - 1} v(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_{\max}=\omega_E} \frac{\hbar\omega_i * 3N}{e^{\frac{\hbar\omega_i}{T}} - 1} \delta(\omega - \omega_E) d\omega = \frac{\hbar\omega_E * 3N}{e^{\hbar\omega_i/T} - 1} \quad (2.10)$$

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\hbar\omega_E \cdot 3N - e^{\frac{\hbar\omega_E}{T}} \cdot \frac{\hbar\omega_E}{T^2}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega_E}{T}} - 1\right)^2} \quad (2.11)$$

Модель Дебая

- Колебания решетки рассматриваются как фононный газ.
- Закон дисперсии фононов предполагается изотропным и линейным, то есть $\omega = u_s k$, ($u_s = const$).
- Первая зона Бриллюэна, которая представляет собой многогранник в пространстве волновых векторов, заменяется на шар того же объема. Его радиус q_0 находится из условия равенства объемов: $V_{\text{з.Бр.}} = \frac{4\pi q_0^3}{3} \Rightarrow q_0 = \left(\frac{6\pi^2}{V_{\text{яч.}}}\right)^{1/3}$
- $0 < \omega < \omega_{\max} = \omega_D$

Для сплошной среды число состояний на элемент $dk = \frac{V4\pi k^3 dk}{(2\pi)^3}$. Усредним $\omega = \bar{u}_s k$; $\frac{3}{\bar{u}_s^3} = \frac{1}{\bar{u}_e^3} + \frac{2}{\bar{u}_t^3}$, ($\omega_t = \bar{u}_t k$, $\omega_c = \bar{u}_c$ — продольные и поперечные волны). Тогда $\frac{V4\pi k^3 dk}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{V3\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \bar{u}_s^3} \rightarrow \nu(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{\bar{u}_s^3} \omega \leq \omega_D \\ 0, \quad \omega > \omega_D \end{cases}$

Теплоёмкость

$$C_v = \int_0^{\omega_D} \frac{(-1)e^{\hbar\omega/T} \cdot \left(\frac{1}{T^2}\right) * (\hbar\omega)^2}{(e^{\hbar\omega/T} - 1)^2} v(\omega) d\omega, \quad (2.12)$$

Новая переменная $\begin{cases} \varkappa = \frac{\hbar\omega}{T} & | \omega \rightarrow 0 \quad \varkappa \rightarrow 0 \\ d\varkappa = \frac{\hbar}{T} d\omega & | \omega \rightarrow \omega_D \quad \varkappa \rightarrow \frac{\Theta_D}{T} \end{cases}$ ($\Theta_D = \omega_D \hbar$)

Тогда

$$\begin{aligned} C_v &= \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^\chi \chi^2}{(e^\chi - 1)^2} * \frac{3T^2 \varkappa^2}{2\pi^2 \bar{u}_s^2 \hbar^2} * \frac{T}{\hbar} d\varkappa = \frac{3T^3}{2\pi^2 \bar{u}^3 \hbar^3} \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^\chi \varkappa^4}{(e^\chi - 1)^2} = \begin{pmatrix} \omega_D = \bar{u}_s k_D \\ \bar{u}_s = b \omega_D / k_D \end{pmatrix} = \\ &= \frac{3}{2\pi^2} * \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 k_D^3 \begin{cases} T \ll \theta_D \Rightarrow \theta_D/T \rightarrow \infty \Rightarrow \int_0^\infty \varkappa^2 d\varkappa = \frac{4\pi^2}{15} \\ T \gg \theta_D \Rightarrow \int_0^{\theta_D/T} e^\chi \varkappa^2 d\varkappa \approx \int_0^{\theta_D/T} \varkappa^2 d\varkappa = \frac{1}{3} \left(\frac{\theta_D}{T}\right)^3 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$C_v = \begin{cases} T \ll \theta_D \Rightarrow \frac{3}{2\pi} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 k_D^3 \frac{4}{15} \pi^2 = \frac{2\pi}{5} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 k_D^3 \\ T \gg \theta_D \Rightarrow \frac{k_D^3}{2\pi} \Rightarrow \langle \int_0^{\omega_D} v(\omega) d\omega = 3N \rangle \Rightarrow \frac{3N\pi^2}{2\pi^2} = 9N \end{cases} \quad (2.14)$$

2.3 Приближение почти свободных электронов. Поверхности Ферми металлов. Метод Харрисона.



Применим для металлов; Электроны ведут себя почти как свободные; $U(r)$ мало (значительно меньше кинетической энергии); Используются методы теории возмущений

Рассматривается движение электронов в линейной цепочке прямоугольных потенциальных ям шириной a , отделённых барьераами толщиной b и высотой U_0 . Длина цепочки L , период $a + b$. Решение уравнения Шредингера $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$ разбивается на две части

1. $U = 0$, волновая функция представляется в виде $\psi_1(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}$ (первое слагаемое - прямая волна, второе - отраженная от барьера)
2. $U = U_0$, волновая функция: $\psi_2(x) = Ce^{\beta x} + Be^{-\beta x}$. При этом $\alpha = \sqrt{\frac{2me}{\hbar^2}}$; $\beta = \sqrt{\frac{2me(U_0 - E)}{\hbar^2}}$.

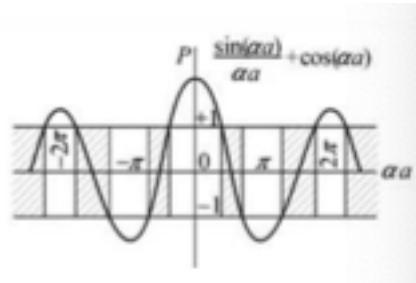
Подставляя в одномерную функцию Блоха $\psi(x) = U(x) \exp(ikx)$

$$U_1(x) = Ae^{(\alpha - ik)x} + Be^{-(\alpha + ik)x}; \quad U_2(x) = Ce^{(\beta - ik)x} + Be^{-(\beta + ik)x}.$$

Определим A, B, C, D из непрерывности $U(x)$ и $U'(x)$ в местах скачка потенциала. Т.е. для $x = 0$

$$U_1(0) = U_2(0); \left(\frac{\partial U_1}{\partial x} \right)_{x=0} = \left(\frac{\partial U_2}{\partial x} \right)_{x=0}$$

Также воспользуемся периодичностью $U(x)$: $U_1(a) = U_2(-b)$; $\left(\frac{\partial U_1}{\partial x}\right)_{x=a} = \left(\frac{\partial U_2}{\partial x}\right)_{x=-b}$



Подставляя в уравнения для $U_i(x)$, получим

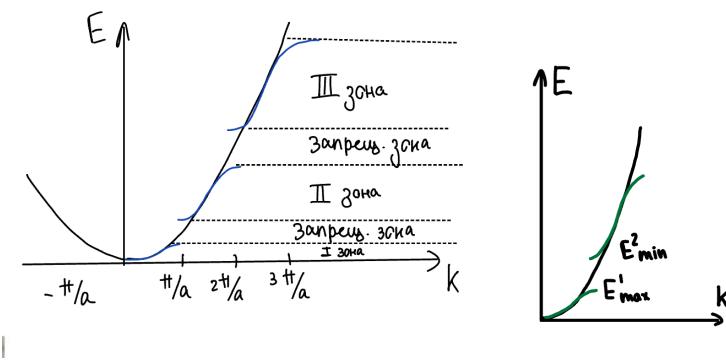
$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{sh}(\beta b) \sin(\alpha a) + \operatorname{ch}(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos k(a+b)$$

Рассмотрим предельный случай $b \rightarrow 0, U_0 \rightarrow \infty$ при $bU_0 = const = \frac{\hbar^2}{ma}P$. $P = \frac{ma}{\hbar^2 b v_0}$ (P – прозрачность барьера). Тогда: $P \frac{\sin(\alpha a)}{ad} + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$.

Так как $-1 < \cos x < 1$, левая часть уравнения от -1 до 1 . Это и определяет область разрешённых состояний.

Таким образом, при построении зон Бриллюэна в приближении ПСЭ рассматривается чередование запрещенных и разрешенных зон. При этом

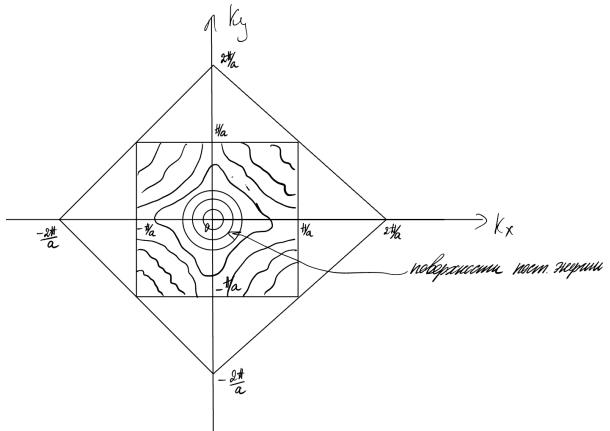
- на границе $\frac{\partial E}{\partial k} = 0$



- размеры зон одинаковы, поэтому число состояний в зонах конечно и одинаково
 - в расширенной схеме каждая зона повторяется при трансляции на \bar{a} : схема периодична, первая зона — приведенная зонная схема

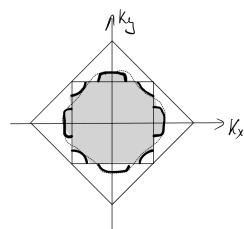
Заполнение зон Бриллюэна электронами в металлах:

- Двухкомпонентная квадратичная решётка: 1-я зона — куб (квадрат), 2-я зона — призма (4 треугольника)
- $E_{\min}^2 < E_{\max}^1$ — металлы Mg, Be (двуихзонные). Проводимость: электронная по второй зоне, дырочная по первой (вторая зона заполняется после первой).

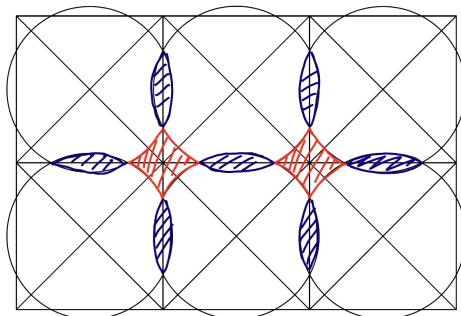


Поверхность Ферми — поверхность с энергией Ферми, отделяющая пустые состояния от занятых.

- Металлы 1-й группы. Na, Li, K, Au, Ag, Cu: первая зона заполнена на половину:
 $R^2\pi = \frac{\pi^2}{2a^2} \Rightarrow R^2 = \frac{\pi}{2a^2} \Rightarrow R = \frac{\pi}{a\sqrt{2\pi}}$, $K_F = \frac{\pi}{a\sqrt{2\pi}}$
- Металлы 2-й группы. Mg, Be, Zn, Cd: $R^2\pi = \frac{4\pi^2}{a^2} \Rightarrow R^2 = \frac{4\pi}{a^2} \Rightarrow K_F = \frac{2\sqrt{\pi}}{a}$



Метод Харрисона построения поверхностей Ферми металлов



1. Построение мозаики зон Бриллюэна
 2. Расчёт размеров и построение сфер Ферми с центрами из каждого элемента мозаики
 3. Корректировка границ сфер (пересечение с границами зон под прямым углом)
 4. Классификация полученных объёмов по зонам Бриллюэна (вогнутые поверхности — к сферам $k + 1$ -й зоне (дырочные); выпуклые — электронные в k -й зоне)

2.4 Предположения и следствия метода сильной связи. Заполнение энергетических зон электронами (металлы, полупроводники и диэлектрики, полуметаллы).

Метод сильной связи: электрон в твёрдом теле ведёт себя так же, как в изолированном атоме.

$$-n = 1, 2, 3 \dots \left(H : E = -\frac{R_y}{n^2} \right) (E = E(n, l) \text{ в отсутствие полей})$$

$$-l = 0, 1, 2 \dots n - 1 \quad (M_e = \hbar\sqrt{l(l+1)})$$

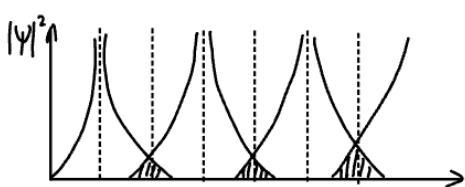
$-m = -l \dots 0 \dots l$ (($2l + 1$) значений)

$-s = \pm 1(1/2)$ (s -подуровень — вырожден, p — трёхкратно вырожден)

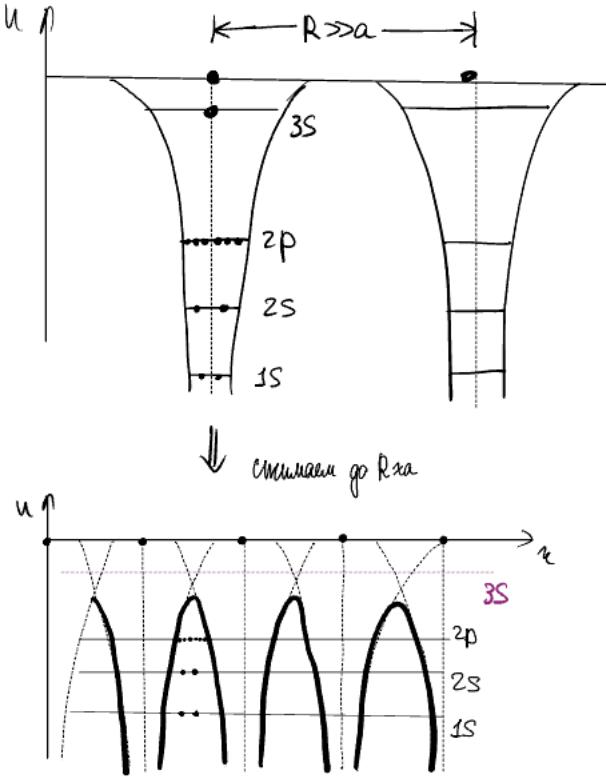
Рассмотрим на примере атома натрия.

При переходе от набора изолированных атомов к кристаллу 3s-подуровень оказывается выше барьера. Поэтому движение электронов этого подуровня по всему кристаллу не ограничено. К снижению потенциальных барьеров привело перекрытие волновых функций.

Уравнение Шрёдингера для изолированного атома с номером g будет принимать вид $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_g(\bar{r}) \right\} \psi_g(\bar{r}) = E_a \psi_g(\bar{r})$ (\bar{R}_g — радиус-вектор узла решётки).



В качестве предполагаемого вида $\psi(\bar{r})$ выберем линейную комбинацию $\sum_g a_g \psi_g$.



Тогда $\psi(\bar{r}) = \sum_g a_g \psi_g = \sum_g e^{ik\vec{R}_g} \psi_g (\bar{r} - \vec{R}_g)$. При этом около узла g $\psi(\bar{r}) \approx e^{ik\vec{R}_g} \psi_g (\bar{r} - \vec{R}_g)$

$$\sum_g \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_g(\bar{r}) \right] + [U(\bar{r}) - U_g(\bar{r})] - E \right\} e^{ik\vec{R}_g} \psi_g = 0 \quad (\text{вид, чтобы был известный гамельтониан} \Rightarrow \sum_g \{(E_a - E) + W(\bar{r})\} e^{ik\vec{R}_g} \psi_g = 0).$$

$\int \psi_g^* \psi_g d\bar{r} = S(R_g - R_g')$ — интеграл перекрытия

$\int \psi_g^* w(\bar{r}) \psi_g d\bar{r} = A(R_g - R_g')$ — обменный интеграл

Тогда $\sum_g e^{ik\vec{R}_g} \left\{ (E_a - E) S(\vec{R}_g - \vec{R}_g') + A(\vec{R}_g - \vec{R}_g') \right\} = 0$.

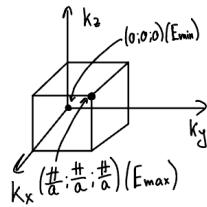
И, вводя $\bar{q} = \vec{R}_g - \vec{R}_g' : (E_a - E) \sum_g e^{ik\bar{q}} S(\bar{q}) + \sum_g A(\bar{q}) e^{ik\bar{q}} = 0$,

где E периодичная по волновому вектору добавка: $E = E_a + \frac{\sum_g A(\bar{q}) e^{ik\bar{q}}}{\sum_g S(\bar{q}) e^{ik\bar{q}}}$.

В суммы входят сначала слагаемые I-го типа (ближайшие соседа, т.е. I сфера), затем вторая сфера и так далее. В числителе учитывается перекрывание волновых функций соседей, в знаменателе для простоты перекрывание не учитывается:

$$\sum_g S(\bar{q}) e^{ik\bar{q}} \int \psi_g^* \psi_g d\bar{r} + \dots = 1 \quad (\text{остальные слагаемые не учитываются})$$

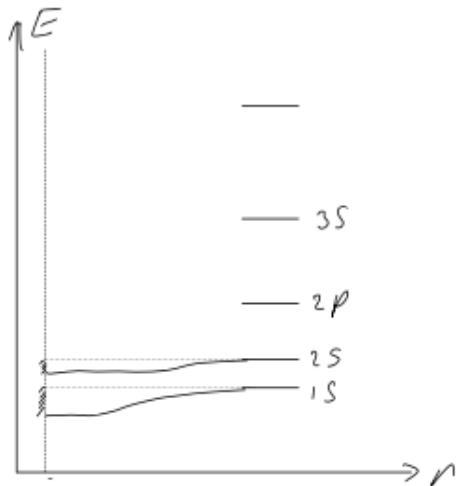
$\sum_g A(\bar{q}) e^{ik\bar{q}} \int_{\bar{q}=0}^{\bar{q}=0} \psi_g^* w(\bar{r}) \psi_g d\bar{r} * 1 + A_1 \sum_{ik} e^{i\bar{k}\bar{q}}$ (второе слагаемое отвечает за соседей из первой координационной сферы)



Конечное уравнение для $E(\bar{k}) = E_a + \underbrace{C}_{<0} + A_1 \sum e^{i\bar{k}\bar{q}}$. В простой кубической решётке $E(\bar{k}) = E_a + C + A_1 (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a}) = E_a + C + 2A_1 (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$

Следствия МСС:

- При образовании кристаллов из изолированных атомов каждый атомный уровень движется вниз и расширяется \Rightarrow образуются зоны.



- Каждая зона ограничена E_{\min} и E_{\max} .

$$E_{\min} = E_a + C - 6|A| \quad (C < 0)$$

$$E_{\max} = E_a + C + 6|A|.$$

Таким образом, ширина зоны $12 A_1$ ($\Delta E = 12 |A_1|$)

- При движении по энергии вверх (при переходе от нижних уровней к верхним) ширина разрешённых зон растёт (внешние оболочки перекрываются сильнее, чем внутренние). При этом ширина запрещенных зон уменьшается.
- Разрешённые и запрещенные зоны чередуются, возможно перекрытие зон.

5. $E(k)$ — чётная по k .

6. Качественное изменение внешних условий

$$T \uparrow \rightarrow a \uparrow \rightarrow |A_1| \downarrow \rightarrow \Delta E \downarrow \rightarrow E_{g\uparrow}$$

$$P \uparrow \rightarrow a \downarrow \rightarrow |A_1| \uparrow \rightarrow \Delta E \uparrow \rightarrow E_{g\downarrow} \downarrow$$

7. Вырождение может частично или полностью сниматься при образовании кристалла из атомов.

8. Заполнение энергетических зон.

С ростом энергии растёт ширина разрешённых зон, а ширина запрещённых зон уменьшается. Из-за высокого положения уровней в какой-то момент возможно перекрывание. При образовании кристаллов вырождение может частично или даже полностью сниматься. Отсюда качественное понимание, как меняются свойства при изменении внешних условий:

$$T \uparrow \rightarrow a \uparrow \rightarrow |A_1| \downarrow \rightarrow \Delta E \downarrow \rightarrow E_{g\uparrow}$$

$$P \uparrow \rightarrow a \downarrow \rightarrow |A_1| \uparrow \rightarrow \Delta E \uparrow \rightarrow E_{g\downarrow} \downarrow$$

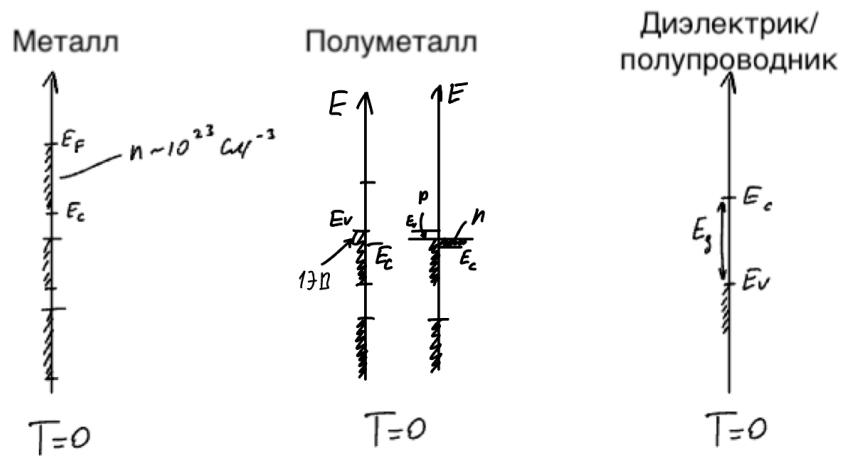
Заполнение энергетических зон: металлы, диэлектрики, полупроводники

N изолированных атомов	Кристалл из N атомов
$N * 2(2l + 1)$	$2N(2l + 1)$ (число состояний сохраняется)
Число уровней сохраняется + сохраняется степень заполнения состояний	

Если в системе из N атомов уровень был заполнен наполовину, то и в кристалле зона будет заполнена наполовину.

Целиком заполненная зона не даёт вклада в проводимость.

Классификация твёрдых тел



Полупроводник отличается от диэлектрика только размером запрещённой зоны (у диэлектрика $E_g > 5\text{эВ}$, у полупроводника $E_g < 5\text{эВ}$).

2.5 Волновая функция электрона в кристалле.

Теорема Блоха. Квазимпульс электрона в кристалле. Зоны Бриллюэна.

Для одного электрона, движущегося в кристалле, уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\bar{r}) \right\} \psi(\bar{r}) = E\psi(\bar{r})$$

$$U(\bar{r} + \bar{a}_n) = U(\bar{r}), \quad \bar{a}_n = n_1 \bar{a}_1 + n_2 \bar{a}_2 + n_3 \bar{a}_3$$

U — потенциал кристаллической решётки, объединяет в себе взаимодействие с решёткой и взаимодействие с другими электронами, \bar{a}_n — период кристаллической решётки.

Теорема Блоха: волновая функция электрона в поле периодичного потенциала (в частности в кристалле) может быть представлена в виде произведения плоской волны и функции, обладающей той же периодичностью, что и кристаллическая решётка.

$$\psi_{nk} = e^{ikr} U_{nk}(r), \quad U_{nk}(\bar{r} + \bar{a}) = U_{nk}(\bar{r}) — \text{блоховская функция}$$

\bar{a} — период кристаллической решётки, n — номер зоны.

$\psi(\bar{r} + \bar{a}) = e^{i\bar{k}\bar{a}}\psi(\bar{r})$ — условие трансляционной симметрии для волновой функции в кристалле.

Квазимпульс в кристалле

$$\begin{aligned} \text{Скорость свободного электрона } \langle \bar{V} \rangle &= \int_V A e^{-i\bar{k}\bar{r}} \left(-i \frac{\hbar}{m} \nabla \right) A e^{i\bar{k}\bar{r}} d\bar{r} = \\ &= \frac{-i\hbar}{m} (ik) \underbrace{\int_V A e^{-i\bar{k}\bar{r}} A e^{i\bar{k}\bar{r}} d\bar{r}}_1 = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \end{aligned}$$

р— импульс.

$$\begin{aligned} \text{Скорость электрона в кристалле } \langle \bar{V} \rangle &= \int_V \psi^*(\bar{r}) \hat{V} \psi(\bar{r}) d\bar{r} \\ \langle \bar{V} \rangle &= \int u_k^*(\bar{r}) e^{-i\bar{k}\bar{r}} \left(-i \frac{\hbar}{m} \nabla \right) U_k(\bar{r}) e^{i\bar{k}\bar{r}} d\bar{r} = - \left(i \frac{\hbar}{m} \right) (ik) \int u_k^*(\bar{r}) e^{-i\bar{k}\bar{r}} u_k(\bar{r}) e^{i\bar{k}\bar{r}} d\bar{r} + \\ &+ \left(-i \frac{\hbar}{m} \right) \int u_k^*(\bar{r}) e^{-i\bar{k}\bar{r}} e^{i\bar{k}\bar{r}} \nabla u_k(\bar{r}) d\bar{r} = \frac{\hbar k}{m} - i \frac{\hbar}{m} \int u_k^*(\bar{r}) \nabla u_k(\bar{r}) d\bar{r} \neq \frac{p}{m} \end{aligned}$$

Для описания поведения электрона в кристалле вводится квазимпульс P такой, что $V = \frac{dE}{dP}$. Вместе с квазимпульсом вводится квазиволновой вектор $k = P/\hbar$. Далее квазимпульс будем обозначать p .

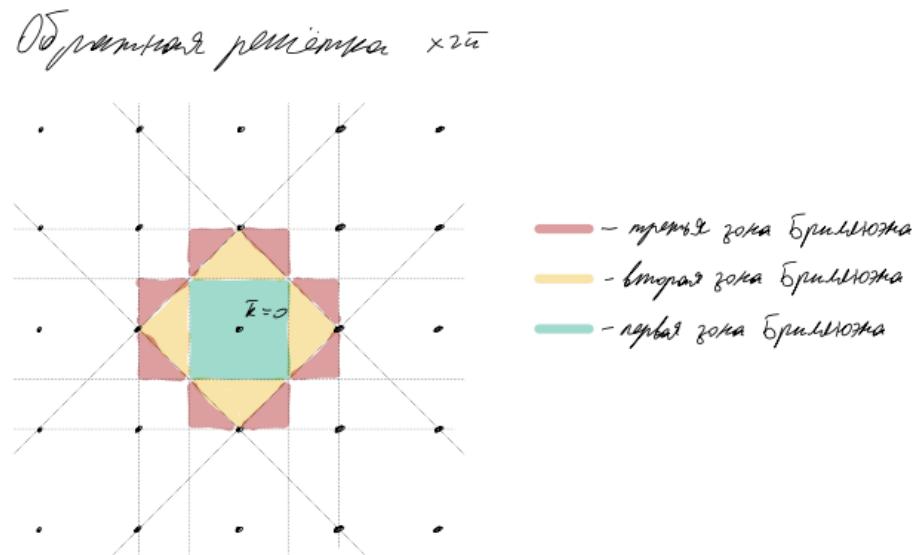
Свойства квазимульса:

1. $\frac{dp}{dt} = F = \nabla U$, причём F — внешняя сила.

2. При отсутствии внешних сил квазимпульс сохраняется.
3. Любое искажение периодичности решётки, приводящее к процессам рассеяния электронов на дефектах, можно представить как наложение локальной внешней силы.
4. Квазимпульс дискретен ($\Delta p = 2\pi\hbar/a$).
5. Квазимпульс изменяется в пределах зоны Бриллюэна (в то время как импульс свободного электрона может принимать значения $[0; +\infty)$)

Возьмём большой кристалл ($L \gg a$). Внутреннюю область разбиваем на блоки размером L_x, L_y, L_z . $\psi(x; y; z) = \psi(x + L_x; y; z) = \psi(x; y + L_y; z) = \psi(x; y; z + L_z)$
 $\psi(x + L_x) = \psi(x) \Rightarrow U_k(x + L_x)e^{ik_x(x+L_x)} = U_k(x)e^{ik_xx}$
Так как $e^{ik_x L_x} = 1$, то $k_x L_x = 2\pi n$ (n — целое). Из этого следует дискретность квазиволнового вектора, так как $p = \hbar k$, то и дискретность квазимпульса.

Зона Бриллюэна — отображение ячейки Вигнера-Зейтса в обратном пространстве. В приближении Блоха волновая функция электрона для периодического потенциала решетки полностью описывается ее поведением в 1 зоне Бриллюэна. 1я зона Бриллюэна содержит точку $k = 0$ (2я зона непосредственно прилегает к 1 и так далее); она может быть построена как объем, ограниченный плоскостями, которые отстоят на равные расстояния от рассматриваемого узла обратной решётки до соседних узлов. Для простой кубической решётки зона Бриллюэна — кубооктаэдр (14-гранник).



Число разрешённых (возможных) состояний квазиволнового вектора в зоне Бриллюэна конечно. Число разрешённых состояний в кристалле с параметром решётки a и периодичностью квазиволнового вектора $2\pi/L$: $\frac{2\pi}{a}/\frac{2\pi}{L} = 2L/a = 2N$. N — количество атомов в атомной решётке, 2 из-за возможных ориентаций спина.

Все зоны Бриллюэна имеют одинаковый объём.

2.6 Закон дисперсии, изоэнергетическая поверхность, эффективная масса электрона в кристалле

Закон дисперсии — зависимость энергии от квазимпульса в разрешенной зоне ($E(p)$).

Классификация:

1. Квадратичные ($E \sim p^2$)

- (a) Квадратичный изотропный $E = \frac{p^2}{2m^*}$ (изоэнергетическая поверхность — сфера, $R = \sqrt{2m^*E}$)
- (b) Квадратичный анизотропный $E = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + \frac{p_z^2}{2m_z}$ (изоэнергетическая поверхность — трёхосный эллипсоид. Для случая $m_x = m_y$ — эллипсоид вращения).

2. Неквадратичные ($E \not\sim p^2$, $m^* \neq const$ $m^* \uparrow\uparrow E$)

- (a) Закон Кейна (изотропный) $E(1 + \frac{E}{E_g}) = \frac{p^2}{2m^*}$ (изоэнергетическая поверхность вблизи экстремума — сфера $R = \sqrt{2m^*(0)E(1 + E/E_g)}$)
- (b) Закон дисперсии в методе сильной связи (для ПКР) $E = E_a + C + 2A_1(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$ (В окрестностях экстремумов выражается в квадратичный закон $E = |A_1|a^2k^2$, изоэнергетическая поверхность вблизи экстремума — сфера $R = \sqrt{E/(|A_1|a^2)}$)

Эффективная масса электрона

Введение эффективной массы электрона позволяет описывать его движение в кристалле при помощи законов механики. $\frac{1}{m^*} = \frac{d^2E}{dp^2}$. Вблизи минимума энергии $m^* > 0$, вблизи максимума энергии $m^* < 0$.

В трёхмерном случае m^* — тензор, который можно диагонализировать правильным выбором точки отсчёта.

$$\widetilde{m^*}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial p_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x \partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x \partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_y \partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y \partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_z \partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z \partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z^2} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_3^{-1} \end{pmatrix}$$

$$\bar{F}_{\text{внеш}} = \widetilde{m^*} \bar{a}$$

2.7 $k \cdot p$ -метод. Энергетический спектр электрона в однозонном приближении. Правила сумм. Взаимодействие энергетических зон

$k \cdot p$ -метод.

Методы расчёта «из первых принципов» не обладают достаточной точностью для расчёта энергетических зон узкощелевых полупроводников так как:

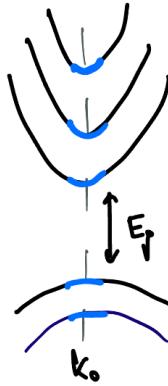
1. E_g в данных материалах может быть $< 0,1\text{эВ}$ (или 0эВ)
2. Результат получается в численном виде (таблица с числами в пределах зоны Бриллюэна). В УЩПП необходимо знать закон дисперсии в окрестности экстремумов зон ($E_c(k)$ и $E_v(k)$) в аналитическом виде.

Преимущество $k \cdot p$ -метода — при расчёте используются экспериментальные данные, а в результате получается аналитический вид закона дисперсии.

Предположения:

- $\psi_{nk_0}(\bar{r})$ — волновые функции в экстремумах зон
- $E_n(\bar{k}_0)$ — энергия краёв зон
- Матричные элементы оператора импульса (из эксперимента)

То есть известны решения уравнения Шрёдингера $\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\bar{r}) \right\} \psi_{nk_0}(\bar{r}) = E_n(\bar{k}_0) \psi_{nk_0}(\bar{r})$. Можно найти $\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\bar{r}) \right\} \psi_{nk_0}(\bar{r}) = E_n(\bar{k}_0) \psi_{nk_0}(\bar{r})$ в малых окрестностях экстремумов зон k_0 . То есть можно найти законы дисперсии.



1. Переход от уравнения для ψ_{nk} к уравнению U_{nk} .

$$\begin{aligned}
 \psi_{nk}(\bar{r}) &= U_{nk}(\bar{r}) e^{i\bar{k}\bar{r}} \\
 \psi_{nk}(\bar{r}) &= U_{nk}(r) e^{i\bar{k}\bar{r}} \hat{p} \left(U_{nk} e^{i\bar{k}\bar{r}} \right) = e^{i\bar{k}\bar{r}} \hat{p} (U_{nk}) + U_{nk} \hat{p} \left(e^{i\bar{k}\bar{r}} \right) = e^{i\bar{k}\bar{r}} \hat{p} (U_{nk}) + \hbar k e^{i\bar{k}\bar{r}} U_{nk} = \\
 &= e^{i\bar{k}\bar{r}} (\hat{p} + \hbar \bar{k}) U_{nk} \\
 \hat{p} \left(\hat{p} \left(U_{nk} e^{i\bar{k}\bar{r}} \right) \right) &= \dots = e^{i\bar{k}\bar{r}} (\hat{p} + \hbar \bar{k})^2 U_{nk} \\
 \underbrace{\left\{ \frac{(\hat{p} + \hbar k)^2}{2m} + U(\bar{r}) \right\}}_{\hat{H}_k} U_{nk}(\bar{r}) &= E_n(\bar{k}) U_{nk}(\bar{r})
 \end{aligned}$$

$$\hat{\bar{p}} \xrightarrow{\psi_{nk} \rightarrow U_{nk}} (\hat{p} + \hbar k)$$

$$\left\{ \frac{(\hat{p} + \hbar k)^2}{2m} + U(\bar{r}) \right\} = \hat{\mu}_k$$

2. Выделение оператора \hat{H}_{k_0} и дополнительного возмущения зависящего от $(k - k_0)$

$$\hat{H}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \bar{k} \hat{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\bar{r})$$

$$\hat{H}_k = \hat{H}_{k_0} + \hat{V}$$

$$\hat{H}_k = \hat{H}_{k_0} + \frac{\hbar}{m} (\bar{k} - \hat{k}_0) \hat{p} + \frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k} - \bar{k}_0)$$

$$\hat{V} = \frac{\hbar}{m} (\bar{k} - \bar{k}_0) \hat{p} + \frac{\hbar^2}{2} (\bar{k} - \bar{k}_0)$$

\hat{V} — возмущение.

\hat{V} возрастает при удалении \bar{k} от \bar{k}_0 .

3. Применяем теорию возмущений. Разложение $U_{nk}(\bar{r})$ в ряд по известным $U_{nk_0}(\bar{r})$.

Подставляем в уравнение, умножаем на $U_{nk_0}^*$, интегрируем по элементарной ячейке. Переходим к системе уравнений относительно $C_{nn'}$

$$\begin{aligned} \sum_{n'} C_{nn'} \left[\int U_{nk_0}^* \hat{H}_{k_0} U_{n'k_0} d\bar{r} + \frac{\hbar}{m} (\bar{k} - \bar{k}_0) \int U_{nk_0}^* \hat{p} U_{n'k_0} d\bar{r}^* + \frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k}^2 - \bar{k}_0^2) \int U_{nk_0}^* U_{n'k_0} d\bar{r} \right] = \\ = \sum_{n'} C_{nn'} E_n(\bar{k}) \underbrace{\int U_{nk_0}^* U_{n'k_0} dr}_{\delta_{nn_1}} \\ \int U_{nk_0}^* \hat{H}_{k_0} U_{n'k_0} d\bar{r} = E_n(\bar{k}_0) \delta_{nn'} \\ \langle U_{nk_0} | \hat{p} | U_{n'k_0} \rangle = p_{nn'}(\bar{k}_0) — \text{матричный оператор импульса.} \end{aligned}$$

4. Определитель системы должен быть равен «0»

$$\det \left| \left[\left\{ E_1(\bar{k}_0) - E_n(\bar{k}) + \frac{\hbar^2}{2m} \right\} \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m} (\bar{k} - \bar{k}_0) p_{nn'}(\bar{k}_0) \right] \right| = 0$$

В общем случае $n = \infty$

Решая определитель можно получить законы дисперсии для $E_n(\bar{k})$. Мешает то, что надо знать много значений оператора импульса и наличие большого количества зон.

Однозонное приближение

1 зона с номером n . В идём в конец 3 пункта, $n = n'$. $E(\bar{k}_0) - E(\bar{k}) + \frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k}^2 - \bar{k}_0^2) + \frac{\hbar}{m} (\bar{k} - \bar{k}_0) \bar{p}_{nn}(\bar{k}_0) = 0$

Воспользовавшись $p_{An}(k_0) = -\hbar k_0$ получаем $E(\bar{k}) = E(\bar{k}_0) + \frac{\hbar^2 (\bar{k} - \bar{k}_0)^2}{2m}$.

Правила сумм

Вернёмся в конец пункта 2.

$$H = \hat{H}_{k_0} + \frac{\hbar}{m} (\bar{k} - \bar{k}_0) \hat{p} + \frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k}^2 - \bar{k}_0^2)$$

В теории возмущений для невырожденных состояний

$$(\hat{H}_0 + \hat{U}) \psi = E \psi \quad E = E_0 + E_1 + E_2 + \dots$$

$$E_1 = V_{nn} = \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n dr$$

$$\begin{aligned}
E_L &= \sum_{n' \neq n} \frac{V_{nn'} \cdot V_{n'n}}{E_n(0) - E_{n'}(0)} \\
E_n(\bar{k}) &= E_n(\bar{k}_0) + \underbrace{\frac{\hbar}{m} (\bar{k} - \bar{k}_0) \int U_n^* U_n dr + \frac{\hbar^2}{2m} (k^* - k_0^2) \int U^* U dr}_{E_1} + \\
&+ \underbrace{\frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{(k - k_0) p_{nn'}(\bar{k}_0) \cdot (k - k_0) p_{n'n}(\bar{k}_0)}{(E_n(\bar{k}_0) - E_{n'}(\bar{k}_0))}}_{E_2} + E_3 + \dots \\
\hbar(\bar{k} - \bar{k}_0) &= \bar{p} — \text{квазимпульс.} \\
E &= E_n(E_0) + \frac{p^2}{2m^*} \\
\frac{1}{m^*} &= \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2} \sum \frac{p_{nn}(\bar{k}_0) p_{n'n}(k_0)}{E_n(k_0) - E_{n'}(k_0)} + \dots \\
E_n(\bar{k}) &= E_n(\bar{k}_0) + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{\bar{p} p_{n'n}(k_0) \cdot \bar{p} p_{n'n}(k_0)}{E_n(k_0) - E_{n'}(k_0)} + \dots
\end{aligned}$$

правила сумм

Правила сумм для $E_n(\bar{k})$ и m^ :*

1. Отклонение сумм для $E_n(\bar{k})$ от квадратичного изотропного закона и m^* от m — следствие учёта наличия других зон.
2. Вклад других зон — знакопеременный.
3. Количественно ряд зависит от $E_n - E_{n'}$ и от величины $p_{nn'}(\bar{k}_0)$.

Если $p_{nn'}(\bar{k}_0) = 0$, то зоны не взаимодействуют. Если $p_{nn'}(\bar{k}_0) \neq 0$, то говорят, что зоны взаимодействуют.

2.8 Параметры зонной структуры полупроводников. Зонная структура основных полупроводниковых материалов.

Основные параметры зонной структуры:

1. Кристаллическая решётка
2. Форма зоны Бриллюэна и расположение в ней основных точек симметрии и направлений
3. Положение экстремумов зон в зоне Бриллюэна, величина E_g .
4. Законы дисперсии и изоэнергетические поверхности в окрестностях экстремумов зон.

//для справки//

Для ГЦК решётки 1 зона Бриллюэна — кубооктаэдр в ней

Γ — центр зоны Бриллюэна

X — центры квадратных граней (3 штуки)

L — центры гексагональных граней (4 штуки)

Σ — внутри зоны Бриллюэна в направлении типа $\langle 110 \rangle$ (12 штук)

Δ — внутри зоны Бриллюэна в направлении типа $\langle 100 \rangle$ (6 штук)

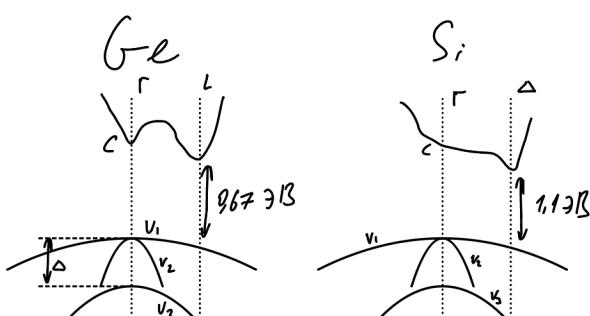
Зонная структура Ge и Si

- Кристаллическая решётка типа алмаза (2 ГЦК подрешётки, сдвинутые друг относительно друга на $\frac{1}{4}$ пространственной диагонали куба)
- Зона Бриллюэна такая же как и у ГЦК решётки Браве — 14-гранник
- Ge: минимум зоны проводимости в точках L (4 точки на зону Бриллюэна). максимум валентной зоны в точке Γ (1 точка)

$$E_g \approx 0,67 \text{ эВ при } T = 300 \text{ К}$$

Si: минимум зоны проводимости в точках Δ (6 штук на зону Бриллюэна), максимум валентной зоны в точке Γ (1 точка)

$$E_g \approx 1,1 \text{ эВ при } T = 300 \text{ К}$$



- Зона проводимости: $E(\bar{k}) = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_t^*} + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_l^*}$

$$k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2, k_\parallel^2 = k_z^2$$

$$\text{Ge: } k_\parallel \parallel \langle 111 \rangle$$

$$\text{Si: } k_\parallel \parallel \langle 100 \rangle$$

Изоэнергетические поверхности — эллипсоиды вращения.

- Валентная зона: $E_{1;2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[Ak^2 \pm (B^2 k^4 + c^2(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_z^2))^0, 5 \right]$, (A, B, C — безразмерные константы). Изоэнергетические поверхности — гофрированные сферы.

$$E_3(\bar{k}) = -\frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m_3^*}, m_3^* = \frac{m}{A}. \text{ Изоэнергетические поверхности — сферы.}$$

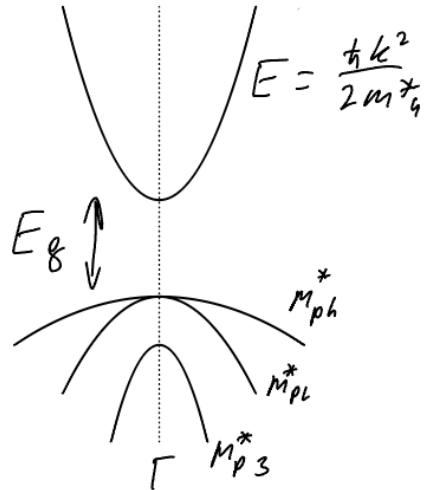
Зонная структура A^3B^5

A: In, Ga, Al...

B: Sb, As, P, N...

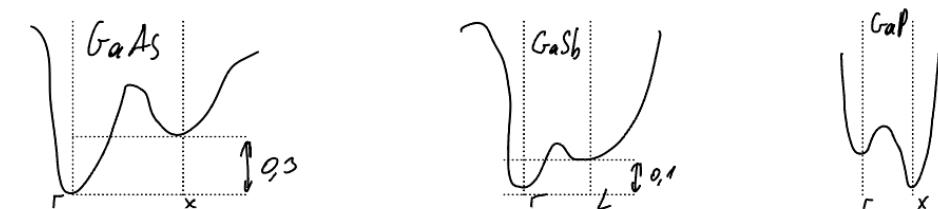
Общая (наиболее распространённая) ситуация

1. Кристаллическая решётка типа сфалерита (цинковой обманки)
2. Зона Бриллюэна — кубооктаэдр
3. Закон дисперсии Кейна



Отклонение от этой системы:

- GaN, InN, AlN кристаллизуются в решётки вюрцита (ГПУ)
- Наличие у ряда полупроводников дополнительных экстремумов в зоне проводимости



Прямозонные используются в оптике.

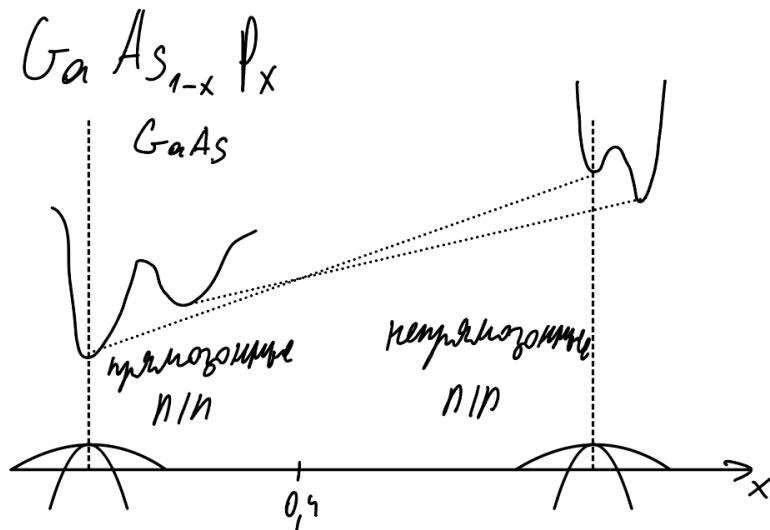
Зонная структура A^2B^6

A: Zn, Cd, Hg...

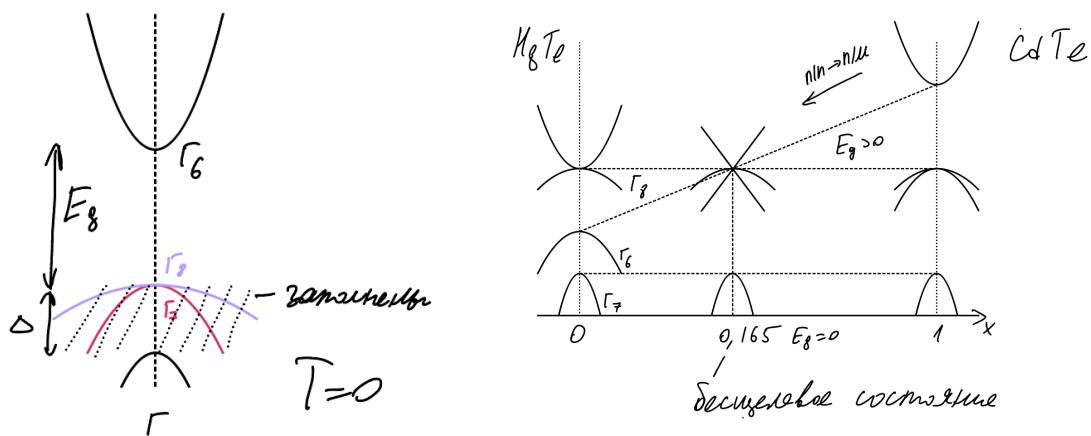
B: O, Se, S, Te...

1. Кристаллическая решётка типа сфалерита или вюрцита
2. Зона Бриллюэна — кубооктаэдр
3. Выполняется закон Кейна

Особенности полупроводников на основе Hg:



- При низких температурах существуют свободные носители заряда (как в металлах)
- Инверсная зонная структура ($E_g < 0$ в законе Кейна)



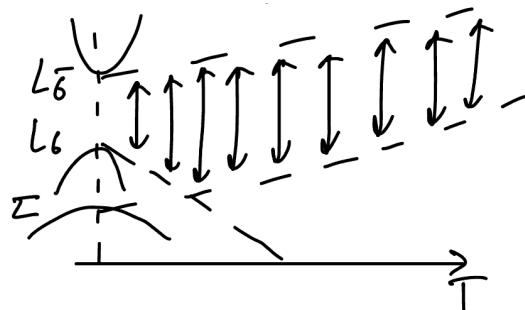
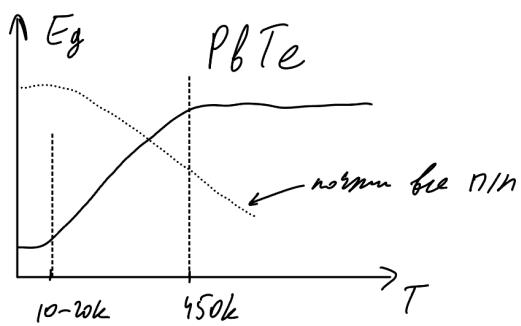
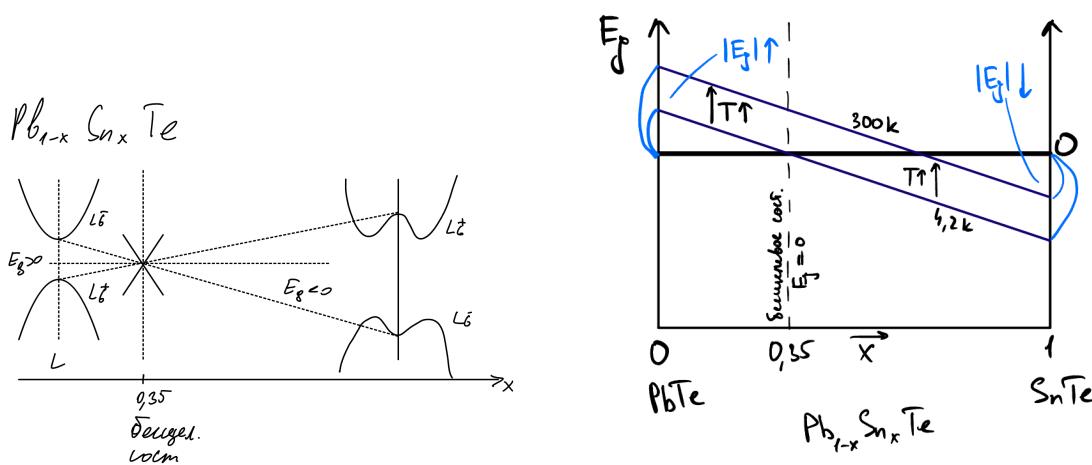
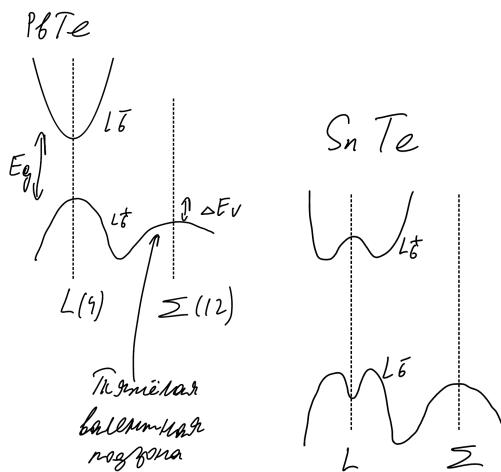
Зонная структура A^4B^6

A: Sn, Ge, Pb...

B: O, S, Se, Te...

Кристаллическая структура

- Кубические модификации (решётки типа NaCl). Зона Бриллюэна — кубооктаэдр
- Ромбическая решётка (деформация куба вдоль $\langle 111 \rangle$) (CdTe)
- Орторомбическая решётка (деформация куба вдоль $\langle 110 \rangle$) (PbTe)



Модель инверсии зон Диммака

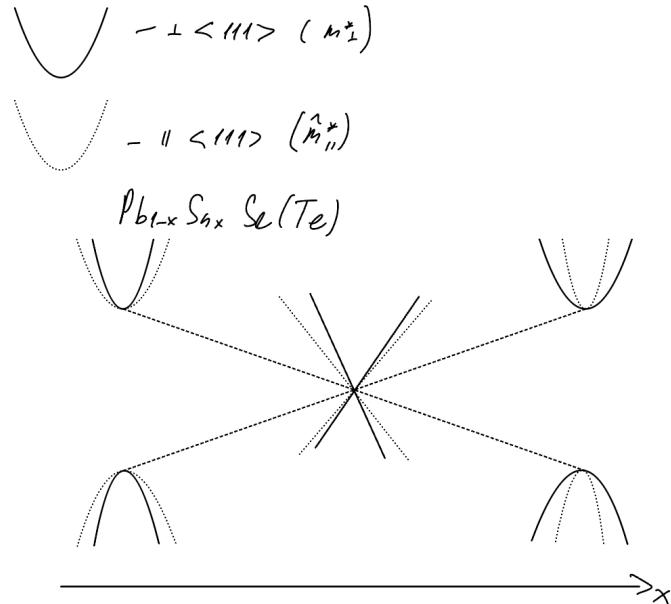
Справа от бесщелевого состояния $E_g \downarrow T$, слева от бесщелевого состояния $E_g \uparrow T$.

Для полупроводников на основе свинца наблюдается рост с насыщением запрещённой зоны от температуры (для большинства других полупроводников с ростом температуры запрещённая зона уменьшается). С ростом температуры края зон L_6 и $L_{\bar{6}}$ расходятся (увеличение запрещённой зоны), а край зоны Σ движется вверх (приблизительно с такой же скоростью, что и L_6). С некоторого момента зона Σ оказывается выше L_6 (выход на насыщение).

До точки $x \leq 0.3$ можно использовать модифицированный закон Кейна

$$(E \left(1 + \frac{E}{E_g} \right) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_t^*(0)} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_l^*(0)}, 2 \text{ параметра } m_t \text{ и } m_l).$$

Далее лучше закон дисперсии Диммака $\left(\left(\frac{E_g}{2} + \frac{p_{\perp}^2}{2m_t^-} + \frac{p_{\parallel}^2}{2m_t^-} - E \right) \left(-\frac{E_g}{2} - \frac{p_{\perp}^2}{2m_t^+} - \frac{p_{\parallel}^2}{2m_t^+} - E \right) = E_{\perp} \frac{p_{\perp}^2}{2m} + E_{\parallel} \frac{p_{\parallel}^2}{2m}, m_t^{\pm}, m_l^{\pm}, E_{\perp}, E_{\parallel} \right.$ — 6 параметров, определяются только экспериментально).



2.9 Прямой и инверсный спектры Кейна для полупроводников A^3B^5 и A^2B^6 .

Зонная структура A^3B^5

A: In, Ga, Al...

B: Sb, As, P, N...

Общая (наиболее распространённая) ситуация

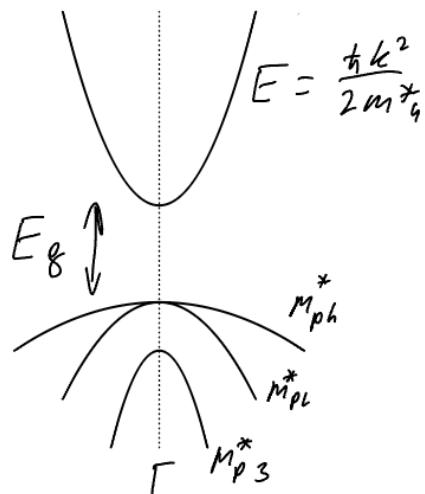
1. Кристаллическая решётка типа сфалерита (цинковой обманки)
2. Зона Бриллюэна — кубооктаэдр
3. Закон дисперсии Кейна:

$$\begin{cases} E_c = E_g + \frac{1}{2}E_g \left(\sqrt{1 + \frac{8k^2P^2}{3E_g^2}} - 1 \right) \\ E_{v_1} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ E_{v_2} = -\frac{E_g}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{8k^2P^2}{3E_g^2}} - 1 \right) \\ E_{v_3} = -\Delta - \frac{P^2 k^2}{3(E_g + \Delta)} \end{cases}$$

Δ — энергия спинорбитального взаимодействия, $P = \frac{\hbar}{m} \int U_c^* \hat{p} U_{v_2} d\vec{r}$ — матричный элемент оператора импульса ($\hat{p} = -i\hbar\nabla$), U_c , U_{v_2} — блоховские амплитуды.

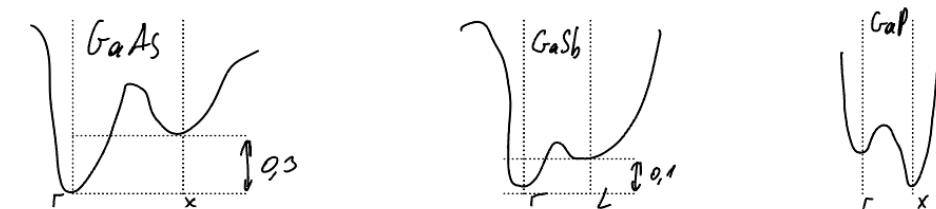
Неквадратичный закон для электронов и лёгких дырок (зоны проводимости и лёгких дырок зеркальны ($m_c^* = m_{v_2}^*$)).

При выборе начала отсчёта на уровне Ферми закон превращается в $E \left(1 + \frac{E}{E_g}\right) = \frac{2k^2 p^2}{3E_g} \leftrightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. В узкощелевых полупроводниках необходимо учитывать вклад $1 + \frac{E}{E_g}$, эффективная циклотронная масса $m_c^*(E) = m^*(0)(1 + \frac{2E}{E_g})$.



Отклонение от этой системы:

- GaN, InN, AlN кристаллизуются в решётки вюрцита (ГПУ)
- Наличие у ряда полупроводников дополнительных экстремумов в зоне проводимости



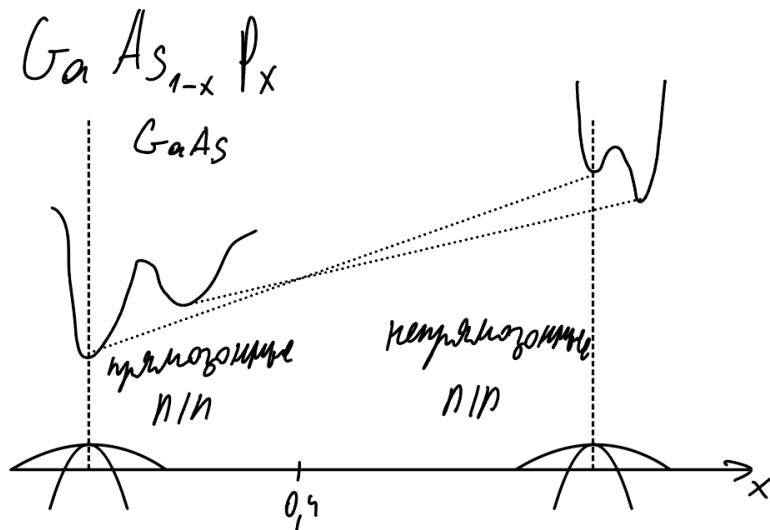
Прямозонные используются в оптике.

Зонная структура A^2B^6

A: Zn, Cd, Hg...

B: O, Se, S, Te...

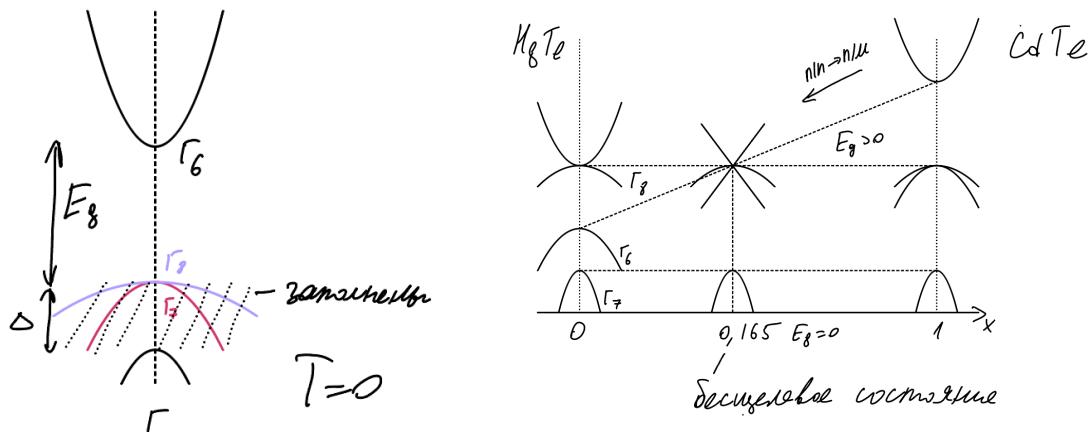
1. Кристаллическая решётка типа сфалерита или вюрцита
2. Зона Бриллюэна — кубооктаэдр



3. Выполняется закон Кейна

Особенности полупроводников на основе Hg:

- При низких температурах существуют свободные носители заряда (как в металлах)
- Инверсная зонная структура ($E_g < 0$ в законе Кейна)



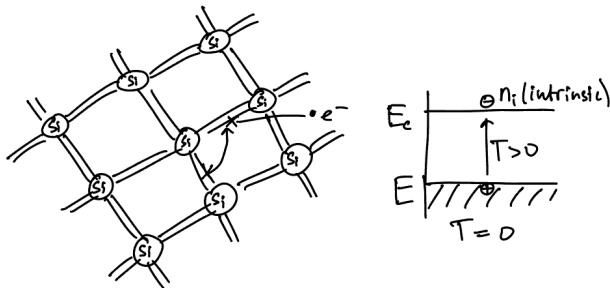
$E = \frac{E_g}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{8k^2 p^2}{3E_g^2}} - 1 \right) \xrightarrow{E_g=0} E = \sqrt{\frac{2}{3}} pk$ — Линейный закон дисперсии (как у графена. Обладает нулевой запрещённой зоной).

2.10 Энергетические уровни дефектов в полупроводниках. Водородоподобная модель примеси. Примесные зоны.

Собственная проводимость.

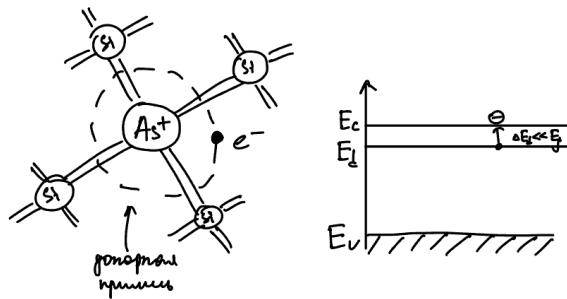
Собственный полупроводник — полупроводник без дефектов и примесей.

При $T = 0$ проводимость нулевая. При повышении температуры появляются свободные электроны (возникает проводимость $\sigma = e\mu n$). На место ушедшего электрона может прийти электрон из соседней связи. Разорванная связь — дырка тоже вносит вклад в проводимость. Концентрация электронов и дырок одинакова $\sigma = e\mu n + e\mu p$. Механизм проводимости — по незаполненным связям.



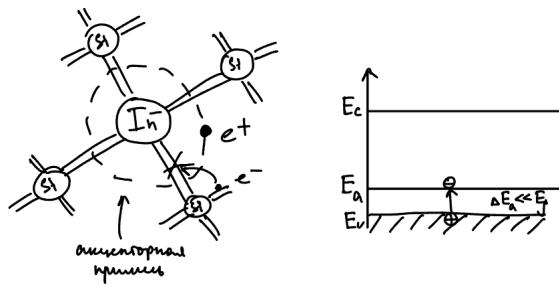
Примесная проводимость

Донорный полупроводник (n -типа)



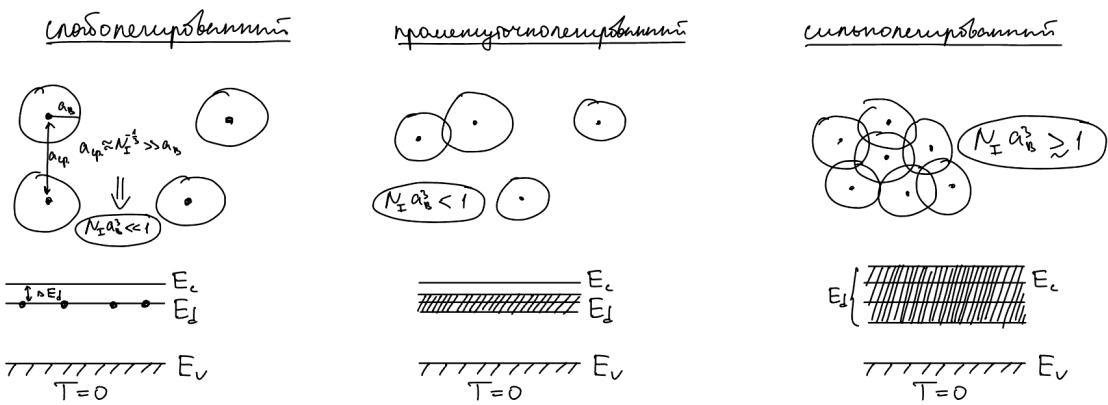
При $T = 0$ электрон связан с атомом примеси и не вносит вклад в проводимость. С ростом температуры всё больше ёлектронов покидают атом примеси и начинают движение по решётке. В этом случае проводимость только электронная.

Акцепторный полупроводник (p -типа)



При лигировании примесью с меньшим количеством валентных электронов, чем у основного атома одна связь остаётся незаполненной. На эту связь могут перемещаться электроны с другой (перемещая незаполненную связь по кристаллу) — осуществляется дырочная проводимость.

Примесные зоны. Классификация по степени лигирования.



1. Слабое лигирование. Среднее расстояние между примесями много больше боровского радиуса. Примеси не взаимодействуют.
2. Среднее лигирование. Среднее расстояние порядка боровского радиуса, примеси взаимодействуют. Перекрытие волновых функций электронов соседних примесей приводит к размытию уровней в зоне.
3. Волновые функции электронов примесей сильно перерываются, примесная зона может достигать зоны проводимости и перекрываться с ней. Сильнолигированный полупроводник похож на металл.

Появление дефектов — появление локальных уровней на фоне зонной структуры полупроводника. Нахождение уравнений дефектов — решение уравнения Шрёдингера с потенциалом дефекта $V(\bar{\epsilon})$

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\bar{r}) + V(\bar{r}) \right\} \Psi(\bar{r}) = E \psi(\bar{r})$$

$\psi(\bar{r})$ — волновая функция в окрестности дефекта, $\Psi(\bar{r}) = \sum_{\bar{n}'; \bar{k}'} C_{n'}(\bar{k}') \psi_{n'k'}(\bar{r})$, \bar{n}' — номер зоны, \bar{k}' — точки в зоне Бриллюэна.

Задача не имеет общего решения. Выделяется самый простой возможный случай, в котором можно получить конечное решение: водородоподобная модель.

$$\Psi(\bar{v}) \sim \psi_{n, \bar{k}_0}(\bar{r})$$

k_0 — точка экстремума зоны Бриллюэна.

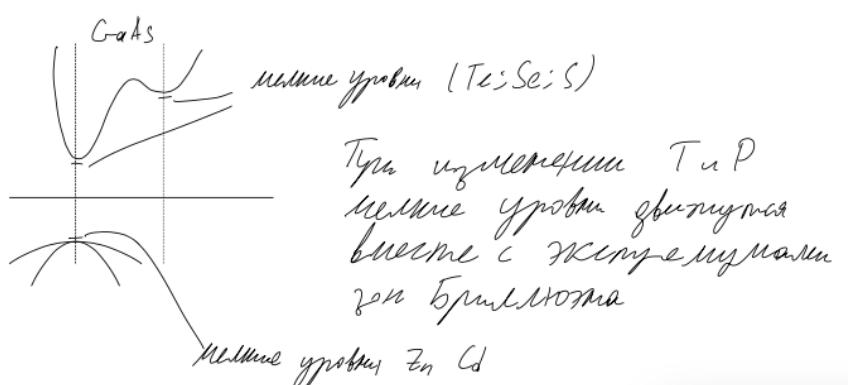
$$V(\bar{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}$$

$$\begin{cases} \Delta E_d = \frac{13,6}{\epsilon^2} \left(\frac{m^*}{m} \right) \frac{1}{n^2} \\ a_B = 0,53 \frac{\epsilon}{z} \left(\frac{m}{m^*} \right) n^2 \end{cases}$$

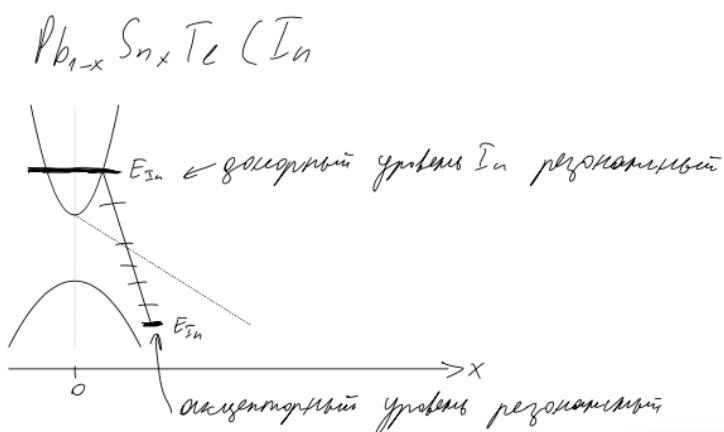
1. Случай «мелких» уровней $V(\bar{r})$ — дальнодействующий потенциал. $\Delta x \Delta p \geq \hbar \Rightarrow \Delta x \Delta k \geq 1$, $\Delta x = a_B \gg a \Rightarrow \Delta k \ll 1/a$ (подходит для описания примесных уровней Si , Ge , A^3B^5 , A^2B^6)



2. Альтернативный случай — «глубокие» уровни. В этом случае учитываются многие энергетические зоны и все точки зоны Бриллюэна. Реализуется при: $V(\vec{r})$ — короткодействующий, $\Delta E_t \approx E_g$. $|Deltax| \leq a \Rightarrow \Delta k \sim \Delta k_{3,\text{Бр.}}$
3. Резонансные уровни — уровни расположение на фоне разрешённых зон: возможны переходы электронов с уровня в зону и обратно из-за этого уширение уровня дефектов ($\Delta E \Delta t \geq \hbar$). Резонансные уровни могут быть как мелкими так и глубокими.



Глубокие уровни образованы всеми точками зон Бриллюэна, они не могут следовать за какой-то конкретной.

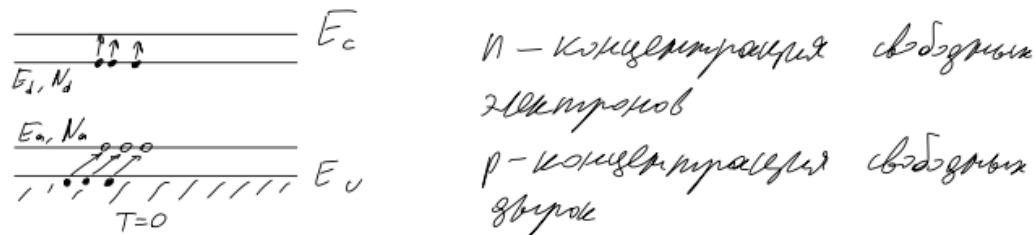


2.11 Уравнение электронейтральности. Статистика носителей заряда в полупроводнике с одним типом примеси.

Из расчёта известно $n = N_c F_{1/2}(\eta)$, $p = N_v F_{1/2}(\eta - \Delta\varepsilon)$.

где $F_{1/2}$ — интеграл Ферми, $\frac{E-E_c}{kT} = \varepsilon$ — энергия электронов относительно дна зоны проводимости, $\frac{E_g}{kT} = \Delta\varepsilon$, $\frac{F-E}{kT} = \eta$, F — уровень Ферми, $N_c N_v$ — функции плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне. Но не известно значение уровня Ферми. Цель введения закона электронейтральности — расчет $F(T)$.

Суть (физический смысл): кристалл в целом электронейтрален, хотя состоит из заряженных частиц. $\sum_i N_- = \sum_i N_+$.



N_d — концентрация атомов донорной примеси N_a — концентрация атомов акцепторной примеси n_d — концентрация электронов на донорном уровне (E_d) p_d — концентрация дырок на донорном уровне (E_d) n_a — концентрация электронов на акцепторном уровне (E_a) p_a — концентрация дырок на акцепторном уровне (E_a) N_d^+ — концентрация ионов донорной примеси N_a^- — концентрация ионов акцепторной примеси

$$\begin{cases} N_d^+ = p_d \\ N_a^- = n_a \end{cases} \quad \begin{cases} n_d + p_d = N_d \\ n_a + p_a = N_a \end{cases}$$

Каждый примесный уровень может быть занят либо электроном, либо дыркой ($N_a^- = N_a - p_a$, $N_d^+ = N_d - n_d$)

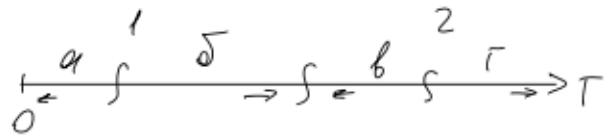
Уравнение электронейтральности: $n + N_a - p_a = p + N_d - n_d$ (можно обобщить для нескольких типов примеси $n + \sum n_d - p - \sum p_a = \sum N_d - \sum N_a$).

Статистика полупроводника с одним типом примеси

Из уравнения электронейтральности следует, что $n = N_d - n_d + p = p_d + p$.

Предположения:

- невырожденный полупроводник $n = N_c e^\eta$, $p = N_v e^{-\eta - \Delta\varepsilon}$
- Мелкие примеси $\Delta E_d \ll E_g$ (это позволит разбить шкалу температур на характерные уровни)



1 — область низких температур, в которой происходит ионизация только атомов примеси. 2 — область высоких температур, в которой происходит ионизация атомов основного вещества.

1. Ионизация только примеси $\Rightarrow p = 0 \Rightarrow n = p_d$.

$$p_d = \frac{N_d}{g e^{\frac{F-E_d}{kT}} + 1} = \frac{N_d}{g e^{g+\varepsilon_d} + 1}$$

$$\frac{F - E_c}{kT} = \eta, \quad \frac{E_c - E_d}{kT} = \frac{\Delta E_d}{kT} = \varepsilon_d, \quad n = N_c e^\eta, \quad e^\eta = \frac{n}{N_c}$$

$$n = \frac{N_d}{g \frac{n}{N_c} e^{\varepsilon_d} + 1}$$

$$n^2 + \underbrace{\frac{N_c}{g} e^{-\varepsilon_d} n}_{a} - \underbrace{\frac{N_c N_d}{g} e^{-\varepsilon_d}}_{c} = 0$$

$$x^2 + ax + c = 0$$

$$x = \frac{a}{2} \left(\pm \sqrt{1 - \frac{4c}{a^2}} - 1 \right)$$

$$n = \frac{N_c}{2g} e^{-\varepsilon_d} \left[\pm \sqrt{1 + \frac{4g N_d}{N_c} e^{\varepsilon_d}} - 1 \right]$$

$$\text{a)} \quad \frac{4g N_d}{N_c} e^{\varepsilon_d} \gg 1, \quad \varepsilon_d \sim \frac{1}{T}, \quad N_c \sim T^{3/2}$$

Случай низких температур в области 1

$$n \approx \frac{N_c}{2g} e^{-\varepsilon_d} \sqrt{\frac{4g N_d}{N_c} e^{\varepsilon_d}} = \sqrt{\frac{N_c N_d}{g} e^{-\frac{-\varepsilon_d}{2}}} = \sqrt{\frac{N_c N_d}{g} e^{-\frac{E_c - E_d}{2kT}}}$$

Рост n с увеличением T — 1а область примесной ионизации.

$$F(T) = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_d}{g N_c}$$

$$6) \frac{4gN_d}{N_c}e^{\varepsilon_d} \ll 1 \quad \left(\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2} \quad x < 1 \right)$$

$$n \approx \frac{N_c}{2g} e^{-\varepsilon_d} \left\{ 1 + \frac{2gN_d}{N_c} e^{\varepsilon_d} - 1 \right\}$$

б — область истощения (насыщения примеси)

$$n = N_c e^{\frac{F-E_c}{kT}} = N_d$$

$$F(T) = E_c - kT \ln \frac{N_d}{N_c}$$

$$2. n = \frac{n_i^2}{n} + N_d$$

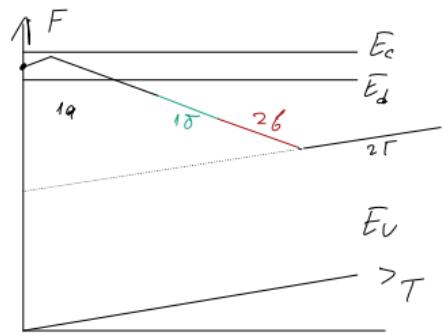
$$n^2 - N_d n - n_i^2 = 0$$

$$n = \frac{N_d}{2} \pm \sqrt{\frac{N_d^2}{4} + n_i^2}$$

$$\text{в)} \frac{N_d^2}{4} \gg n_i^2, \quad n = \frac{N_d}{2} + \frac{N_d}{2} = N_d \quad \text{— вся ещё область истощения примеси.}$$

г) $\frac{N_d^2}{4} \ll n_i^2, n \rightarrow n_i(T)$ — интервал собственной ионизации. Поведение аналогично собственному полупроводнику.

T_s, T_i — нижняя и верхняя температура истощения.

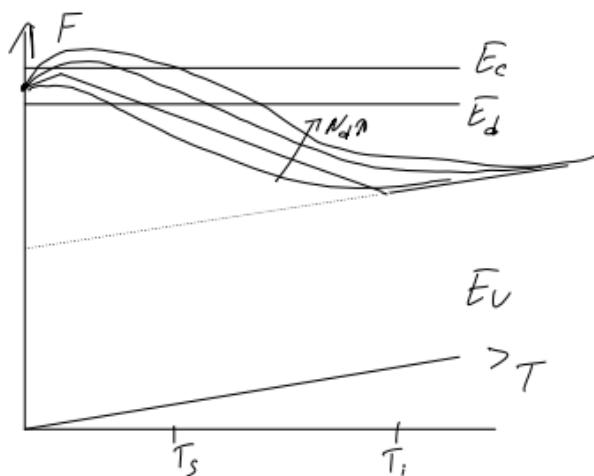
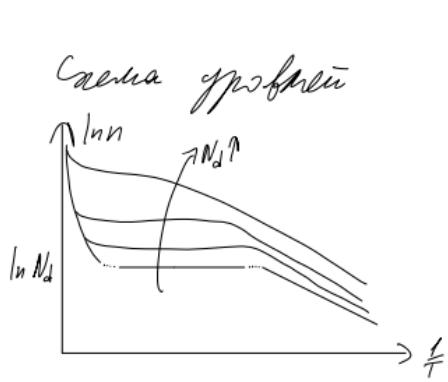
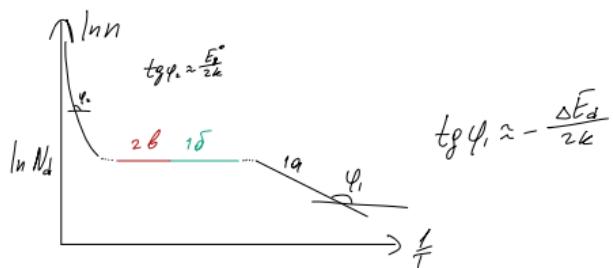


$$T=0: F = \frac{E_c + E_d}{2}$$

$T \uparrow: g N_c < N_d \quad F \uparrow$

$$T \uparrow: g N_c = N_d \quad F = \frac{E_c + E_d}{2}$$

$T \uparrow: g N_c > N_d \quad F \downarrow$



2.12 Неравновесные носители заряда (время жизни, механизмы рекомбинации). Уравнение непрерывности и примеры его использования.

Неравновесные носители заряда возникают из-за:

1. Внешних воздействий

- (a) Облучение квантами электромагнитного излучения
- (b) Облучение быстрыми частицами (электроны, нейтроны, γ -излучение)
- (c) Приложение электрического поля
- (d) Ток в р-п-переходе

2. Внутренних воздействий

- (a) Изменение температуры

Время жизни

Простая механическая модель: 1 тип электронов 1 механизмов рекомбинации.

$W_{nl} = S_{nl} P_l \langle V_{nl} \rangle$ ($[\frac{1}{\text{см}}] = [\text{см}^2 \text{см}^{-3} \frac{\text{см}}{\text{с}}]$) — вероятность рекомбинации электронов по механизму l.

S_{nl} — эффективное сечение процесса рекомбинации электронов по механизму l.

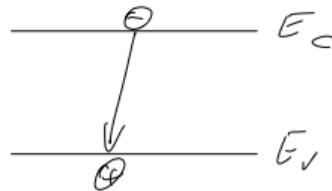
$\frac{1}{W_{nl}} = \tau_{nl}$ — среднее время жизни электрона при рекомбинации по механизму l.

$$W_n = \sum_l W_{nl} \quad \frac{1}{\tau_n} = \sum_l \frac{1}{\tau_{nl}}$$

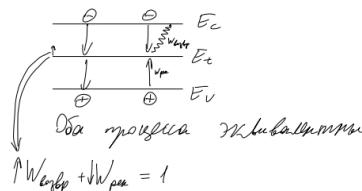
Основные механизмы рекомбинации

1) По типу переходов

а) Межзонная рекомбинация



б) Рекомбинация через рекомбинационные уровни

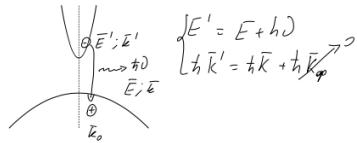


в) Экситонная рекомбинация

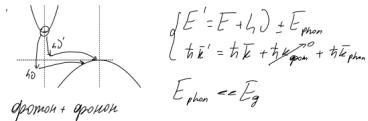
г) Поверхностная рекомбинация

2) По виду выделяемой энергии

а) Межзонная рекомбинация (излучательная)



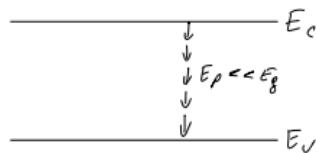
б) Безизлучательная рекомбинация



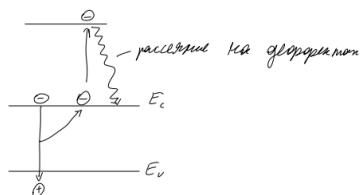
– Фононная (вся энергия идёт на создание фонона)

$$E_p \ll E_g \approx 0,01 \text{ эВ}$$

имеет вид волны



– Ударная (Оже) рекомбинация



Уравнение непрерывности и примере его использования

В выделенном объеме концентрация носителей заряда может меняться за счет генерации, рекомбинации, диффузии и дрейфа.

$$\frac{dn}{dt} = \overbrace{g_{nE} - r_{nE}}^{G_n} + \overbrace{g_{nI} - r_{nI}}^{-R_n} + \frac{1}{e} \operatorname{div} \bar{j}_n(r)$$

$$\frac{dp}{dt} = \overbrace{g_{pE} - r_{pE}}^{G_p} + \overbrace{g_{pI} - r_{pI}}^{-R_p} - \frac{1}{e} \operatorname{div} \bar{j}_p(r)$$

g — скорость генерации носителей заряда r — скорость рекомбинации носителей заряда $G_{n,p}$ — эффективная скорость генерации $R_{n,p}$ — эффективная скорость рекомбинации E — внешние I — внутренние

Рекомбинация при монополярной генерации (линейная рекомбинация)

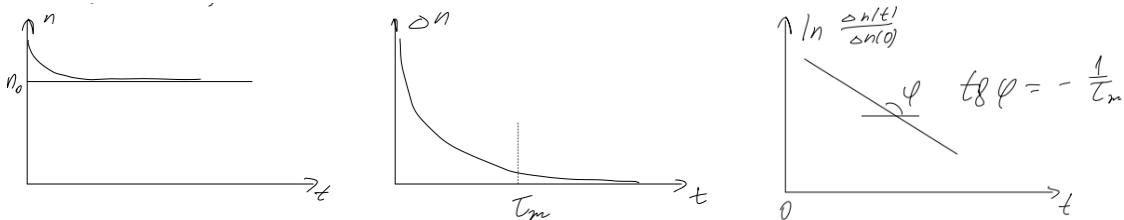
Предположения:

1. Выключаем генерацию в момент времени $t=0$
2. Полупроводник однородный ($n(\bar{r}) = const$, $\bar{E} = 0$)
3. $\Delta \ll n_0$ — условие низкоуровневого возбуждения (инжекции)
4. Генерация примесная

$$\frac{dn}{dt} = \overbrace{G_n^0} - R_n + \overbrace{\frac{1}{e} \text{div} \bar{j}_n}^0 \Rightarrow \frac{dn}{dt} = -W_n \Delta n = -\frac{\Delta n}{\tau_{\text{ж}}}$$

$$\Delta n(t) = \Delta n(0) e^{-\frac{t}{\tau_{\text{ж}}}}, \quad n = n_0 + \Delta n$$

$\tau_{\text{ж}}$ — время за которое значение Δn уменьшится в e раз.



Рекомбинация при биполярной генерации (квадратичная рекомбинация)

Предположения:

1. Выключаем генерацию в момент времени $t=0$
2. Полупроводник однородный ($\bar{E} = 0$)
3. Межзонная генерация ($\Delta n = \Delta p$)
4. Уровень возбуждения любой

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= \frac{dp}{dt} = -R_n = -\gamma(np - n_0 p_0), \quad \gamma \text{ — коэффициент межзонной рекомбинации.} \\ n &= n_0 + \Delta n \\ p &= p_0 + \Delta p \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \gamma \\ n_0 \\ p_0 \end{array} \right\} \rightarrow -\gamma(np - n_0 p_0)$$

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= -\gamma(n_0 p_0 + n_0 \Delta p + p_0 \Delta n + \Delta n \Delta p - n_0 p_0) \\ \frac{dn}{dt} &= -\gamma(n_0 \Delta p + p_0 \Delta n + \Delta n \Delta p) \end{aligned}$$

- a) Низкий уровень инжекции ($\Delta n, \Delta p \ll n_0, p_0$)
 — р-тип ($p_0 \gg n_0$), $\frac{d(\Delta n)}{dt} = -rp_0 \Delta n \sim \Delta n$

$$\Delta n(t) = \Delta n(0)e^{-\frac{t}{\tau_n}}, \tau = \frac{1}{\gamma p_0}$$

– n-типа ($n_0 \gg p_0$), $\frac{d(\Delta n)}{dt} = -rn_0\Delta p \sim \Delta p$

$$\Delta p(t) = \Delta p(0)e^{-\frac{t}{\tau_p}}, \tau = \frac{1}{\gamma n_0}$$

Времена жизни в процессах определяется концентрацией неосновных носителей заряда.

б) Высокий уровень инжекции ($\Delta n, \Delta p \gg n_0, p_0$)

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = \frac{d(\Delta n)}{dt} = -\gamma(\Delta n)^2 \sim (\Delta n)^2 \text{ — квадратичная рекомбинация.}$$

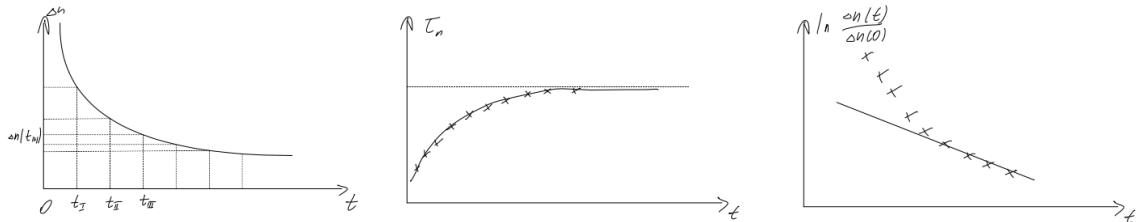
$$\frac{d(\Delta n)}{(\Delta n)^2} = -\frac{dt}{\gamma} \rightarrow \frac{1}{\Delta n} = \gamma t + C. \text{ Граничное условие } t = 0, \Delta n = \Delta n(0) \Rightarrow C = \frac{1}{n(0)}$$

$$\Delta n(t) = \frac{\Delta n(0)}{1 + \gamma \Delta n(0)t}$$

Не можем вывести всего один параметр (τ_n — время жизни), который характеризует весь процесс.

Мгновенное время жизни (обобщение τ_n).

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{\Delta n(t)}{\tau_n(t)} \rightarrow \tau_n = -\frac{\Delta n(t)}{\frac{dn}{dt}}$$



Релаксация избыточной концентрации при конечном внешнем возбуждении

Предположения:

1. Включаем генерацию в момент времени $t=0$
2. Полупроводник однородный ($\bar{E} = 0$)
3. Генерация монополярная
4. Низкий уровень возбуждения

$$\frac{dn}{dt} = G_n - R_n, R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n}$$

$$\frac{d(\Delta n)}{\Delta n - G_n \tau_n} = -\frac{dt}{\tau_n}$$

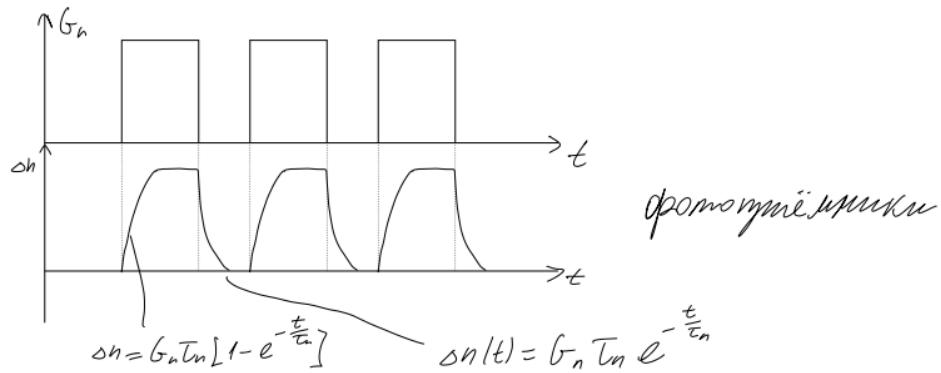
$$\ln(\Delta n - G_n \tau_n) = -\frac{t}{\tau_n} + C$$

$$\Delta n - G_n \tau_n = B e^{-\frac{t}{\tau_n}}$$

$$\text{Граничные условия } t = 0, \Delta n(t) = 0 \Rightarrow -G_n \tau_n$$

$$\Delta n(t) = G_n \tau_n \left[1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}} \right]$$

$$t \rightarrow \infty \quad \Delta n(t) = G_n \tau_n = \Delta n_{\text{стационар}}$$



Прямоугольный импульс внешнего напряжения \rightarrow искажённый импульс с наростаниями и спадами (фотоприёмники).

Большое время жизни \Rightarrow большая амплитуда (хорошо), но затягивание спада (плохо).

2.13 Контакт металл-полупроводник (контактная разность потенциалов, энергетические диаграммы, вольтамперная характеристика).

Полупроводник n-типа. $\Phi_m < \Phi_n$

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\rho}{\varepsilon \varepsilon_0} \rightarrow \frac{dE}{dx} < 0 \quad E > 0$$

$$E = -\frac{d\varphi}{dx} \rightarrow \frac{d\varphi}{dx} < 0 \quad \varphi > 0$$

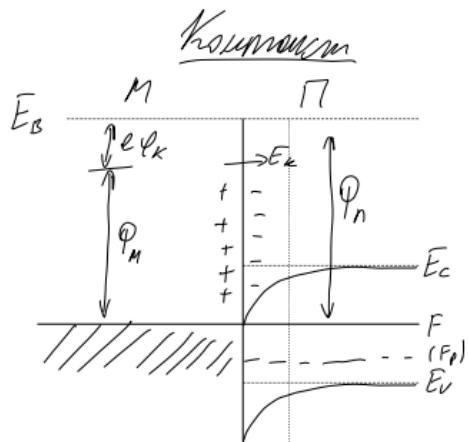
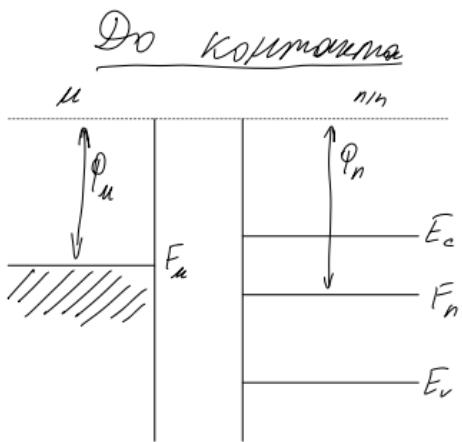
$$U = -e\varphi \rightarrow U < 0$$

Полупроводник p-типа. $\Phi_m > \Phi_n$

$$E = \frac{en_0}{\varepsilon \varepsilon_0} (L_0 - x) \quad \varphi(x) = -\frac{en_0}{2\varepsilon \varepsilon_0} (L_0 - x)$$

Границочное условие: $x = 0, \varphi(x) = -\varphi_k$

$$-\varphi_k = -\frac{en_0}{2\varepsilon \varepsilon_0} (L_0)^2$$

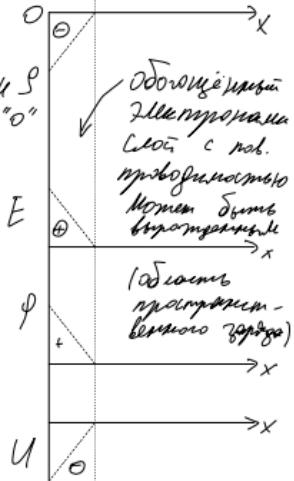


Приложим зону с уменьшением до "0"

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\varphi}{\epsilon \epsilon_0} \rightarrow \frac{dE}{dx} < 0 \quad E > 0$$

$$E = - \frac{d\varphi}{dx} \rightarrow \frac{d\varphi}{dx} < 0 \quad \varphi > 0$$

$$U = -e\varphi \rightarrow U = 0$$



$$L_0 = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0\varphi_k}{en_0}} \text{ — в сильном поле } e\varphi \gg kT$$

Можно сравнить с l_D в слабом поле $e\varphi \ll kT$

$$l_D = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{e^2 n_0}}$$

При $T = 300 \text{ K}$ $\varphi_k = 1 \text{ В}$, $\frac{L_0}{l_D} = 10$

Для полупроводника р-типа аналогично (на рисунках показан уровень ферми такого полупроводника штрихом (F_p)).

Энергетические диаграммы контакта металл-полупроводник во внешнем поле

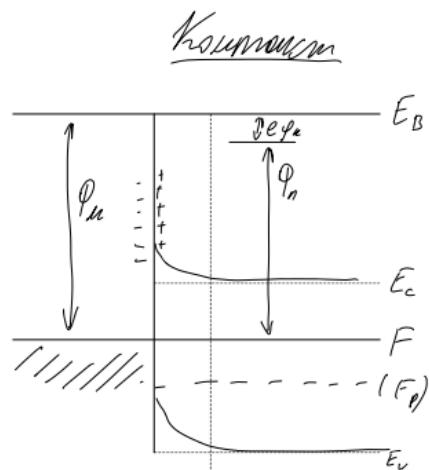
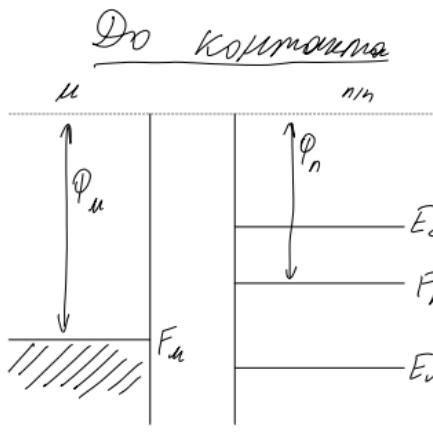
Рассмотрим контакт металл-полупроводник н-типа (с обеднённым слоем)

Изменится изгиб зон и толщина слоя ОПЗ (уменьшится при $U > 0$, увеличится при $U < 0$).

Напряжение приложено в прямом направлении если металл +, а полупроводник -.

Токи при контакте:

$$j_{\text{TP}} = AT^2 e^{-\frac{\Phi_M}{kT}}, \quad j_{\text{TM}} = AT^2 e^{-\frac{\Phi_M + e(\varphi_k + U)}{kT}}$$

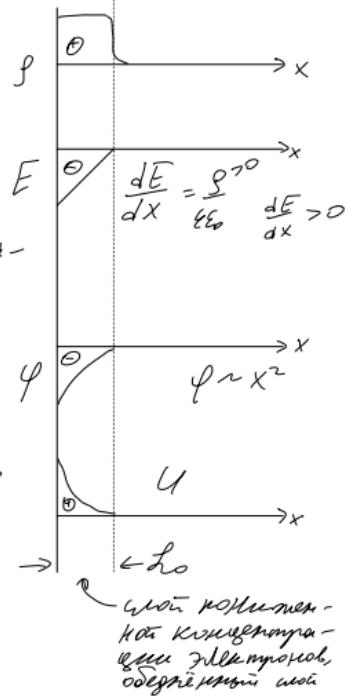


Вспоминаем, что ур. Пуассона

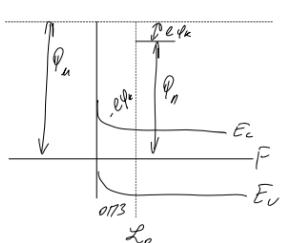
$$* \frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{eN}{\epsilon\epsilon_0} \left(1 - e^{\frac{e\varphi}{kT}}\right)$$

по решению есть $\varphi \approx kT$ — сильное приближение

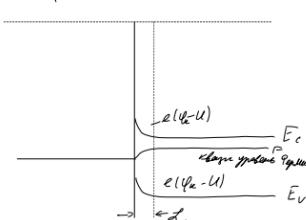
$$\begin{aligned} e\varphi_k &\approx 12 \text{ В} \quad kT \approx 0,026 \text{ мВ} \Rightarrow \varphi \\ e\varphi_k &>> kT \quad \text{сильно сильное} \\ -\varphi < 0 \rightarrow e^{\frac{e\varphi}{kT}} &\rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{(eN_0)}{\epsilon\epsilon_0} \end{aligned}$$



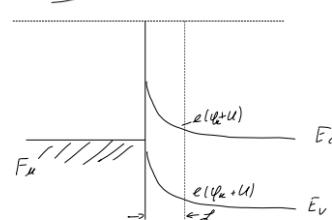
$U=0$



$+ U>0 -$



$- U<0 +$

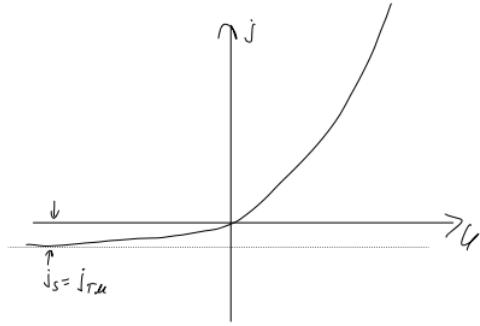


$$j = j_{\text{TP}} - j_{\text{TM}} = \underbrace{AT^2 e^{-\frac{\Phi_M}{kT}}}_{j_s} \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right)$$

j_s — ток насыщения.

ВАХ

Электроннодефектный контакт металл-полупроводник — диод Шоттки.
Электронноизбыточный — омический контакт (невыпрямляющий) применяется



для исследования свойств полупроводников.

2.14 Электронно-дырочный переход (энергетические диаграммы, идеальная ВАХ, ток насыщения).

Предположения:

1. Резкий р-п переход (концентрация примеси меняется скачком).
2. Невырожденный полупроводник.
3. Температура соответствует области истощения примеси.
4. Использован один и тот же полупроводник, но с разными примесями.

$$\Phi_p > \Phi_n \Rightarrow j_{Tp} < j_{Tn}$$

В обоих случаях заряд создают ионы примеси.

$$\begin{aligned} e\varphi_k &= \varphi_p - \varphi_n = (x + E_c - F) - (x + E_c - F) = F_n - F_p = \left(E_c - kT \ln \frac{N_c}{N_d} \right) - \\ &- \left(E_v + kT \ln \frac{N_N}{N_a} \right) = -kT \ln \frac{n_i^2}{N_c N_v} - kT \ln \frac{N_c}{N_d} - kT \ln \frac{N_v}{N_a} = kT \ln \frac{N_c N_v}{n_i^2} \cdot \frac{N_d}{N_c} \cdot \frac{N_a}{N_v} = \\ &= kT \ln \frac{N_d N_a}{n_i^2} \\ \varphi_k &= \frac{kT}{e} \ln \frac{N_d N_a}{n_i^2} \quad e\varphi_k \leq E_g \quad \varphi_k \sim 1B \end{aligned}$$

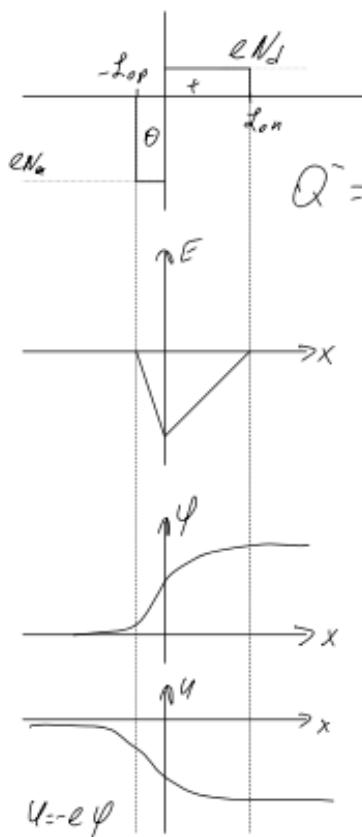
$$n_i^2 = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}} \rightarrow E_g = -kT \ln \frac{n_i^2}{N_c N_v}$$

Энергетические диаграммы р-п-перехода во внешнем поле ВАХ

j_D, j_E — Диффузионный ток и дрейфовый (дрейфовый ток не преодолевает энергетический барьер) соответственно.

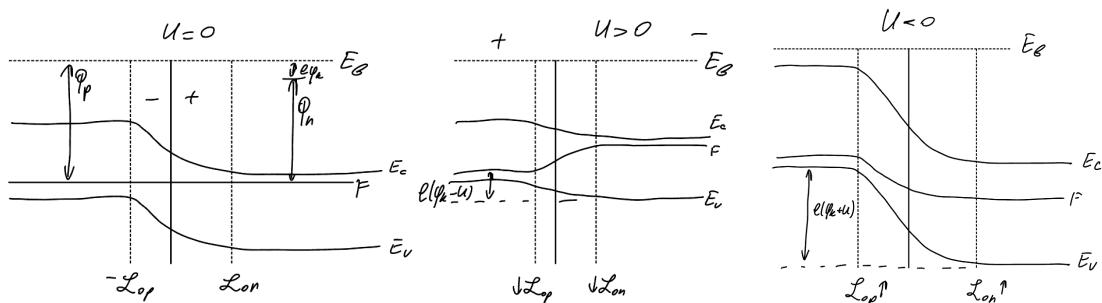
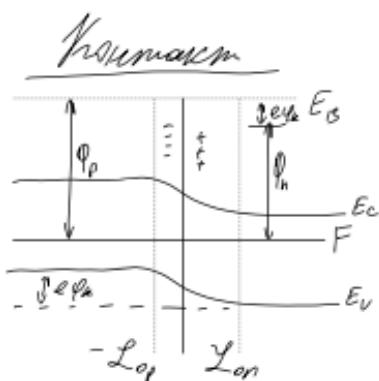
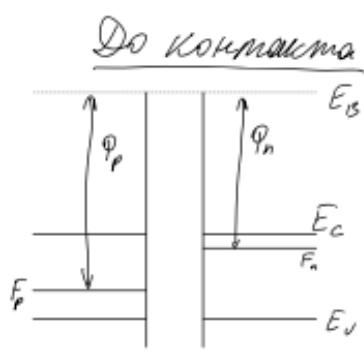
$$j = \underbrace{(\bar{j}_{D_p} + \bar{j}_{E_p})}_0 + \underbrace{(\bar{j}_{D_n} + \bar{j}_{E_n})}_0 = 0$$

$$j_E = j_{E_n} + j_{E_p}, \quad j_D = j_{D_n} + j_{D_p}$$



$Q^- = Q^+ - \text{плотность на графике}$

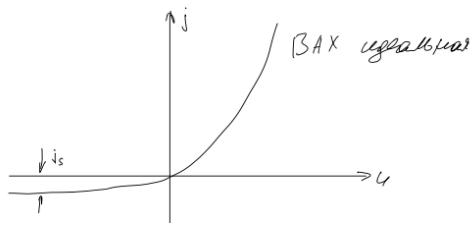
Использовалась одна и та же
ячейка, но с различными приле-
гшими



$$j = j_s \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right)$$

$j_s = j_{E_s} + j_{E_p}$ — токи неосновных носителей заряда.

Образование j_s :



1. Неосновные носители заряда диффундируют к оптимизации
2. Мгновенный переброс через ОПЗ

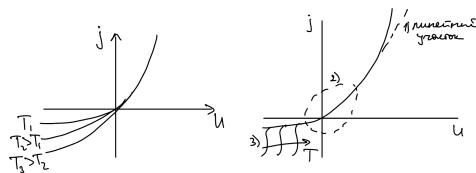
Токи через р-п-переход.

Дрейфовые токи преодолевают потенциальный барьер. При этом дрейфовые и диффузационные токи попарно компенсируют друг друга.

Ток насыщения: $j_s = j_{E_n} + j_{E_p} = en_i^2 \left(\frac{L_n}{p_p \tau_n} + \frac{L_p}{n_n \tau_p} \right) \sim n_i^2 \sim e^{-E_j/kT} = j_s(E_g, T)$, $E_g \uparrow\downarrow i_s, T \uparrow\uparrow j_s$.

Отличия реальной ВАХ от идеальной.

1. Появление линейного участка при больших напряжениях.
2. Около 0 появляются искажения из-за генерации/рекомбинации в ОПЗ.
3. Пробой р-п-перехода при больших обратных напряжениях.



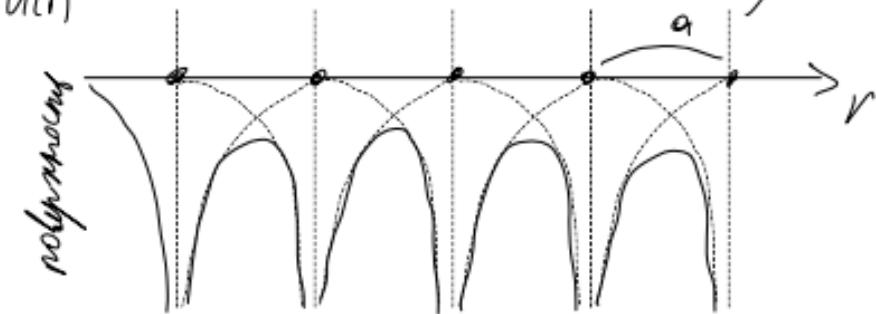
2.15 Поверхностные состояния. Поверхностная проводимость. Эффект поля.

Свойства полупроводника (электропроводность, рекомбинационные явления, оптические свойства и т.д.) сильно зависят от состояния поверхности (состав атмосферы, обработка). Причина зависимости — поверхностные уровни (локализованные состояния, подобные уровням дефектов).

Причины возникновения поверхностных уровней:

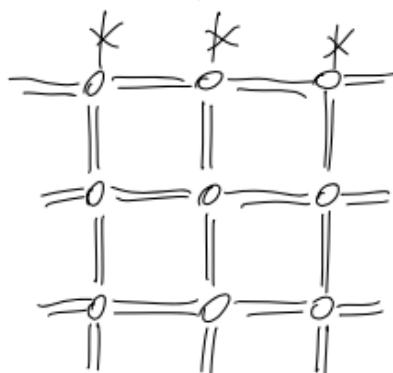
- 1) На поверхности нарушается периодичность потенциала
(Для атомов на поверхности уравнение Шрёдингера имеет другие решения по отношению к атомам в объеме).
- 2) На поверхности не образуются парные ковалентные связи. Из-за этого появляются локализованные поверхностные состояния.

U. E. Талли (1932 г.)



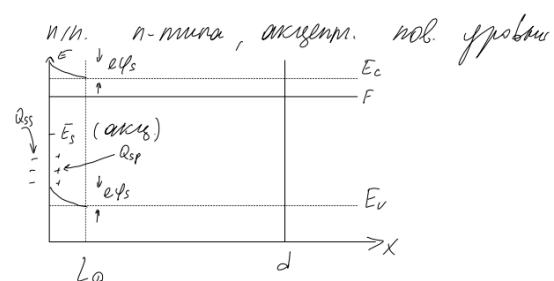
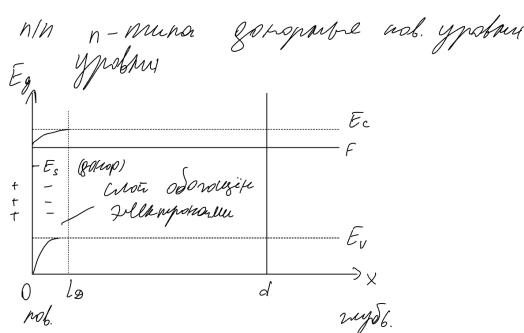
Г. Б. Моки

поверхность



3) Дефекты на поверхности (результаты обработки, чужеродные атомы атмосферы, жидкости).

Все причины приводят к появлению заряда на поверхности, он приводит к появлению заряда под поверхностью, из-за этого в приповерхностном слое появляется поле. Поле приводит к изгибу зон на глубине порядка $L_D = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{e^2 n_0}}$.



При толщине образца сопоставимой с глубиной проникновения поля свойства образца координально меняются (полупроводник n-типа начинает вести себя как

полупроводник р-типа).

//для справки//

Решение уравнения Пуассона в ОПЗ

Вычислим $\varphi(x)$, $E(x)$, $U(x)$, Q_{ss} , Q_{sp} .

Предположения:

1. Невырожденный полупроводник

2. Область истощения примеси

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon\varepsilon_0}$$

$$\rho(x) = -e(n - p + N_a^- - N_d^+) = -e \left[n_0 \left(e^{\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) - p_0 \left(e^{-\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) \right]$$

$$n = N_c e^{\frac{F - (E_c - e\varphi)}{kT}} = n_0 e^{\frac{e\varphi}{kT}}$$

$$p = N_v e^{\frac{(E_v - e\varphi) - F}{kT}} = p_0 e^{-\frac{e\varphi}{kT}}$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[n_0 \left(e^{\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) - p_0 \left(e^{-\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) \right]$$

$$\frac{e}{kT} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{en_i}{kT} \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[\frac{n_0}{n_i} \left(e^{\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) - \frac{p_0}{n_i} \left(e^{-\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) \right]$$

Замена $Y = \frac{e\varphi}{kT}$, $\frac{n_0}{n_i} = \lambda$, $\frac{p_0}{n_0} = \frac{n_i}{n_0} = \lambda^{-1}$

$$\frac{d^2Y}{dx^2} = L_D^{-2} [\lambda (e^Y - 1) - \lambda^{-1} (e^{-Y} - 1)] \quad | \cdot 2 \frac{dy}{dx}$$

$$2 \frac{d^2Y}{dx^2} \frac{dY}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\frac{dY}{dx} \right)^2 = 2L_D^{-2} [\lambda (e^Y - 1) - \lambda^{-1} (e^{-Y} - 1)] \frac{dY}{dx}$$

Интегрируем и извлекаем квадратный корень.

$$\frac{dY}{dx} = \sqrt{2} L_D^{-1} F(\lambda; Y)$$

$$F(\lambda; Y) = [\lambda (e^Y - 1) + \lambda^{-1} (e^{-Y} - 1) + (\lambda^{-1} - \lambda) Y]^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{dy}{\sqrt{2} L_D^{-1} F(\lambda; y)} = dx$$

$$x(Y) = \frac{L_D}{\sqrt{2}} \int \frac{dY}{F(\lambda; Y)}$$

$$x(Y) = \frac{L_D}{\sqrt{2}} \int \frac{dY}{F(\lambda; Y)} \text{ — общее решение, можно получить только численно.}$$

$$Q_{sp} = \int_0^\infty \rho(x) dx = -\varepsilon \varepsilon_0 \int \frac{d^2 \varphi}{dx^2} dx = \varepsilon \varepsilon_0 \frac{kT}{e} \int \frac{d^2 Y}{dx^2} dx = -\varepsilon \varepsilon_0 \frac{kT}{e} \frac{dY}{dx} \Big|_{0; Y=Y_s}^\infty = 0 -$$

$$-\left(-\varepsilon \varepsilon_0 \frac{kT}{e} \sqrt{2} L_D^{-1} F(\lambda; Y_s) \right) = \sqrt{2} e n_i L_D F(\lambda; Y_s)$$

$$|Q_{sp}| = |Q_{ss}| \rightarrow \sqrt{2} e n_i L_D F(\lambda; Y_s) = \frac{e N_s}{g_s e^{\frac{E_s - F}{kT}} + 1} = e n_a$$

n_a — количество электронов на акцепторном уровне.

Поверхностная проводимость

- Эффект поверхности проводимости: изменение проводимости тонких пластин при изменении состояния поверхности (Y_s — поверхностный потенциал)
- Количественная характеристика эффекта — удельная проводимость $\Delta G = G_s$

$\Delta G = G_s = e \mu_n \Delta N + e \mu_p \Delta P$, ΔN , ΔP — поверхностные избытки электронов и дырок. $[\Delta N] = [\Delta P] = \text{см}^{-2}$

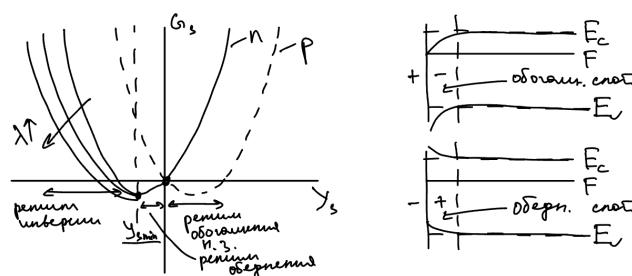
$$\Delta N = \int_0^\infty [n(x) - n_0] dx, \quad \Delta P = \int_0^\infty [p(x) - p_0] dx$$

$$\Delta N = \int_0^\infty [n(x) - n_0] dx = n_0 \int_0^\infty \left(e^{\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) \frac{dx}{dY} dY = n_0 \frac{L_D}{\sqrt{2}} \int \frac{e^Y - 1}{F(\lambda; Y)} dY$$

$$\Delta P = \int_0^\infty [p(x) - p_0] dx = p_0 \int_0^\infty \left(e^{-\frac{e\varphi}{kT}} - 1 \right) \frac{dx}{dY} dY = p_0 \frac{L_D}{\sqrt{2}} \int \frac{e^{-Y} - 1}{F(\lambda; Y)} dY$$

Поверхностные интегралы можно вычислить численно или по таблице.

$G_s(Y_s)$

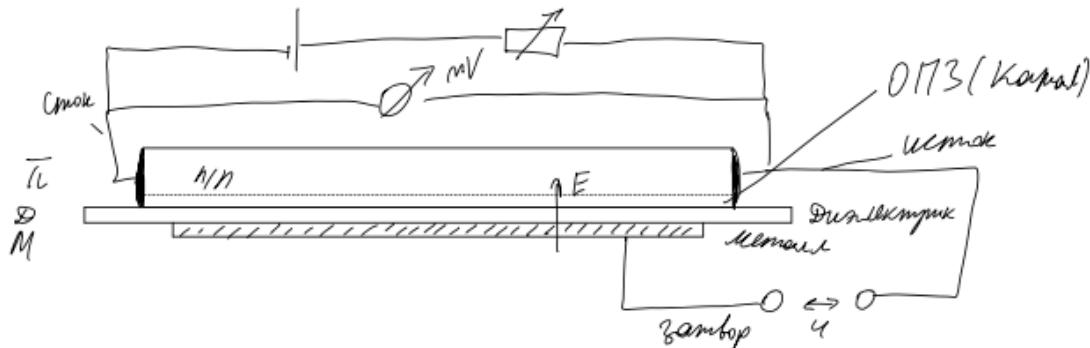


- $Y_s = 0$ (Плоские зоны), $G_s = 0$.
- $Y_s > 0$, $G_s \approx e \nu_n \Delta N \sim e^{Y_s}$. Рост $G_s > 0$, режим обогащения.

3. $Y_s \leq 0$, $G_s \approx e\nu_n \Delta N \sim e^{-Y_s}$. Обеднение, $G_s < 0$ и уменьшение до Y_{min} .
4. $Y_s < 0$, $G_s \approx e\nu_p \Delta P \sim e^{Y_s}$. Скорость наростания неосновных носителей заряда больше, чем скорость убывания основных, образуется инверсный слой $G_s \uparrow$.

Эффект поля (влияние поля на G_s)

Эффект поля — влияние внешнего электрического поля на величину поверхностной проводимости.



Модель полевого транзистора

1. Плавная регулеровка Y_s : замер ОПЗ, G_s , изгиба зон
2. С таким эффектом можно определить поверхностный потенциал Y_s

Алгоритм определения Y_s

1. Расчёт $G_s(Y_s)$ (μ_n, μ_p, n_0, p_0)
2. Измерить (экспериментально) эффект поля

$$Y_{\text{эксперимент}} - Y_{\text{теор}} = Y_s - \text{расчёт поверхностных состояний}.$$

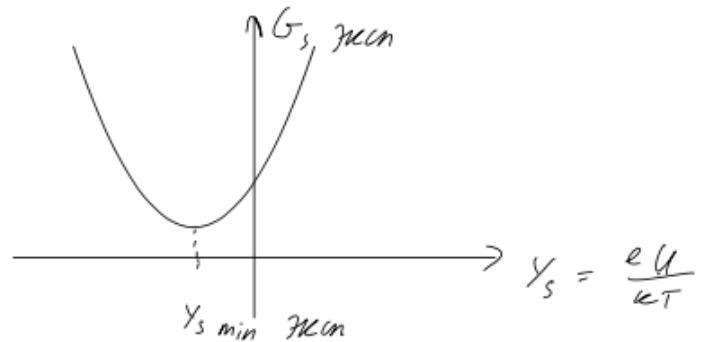
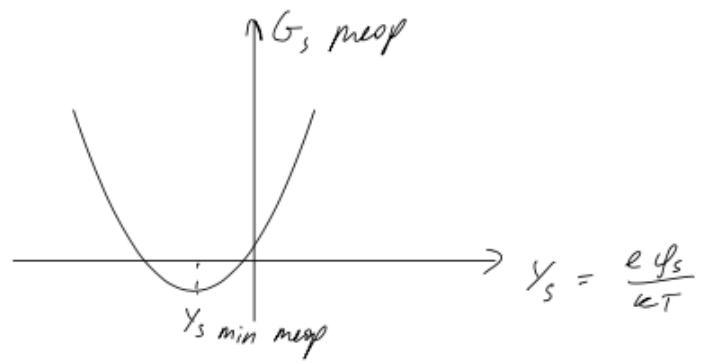
2.16 Классификация кинетических явлений.

Электропроводность.	Эффективная
масса	проводимости.
зависимости подвижности носителей заряда в	
полупроводниках.	

Классификация

По физическому смыслу:

1. \bar{E} — электропроводность



2. ∇T — теплопроводность
3. $\bar{E}; \bar{B}$ — гальвано-магнитные эффекты (эффект Холла, магнитосопротивление)
4. $\nabla T \leftrightarrow \bar{E}$ — термоэлектрические эффекты (эффект Зеебека, эффект Пельтье)

По характеру протекания:

1. Условия: изотермические, адиабатические
2. Однородность (степень): характер распределения примеси, структура.
3. Распределение векторов сил (\perp , \parallel , φ)
4. Первичные и вторичные эффекты
5. Дополнительные внешние воздействия (свет, облучение)

Электропроводность

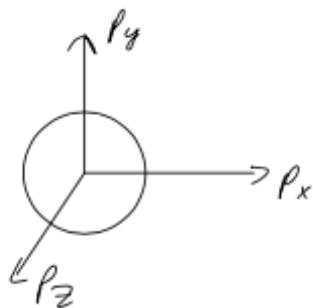
$$E \neq 0 \quad \nabla F = \nabla T = \bar{B} = 0 \quad \Rightarrow j = e^2 \mathcal{K}_{11} \bar{E} = \sigma \bar{E}$$

$$\sigma = e^2 \mathcal{K}_{11} = e^2 \frac{n}{m^*} \langle E \tau \rangle = e^2 \frac{n}{m^*} \langle \tau \rangle = en \left(\frac{e \langle \tau \rangle}{m^*} \right) = en\mu$$

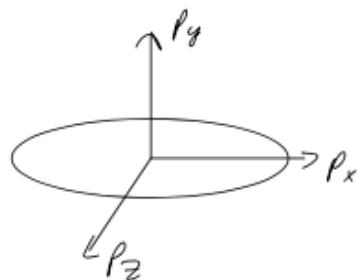
$r = \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*}$ — подвижность.

1) Неворожденный полупроводник $E = \frac{p^2}{2m^*}$, $\sigma = \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau \rangle = \frac{e^2 n}{m^*} (kT)^p \tau_0 \frac{\Gamma(p + \frac{5}{2})}{\Gamma(\frac{5}{2})}$

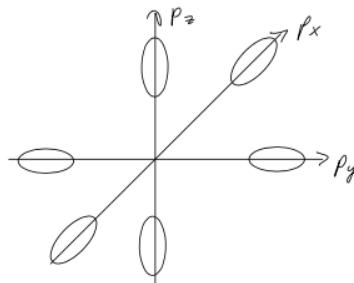
2) Вырожденный полупроводник $\sigma = \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau \rangle = \frac{e^2 n}{m^*} \tau(F)$



I) Анизотропный квадратичный закон дисперсии $E = \frac{P_x^2}{2m_1} + \frac{P_y^2}{2m_2} + \frac{P_z^2}{2m_3}$, $\sigma = \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau \rangle$



II) Многодолинный полупроводник (Si , $M = 6$ — число эквивалентных подзон).



$$\sum_{i=1}^6 \frac{1}{m_i^*} = 2 \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{m_t} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_t} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t} \end{pmatrix}}_{1;4} + 2 \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{m_l} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_t} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t} \end{pmatrix}}_{2;5} + 2 \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{m_t} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_l} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t} \end{pmatrix}}_{3;6} = 2 \left(\frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_2} \right)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma} &= \sum_{i=1}^6 \tilde{\sigma}_i = e^2 \langle \tau \rangle n_j \sum_{i=1}^6 \frac{1}{m_i^*} = e^2 \langle \tau \rangle n_j 2 \cdot 3 \left(\frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_l} \right) \cdot \frac{1}{3} = \\ &= e^2 \langle \tau \rangle n \frac{1}{m_c^*} \text{ — скалярная электропроводность. Результат справедлив для большинства кубических многодолинных полупроводников (Ge, } A^3B^5). \end{aligned}$$

m_c^* — эффективная масса проводимости ($\frac{1}{m_c^*} = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_l} \right)$). n_j — концентрация носителей заряда в каждой долине. $n = 6n_j$ — общая концентрация носителей заряда.

Si — самый простой пример многодолинного полупроводника (поверхности постоянных энергий вытянуты вдоль осей).

Температурная зависимость подвижности

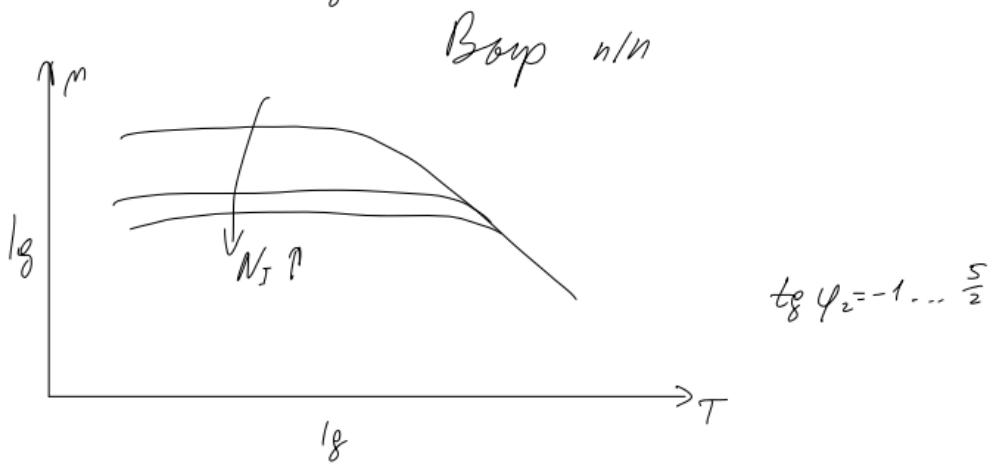
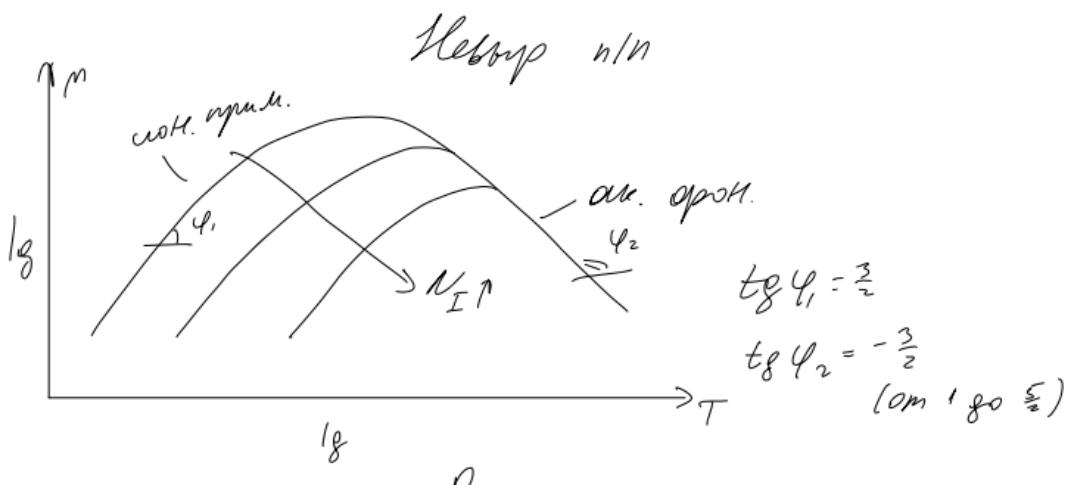
$$\mu = \frac{e}{m_c^*} \langle \tau \rangle = \begin{cases} \frac{e}{m_c^*} \tau_0(T) (kT)^p \frac{\Gamma(p+\frac{5}{2})}{\Gamma(\frac{5}{2})} & \text{невырожденный} \\ \frac{e}{m_c^*} \tau(F) = \frac{e}{m_c^*} \tau_0(T) F^p & \text{вырожденный} \end{cases}$$

$$\tau(E) = \tau_0(T) E^p$$

$$p = \begin{cases} -\frac{1}{2} & \text{точечные дефекты, дислокации, акустические фононы*} \\ 0 & \text{нейтральные атомы примеси} \\ \frac{1}{2} & \text{оптические фононы*} \\ \frac{3}{2} & \text{ионы примеси} \end{cases}$$

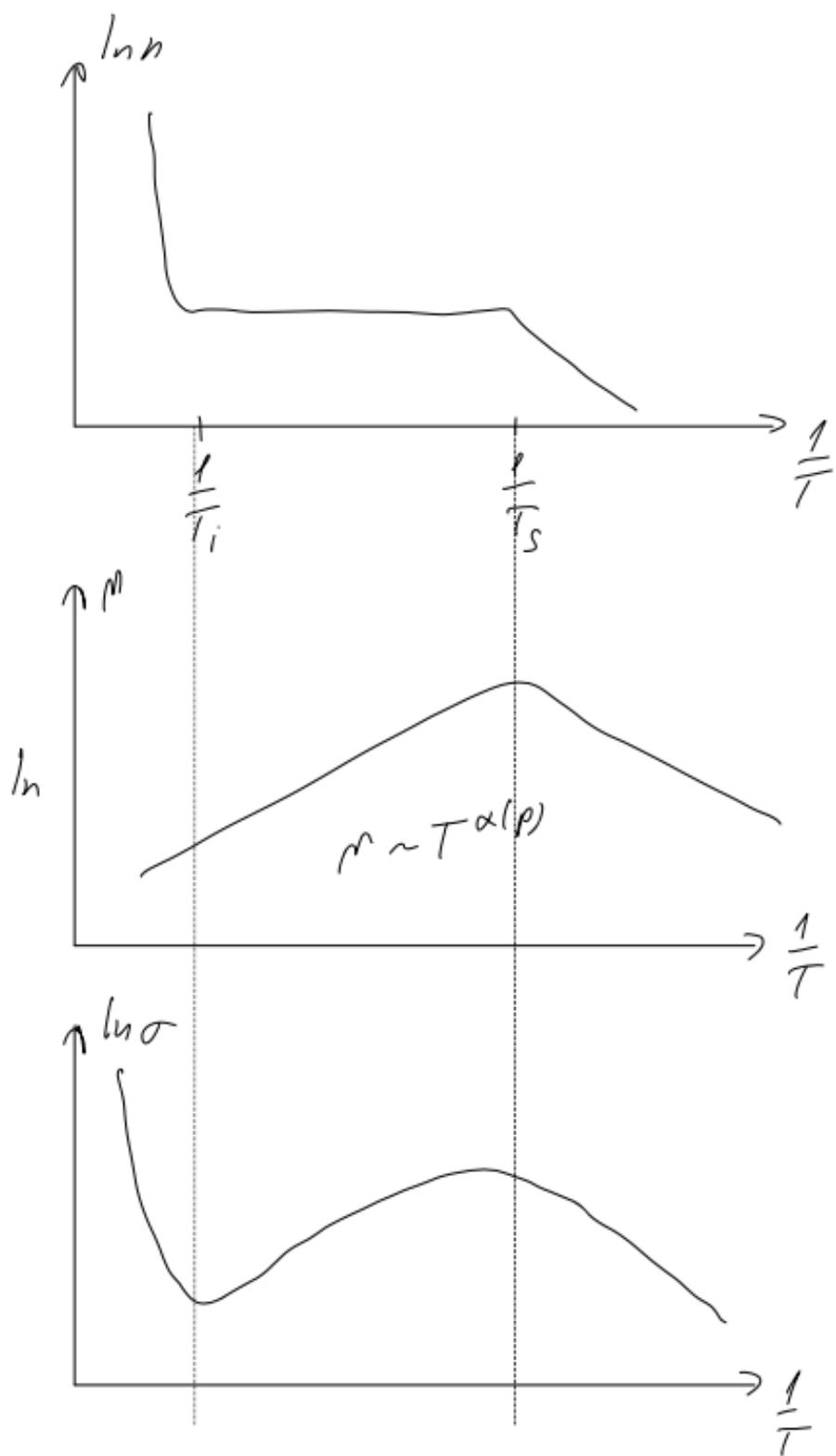
* для фононов $\tau_0 \sim T^{-1}$

Вырожденный	Невырожденный
Рассеяние на ионах примеси	Рассеяние на ионах примеси
$\mu \sim T^{\frac{3}{2}}$	$\mu \sim T^0$
Рассеяние на точечных дифектах и дислокациях	Рассеяние на точечных дифектах и дислокациях
$\mu \sim T^{-\frac{1}{2}}$	$\mu \sim T^0$
Рассеяние на атомах примеси	Рассеяние на атомах примеси
$\mu \sim T^0$	$\mu \sim T^0$
Рассеяние на акустических фононах	Рассеяние на акустических фононах
$\mu \sim T^{-\frac{3}{2}}$	$\mu \sim T^{-1}$
Рассеяние на оптических фононах	Рассеяние на оптических фононах
$\mu \sim T^{-\frac{1}{2}}$	$\mu \sim T^{-1}$



//для справки//

Температурная зависимость электропроводности.

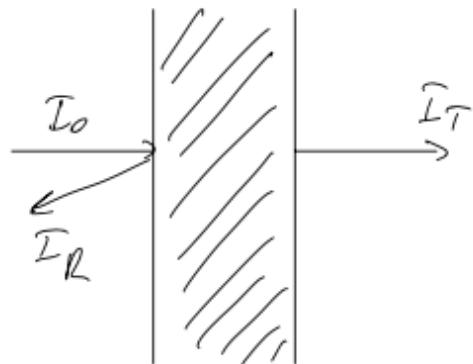


2.17 Оптические характеристики полупроводников.

Определение параметров полупроводников по спектрам оптического поглощения.

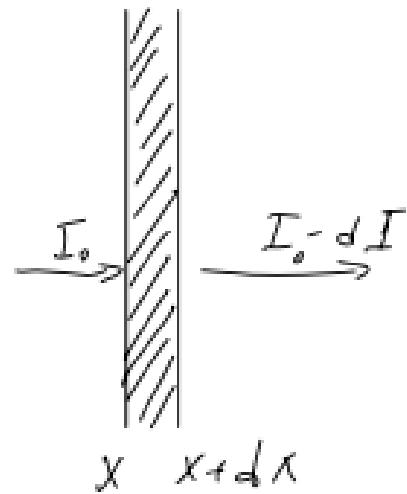
I_0 — интенсивность светового излучения (количество квантов на единицу площади в единицу времени).

Отражение и пропускание



$$R = \frac{I_R}{I_0}, T = \frac{I_T}{I_0}$$

Поглощение



$$dI = -\alpha I dx, I = I_0 e^{-\alpha x}$$

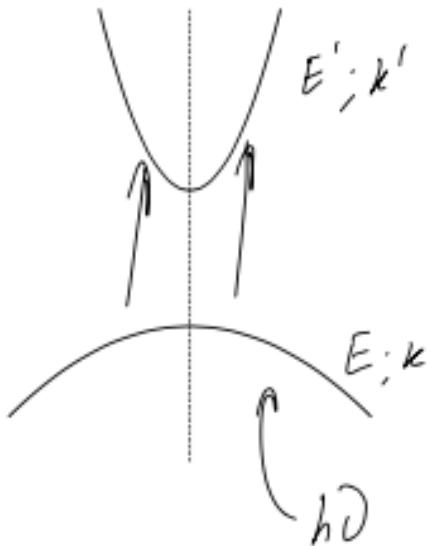
$R(\lambda; \nu; \hbar\nu)$ — спектр отражения $T(\lambda; \nu; \hbar\nu)$ — спектр пропускания $\alpha(\lambda; \nu; \hbar\nu)$ — спектр поглощения

α — главный коэффициент (все остальные можно выразить через него).

Определение параметров полупроводников по спектрам оптического поглощения.

Собственное поглощение

Реализуется в полупроводниках с прямозонной структурой, у которых экстремумы валентной зоны расположены в одной точке зоны Бриллюэна.

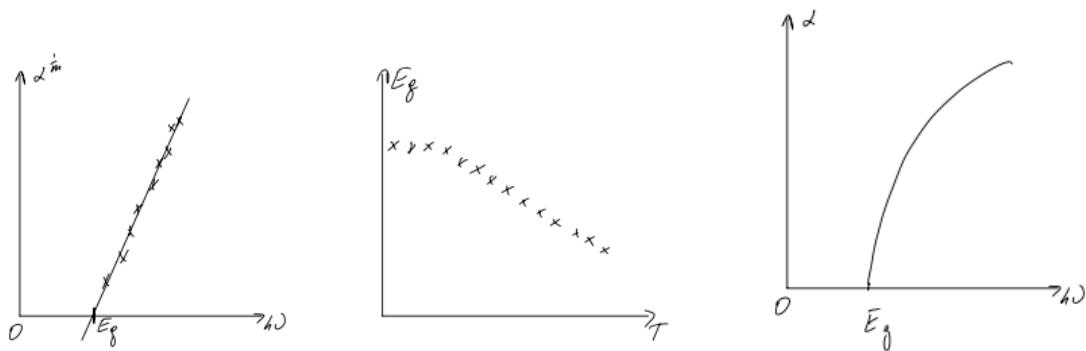


$$E' = E + h\nu$$

$$\hbar k' = \hbar k + \hbar k_p$$

k_p — волновой вектор фотона. $k_p \ll \Delta k_{\text{З.Бр.}}$, можно принебречь им в законе сохранения энергии.

$\alpha = A(h\nu - E_g)^m$, нужно построить зависимость в линейном виде и найти энергию запрещённой зоны (так определяют зависимость $E_g(T)$).

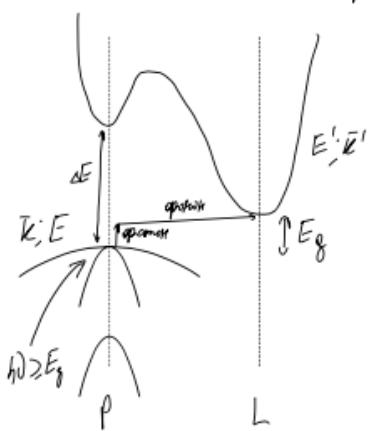


Собственное поглощение. Непрямые переходы.

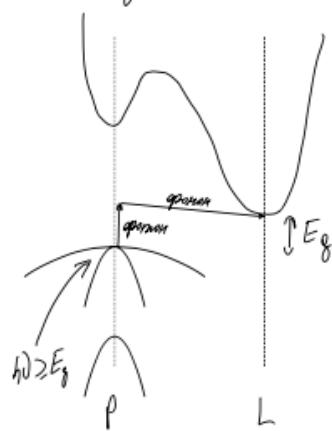
Реализуется в непрямой зонной структуре. Требуется участие частицы с волновым вектором, стравнимым с зоной Бриллюэна.

$$E' = E + h\nu \pm E_p$$

С понижением температуры



С выпускаем фононами

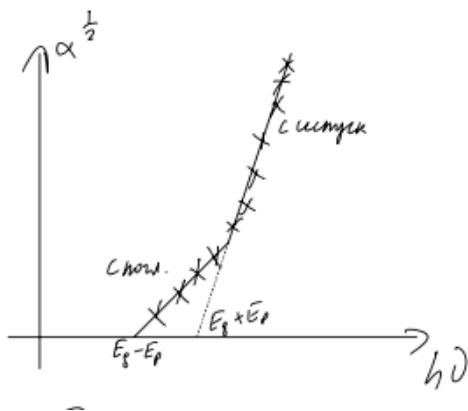


$$\hbar\bar{k}' = \hbar\bar{k} + \underbrace{\hbar\bar{k}_{\text{фотона}}}_{=0} + \hbar\bar{k}_p$$

$$N_p^0 = \frac{1}{e^{\frac{E_g}{kT}} - 1}$$

$$\alpha(h\nu) = \underbrace{\Delta_1 f_1(N_p)(h\nu - E_g - E_p)^2}_{\text{с испусканием фононов}} + \underbrace{A_2 f_2(N_p)(h\nu - E_g + E_p)^2}_{\text{с поглощением фононов}}$$

E_p — энергия фонона на краю зоны Бриллюэна.



При понижении температуры исчезает ветвь, отвечающая за испускание с поглощением.

Осцилляции межзонного магнитосопротивления.

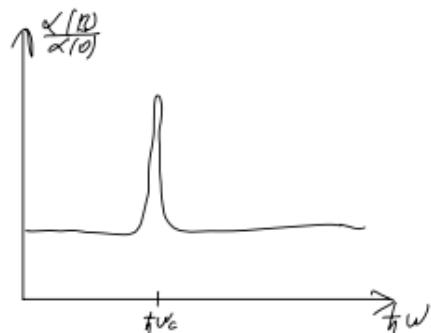
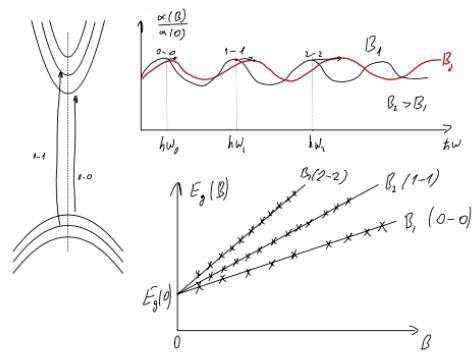
Осцилляции межзонного магнитосопротивления позволяют с высокой точностью определить энергию запрещённой зоны.

$B \gg 0, B \parallel z$

Циклотронный резонанс.

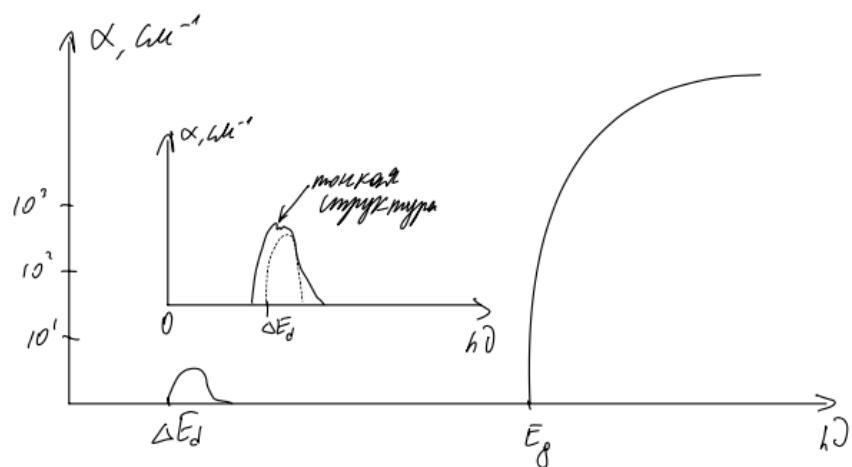
Позволяет точно определить циклотронную массу.

$$m_c^* = \frac{eB}{\omega_{\text{рез}}}$$



Примесное поглощение.

При высокой чувствительности измерительного оборудования на спектре поглощения можно наблюдать пики примесного поглощения, по которым можно определить энергию донорного уровня и положение возбуждённых уровней (из тонкой структуры).

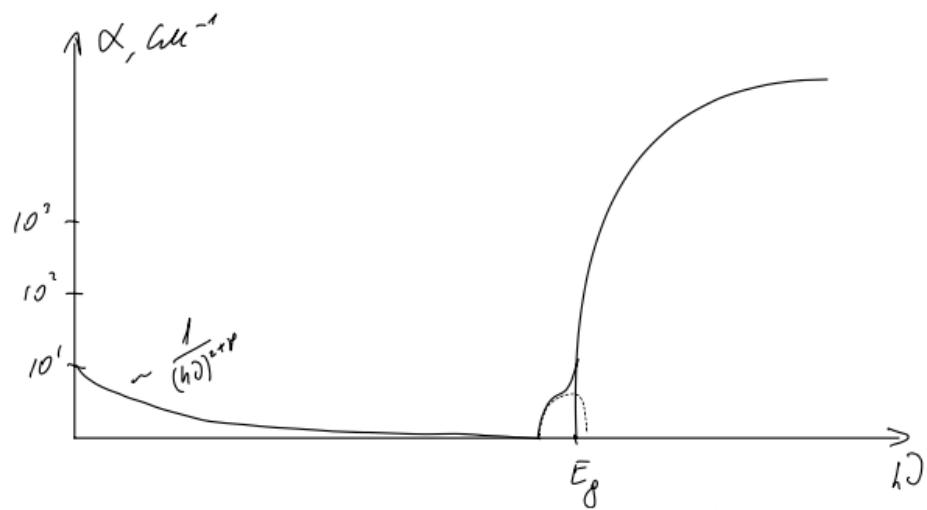


Поглощение свободных носителей заряда.

1. Только непрямые переходы.
2. Участие фононов и дефектов решётки.

Даёт информацию об основном механизме рассеяния.

$$\alpha \sim \frac{1}{(h\nu)^{2+p}}$$



$$p = \begin{cases} -\frac{1}{2} & \text{точечные дефекты, дислокации, акустические фононы} \\ 0 & \text{нейтральные атомы примеси} \\ \frac{1}{2} & \text{оптические фононы} \\ \frac{3}{2} & \text{ионы примеси} \end{cases}$$

2.18 Сверхпроводимость. Критические температура, магнитное поле, ток. Эффект Мейсснера.

Сверхпроводимость - свойство некоторых материалов обладать нулевым электрическим сопротивлением при достижении ими температуры ниже определённого значения (критическая температура). Основные свойства: нулевое сопротивление, нулевое внутреннее магнитное поле.

Критическая температура - температура, ниже которой проводник находится в сверхпроводящем состоянии

Магнитные явления, появляющиеся в с/п состоянии, не могут быть в полной мере описаны уравнением Maxwella. Рассмотрим случай идеального проводника в отсутствие магнитного поля: $\underline{E} = j\rho \Rightarrow$ при $\rho = 0 \Rightarrow$ из $\text{rot} \underline{E} = -\frac{1}{c} \frac{\delta \underline{B}}{\delta t}$ (ур Maxwella) $\Rightarrow \underline{B} = \text{const}$ при $\rho = 0$

Рассмотрим процесс охлаждения проводника до сверхпроводящего состояния ($T < T_c$). Исходя из написанных выше соотношений при достижении температур ниже критической температуры магнитное поле внутри проводника должно сохранить значение, которое проводник имел при $T = T_c$, а дальнейшее охлаждение не должно влиять на внутреннее магнитное поле. Получаем ситуацию, когда в зависимости от последовательности приложения внешнего магнитного поля и охлаждения образца до критической температуры получим разные значения внутреннего магнитного поля в сверхпроводящем состоянии.

В первом случае, при $T > T_c$ и внешнем магнитном поле $B_{\text{ext}} = 0$ (левая часть рис 1а.), внутреннее магнитное поле при $T < T_c$ будет нулевым даже в случае, если в с/п состоянии мы приложим внешнее магнитное поле. Таким образом в сверхпроводящем состоянии при приложении внешнего магнитного поля возникающие токи в образце с нулевым сопротивлением компенсировали внешнее магнитное поле и выталкивали бы его, а при выключении токи пропадали.

Во втором случае, при $T > T_c$ и внешнем магнитном поле $B_{\text{ext}} \neq 0$, магнитное поле внутри проводника в с/ состояниии будет равно B_{ext} . Таким образом в данном случае если в с/п состоянии убрать внешнее магнитное поле, то внутреннее магнитное поле будет сохраняться и иметь значение B_{ext} . (правая часть рисунка А.).

Однако в случае реального сверхпроводника проводника не только $\frac{\delta \underline{B}}{\delta t} = 0$ при $\rho = 0$, но и $\underline{B} = 0$ — **эффект Мейсснера**. Другими словами, постоянные поверхностные токи создают магнитное поле, противоположное внешнему магнитному полю (выталкивают внешнее магнитное поле) (рис В). На образование поверхностных токов затрачивается энергия, которая будет зависеть от прикладываемого к образцу поля. Таким образом, если превысить **критическое магнитное поле**, то сверхпроводимость разрушается и проводник переходит в нормальное состояние (рис.2).

Зависимость критического поля от температуры имеет вид $H_c \approx H_0 \left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)\right]^2$, где H_0 — H_c при $T = 0$ K

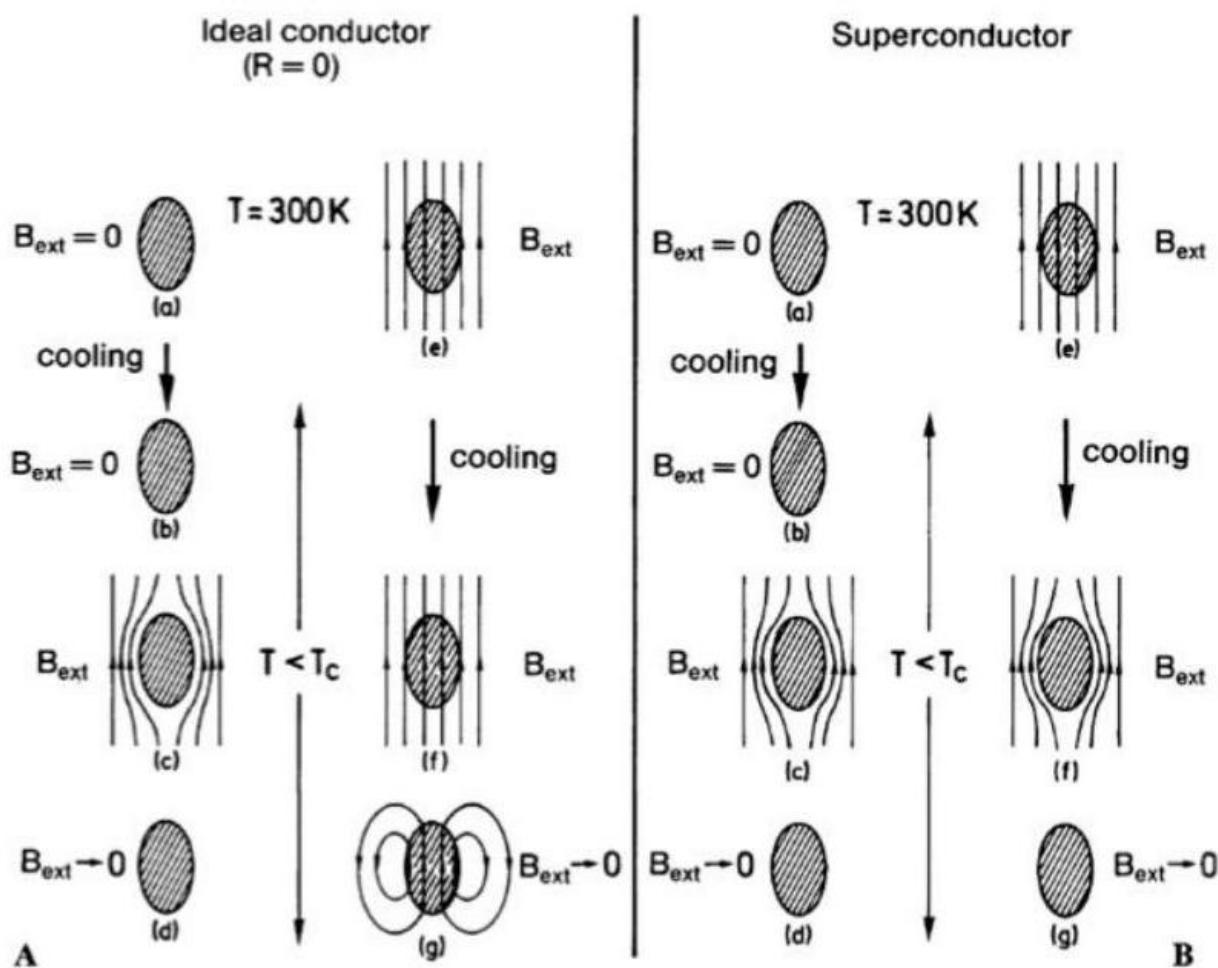
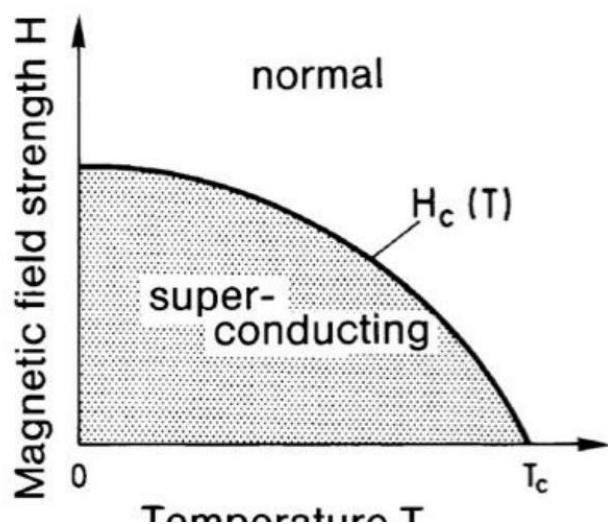


Иллюстрация изменений, происходящих в образце при переходе в с/п состояние при приложении в разном порядке внешнего магнитного поля и изменения температуры для а) идеального проводника; б) сверхпроводника



Зависимость критического поля от температуры

Однако магнитное поле связано уравнением Максвелла с током, протекающим в замкнутом проводнике следующим образом: $j = \text{rot } H$. Таким образом можем ввести еще один параметр - **критический ток** j_s , связанный с критическим магнитным полем.

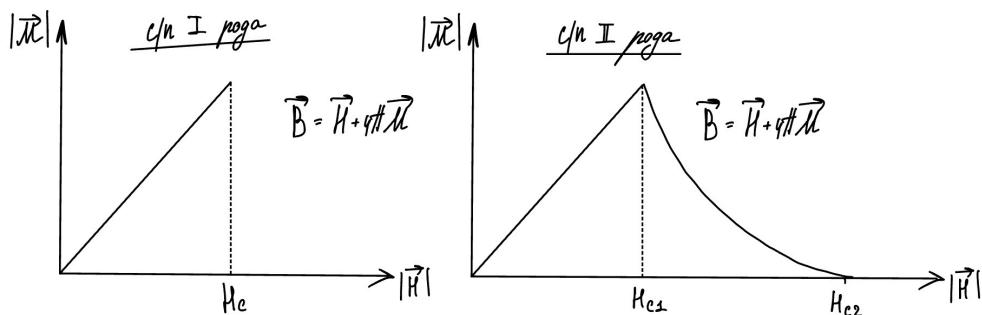
2.19 Глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник. Сверхпроводники 1-го и 2-го рода. Вихри Абрикосова.

В сверхпроводнике внешнее магнитное поле не проникает внутрь проводника (эффект Мейснера). Однако магнитное поле не может быть вытолкнуто из всего объема сверхпроводника вплоть до самой поверхности \Rightarrow на поверхности существует ∞ плотность тока \Rightarrow поле проникает в образец в тонкий приповерхностный слой в котором B , снижается до 0 и текут экранирующие токи. Толщина приповерхностного слоя - глубина проникновения. Оласть сверхпроводника, куда магнитное поле не проникает - ядром Мейснера.

(Стоит заметить, что проникновение поля в сверхпроводник может зависеть и от формы образца. К примеру для сверхпроводящего шара в однородном поле H_0 будет наблюдаться сгущение линий поля на его «экваторе» — в этой области может возникнуть ситуация, когда $H > H_c$. В такой ситуации реализуется промежуточное состояние с чередующимися областями сверхпроводящей и нормальной фазы.)

При $H > H_c(H_{c1})$ поведение сверхпроводников различается. Для сверхпроводников I-го рода поле свободно и равномерно проникает в толщу образца, сверхпроводимость разрушается.

Для сверхпроводников II рода при полях $H_{c1} < H < H_2$ возникает промежуточное состояние (фаза Шубникова), характеризующееся возникновением вихрей Абрикосова. Магнитное поле при этом проходит в образец.



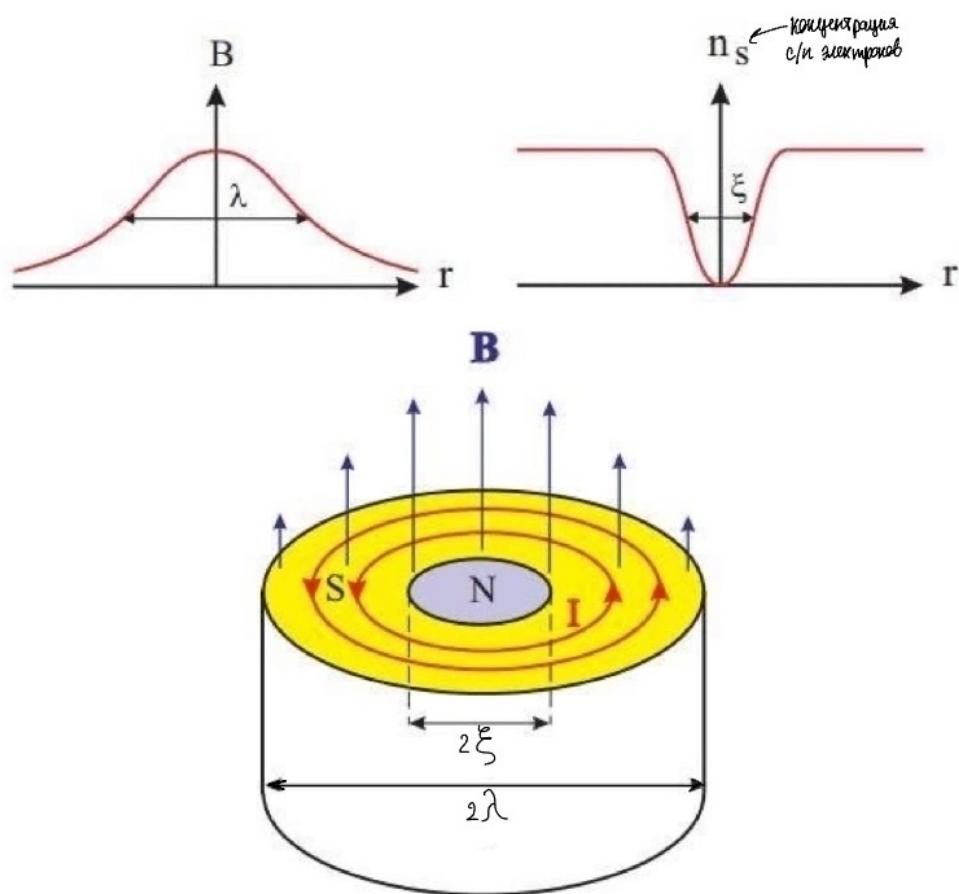
В теории Гинзбурга-Ландау вводится дополнительный параметр ξ — длина когерентности, определяет длину от поверхности, на которой концентрация сверхпроводящих электронов выходит на т/д равновесное состояние. K/ξ — параметр Гинзбурга-Ландау (λ - лондоновская глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник, ξ — длина когерентности); в сверхпроводниках 1-го рода $K \ll 1 (\xi > \lambda)$.

В сверхпроводниках 2-го рода поверхностная энергия на границе раздела обычной и сверхпроводящей фаз < 0 , $\lambda \gg \xi$, по формуле:

$$\sigma_{\text{пов}} = (\xi - \lambda) \frac{H_{\text{kp}}^2}{8\pi}$$

Таким образом, образование новых границ сверхпроводящая фаза/обычная фаза выгодно в с/g II-ого рода. В объёме сверхпроводящей фазы образуются нити обычной фазы. У поверхности этих нитей текут вихревые токи, создающие магнитное поле. ξ - длина когерентности - интервал, на котором меняется плотность сверхпроводящих электронов, поэтому ξ характеризует размер (радиус) нити обычной фазы. λ - глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводящую фазу, поэтому λ характеризует величину интервала вблизи нити обычной фазы, в которой протекают вихревые токи и имеется затухающее магнитное поле. Магнитное поле затухает по мере удаления от нити обычной фазы.

Итого, вихрь Абрикосова устроен так. В центре вихря находится нормальное (несверхпроводящее) ядро радиусом ξ , сквозь которое нитью проходит магнитный поток величиной $\Phi_0 = h/2e = 2 \cdot 10^{-7}$ В6 (ровно 1 квант потока). Вокруг ядра в слое толщиной λ циркулирует сверхпроводящий ток.



2.20 Физические свойства сверхпроводников.

Размагничивающий фактор. Промежуточное состояние, разрушение сверхпроводимости током и магнитным полем.

Электрические свойства

Падение сопротивления в точности до 0 при $T < T_c$.

Эффект Джозефсона стационарный: Через слабую связь двух сверхпроводников (несверхпроводящую прослойку) течет сверхпроводящий ток (если он достаточно слаб). Это следствие того, что сверхпроводимость - кооперативное квантовое явление.

Эффект Джозефсона нестационарный: увеличим ток через слабую связь так, чтобы на ней возникла разность потенциалов. Помимо постоянной составляющей U напряжение будет иметь еще и переменную компоненту, осциллирующую с частотой ω , причем $\hbar\omega = 2eV$

Магнитные свойства

- Магнитные силовые линии вне сверхпроводников всегда касательны к его поверхности. $\operatorname{div} \vec{B} = 0$, значит $\vec{B}_n^{ext} = \vec{B}_n^{int}$ (нормальные компоненты равны внутри и снаружи), но $\vec{B}_n^{int} = 0$ в СП, значит и $\vec{B}_n^{ext} = 0$.
- По поверхности СП во внешнем магнитном поле всегда течет поверхностный ток. Внутри ток $j_s = 0$, т.к. $\operatorname{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c} j$, а $\vec{B} = 0$. Рассмотрим контур «1-2-3-4-1»:



$$\oint B dl = \int_1^2 B dl + \int_2^3 B dl + \int_3^4 B dl + \int_4^1 B dl = H_0 * 1_{12} + 0 + 0 + 0.$$

$$\int_2^3 B dl = \int_4^1 B dl = 0, \text{ т. } B \perp dl.$$

По ур. Максвелла $\oint B dl = \frac{4\pi}{n} I$, следовательно

$$H_0 l_{12} = \frac{4\pi}{c} j_{\text{non}} l_{12}.$$

Отсюда следует связь между порерхостным током и магнитным полем на поверхности сверхпроводника:

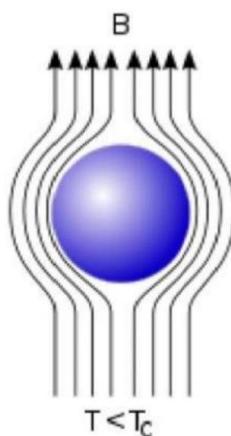
$$\mathbf{j}_{\text{nos}} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{n}, \mathbf{H}_0]$$

где \mathbf{n} - единичный вектор внешней нормали к поверхности сверхпроводника.

- В односвязном сверхпроводнике токи по поверхности текут только тогда, когда СП находится в магнитном поле. Если токи сохранялись бы и при отключении внешнего магнитного поля, то в толще СП возникало бы поле, что невозможно.
- Эффект Мейсснера: При охлаждении сверхпроводника в небольшом ($H < H_c$) магнитном поле при температуре сверхпроводящего перехода магнитное поле выталкивается из толщи сверхпроводника. Выталкивание внешнего магнитного поля из сверхпроводника происходит за счет возникновения поверхностных токов.

Размагничивающий фактор:

При приложении магнитного поля к образцу цилиндрической формы параллельно оси цилиндра разрушение сверхпроводимости сверхпроводников 1-го рода происходит при критическом поле H_c . Однако более сложным будет процесс разрушения, если цилиндр поместить в поперечное магнитное поле.



Влияние экранирующих токов распространяется за пределы сферы и искажает магнитные силовые линии. При этом в точках, удаленных от сферы влияние экранирующих токов пренебрежительно мало, в то время как для близких к сфере точек происходит сгущение магнитных линий, что приводит к увеличению плотности силовых линий вблизи поверхности образца. Таким образом, вблизи поверхности H может превысить H_c , что приведет к частичному разрушению сверхпроводящего состояния. Таким образом произойдет разбиение сверхпроводника на полосы нормальной и сверхпроводящей фазы. Данный эффект легче всего наблюдается для сверхпроводников первого рода с определенной геометрией (шар, эллипс, цилиндр если поле перпендикулярно оси). При сгущении линий до $H > H_c$ образуется промежуточное состояние - состояние, при котором сверхпроводник 1-го рода не является ни полностью сверхпроводником, ни полностью проводником.

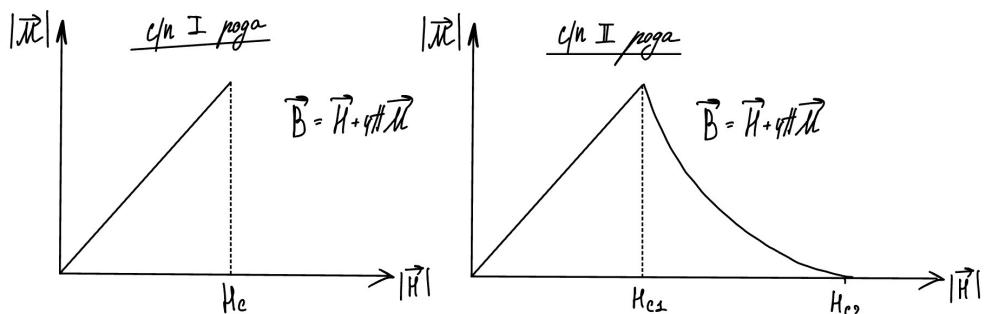
Пусть до перехода тела в промежуточное состояние максимальное поле на поверхности равно H_m . При этом внешнее поле вдали от тела равно H_0 , причем коэффициент пропорциональности зависит от формы тела: $H_m = \frac{H_0}{(1-n)}$. В этом

выражении n – размагничивающий фактор. При $H_m = H_c$ произойдет разрушение сверхпроводящего состояния.

Геометрическая форма	Размагничивающий фактор, n
Цилиндр (параллельно оси)	0
Цилиндр (перпендикулярно оси)	1/2
Шар	1/3
Пластина (перпендикулярно плоскости)	1

Для сверхпроводников второго рода разрушение сверхпроводимости происходит в несколько этапов: Выделяют H_{c1} и H_{c2} .

1. $H < H_{c1}$ поле не проникает в сверхпроводник. $B = 0, R = 0$.
2. $H = H_{c1}$ в сверхпроводнике появляются вихри Абрикосова, поле проникает в материал.
3. Между H_{c1} и H_{c2} материал находится в смешанном состоянии. $B \neq 0, R = 0$
4. $H = H_{c2}$ вихри соприкасаются несверхпроводящими сердцевинами, и в толще материала становится несверхпроводящим.
5. $H > H_{c2}$ сверхпроводимость разрушается.



Разрушение сверхпроводимости током

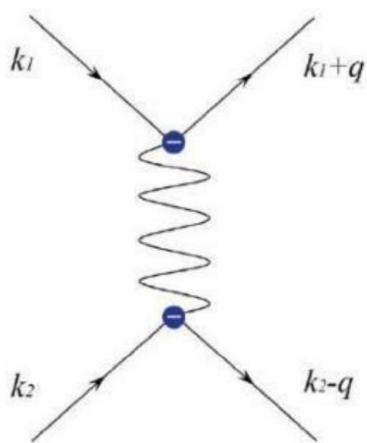
Критический ток – ток, при котором исчезает сверхпроводимость. В сверхпроводниках I-го рода действует правило Сильсби. Величина критического тока такова, что он создает на поверхности проводника критическое магнитное поле.

$$H_c = \frac{I_c}{2\pi r} \Rightarrow I_c = H_c \times 2\pi r$$

Для сверхпроводников 2-го рода правило Сильсби неприменимо. Критический ток в сверхпроводниках 2-го рода необычайно чувствителен к структуре образца и у одного и того же материала может меняться на несколько порядков величины.

2.21 Электрон-фононное взаимодействие. Куперовские пары. Основные положения теории сверхпроводимости Бардина-Купера-Шриффера.

В свободном электронном газе единственным типом взаимодействия является отталкивание. Проходя кристаллическую решетку, электрон, имеющий отрицательный заряд взаимодействует с положительно заряженными узлами решетки, деформируя ее. Наблюдающуюся деформацию можно описать в виде квазичастицы - фона, который появляется в ходе пролёта электрона. Эта деформация вызывает избыточный положительный заряд, что влияет на второй электрон, образуется куперовская пара электронов, где фононы являются медиатором взаимодействия между ними.



Процесс электрон-фононного взаимодействия, где k_1, k_2 – волновые векторы электронов, q - волновой вектор образующегося фона.

Свойства куперовской пары:

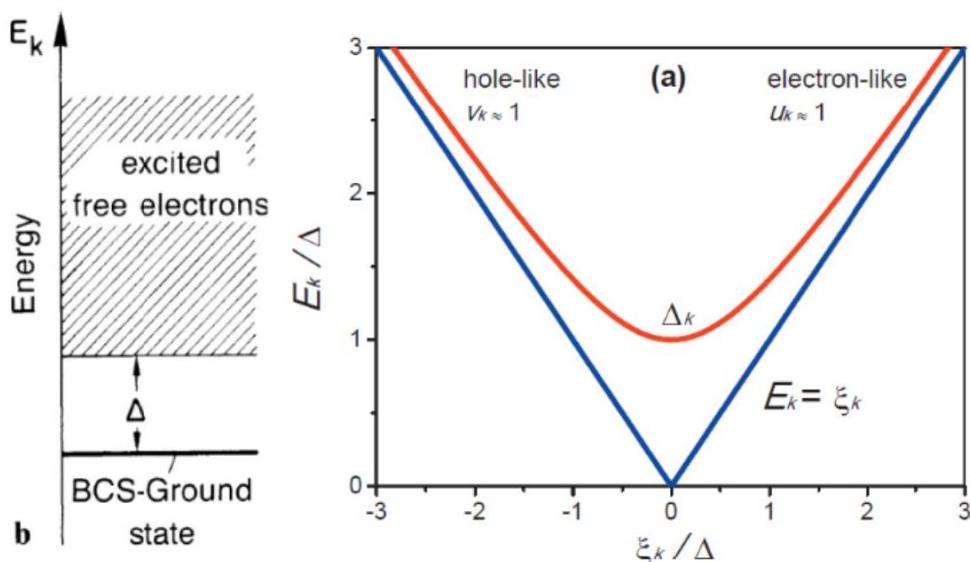
- Спины электронов антипараллельны (\Rightarrow бозоны)
- Существование обусловлено электрон-фононным взаимодействием
- Меньшая энергия, чем сумма энергий двух электронов (выигрыш в энергии)
- В образовании куперовской пары участвуют электроны вблизи уровня Ферми с энергиями в интервале $[E_F - \hbar\omega D; E_F + \hbar\omega D]$, где ωD – дебаевская частота фона

Основные предположения теории БКШ:

- Нормальное состояние неустойчиво при наличии притяжения между электронами
- При $T = 0$ К энергии корреляции между куперовскими парами одинаковы как для сверхпроводящей фазы, так и для нормальной фаз

- суммарный импульс пары = 0

Теория Бардина-Купера-Шриффера (БКШ) основывается на куперовских парах, существующих за счёт электрон-фононного взаимодействия. В ходе образования куперовской пары, как упоминалось ранее, происходит выигрыш в энергии, а значит энергия невозбуждённого состояния уменьшается. На уровне невозбуждённого состояния находится большое количество куперовских пар, что объясняет макроскопические свойства сверхпроводимости. На спектре возбуждения электронов энергия возбуждения равна $E = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$ где ξ – кинетическая энергия электрона, Δ – выигрыш энергии при образовании куперовской пары.



- a) Спектр возбуждения в теории БКШ, б) спектр возбуждения для нормального проводника (синее) и сверхпроводника (красное)

2.22 Закон дисперсии. Энергетическая щель. Плотность состояний элементарных возбуждений. Зависимость щели от температуры.

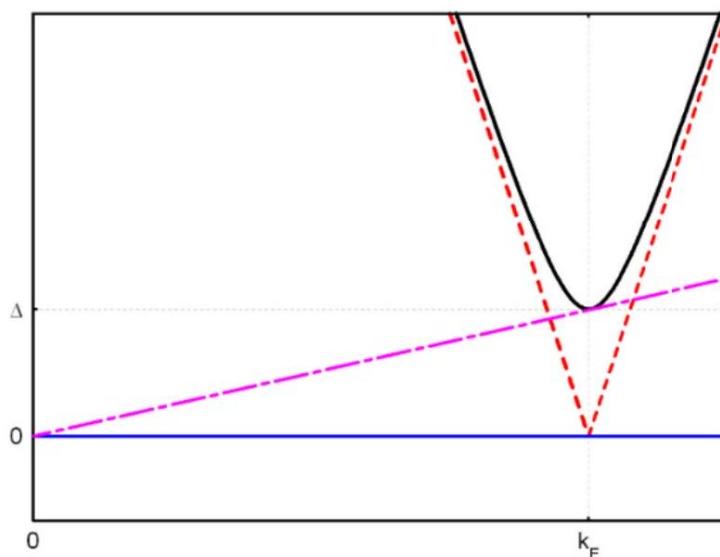
Электрон, пролетая через кристаллическую структуру деформирует ее. Деформация вызывает избыточный положительный заряд, что влияет на второй электрон. Взаимодействие между данными электронами происходит с участием фонона, который рождается при деформации решетки первым электроном и поглощается вторым электроном. В результате деформации образуется “куперовская пара” происходит выигрыш в энергии, а значит энергия невозбуждённого состояния уменьшается. В образовании куперовской пары при $T = 0$ К участвуют электроны вблизи уровня Ферми с энергиями узкого интервала $[E_F - \hbar\omega D; E_F + \hbar\omega D]$, где ωD –

дебаевская частота фонона. Таким образом, в основном состоянии ($T = 0$ K) с/п все электроны имеют энергию из данного энергетического диапазона и находятся в состоянии бозе-конденсата.

Возбуждения в металле затрагивают только электроны с энергией вблизи от фермиевской. Эти возбуждения можно описывать либо на языке перехода «реального» электрона из состояния под поверхностью Ферми, либо на языке рождения пары частица-античастица («электрон-дырка»). При этом для малых отклонений от поверхности Ферми можно считать спектр этих частиц и античастиц линейным и обращающимся в ноль при $k = k_F : \varepsilon = \hbar v_F |k - k_F|$

Эксперимент указывает на появление «щели» в спектре возбуждений сверхпроводящего состояния. Причём, так как щель непрерывно возникает при переходе в сверхпроводящее состояние, это означает, что бесщелевой спектр электронных возбуждений нормального металла должен плавно преобразоваться в щелевой спектр возбуждений в сверхпроводнике. Феноменологический вид вид спектра возбуждений с квадратичным минимумом на фермиевском волновом векторе представлен на рисунке 1. С учётом требования непрерывности перехода спектра квазичастиц сверхпроводника в спектр квазичастиц нормального металла, можно «угадать» вид этого спектра:

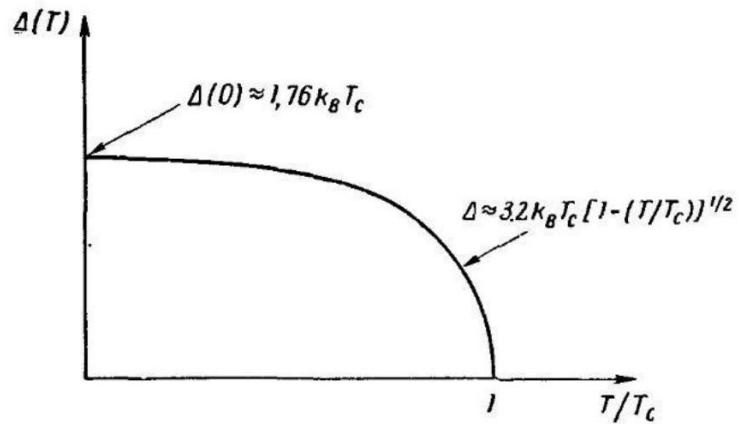
$$\varepsilon(k) = \sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v_F^2 (k - k_F)^2}, \Delta - \text{выигрыш энергии при образовании куперовской пары.}$$



Энергетический спектр возбуждений в нормальном металле (пунктир) и сверхпроводнике (сплошная линия). Штрих-пунктирная линия показывает построение критической скорости Ландау (критерий сверхтекучести Ландау). Нулевой уровень соответствует энергии основного состояния.

Из теории БКШ можно получить приближенное соотношение для ширины щели при $T = 0$ K : $\Delta \approx 2\hbar\omega_D \exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right]$, где $N(0)$ плотность состояний элементарный возбуждений при 0 K; V - константа взаимодействия (матричный элемент рассеяния электронов на фононах) При температурах выше T_c сверхпроводимость отсутствует

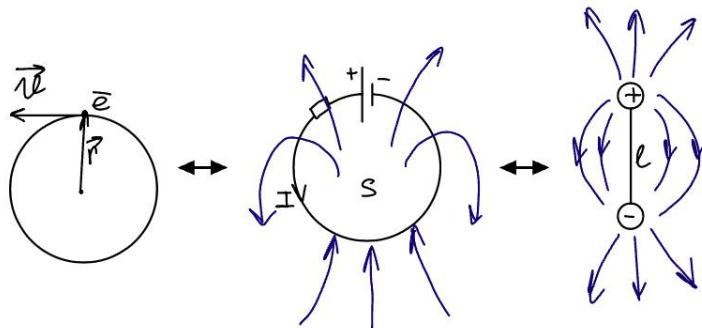
$$\Rightarrow \Delta = 0;$$



Энергетический спектр возбуждений в нормальном металле (пунктир) и сверхпроводнике (сплошная линия). Штрих-пунктирная линия показывает построение критической скорости Ландау (критерий сверхтекучести Ландау). Нулевой уровень соответствует энергии основного состояния.

2.23 Спиновый и орбитальный магнитные моменты атомов. Влияние кристаллического поля на магнетизм атомов. Магнитные моменты атомов переходных и редкоземельных элементов

Рассмотрим электрон, который движется по окружности. Поле, которое создаёт этот электрон выглядит как поле диполя. Такая система аналогична витку с током, где сила тока равна заряду, делённому на период вращения: $I = \frac{eV}{2\pi r}$.



Формула дипольного момента кольца с током: $\vec{m} = \frac{I\vec{S}}{c}$ (\vec{m} – величина дипольного момента)

Согласно классической электродинамике, магнитный момент m кольца с током, охватывающего площадь S , равен (в системе СГС):

$$\vec{m} = \frac{1}{c} (\pi r^2) \frac{V}{2\pi r} e = \frac{e}{2c} V r \frac{m_e}{m_e} = L \frac{E}{2cm_e}$$

\vec{L} – **орбитальный момент** количества движения электрона. Если учесть, что орбитальный (механический) момент электрона может принимать лишь дискретные значения, кратные постоянной Планка, то и значения магнитного момента электрона m могут быть только дискретными и магнитный момент электрона кратен магнетону Бора. Следовательно, μ_B играет роль элементарного магнитного момента — «кванта» магнитного момента электрона.

$$\vec{m} = L * \frac{E}{2cm_e}$$

$$\vec{L} \Rightarrow \begin{cases} |\vec{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)} \\ L_z = \hbar(L, -L-1, -L-2, \dots -L) \\ \frac{e\hbar}{2m_ec}\sqrt{L(L+1)} \end{cases}$$

$$\vec{m} \Rightarrow \frac{e\hbar}{2m_ec}(L, L-1, L-2, \dots -L)$$

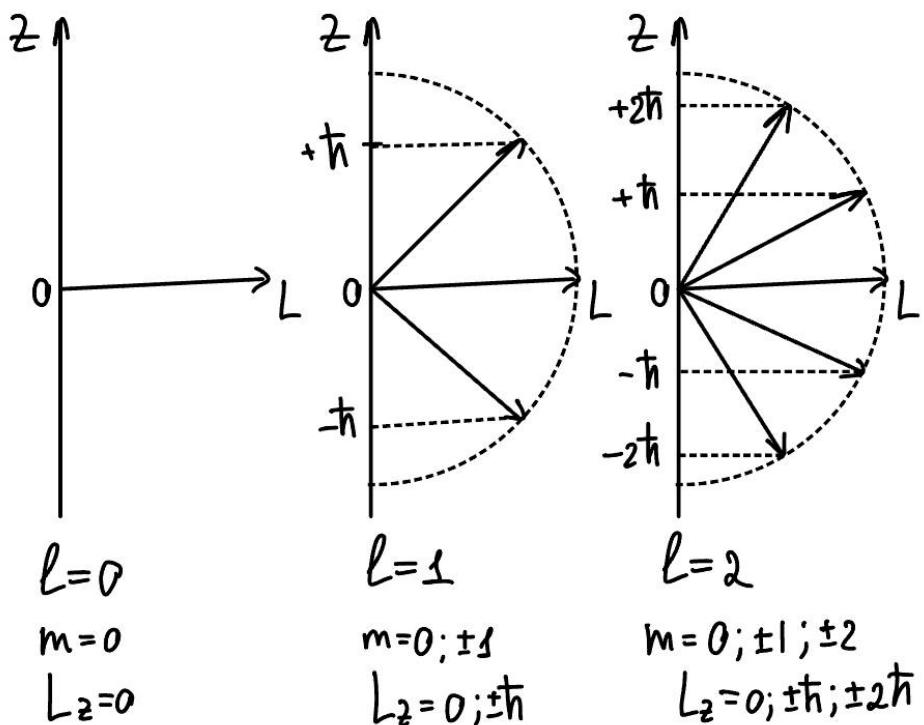
$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_ec}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_ec} \approx 10^{-20} [\text{emu}]$$

$$\mu_B = 0,927 * 10^{-20} \text{emu} [\text{CC}]$$

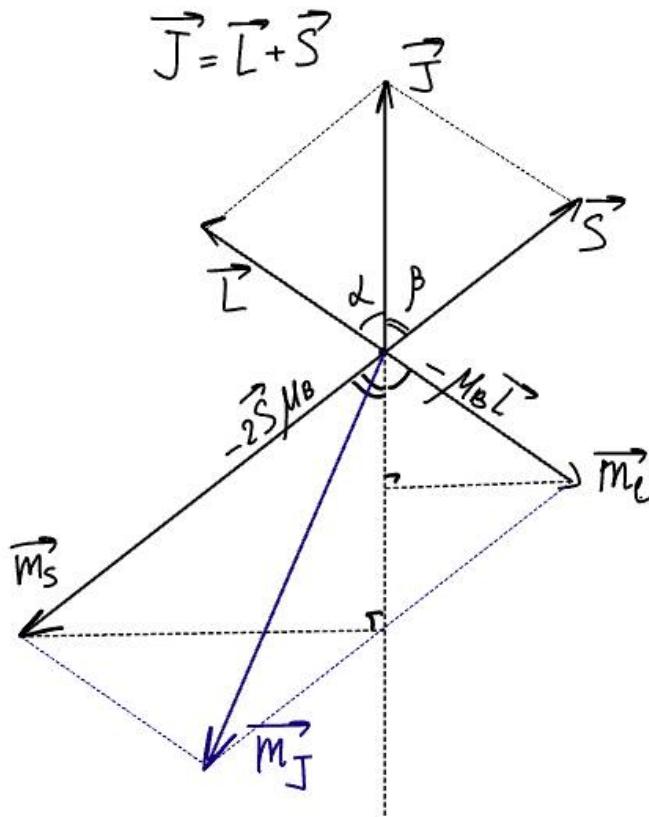
$$\mu_B = 0,927 * 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}} [\text{CH}]$$

Схема возможных ориентаций орбитального момента:



Спиновый магнитный момент \vec{S} Полный магнитный момент \vec{J} электрона равен сумме векторов орбитального магнитного момента электрона и спинового магнитного момента. (Нас интересует только та часть магнитного момента, которая сонаправлена с вектором J .)

$$m_J = \mu_B |\vec{L}| * \cos \alpha + 2\mu_B |\vec{S}| * \cos \beta$$



по теореме косинусов:

$$\begin{aligned} |\vec{S}| &= |\vec{L}|^2 + |\vec{J}|^2 - 2|\vec{L}||\vec{J}| \cos \alpha \\ \Rightarrow \cos \alpha &= \frac{|\vec{L}|^2 + |\vec{J}|^2 - |\vec{S}|^2}{2|\vec{L}||\vec{J}|} \\ \Rightarrow \cos \beta &= \frac{-|\vec{L}|^2 + |\vec{J}|^2 + |\vec{S}|^2}{2|\vec{L}||\vec{J}|} \end{aligned}$$

$$m_J = \mu_B \left(\frac{|\vec{L}|^2 + |\vec{J}|^2 + |\vec{S}|^2}{2|\vec{J}|} + 2 \frac{-|\vec{L}|^2 + |\vec{J}|^2 + |\vec{S}|^2}{2|\vec{J}|} \right) * \frac{|\vec{J}|}{|\vec{J}|} = \mu_B \left(\frac{-|\vec{L}|^2 + |\vec{J}|^2 + |\vec{S}|^2}{2|\vec{J}|^2} \right) |\vec{J}|;$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$\left(\frac{-|\vec{L}|^2 + |\vec{J}|^2 + |\vec{S}|^2}{2|\vec{J}|^2} \right) - g - \text{фактор (фактор Ланде)}$$

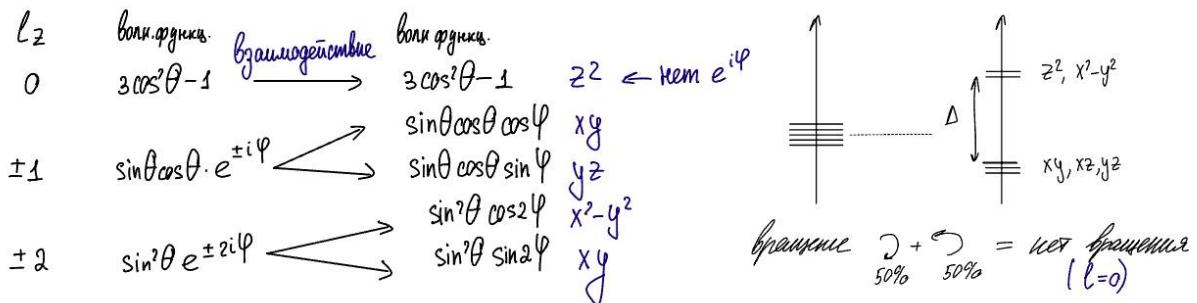
$$\text{T. e. } m_J = \mu_B g |\vec{J}| \Rightarrow \vec{m} = \mu_B g \vec{J}$$

$$\begin{cases} |\vec{m}| = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)} \\ m_z = \mu_B g (J, J-1, \dots, -J) \end{cases}$$

3d-элементы проявляют чисто спиновый магнитный момент: L=0, S ≠ 0, g=2

Это связано, с тем, что орбитальный момент заморожен в результате воздействия кристаллического поля. d-металлы обладают большим радиусом d оболочки ⇒ d-электроны не заэкранированы, следовательно, они подвергаются

воздействию кристаллического поля: как бы «прикрепляются» к решётке. Таким образом, орбитальный момент «заморожен». Реализуется чисто спиновый механизм взаимодействия.

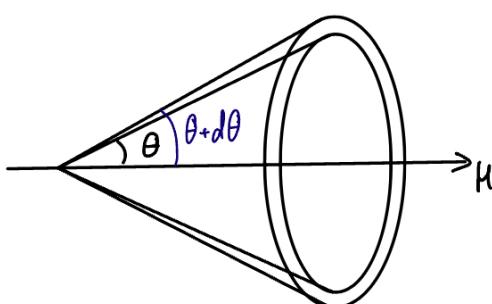


РЗЭ – 4f электроны не взаимодействуют с кристаллическим полем, так как 4f электроны хорошо экранированы. $J = L + S$, $S \neq 0$, $L \neq 0$, $g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$ (эта формула для g-фактора работает для всех РЗЭ, кроме Sm и Eu).

2.24 Парамагнетизм. Функции Ланжевена и Бриллюэна. Закон Кюри-Вейсса.

Парамагнетики — вещества, которые намагничиваются во внешнем магнитном поле в направлении внешнего магнитного поля $J \uparrow\uparrow H$ и имеют положительную магнитную восприимчивость ($\xi \ll 1$), магнитная проницаемость незначительно отличается от 1 ($\mu > \approx 1$).

Рассмотрим классическую теорию парамагнетизма Ланжевена. Пусть имеется идеальный газ магнитных диполей с магнитными моментами μ_0 и с концентрацией N. При этом взаимодействие между диполями явно не учитывается, но считается, что диполи участвуют в тепловом движении и при столкновениях направления магнитных моментов меняются. Если такой газ магнитных диполей находится в магнитном поле, то каждая диполь обладает потенциальной энергией: $U = -\mu_0 H \cos(\theta)$, где θ — угол между μ_0 и H.



Допустим, что для распределения диполей по энергии выполняется статистика Больцмана. Тогда вероятность того, что диполь направлен под углом θ к направлению

поля пропорциональна: $e^{-\frac{U}{kT}} = e^{\frac{\mu_0 H \cos \theta}{kT}} = e^{a \cos \theta}$, где $a = \frac{\mu_0 H}{kT}$

Обозначим вероятность того, что диполь составляет с полем угол в интервале θ и $\theta + d\theta$, как $p(\theta)$. Для намагниченности M , т.е. магнитного момента единицы объема имеем:

$$M = \mu_0 N \int_0^\pi \cos \theta p(\theta) d\theta$$

$$M = \mu_0 N \left(\frac{e^a + e^{-a}}{e^a - e^{-a}} - \frac{1}{a} \right) = \mu_0 N \left(\coth a - \frac{1}{a} \right) = \mu_0 N L(a)$$

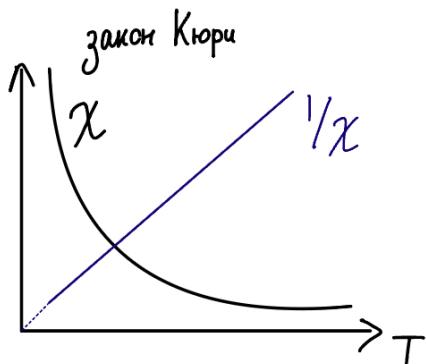
где $L(a)$ - **функция Ланжевена**.

При $a \rightarrow \infty$, что соответствует случаю, когда магнитная энергия много больше тепловой, $L(a) \rightarrow 1$ и $M = \mu_0 N$, т.е. все диполи направлены по полю. При комнатной температуре такое условие реально не достижимо, так как при магнитном моменте в μ_B необходимо очень сильное поле (порядка 10^6 Э, но при $1\text{K} \frac{\mu_N}{kT} \sim 1$ уже при 10^4 Э)

При условии $a \ll 1$, $L(a)$ можно разложить в ряд:

$$L(a) = \coth a - \frac{1}{a} = \frac{1}{a} + \frac{a}{3} - \frac{a^3}{45} + \dots - \frac{1}{a} \approx \frac{a}{3}$$

Тогда для намагниченности получим: $M = \frac{\mu_0 N a}{3} = \frac{\mu_0^2 N H}{3kT}$, и для восприимчивости имеем: $\chi = \frac{\mu_0^2 N H}{3kT} = \frac{C}{T}$. Эта температурная зависимость называется **законом Кюри**, а коэффициент C – постоянной Кюри.



Точка Кюри — температура фазового перехода II рода, связанного со скачкообразным изменением свойств вещества. При температуре ниже точки Кюри ферромагнетики обладают спонтанной намагниченностью. Выше точки Кюри ферромагнетик оказывается разрушает его самопроизвольную намагниченность, в результате ферромагнетик становится парамагнетиком.

Так как на самом деле для магнитных атомов имеет место пространственное квантование, то необходимо рассматривать не непрерывное распределение магнитных диполей по направлению в пространстве, а возможные дискретные ориентации, определяемые условием пространственного квантования. Можно считать, что как и в классическом случае, справедливо статистическое распределение Больцмана.

Энергия атома в магнитном поле определяется теперь магнитными квантовыми

числами M_J :

$$U = -g_J \mu_B M_J H$$

Для вычисления намагниченности производится суммирование по всем возможным значениям M_J :

$$\begin{aligned} M &= g_J \mu_B N \frac{\sum_{M_J=-J}^{M_J=+J} M_J e^{\frac{g_J \mu_B M_J H}{kT}}}{\sum_{M_J=-J}^{M_J=+J} e^{\frac{g_J \mu_B M_J H}{kT}}} = g_J \mu_B J N \left(\frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} a - \frac{1}{2J} \coth \frac{1}{2J} a \right) = \\ &= g_J \mu_B J N B_J(a) \end{aligned}$$

где $a = \frac{g_J \mu_B J H}{kT}$, $B_J(a)$ — функция Бриллюэна.

В сильных полях и при низких температурах $a \rightarrow \infty$, $\coth \rightarrow 1$, $B_J(a) \rightarrow 1$. Таким образом, при полном насыщении $M = g_J \mu_B J N$, то есть величина намагниченности отличается от полученной при классическом рассмотрении ($M = g_J \mu_B N \sqrt{J(J+1)}$).

При $a \ll 1$ функцию Бриллюэна можно разложить в ряд:

$$B_J(a) = \frac{J+1}{3J} a - \frac{[(J+1)^2 + J^2] (J+1)}{90J^3} a^3 + \dots$$

Оставив только первый член, то для восприимчивости получим:

$$\chi = \frac{g_J^2 \mu_B^2 J (J+1) N}{3kT}$$

что совпадает с выражением для восприимчивости при классическом рассмотрении.

Вейсс предположил, что на магнитный момент каждого атома действует некое молекулярное поле, пропорциональное намагниченности, т.е.

$$H_E = \lambda M,$$

где λ — коэффициент молекулярного поля. Далее считается, что формула для намагниченности в магнитном поле, полученная для невзаимодействующих магнитных диполей, применима и в этом случае, но при учете того, что на диполи действует не только внешнее, но и молекулярное поле. Тогда выражение для намагниченности примет вид:

$$M = \mu_0 N L(a), \quad a = \frac{\mu_0 (H + \lambda M)}{kT} \Rightarrow M = \frac{kT}{\mu_0 \lambda} a - \frac{H}{\lambda}$$

Найдем теперь магнитную восприимчивость выше температуры Кюри:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \mu_0 N L'(a) \frac{\partial a}{\partial H}.$$

$$\frac{\partial a}{\partial H} = \frac{\mu_0}{kT} + \frac{\lambda \mu_0}{kT} \cdot \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\mu_0}{kT} + \frac{\lambda \mu_0}{kT} \chi.$$

$$\frac{\partial M}{\partial a} = \mu_0 N L'(a) \approx \frac{1}{3} \mu_0 N,$$

$$\frac{\partial M}{\partial a} = \frac{kT}{\lambda \mu_0}.$$

(При высоких температурах $a \ll 1$ и в разложении $L(a)$ можно ограничиться первым членом $a/3$) Тогда, получим

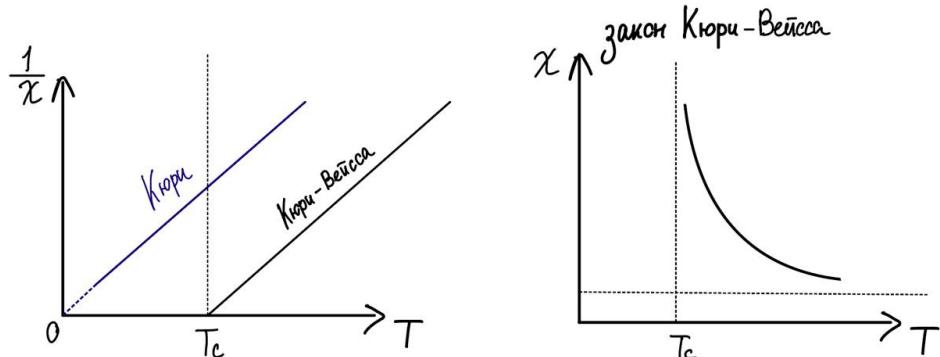
$$\chi = \frac{\mu_0^2 N}{3k \left(T - \frac{\mu_0^2 \lambda N}{3k} \right)}$$

Температура Кюри:

$$T_C = \frac{\mu_0^2 \lambda N}{3k}.$$

$$\chi = \frac{\mu_0^2 N}{3k(T - T_C)} = \frac{C}{T - T_C}.$$

Полученная зависимость — **закон Кюри-Вейсса**. $C = \frac{\mu_0^2 N}{3k}$ — постоянная Кюри.



2.25 Парамагнетизм электронов проводимости

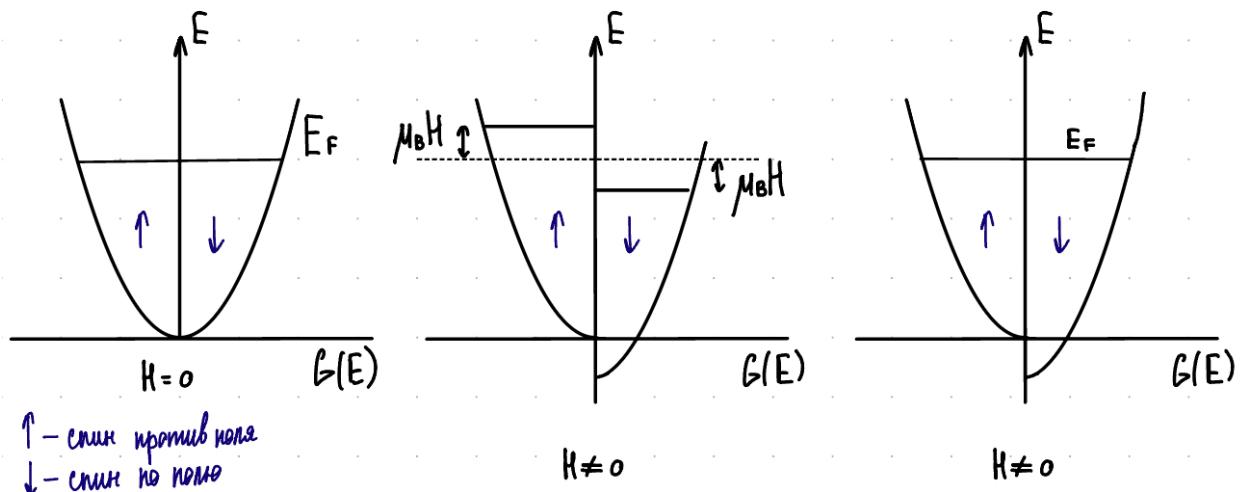
Если рассматривать электроны проводимости в металлах в классическом представлении, как газ свободных частиц, то мы получили бы, что металлы должны обладать большой парамагнитной восприимчивостью, подчиняющейся закону Кюри. На самом деле магнитная восприимчивость металлов не столь велика и слабо зависит от температуры. Объясняется это тем, что электроны проводимости в металле подчиняются статистике Ферми-Дирака, что кардинальным образом меняет подход к рассмотрению их магнитных свойств. Плотность состояний свободных электронов в металле G , как функция энергии электронов E дается формулой

$$G(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\eta^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

Будем считать, что температура близка к 0 К, все состояния с энергией меньше энергии Ферми E_F заполнены и

$$E_F = \frac{\eta^2}{2m} (3\pi^2 N)^{2/3}$$

где N - число электронов в единице объема При отсутствии поля сумма проекций спинов



всех электронов на любую ось равна нулю и суммарная намагниченность равна нулю. При приложении поля у всех электронов со спином по полю энергия понизится на величину $\mu_B H$, а у электронов со спином против поля на такую же величину повысится. Так как уровень Ферми для всех электронов должен быть один и тот же, $\frac{1}{2}G(E_F)\mu_B H$ (считаем $\mu_B H \ll E_F$) электронов из левой части перейдет в правую и таким образом электронов с магнитным моментом по полю станет больше на Δn . Очевидно, что

$$\Delta n = G(E_F) \mu_B H$$

Тогда для намагниченности

$$M = \mu_B \Delta n = G(E_F) \mu_B^2 H \Rightarrow M = \frac{3\mu_B^2 N H}{2E_F}$$

Таким образом параметрическая восприимчивость электронов проводимости в металле

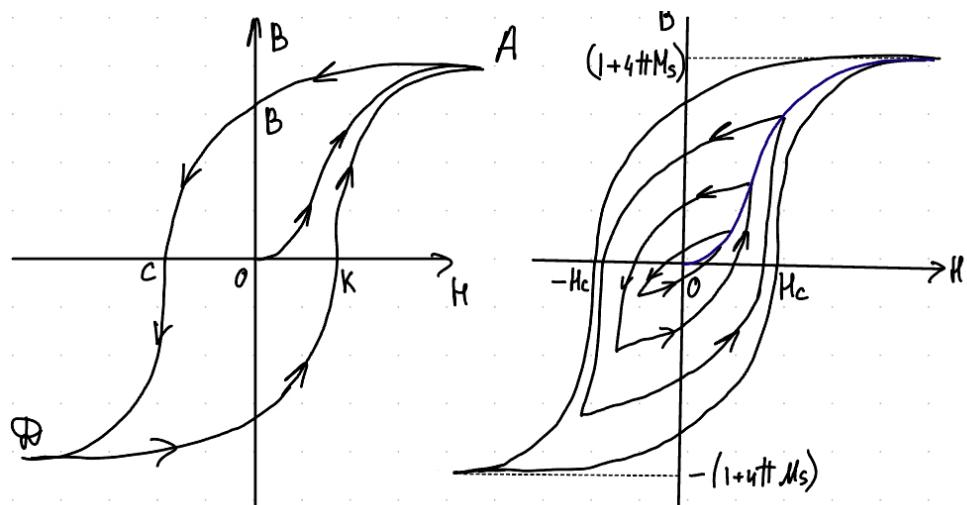
$$\chi_n^{\text{эл}} = \frac{3\mu_B^2 N}{2E_F}$$

Как видно, $\chi_n^{\text{эл}}$ не зависит от температуры и значительно меньше по сравнению с восприимчивостью, если бы она следовала закону Кюри, так как в знаменателе вместо тепловой энергии kT стоит величина на два-три порядка большая.

2.26 Ферромагнетизм. Основные характеристики магнитного состояния ферромагнетика. Приближение молекулярного поля. Зонный ферромагнетизм. Доменная структура. Магнитный гистерезис.

Ферромагнетизм – появление спонтанной намагниченности при температуре ниже температуры Кюри вследствие упорядочения магнитных моментов, при котором большая их часть параллельна друг другу. Вещества, в которых возникает ферромагнитное упорядочение магнитных моментов, называются ферромагнетиками. Иными словами, ферромагнетик – такое вещество, которое (при температуре ниже точки Кюри) способно обладать намагниченностью в отсутствии внешнего магнитного поля.

Ферромагнитным материалам присуще явление **гистерезиса** – отставание изменения магнитной индукции B от изменения напряженности магнитного поля H . Он обусловлен необратимыми изменениями энергетического состояния под действием внешнего поля H .



Причины магнитного гистерезиса : 1) задержки в движении доменных границ, обусловленные дефектностью материала; 2) необратимые вращения намагниченности; 3) процессы образования зародышей доменов с намагниченностью направленной более благоприятно относительно направления поля.

При циклическом изменении поля от точки A индукция описывает симметричную петлю гистерезиса ABCDKA. Отрезок OB соответствует остаточной индукции (намагниченности), отрезок OC – коэрцитивной силе. H_c – коэрцитивная сила, это поле, которое нужно приложить к образцу, чтобы размагнитить его остаточную намагниченность/ напряженность внешнего поля необходимая для полного размагничивания образца.

Если снимать симметричные петли гистерезиса при возрастающей амплитуде поля, то вершины этих петель ложатся на кривую ОА, которая называется основной или нормальной кривой намагничивания. Симметричная петля гистерезиса, в которой достигается техническое насыщение, называется предельной петлей гистерезиса. Все петли гистерезиса, лежащие внутри предельной петли, называются частными петлями гистерезиса.

Приближение молекулярного поля ферромагнетиков

Вейсс предположил, что на магнитный момент каждого атома действует некое молекулярное поле H_E , пропорциональное намагниченности, т.е.

$$H_E = \lambda M,$$

где λ - коэффициент молекулярного поля. Далее считается, что формула для намагниченности в магнитном поле, полученная для невзаимодействующих магнитных диполей, применима и в этом случае, но при учете того, что на диполи действует не только внешнее, но и молекулярное поле H_E . Тогда выражение для намагниченности примет вид:

$$M = \mu_0 N L(a), \quad a = \frac{\mu_0(H + \lambda M)}{kT} \Rightarrow M = \frac{kT}{\mu_0 \lambda} a - \frac{H}{\lambda}$$

Найдем теперь магнитную восприимчивость выше температуры Кюри:

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial M}{\partial H} = \mu_0 N L'(a) \frac{\partial a}{\partial H}. \\ \frac{\partial a}{\partial H} &= \frac{\mu_0}{kT} + \frac{\lambda \mu_0}{kT} \cdot \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\mu_0}{kT} + \frac{\lambda \mu_0}{kT} \chi. \\ \frac{\partial M}{\partial a} &= \mu_0 N L'(a) \approx \frac{1}{3} \mu_0 N, \\ \frac{\partial M}{\partial a} &= \frac{kT}{\lambda \mu_0}. \end{aligned}$$

(При высоких температурах $a \ll 1$ и в разложении $L(a)$ можно ограничиться первым членом $a/3$) Тогда, получим

$$\chi = \frac{\mu_0^2 N}{3k \left(T - \frac{\mu_0^2 \lambda N}{3k} \right)}$$

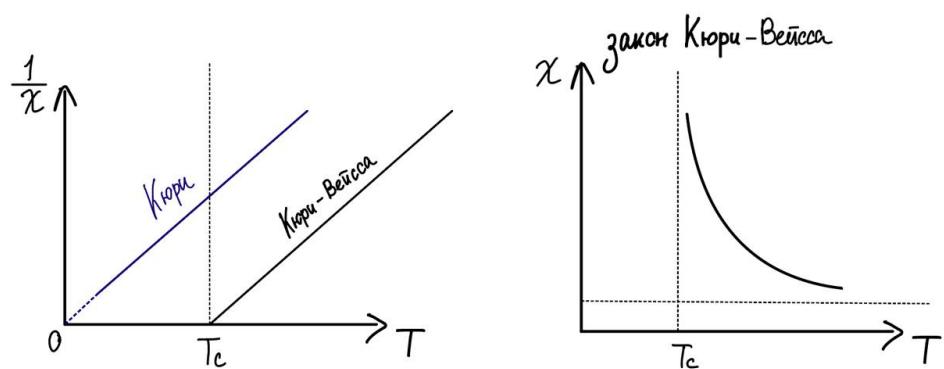
Температура Кюри:

$$T_C = \frac{\mu_0^2 \lambda N}{3k}.$$

$$\chi = \frac{\mu_0^2 N}{3k(T - T_C)} = \frac{C}{T - T_C}.$$

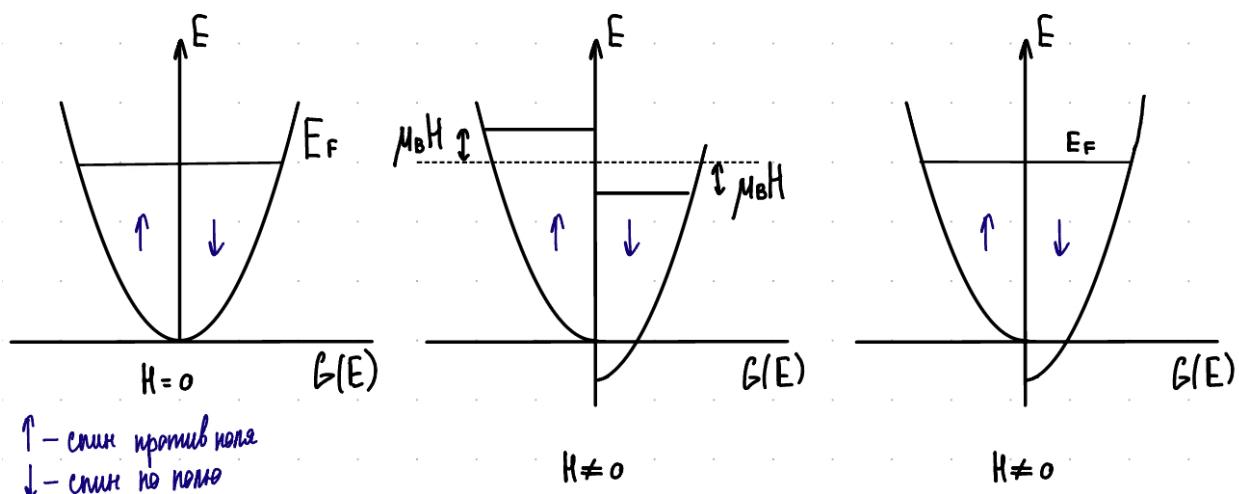
Полученная зависимость — **закон Кюри-Вейсса** для магнитной восприимчивости ферромагнетика. $C = \frac{\mu_0^2 N}{3k}$ - постоянная Кюри.

Зонный ферромагнетизм — магнетизм металлов и сплавов, интерпретируемый



в рамках моделей, основанных на зонной теории. Такие вещества называются зонными магнетиками; их типичные представители - переходные металлы (Fe, Co, Ni, Cr, Mn), их сплавы и соединения. Различают слабые и сильные зонные ферромагнетики. Слабыми называют зонные ферромагнетики, в которых спонтанное расщепление подзон меньше, чем энергетическая ширина зоны. Они характеризуются небольшим спонтанным моментом и статической высокополевой восприимчивостью, связанной с тем, что с ростом поля продолжается перераспределение электронов между подзонами. В сильных ферромагнетиках все электроны находятся в одной подзоне и магнитная восприимчивость близка к нулю. В магнитное поле энергии электронов с противоположными ориентированными спинами различаются. Энергетическая зона разбивается на две подзоны, в одной из которых направление спинов совпадает с направлением приложенного поля, а в другой спиновые моменты ориентированы противоположно полю.

Плотность состояний свободных электронов в металле $G(E)$ – функция энергии электронов E .



При приложении поля у всех электронов со спином по полю энергия понизится на величину $\mu_B H$, а у электронов со спином против поля на такую же величину повысится. Так как уровень Ферми для всех электронов должен быть один и тот же, $\frac{1}{2}G(E_F)\mu_B H$ (считаем $\mu_B H \ll E_F$) электронов из левой части перейдет в правую и таким образом

электронов с магнитным моментом по полю станет больше на Δn . Очевидно, что

$$\Delta n = G(E_F) \mu_B H$$

Тогда для намагниченности

$$M = G(E_F) \mu_B^2 H$$

Таким образом парамагнитная восприимчивость

$$\chi_p = G(E_F) \mu_B^2$$

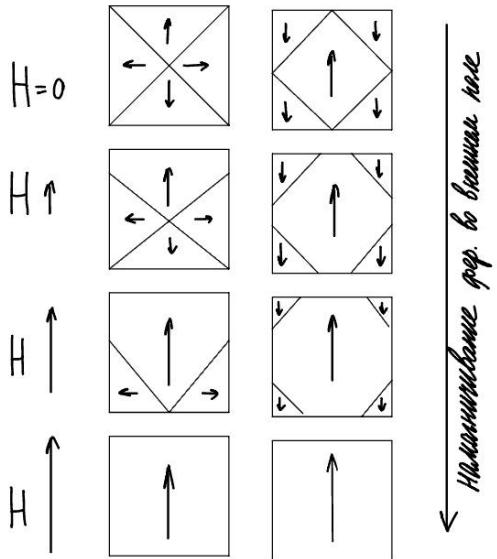
В системе невзаимодействующих электронов фазовые переходы отсутствуют. Упёрт взаимодействия электронов приводят к возникновению фазового перехода. Положительное обменное взаимодействие между электронами с обменным интегралом I стремится выстроить все спины параллельно, что влияет на магнитную восприимчивость парамагнетика Паули:

$$\chi_{\text{exp}} = \frac{\chi_p}{1 - \lambda \chi_p},$$

где $\lambda = I/\mu_B^2$ - параметр обменного взаимодействия. Из формулы (2.67) видно, что восприимчивость обменно-усиленного парамагнетика возрастает по мере возрастания $\lambda \chi_p$. При выполнении условия $\lambda \chi_0 = 1$ восприимчивость стремится к бесконечности, т. е. обменное взаимодействие приводит к самопроизвольному ферромагнитному упорядочению. С учетом (2.66) условие возникновения ферромагнетизма в системе колективизированных электронов с магнитными моментами $\mu_e = 1\mu_B$, которое носит название критерия Стонера, имеет вид

$$IG(E_F) \geq 1$$

Доменная структура Магнитные моменты соседних атомов ферромагнетиков ориентированы параллельно, однако в кристалле достаточно большой величины все магнитные моменты не могут быть ориентированы параллельно. В противном случае вокруг кристалла появится магнитное поле и энергия системы возрастет. Для снижения энергии системы кристалл разбивается на домены - области спонтанной намагниченности, причем разбиение производится таким образом, чтобы внешнее магнитное поле отсутствовало. При помещении ферромагнетика во внешнее магнитное поле векторы намагниченности каких-либо доменов окажутся совпадающими или близкими к совпадению с вектором напряженности внешнего магнитного поля. Энергия таких доменов будет минимальной, тогда как энергия всех остальных доменов повысится. Для того чтобы понизить энергию системы благоприятно ориентированные домены растут. При этом увеличивается намагниченность (M) и, следовательно, возрастает индукция (B).

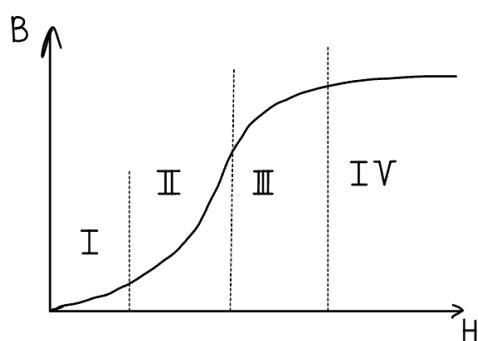


На начальном участке кривой намагничивания увеличение напряженности внешнего поля ведет к незначительному росту индукции, причем при отключении внешнего поля индукция снижается до нуля. Этот участок принято называть участком обратимого намагничивания или областью Релея (I).

На втором участке незначительное изменение напряженности внешнего поля ведет к заметным изменениям индукции. Этот участок принято называть участком резкого роста индукции или областью скачков Баркгаузена (II).

На третьем участке кривой намагничивания зависимость индукции от напряженности внешнего поля вновь ослабевает. Этот участок называют участком замедленного намагничивания или областью намагничивания за счет процессов вращения (III).

На четвертом участке индукция растет пропорционально напряженности магнитного поля. Этот участок называют участком насыщения или областью парапроцесса (IV).



2.27 Природа магнетизма в твердых телах. Обменное взаимодействие. Типы магнитного упорядочения (ферромагнетизм, антиферромагнетизм, ферримагнетизм)

В твердых телах с большим содержанием переходных элементов группы железа или редких земель взаимодействие между атомами, обладающими магнитными моментами, приводит к возникновению при температуре, характерной для каждого вещества, магнитного упорядочения, т.е. наличию определенного дальнего порядка в направлениях магнитных моментов атомов. Причины происхождения магнитного момента атома:

1. Спин электронов
2. Орбитальный момент электронов связан с их вращением вокруг ядра
3. Изменение орбитального момента при наложении внешнего магнитного поля.

Обменное взаимодействие — квантовомеханический эффект, взаимодействие тождественных частиц, приводящее к зависимости значения энергии системы частиц от её полного спина. О.В. эффективно проявляется, когда «перекрываются» волновые функции отдельных частиц системы, т.е. когда существуют области пространства, в которых с заметной вероятностью может находиться частица в различных состояниях движения.

Из принципа тождественности следует, что О.В. возникает в системе одинаковых частиц даже в случае, если прямыми силовыми взаимодействиями частиц можно пренебречь. Эффективно оно начинает проявляться, когда среднее расстояние между частицами сравнимо с длиной волны де Броиля, соответствующей средней скорости частиц.

Характер О.В. различен для фермионов и бозонов. Волновая функция бозонов (целый спин) — симметрична, а фермионов (полуцелый спин) — антисимметрична. Для фермионов О.В. — следствие принципа Паули, препятствующего сближению тождественных частиц с одинаковым направлением спинов. Оно проявляется в отталкивании их друг от друга на расстояниях порядка или меньше длины волны де Броиля. В системе тождественных бозонов О.В. проявляется во взаимном притяжении частиц.

Пример О.В. для двухатомной молекулы:

$$\Psi(r_1, r_2) = -\Psi(r_2, r_1) \text{ если спины параллельны (ФМ)}$$

$$\Psi(r_1, r_2) = \Psi(r_2, r_1) \text{ если спины антипараллельны (АФМ)}$$

Если при разной взаимной ориентации спинов волновая функция разная, то $E_{\uparrow\uparrow} \neq E_{\uparrow\downarrow} E_{\downarrow\uparrow}^T$ – синглет, $E_{\uparrow\uparrow}^S$ – триплет

$$\hat{S}_1 \text{ и } \hat{S}_2 \text{ – квантовые вектора}$$

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2; \quad S = \frac{1}{2}, \quad S = 1; 0$$

$$|\hat{S}|^2 = |\hat{S}_1|^2 + 2(\hat{S}_1, \hat{S}_2) + |\hat{S}_2|^2$$

$$S(S+1) = 2S(S+1) + 2(\hat{S}_1, \hat{S}_2)$$

$$(\hat{S}_1, \hat{S}_2) = \frac{S(S+1)}{2} - \frac{S}{4}$$

Синглет: $S = 0, (\hat{S}_1, \hat{S}_2) = -\frac{3}{4}$

Триплет: $S = 1, (\hat{S}_1, \hat{S}_2) = \frac{1}{4}$

$$E_{\uparrow\uparrow} = E_0 + \frac{1}{4} J$$

$$E_{\uparrow\downarrow} = E_0 - \frac{3}{4} J$$

$J = E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow}$ – обменный интеграл

Базовая энергия: $E_0 = \frac{3E_{\uparrow\uparrow} + E_{\uparrow\downarrow}}{4}$

$E = E_0 + J(\hat{S}_1, \hat{S}_2)$ – обмен Гейзенберга

Типы магнитного упорядочения:

	Знак χ	$ \chi $	μ
Диамагнетизм	–	$10^{-8} - 10^{-4}$	< 1
Парамагнетизм	+	$10^{-6} - 10^{-3}$	> 1
Ферромагнетизм	$+, \chi(H)$	$10^2 - 10^4$	$\mu(H) \gg 1$
Антиферромагнетизм	$+, \chi(H)$	$10^{-4} - 10^{-2}$	$\mu(H) \gg 1$
Ферримагнетизм	$+, \chi(H)$	$10^1 - 10^3$	> 1

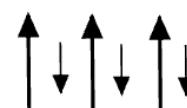
(H – напряжённость магнитного поля, χ – магнитная восприимчивость, μ – магнитная проницаемость)



ферромагнетик



антиферромагнетик



ферримагнетик

Ферромагнетик – доменная структура у всех атомов одинаковый магнитный момент

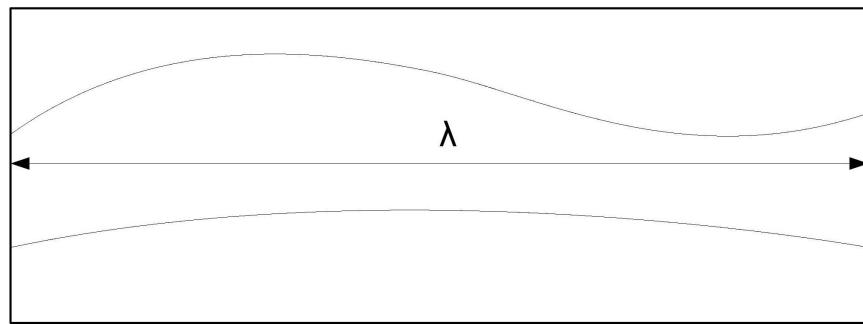
Антиферромагнетик – магнитные моменты ориентированы антипараллельно

Ферримагнетик – магнитные моменты соседних атомов ориентированы антипараллельно и имеют разную величину

Парамагнетик – векторы магнитных моментов разориентированы

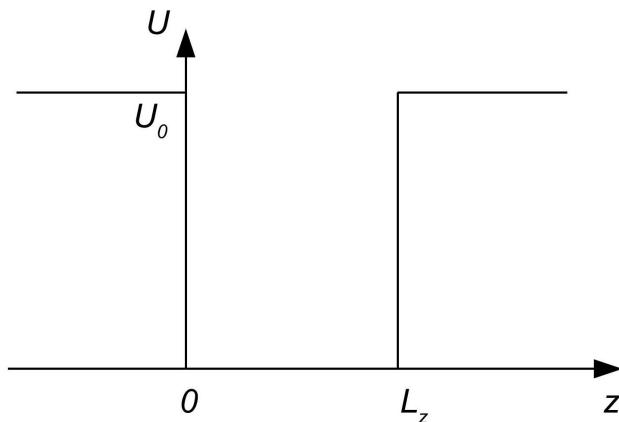
2.28 Размерное квантование в двумерных системах. Энергетический спектр, плотность состояний, концентрация двумерных электронов. Примеры двумерных структур.

Размерное квантование в двумерных системах. Основная идея базируется на основе волновых свойств электрона. Ограничение размера требует размещения целого числа полуволн в пределах структуры.



В результате энергетический спектр становится дискретным

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq z \leq L_z \\ U_0, & z < 0, z > L_z \end{cases}$$



Нет зависимости потенциальной энергии от x, y в явном виде, поэтому:

$$\psi(x, y, z) = \exp(i(k_x x + k_y y)) \psi_z(z)$$

k_x, k_y - компоненты волнового вектора вдоль x, y

Оператор Гамильтона и уравнение Шредигера

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z)$$

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

Подстановка волновой функции в уравнение даёт

$$\frac{d^2\psi_z}{dz^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E - \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - U(z) \right) \psi_z = 0$$

Потенциальный ящик с бесконечными стенками $U_0 \rightarrow \infty$

Волновая функция должна быть равна нулю в области с бесконечной потенциальной энергией:

$$\psi_z = \begin{cases} c_{ms} \sin(k_z z) + c_{mc} \cos(k_z z), & 0 \leq z \leq L_z \\ 0, & z < 0, z > L_z \end{cases}$$

Границное условие при $z=0$ даёт $c_{mc} = 0$.

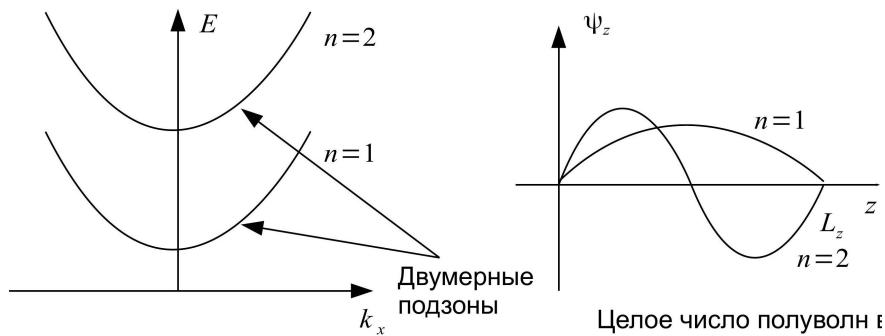
Границное условие при $z = L_z$ даёт: $k_z = \frac{\pi n}{L_z}$, $n = 1, 2, 3 \dots$

Условие нормировки даёт: $c_{ms} = \sqrt{\frac{2}{L_z}}$. Тогда решение:

$$\psi_z = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{\pi n z}{L_z}\right), & 0 \leq z \leq L_z \\ 0, & z < 0, z > L_z \end{cases}$$

$$E - \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}$$

$$\text{Энергетический спектр: } E = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_e L_z^2}, n = 1, 2, 3 \dots$$



Решения внутри ящика $E < U_0$

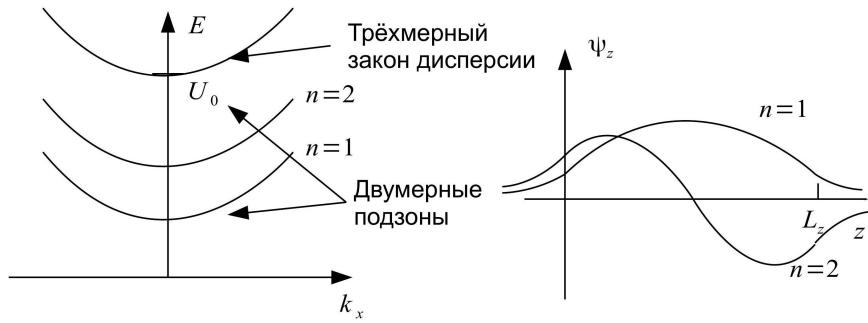
$$\psi_z = \begin{cases} c_l \exp\left(\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} z\right), & z < 0 \\ c_{ms} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} z\right) + c_{mc} \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} z\right), & 0 \leq z \leq L_z \\ c_r \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} z\right), & z > L_z \end{cases}$$

Непрерывность волновой функции и её производной при $z=0$ и $z=L_z$ даёт систему линейных однородных уравнений относительно коэффициентов c :

$$c_l = c_{mc}$$

$$\begin{aligned} c_l \sqrt{2m \frac{(U_0 - E)}{\hbar}} &= c_{ms} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ c_{ms} \sin \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L_z \right) + c_{mc} \cos \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L_z \right) &= c_r \exp \left(-\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} L_z \right) \\ c_{ms} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cos \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L_z \right) - c_{mc} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \sin \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L_z \right) &= \\ -c_r \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \exp \left(-\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} L_z \right) \end{aligned}$$

Ненулевые решения при определителе матрицы системы уравнений равном нулю. Это даёт уравнение на E , которое имеет несколько решений. При любом $E > U_0$ существует ненулевое решение незатухающее при удалении от потенциального ящика (трёхмерного)



В потенциальном ящике со стенками конечной высоты образуется конечное число двумерных подзон. Состояния с энергией выше высоты стенок трёхмерные. Волновые функции двумерных состояний частично проникают в стенки ящика.

В реальных двумерных структурах:

- Волновые функции двумерных состояний сосредоточены внутри потенциальной ямы для электронов и дырок
- В двумерной структуре образуется конечное число двумерных подзон.
- При энергии выше потенциального барьера, ограничивающего потенциальную яму существуют трёхмерные состояния
- При наличии потенциальной ямы для дырок образуются двумерные подзоны для дырок
- Закон дисперсии вблизи минимума двумерной подзоны квадратичный, но может быть анизотропным при анизотропии материала структуры

$$E = E_n + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{xx}} + \frac{k_y^2}{m_{yy}} \right), n = 1, 2, 3 \dots$$

- При наличии двух типов носителей (например лёгкие и тяжёлые дырки) образуется набор двумерных подзон для носителей каждого типа

Энергетический спектр, плотность состояний, концентрация двумерных электронов.

Квадратичный закон дисперсии:

$$E(\vec{k}) = E_n + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} \right)$$

Плотность состояний

$$v_{2D}(E) = \frac{\partial N_{2D}(E' < E)}{\partial E}$$

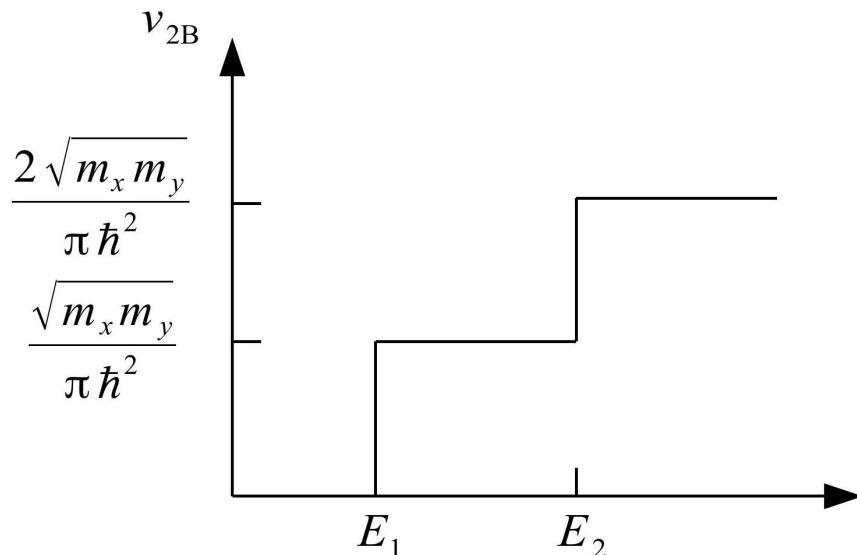
$N_{2D}(E' < E)$ - концентрация (на единицу площади) состояний с энергией $E' < E$

$$N_{2D}(E' < E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_n S_n(E < E) = \frac{2 \cdot 2\pi \sqrt{(m_x m_y)} E}{4\pi^2 \hbar^2} \sum_n \theta(E - E_n)$$

$S_n(E' < E)$ - площадь состояний в пространстве квазиволновых векторов, занимаемая состояниями с энергией $E' < E$ в n -ой двумерной подзоне

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

$$v_{2D} = \sum_n \frac{\sqrt{m_x m_y}}{\pi \hbar^2} \theta(E - E_n)$$



Концентрация двумерных электронов:

$$n_{2D} = \int_{-\infty}^{\infty} v_{2D}(E) f(E) dE$$

При $T = 0$ (квадратичный закон дисперсии):

$$n_{2D} = \sum_n \frac{\sqrt{m_x m_y}}{\pi \hbar^2} (F - E_n) \theta(F - E_n)$$

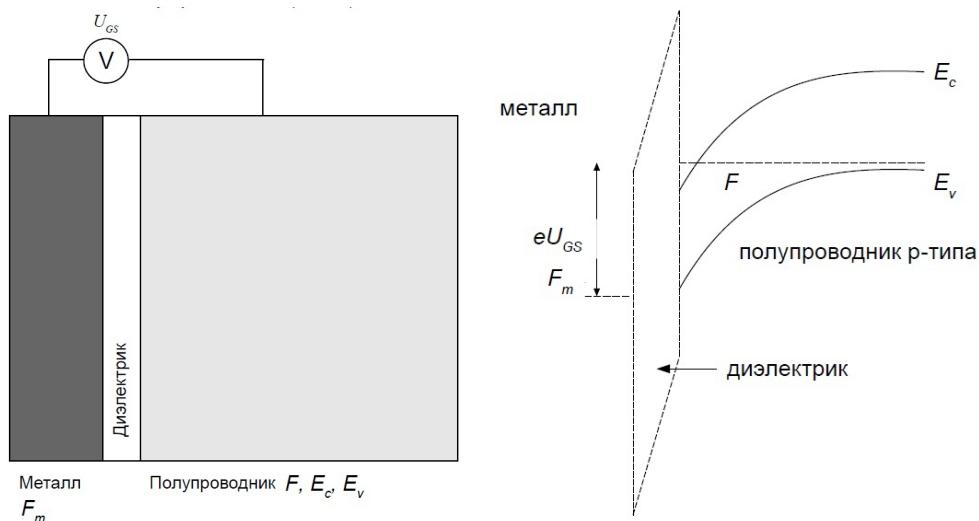
При $T > 0$ (квадратичный закон дисперсии):

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-F}{k_B T}\right) + 1}$$

$$n_{2D} = \sum_n k_B T \frac{\sqrt{m_x m_y}}{\pi \hbar^2} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{F - E_n}{k_B T}\right)\right)$$

Примеры двухмерных структур:

- Структура металл-диэлектрик полупроводник (МДП)



Энергетическая диаграмма структуры металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) в режиме инверсии

- Легированные двухмерные структуры

К веществам, имеющим двумерную или квазидвумерную электронную структуру относится графит и его интеркалированные соединения, а также слоистые дихалькогениды переходных металлов и слоистые полупроводники $A^{III}B^{VI}$ (пример - InSe).

Однородное
легирование

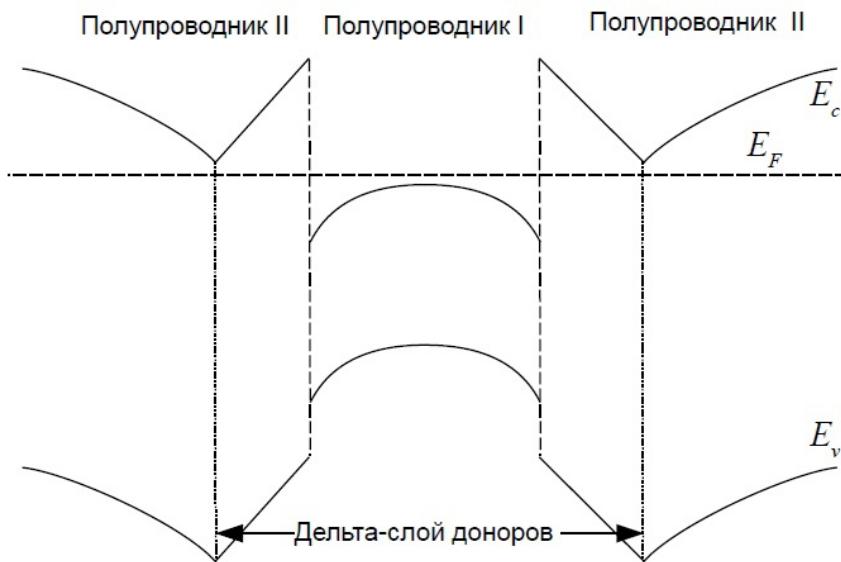
Полупроводник
Легирующая примесь

Модулированное
легирование

Полупроводник
Легирующая
примесь

Дельта
легирование –
примесь в очень
тонком слое

Полупроводник
Легирующая
примесь

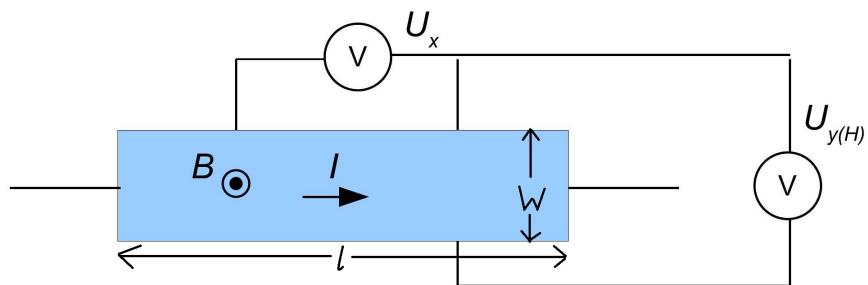


Энергетическая диаграмма дельта-легированной квантовой ямы. Легирующая примесь отделена от электронов в квантовой яме для уменьшения их рассеяния и увеличения подвижности.

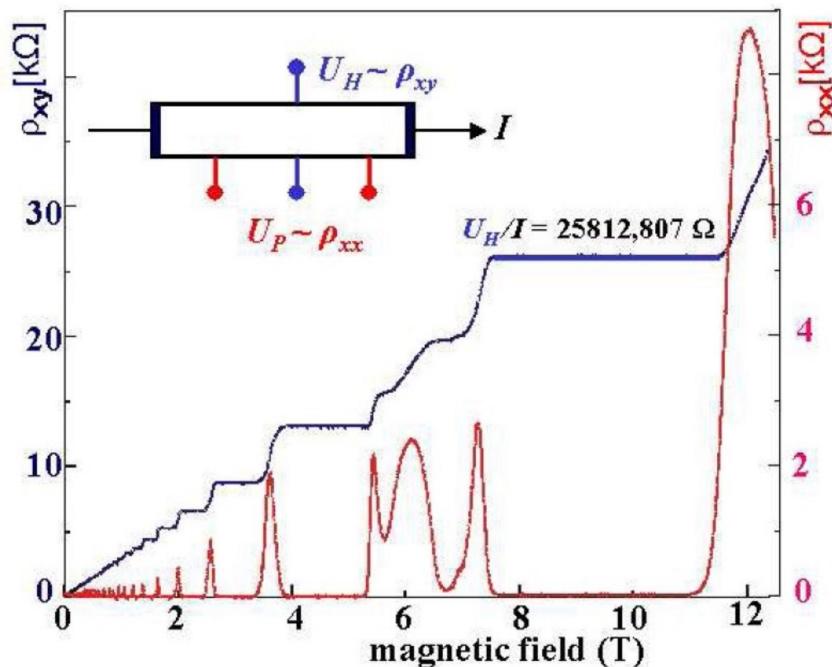
2.29 Целочисленный квантовый эффект Холла. Энергетический спектр и волновые функции электронов в двумерных системах в квантующем магнитном поле. Перенос заряда. Краевые состояния

Вид сверху двумерной структуры в магнитном поле B . I – сила тока. $U_x, U_{y(H)}$ – продольное и поперечное (холловское) напряжение.

Тензоры электропроводности σ и сопротивления ρ



$$\rho = \begin{cases} \rho_{xx} = (U_x/I)(w/l) & \rho_{xy} = -U_{y(H)}/I \\ \rho_{yx} = U_{y(H)}/I & \rho_{yy} = (U_y/I)(w/l) \end{cases} \quad \sigma = \rho^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}$$



Целочисленный квантовый эффект Холла.

При увеличении напряжения исток-затвор увеличивается концентрация двумерных электронов в структуре. ρ – осциллирует в зависимости от напряжения исток-затвор. В области где ρ_{xx} близко к $0\rho_{y(H)}$ слабо зависит от напряжения (область плато). Значение на плато выражается через постоянную Планка и элементарный заряд:

$$\rho_{yx(H)} = \frac{2\pi\hbar}{e^2 v}, v = 1, 2, \dots$$

Условие образования уровней Ландау: период классического движения электрона по циклотронной орбите должен быть меньше чем время релаксации импульса, т.е. электрон должен совершить хотя бы один оборот до рассеяния

$$\omega_c \tau \gg 1$$

Условие на температуру: разность в энергии между уровнями Ландау должно быть больше тепловой энергии

$$\hbar\omega_c \gg k_B T$$

Рассмотрим **двумерный электрон в сильном магнитном поле**:

обобщённый импульс (квазимпульс) в магнитном поле $\hat{\vec{p}} \rightarrow \hat{\vec{p}} + e\vec{A}$,

векторный потенциал (выбирается для прямоугольной структуры): $\vec{A} = (-By, 0, 0)$,

оператор Гамильтона: $\hat{H} = \frac{1}{2m_e}(\hat{\vec{p}} + e\hat{\vec{A}})^2 = \frac{1}{2m_e}[(\hat{p}_x - eBy)^2 + \hat{p}_y^2]$,

уравнение Шредингера: $\hat{H}\psi = E\psi \quad (E = E - E_l)$

В уравнении нет зависимости от координаты x , поэтому волновую функцию можно представить в виде:

$$\psi(x, y) = \psi_y(y) \exp(ik_x x) \quad \hat{p}_x \psi(x, y) = \hbar k_x \psi_y(y) \exp(ik_x x)$$

В результате уравнение для Ψ_y принимает вид:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{d^2\psi_y}{dy^2} - \left(\frac{eBy}{\hbar} - k_x \right)^2 \right) &= E\psi_y \\ \frac{d^2\psi_y}{dy^2} + \frac{eB}{\hbar} \left[2E \frac{m_e}{e\hbar B} - \frac{eB}{\hbar} \left(y - k_x \frac{\hbar}{eB} \right)^2 \right] \psi_y &= 0 \end{aligned}$$

Границные условия для Ψ_y :

$$\psi_y(y) \rightarrow 0, y \rightarrow \pm\infty$$

Ведём обозначения:

- Магнитная длина $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$
- Циклотронная энергия $E = \hbar\omega_c$
- Циклотронная частота $\omega_c = \frac{eB}{m_e}$
- Безразмерная координата вдоль Y $\eta = \frac{y - k_x l_B^2}{l_B}$
- Безразмерная Энергия $G = E \frac{m_e}{e\hbar B} = \frac{E}{\hbar\omega_c}$

Получим безразмерное уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi_y}{d\eta^2} + (2G - \eta^2) \psi_y = 0$$

Решение при $\eta \rightarrow \pm\infty$ $\frac{d^2\psi_y}{d\eta^2} - \eta^2 \psi_y = 0$

Пусть $\beta = \eta^2 \Rightarrow \frac{d^2\psi_y}{d\eta^2} = 4\beta \frac{d^2\psi_y}{d\beta^2} + 2 \frac{d\psi_y}{d\beta} \rightarrow 4\beta \frac{d^2\psi_y}{d\beta^2}$, при $\beta \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{d^2\psi_y}{d\beta^2} = \frac{1}{4} \psi_y$

Решение:

$$\psi_y \rightarrow C \exp\left(-\frac{\beta}{2}\right) = C \exp\left(-\frac{\eta^2}{2}\right), \text{ при } \beta, \eta \rightarrow \infty$$

Решение при конечных η

$$\psi_y = P_n(\eta) \exp\left(-\frac{\eta^2}{2}\right) \quad P_n(\eta) = \sum_{k=0}^n a_{nk} \eta^k$$

Уравнение для полинома после подстановки

$$\frac{d^2 P_n}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dP_n}{d\eta} + (2G - 1)P_n = 0$$

Из него получаются уравнения для коэффициентов полинома

$$(k+1)(k+2)a_{n2} + (2G-1)a_{n0} = 0, k=0, n \geq 2$$

$$(k+1)(k+2)a_{nk+2} - 2ka_{nk} + (2G-1)a_{nk} = 0, \quad 1 \leq k \leq n-2$$

$$-2ka_{nk} + (2G-1)a_{nk} = 0, n-1 \leq k \leq n$$

По условию записи $a_{nn} \neq 0$, поэтому должно быть $-2n + 2G - 1 = 0$
 $G = n + \frac{1}{2}$, а также $a_{nn-1} = 0$

Переходя к исходным переменным, получаем:

Волновая функция:

$$\psi = \exp(ik_x x) P_n\left(\frac{y - k_x l_B^2}{l_B}\right) \exp\left[-\frac{(y - k_x l_B^2)^2}{2l_B^2}\right]$$

Энергия (уровни Ландау):

$$E = E_{nL} = \hbar \frac{eB}{m_e} \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right), n = 0, 1, 2 \dots$$

При учёте спина электрона к оператору Гамильтона добавляется слагаемое $-g\mu_B \hat{B} \hat{S} \Rightarrow$ Энергия с учётом спина:

$$E = E_{nL} = \hbar \frac{eB}{m_e} \left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \frac{1}{2} g\mu_B B \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0}$$

где g – фактор Ланде, m_0 – масса свободного электрона.

Циклические граничные условия вдоль X : $\psi(x + L_x) = \psi(x)$ Это накладывает условия на k_x :

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

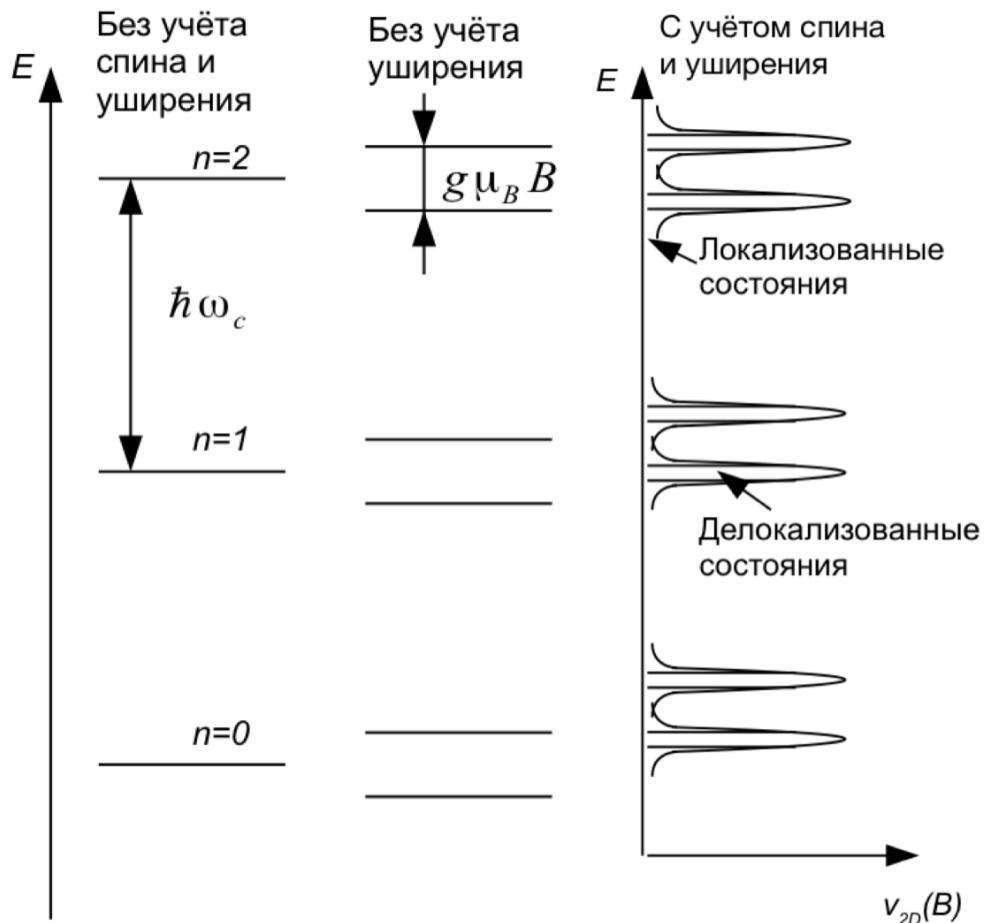
При изменении n_x на 1 волновая функция смещается на $\Delta y = \Delta k_x l_B^2 = \frac{2\pi\hbar}{eBL_x}$ – это размер волновой функции вдоль оси Y .

Если размер структуры вдоль оси Y равен L_y , Количество состояний для уровня Ландау

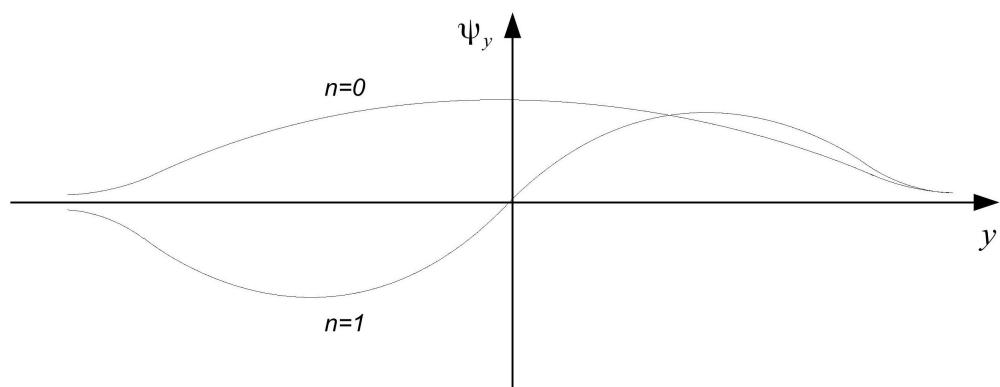
$$N_L = \frac{L_y}{\Delta y} = \frac{L_y}{\Delta k_x l_B^2} = L_x L_y \frac{eB}{2\pi\hbar}$$

Или на единицу площади двумерной структуры

$$N_L = \frac{eB}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi l_B^2}$$



Энергетический спектр электронов в магнитном поле. (Из-за спина уровни Ландау расщепляются, из-за беспорядка уширяются)



Зависимость волновой функции от y

Центр волновой функції в направлении y $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_y(y)|^2 y dy = k_x l_B^2$

Перенос заряда:

Вычислим полную силу тока через плотность потока вероятности: Для одного состояния сила тока

$$I_1 = -e \int_{-\infty}^{\infty} i_x(y) dy$$

Полная сила тока

$$I(B) = \int_{-\infty}^{\infty} I_1(E) v_{2D}(B) f(E) dE$$

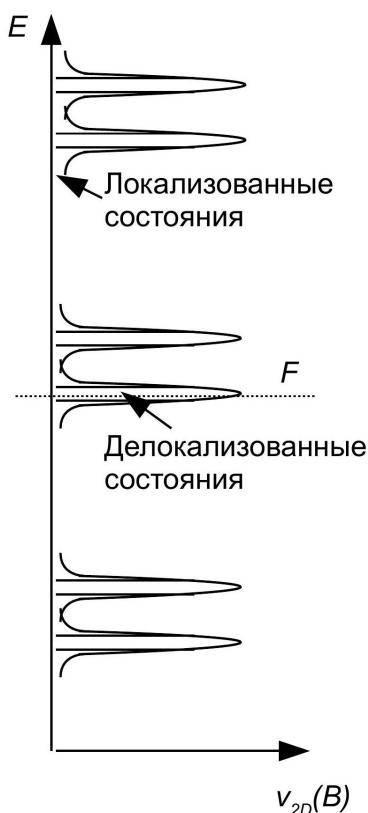
Подставляем полученную волновую функцию

$$I_1 = -\frac{e^2 B}{2m_e} \left(k_x l_B^2 - \int_{-\infty}^{\infty} y |\psi(y)|^2 dy \right) = 0$$

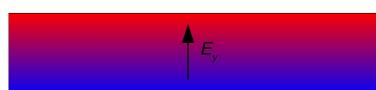
Как переносится ток в магнитном поле? В эксперименте ток не нулевой.

При $T \approx 0$ (КЭХ наблюдается при низкой температуре) можно выделить два случая в зависимости от расположения уровня Ферми.

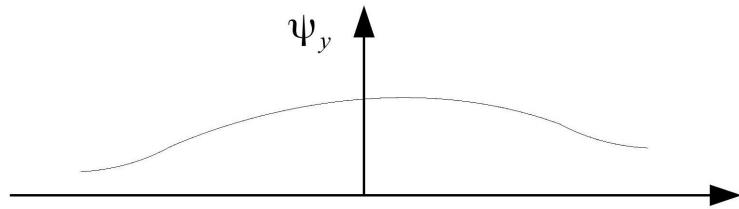
1. Уровень Ферми в области энергий делокализованных состояний.



Электрическое поле E_x уменьшает k_x на $-eE_x\tau/\hbar$. В результате при меньших y состояния заполняются электронами с большей вероятностью. Нарушается электронейтральность структуры, появляется компенсирующее электрическое поле вдоль оси Y и напряжение Холла

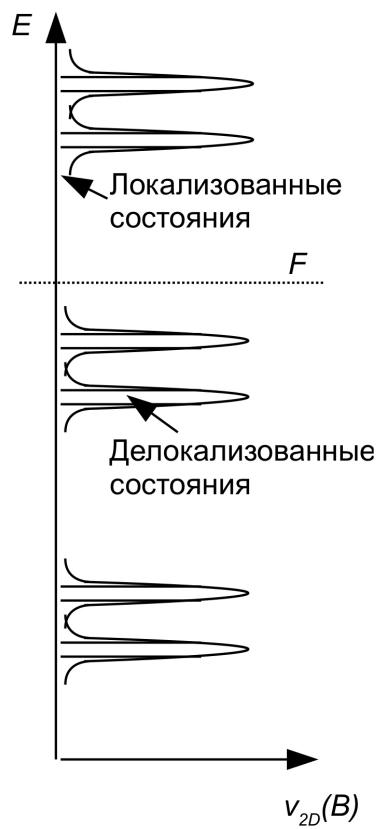


Электрическое поле E_y искажает волновую функцию, так что её центр смещается в сторону больших Y от $k_x I_B^2$. Поэтому сила тока одного состояния становится отличной от 0.



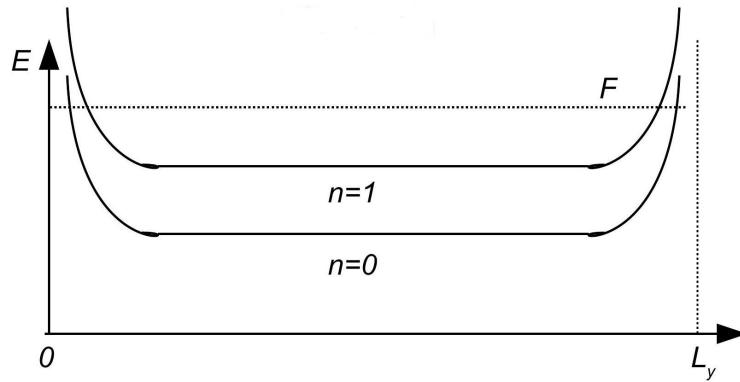
2. Уровень Ферми в области энергий локализованных состояний.

В этом случае перераспределение электронов между делокализованными состояниями невозможно. На краях структуры потенциальная энергия электронов увеличивается. Уровни Ландау загибаются вверх и пересекают уровень Ферми. В местах пересечения образуются одномерные токонесущие состояния шириной порядка I_B — краевые состояния.



Направление движения электронов в этих состояниях задано отклонением центра волновой функции от $k_x I_B^2$. Это отклонение для противоположных краёв противоположное. Поэтому ток в одномерных каналах слева и справа течёт в разных направлениях.

Сила тока переносимого краевыми состояниями образованными от одного уровня Ландау ($T = 0$ K).:



Время релаксации τ и плотность состояний зависят от энергии. Поэтому при поддержании постоянной силе тока напряжение вдоль оси X осциллирует при пересечении уровнем Ферми уровня Ландау. Эти осцилляции периодичны в зависимости от $1/B$. Запишем условие совпадения уровня Ферми с уровнем Ландау с номером n и $n + 1$

$$F - E_l = \frac{\hbar e B_n}{m_e} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad F - E_l = \frac{\hbar e B_{n+1}}{m_e} \left(n + 1 + \frac{1}{2} \right)$$

Отсюда получаем

$$n + \frac{1}{2} = \frac{m_e (F - E_l)}{\hbar e B_n} \quad n + 1 + \frac{1}{2} = \frac{m_e (F - E_l)}{\hbar e B_{n+1}}$$

Вычитаем из правого левое и получаем для периода T_B и частоты F_B осцилляций от двумерной подзоны с минимумом энергии E_1 .

$$T_B = \frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} = \frac{e\hbar}{m_e (F - E_l)} \quad F_B = \frac{1}{T_B} = \frac{m_e (F - E_l)}{e\hbar}$$

Сила тока переносимого левым краевым состоянием ($y = 0$)

$$I_+ = \frac{e}{2\pi} \int_{E_{nL}}^{F_l} v_x dk_x = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{E_{nL}}^{F_l} \frac{dE}{dk_x} dk_x = \frac{e}{2\pi\hbar} (F_l - E_{nL})$$

Сила тока переносимого правым краевым состоянием ($y = L_y$)

$$I_- = \frac{e}{2\pi} \int_{E_{nL}}^{F_r} v_x dk_x = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{E_{nL}}^{F_r} \frac{dE}{dk_x} dk_x = \frac{e}{2\pi\hbar} (F_r - F_{nl})$$

Полная сила тока

$$I = I_+ - I_- = \frac{e}{2\pi\hbar} (F_l - F_r) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} U_H$$

В случае если в уровней Ландау расположено ниже уровня Ферми

$$I = \frac{e^2 v}{2\pi\hbar} U_H$$

$F_p F_r$ – уровень Ферми с левого и правого края

2.30 Сверхрешетки. Энергетический спектр электронов, минизоны. Проводимость вдоль и перпендикулярно оси сверхрешётки. Осцилляции Блоха. Отрицательная дифференциальная проводимость. Резонансное туннелирование

Полупроводниковые сверхрешётки:

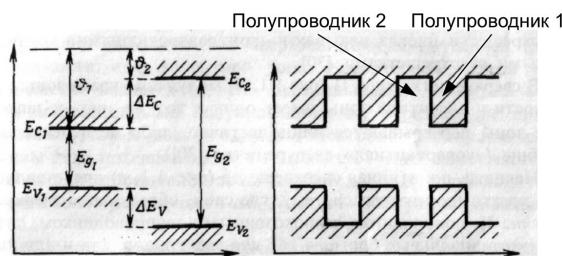
Сверхрешётка (СВР) – структура, в которой имеется искусственное периодическое изменение свойств.

Классификация по размерности:

- Одномерная СВР — периодическое изменение свойств в одном направлении.
- Двумерная СВР — периодическое изменение свойств в двух направлениях
- Трёхмерная СВР — периодическое изменение свойств в трёх направлениях (искусственный кристалл)

Композиционные СВР — периодичность обеспечивается периодическим изменением химического состава:

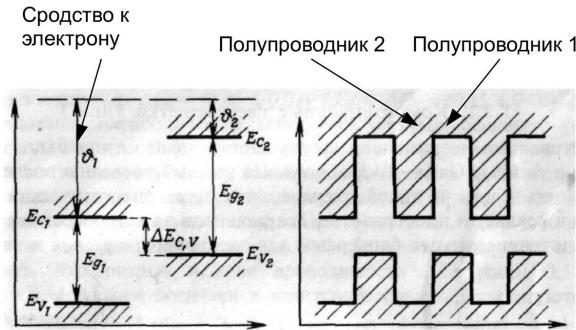
- Композиционные СВР типа I — чередование слоёв разных полупроводников, причём запрещённая зона одного полупроводника расположена в пределах запрещённой зоны второго полупроводника. Примеры:



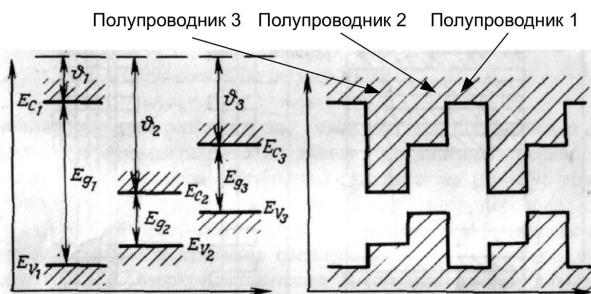
$(Al_x Ga_{1-x} As/GaAs)_n$, $(GaAs/In_x Ga_{1-x} As)_n$, $(GaP/GaAs_x P_{1-x})_n$, $(ZnS/ZnSe)_n$
 $(HgTe/CdTe)_x$, $(Si/Si_{1-x} Ge_x)_n$

- Композиционные СВР типа II — чередование слоёв разных полупроводников, причём запрещённая зона каждого полупроводника выходит за пределы запрещённой зоны другого полупроводника частично или полностью. Пример материалов для слоёв:

- 1) Полупроводник 1: $GaSb_{1-y} As_y$ Полупроводник 2: $In_{1-x} Ga_x As$
- 2) Полупроводник 1: $Pb_{1-y} Sn_y Te$ Полупроводник 2: $Pb_{1-x} Sn_x Te (x \neq y)$



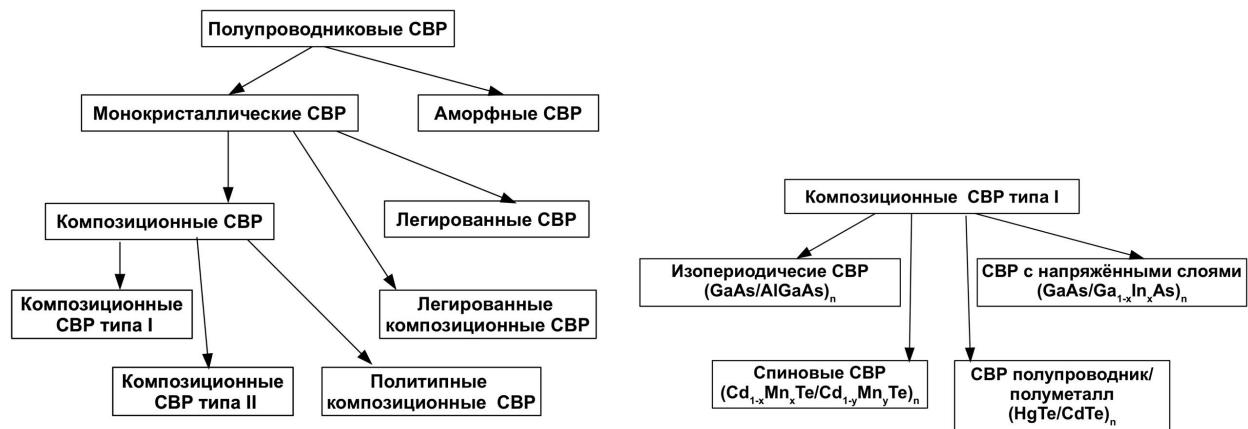
- Политипные композиционные СВР.



Пример: $(AlSb/GaSb/InAs)_n$

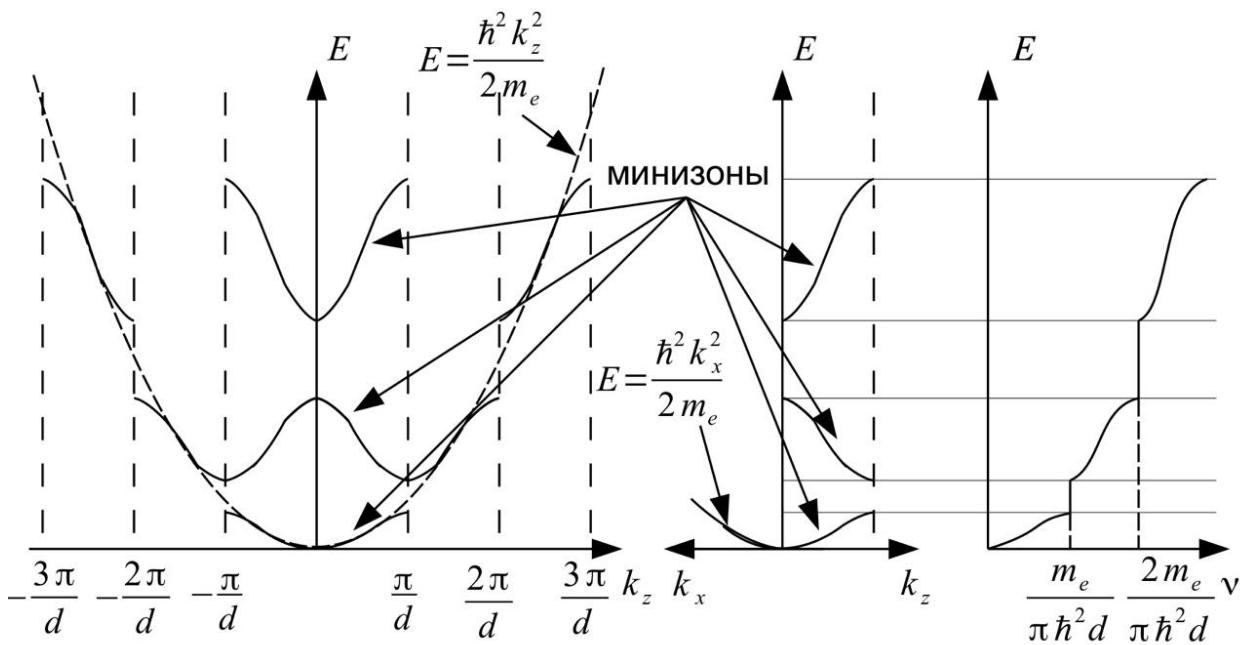
Легированные СВР — СВР, в которых периодически изменяется содержание легирующей примеси, что обеспечивает например, периодическое чередование слоёв n- и p-типа.

Легированные композитные СВР — композитные СВР, в которых легирующая примесь добавлена во все или часть слоёв.

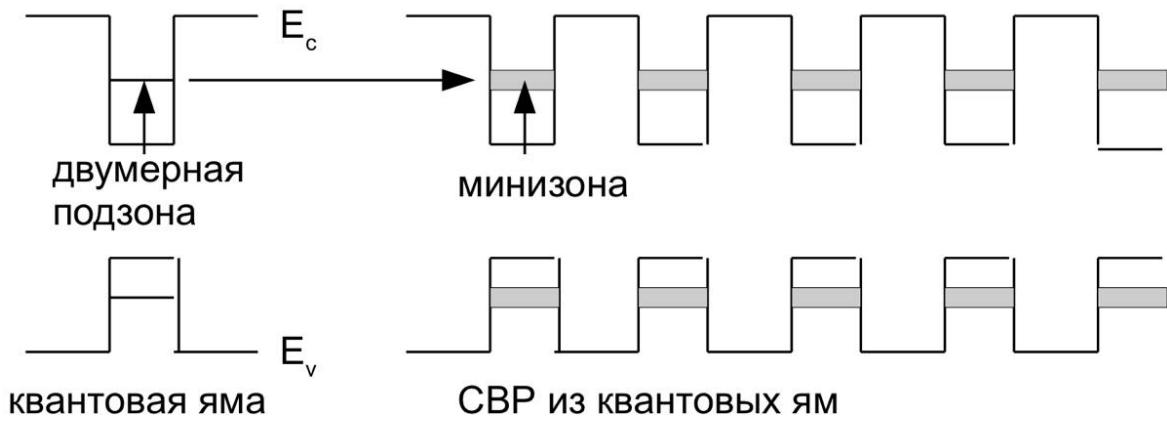


Энергетический спектр электронов в СВР

Пример одномерной СВР с квадратичным изотропным законом дисперсии исходных материалов. В направлении оси СВР за счёт периодического изменения потенциала зона Бриллюэна сжимается до интервала $2\pi/d$. На границах зоны Бриллюэна групповая скорость обращается в 0, закон дисперсии разрывается, образуются **минизоны**, особенности плотности состояний (d - период СВР).



Из-за перекрытия волновых функций двумерные подзоны в квантовых ямах превращаются в трёхмерные минизоны СВР. Волновые функции и уровни энергии состояний в минизонах при слабом перекрытии волновых функций могут быть рассчитаны в рамках метода сильной связи:



Волновая функция двумерной подзоны в одиночной квантовой яме

$$\psi_0(x, y, z) = \phi(z) \exp(i(k_x x + k_y y))$$

Волновая функция минизоны СВР в методе сильной связи

$$\psi(x, y, z) = \sum_n \phi(z - nd) \exp(ink_z d) \exp(i(k_x x + k_y y))$$

Закон дисперсии в рамках метода сильной связи

$$E = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_e} + E_0 - 2t_E \cos(k_z d)$$

Электропроводность вдоль оси СВР. Осцилляции Блоха
 квазиклассический подход:

Во внешнем электрическом поле напряжённости G электрон за время t в СВР приобретает дополнительный квазимпульс: $\Delta p_z = eGt$. Средняя скорость электрона: $v_z = \frac{\partial E}{\partial p_z}$. Плотность тока: $j_z = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int v_z d^3p = j_z(eGt)$

Энергия, а значит и скорость и плотность тока периодическая орбитка p_z . Период T_{Bl} и частота f_{Bl} осцилляций Блоха равны:

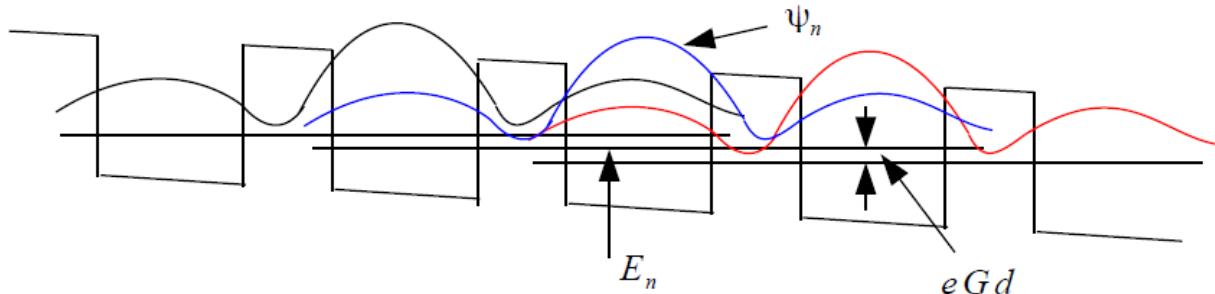
$$eGT_{Bl} = \frac{2\pi\hbar}{d} \quad T_{Bl} = \frac{2\pi\hbar}{eGd} \quad f_{Bl} = \frac{eGd}{2\pi\hbar}$$

Условия наблюдения:

$$T_{Bl} < \tau \quad eGd < \Delta E$$

ΔE – ширина минизоны

Во внешнем электрическом поле напряжённости G периодичность нарушается. В результате волновые функции состояний минизон локализуются. Минизона распадается на систему дискретных уровней энергии – лестницу Ванье-Штарка.



Уравнение Шредингера для СВР во внешнем электрическом поле

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - eGz\psi = E\psi & \quad \text{яма} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + (\Delta E_c - eGz)\psi = E\psi & \quad \text{барьер} \end{aligned}$$

Волновая функция

$$\psi_n = \exp(i(k_x x + k_y y)) \sum_m c_m \phi(z - md)$$

$\phi(z)$ – функция, описывающая зависимость волновой функции от z в ненулевом электрическом поле

$$c_m = J_{n-m} \left(\frac{\Delta E}{eGd} \right) \approx \frac{1}{|n-m|!} \left(\frac{\Delta E}{2eGd} \right)^{|n-m|}$$

Уровни энергии

$$E_n = E_0 + neGd, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Квантовое описание осцилляций. Построим нестационарное состояние из волновых функций двух соседних состояний в электрическом поле

$$\psi = a_1 \psi_1 \exp\left(\frac{i E_0 t}{\hbar}\right) + a_2 \psi_2 \exp\left(\frac{i (E_0 + eGd)t}{\hbar}\right)$$

Плотность вероятности

$$|\psi|^2 = |a_1|^2 \psi_1^2 + |a_2|^2 \psi_2^2 + 2a_1 a_2 \psi_1 \psi_2 \cos\left(\frac{eGdt}{\hbar}\right)$$

Среднее значение координаты z также осциллирует с частотой Блоха

$$\bar{z} = \int z |\psi|^2 dz \approx \bar{z}_1 + \bar{z}_2 + 2a_1 a_2 z_0 c \cos\left(\frac{eGdt}{\hbar}\right) z_0 c = \int z \psi_1 \psi_2 dz$$

Стационарная электропроводность в режиме осцилляций Блоха:

Без учёта релаксации импульса постоянный ток в режиме осцилляций не течёт. Учтём релаксацию импульса в простейшем приближении, считая, что скорость релаксирует по тому же закону, что и импульс. Для стационарной скорости:

$$v_z(\infty) = \int_0^\infty \exp(-t/\tau) dv_z(t)$$

Вычислим для закона дисперсии в приближении сильной связи

$$E = E_0 - 2t_E \cos\left(\frac{eGt}{\hbar} d\right)$$

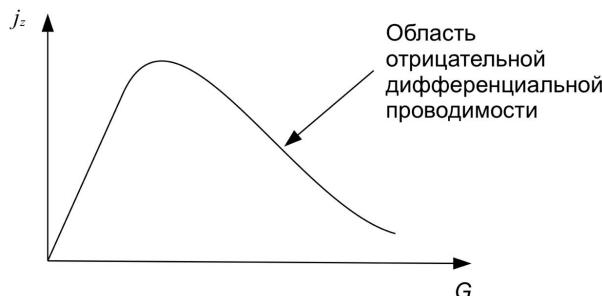
$$dv_z(t) = \frac{d^2 E}{dp_z^2} dp_z(t) = \frac{2t_E d^2}{\hbar^2} eG \cos\left(\frac{eGt}{\hbar} d\right) dt$$

После интегрирования получаем:

$$v_z(\infty) = \int_0^\infty \exp(-t/\tau) dv_z(t) = \frac{2t_E d}{\hbar} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x}{\omega_{Bl}\tau}\right) \cos x dx = \frac{2t_E d}{\hbar} \frac{\omega_{Bl}\tau}{1 + (\omega_{Bl}\tau)^2}$$

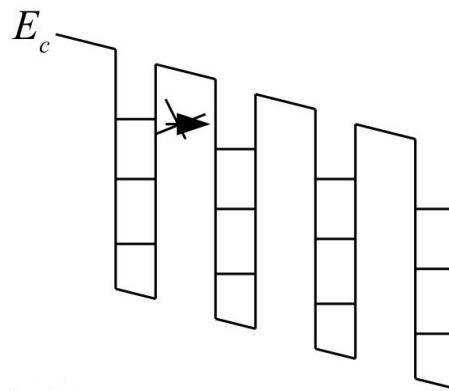
$$\omega_{Bl} = 2\pi f_{Bl} = \frac{eGd}{\hbar}$$

Отрицательная дифференциальная проводимость в режиме осцилляций Блоха:

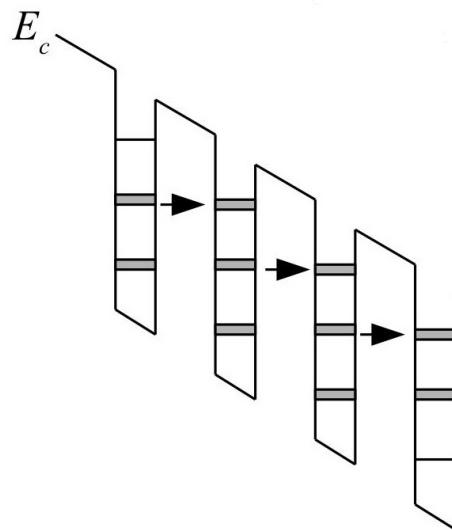


$j_z = env_z(\infty)$, n - концентрация электронов в минизоне В области отрицательной дифференциальной проводимости равномерное распределение электрического поля в СВР неустойчиво. Поле концентрируется в некоторых областях доменах. Домены могут двигаться при протекании тока

Резонансное туннелирование в СВР



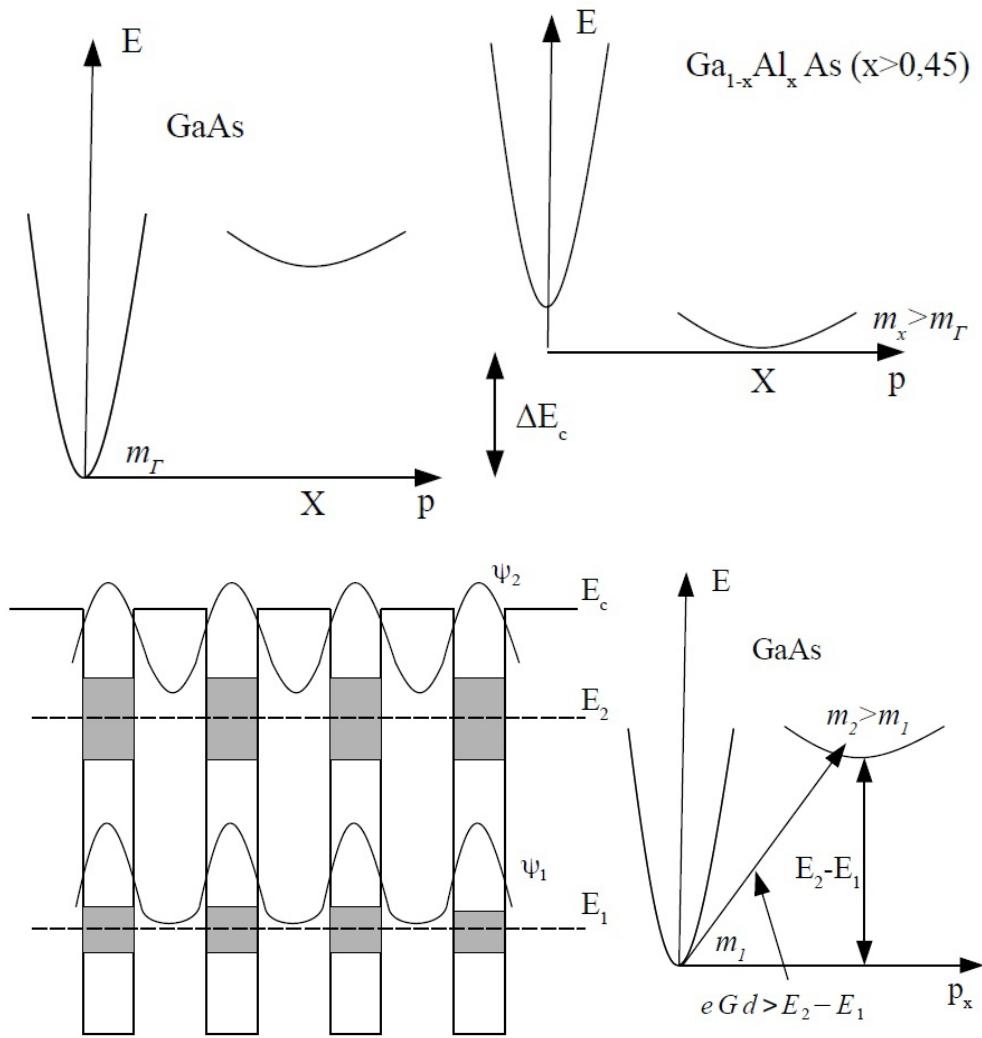
При условии $eGd > \Delta E$ минизона разрушается. При этом электрический ток и электропроводность минимальны



При наличии нескольких минизон дальнейшее увеличение поля может привести к выполнению условия $eGd = E_2 - E_1$ возникает резонансное туннелирование, уровни в потенциальных ямах уширяются, электрический ток и электропроводность увеличиваются

Отрицательная дифференциальная проводимость перпендикулярно оси СВР $Ga_{1-x}Al_xAs$ При увеличении содержания Al до $x = 0,45$ минимум зоны проводимости в точках X становится основным. Эффективная масса электронов в X-минимуме намного больше чем в Г-минимуме. Таким образом при $x > 0,45$ масса электронов в барьерных слоях намного больше, чем в слоях потенциальных ям.

Волновые функции верхних минизон СВР глубже проникают в барьерные слои. Поэтому эффективная масса электронов в верхних минизонах значительно больше



чем в нижних. В достаточно сильном электрическом поле электроны приобретают достаточно энергии для перехода в верхнюю минизону. При этом подвижность электронов и электропроводность резко падают. Это отрицательная дифференциальная проводимость.

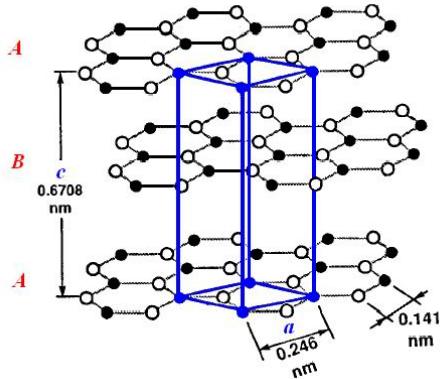
2.31 Графен. Структура графена. Точки Дирака. Закон дисперсии для электронов и дырок. Целочисленный квантовый эффект Холла в графене.

К веществам, имеющим двумерную или хазидвумерную электронную структуру относится графит и его интеркалированные соединения.

Структура графена:

Атомы углерода в графите располагаются в параллельных слоях, расстояние между которыми при комнатной температуре составляет $d_0 = 0,36$ нм. В каждом плоском слое атомы углерода образуют сетку правильных шестиугольников, с расстоянием

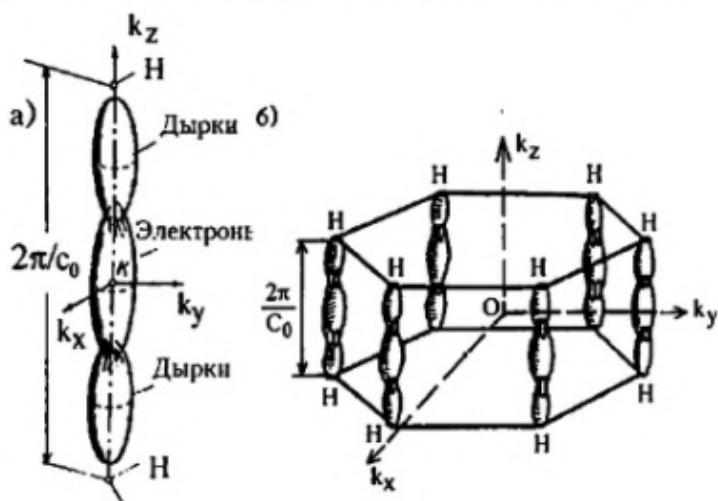
между атомами С – С равным $b_0 = 0.14$ нм. В каждом последующем слое атомы смешены так, что часть из них расположена под центрами шестиугольников, а часть под атомами вышележащего слоя. Такая структура соответствует гексагональной решетке с четырьмя атомами углерода в элементарной ячейке.



Поскольку взаимодействие атомов углерода в одном слое значительно сильнее их взаимодействия в соседних слоях, то хорошим приближением зонной структуры графита является двумерная модель (=графен).

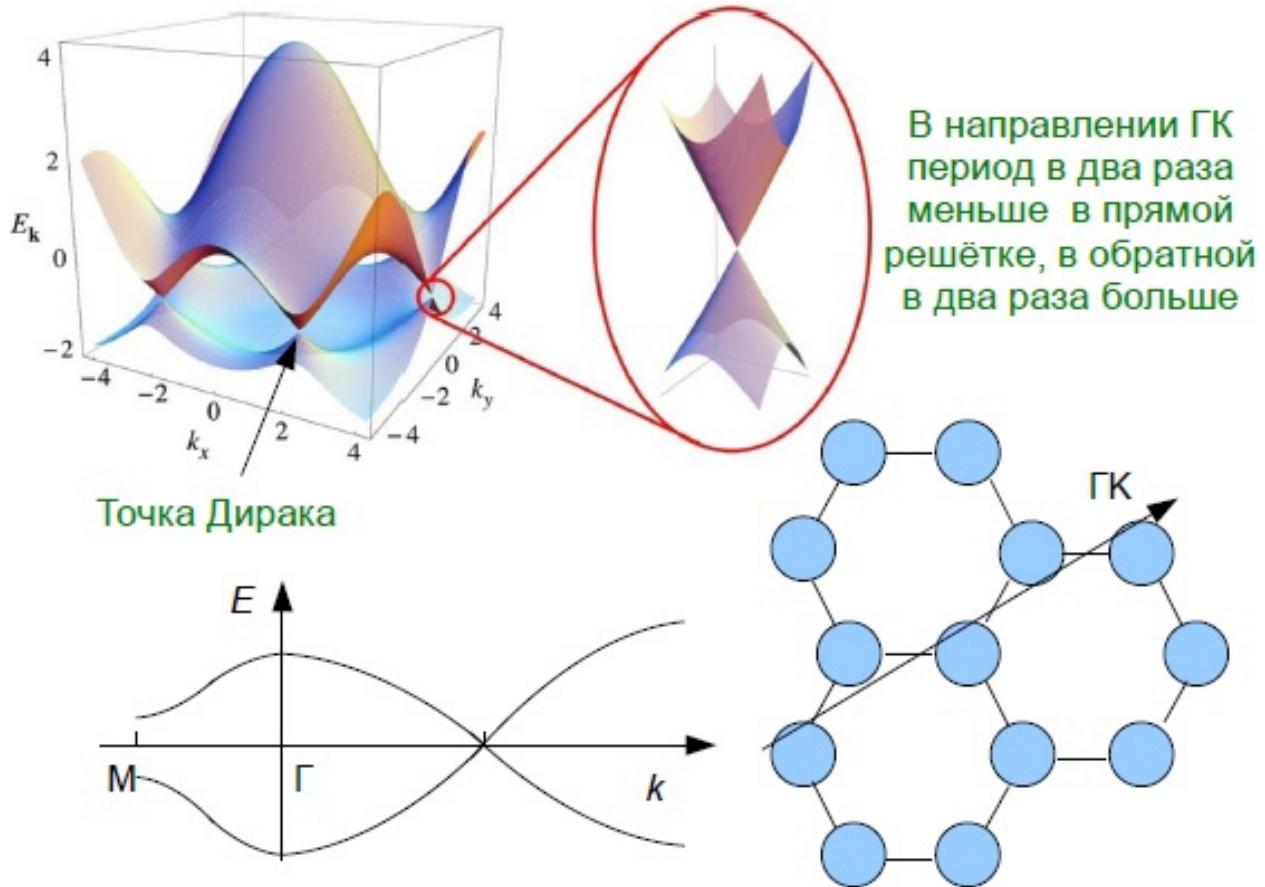
Энергетический спектр:

В гексагональной модификации в элементарной ячейке 4 неэквивалентных атома, по два из каждого графенового слоя. В результате перекрытия волновых функций слоёв законы дисперсии для электронов и дырок вблизи т. К должны расщепляться. Электроны из отщеплённой вверх ветви валентной зоны переходят в отщеплённую вниз ветвь зоны проводимости. Точка К – **точка Дирака**. В результате графит – полуметалл.



Поверхность Ферми графита (а) и ее расположение в зоне Бриллюэна (б)

На рисунке приведена первая зона Бриллюэна графита и поверхность Ферми, состоящая из электронных (в точке К) и дырочных (достигающих точки Н) эллипсоидов (по два эллипса на зону).



Графен. Закон дисперсии. Графическое представление

Закон дисперсии: Площадь занимая состояниями с энергией $E' < E$ в пространстве

$$S(E' < E) = \pi \left(\frac{E}{v_0} \right)^2$$

Концентрация состояний с энергией $E' < E$

$$N(E' < E) = \frac{4S(E' < E)}{(2\pi\hbar)^2} = \frac{1}{\pi\hbar^2} \left(\frac{E}{v_0} \right)^2$$

Плотность состояний:

$$v(E) = \frac{\partial N(E' < E)}{\partial E} = \frac{4S(E' < E)}{(2\pi\hbar)^2} = \frac{2E}{\pi\hbar^2 v_0^2}$$

Концентрация электронов (дырок) в случае вырожденной статистики при заданном положении уровня Ферми

$$n_{2D} = \frac{1}{\pi\hbar^2} \left(\frac{F^2}{v_0^2} \right)$$

Концентрация электронов в нелегированном графене

$$n_{2D} = p_{2D} = \int_0^\infty v(E) f_0(E) dE$$

Вблизи точки Дирака законы дисперсии (плотность состояний) для электронов и дырок симметричны, поэтому для электронейтральности должно быть $F = 0$

$$n_{2D} = p_{2D} = \frac{2}{\pi \hbar^2 v_0^2} \int_0^\infty \frac{E dE}{\exp\left(\frac{E}{k_B T}\right) + 1} = \frac{(k_B T)^2}{\pi \hbar^2 v_0^2} \int_0^\infty \frac{x dx}{\exp(x) + 1} = \frac{C (k_B T)^2}{\pi \hbar^2 v_0^2}$$

$$C = 2 \int_0^\infty \frac{x dx}{\exp(x) + 1} = \frac{\pi^2}{6} - \text{число}$$

Целочисленный квантовый эффект Холла в графене: Рассмотрим процесс квантования энергии электронов в графене в магнитном поле. Квазиклассическое условие квантования площадей:

$$S_n = \pi \left(\frac{E_n}{v_0} \right)^2 = 2\pi \hbar e B (n + \gamma)$$

Уровни Ландау в квазиклассическом приближении:

$$E_n = \pm v_0 \sqrt{2\hbar e B (n + \gamma)}$$

Точное решение уравнения Дирака в магнитном поле:

$$E_n = \pm v_0 \sqrt{2\hbar e B n}, n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Кратность вырождения уровня без учёта спинового расщепления:

$$N_L = \frac{2}{2\pi l_B^2}, n = 0 \quad N_L = \frac{4}{2\pi l_B^2}, n > 0$$

Период осцилляции сопротивления в зависимости от концентрации электронов в постоянном магнитном поле

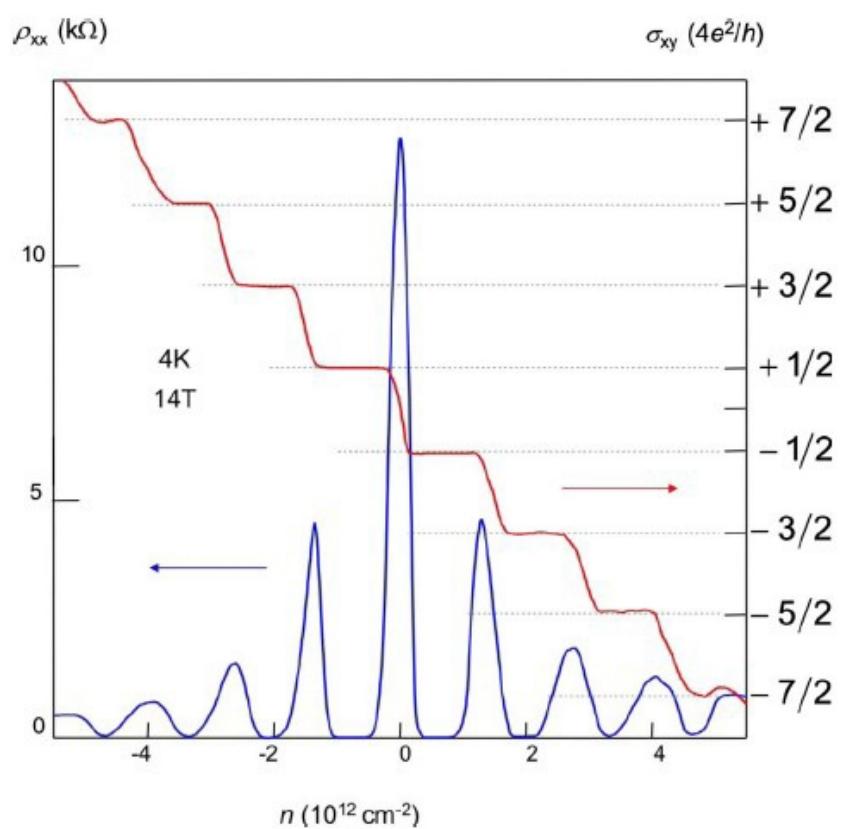
$$n_{2Dn} = \frac{1}{\pi \hbar^2} \frac{F^2}{v_0^2} = \frac{2eBn}{\pi \hbar} \quad n_{2Dn+1} = \frac{1}{\pi \hbar^2} \frac{F^2}{v_0^2} = \frac{2eB(n+1)}{\pi \hbar}$$

Отсюда находим:

$$(n_{2D+1} - n_{2Dn}) \frac{\pi \hbar}{2eB} = 1 \quad T_n = n_{2Dn+1} - n_{2Dn} = \frac{\pi \hbar}{2eB} = \frac{2eB}{\pi \hbar}$$

Тогда квантование холловской проводимости:

$$\sigma_H = \frac{4e^2}{2\pi \hbar} \left(v + \frac{1}{2} \right), v = 1, 2, \dots$$



Глава 3

Механика материалов

3.1 Законы Ньютона для материальной точки и твёрдого тела. Законы сохранения энергии, импульса, момента импульса.

Динамика - изучение движения материальных тел под действием приложенных к ним систем сил с учётом инертности самих тел. Вводят абстрактное понятие о материальной точке, как о точке обладающей массой. Материальная точка - модель простейшего материального объекта, обладающего массой и размерами, формой, вращением и структурой которого можно пренебречь.

Для описания реального твердого тела используют модель абсолютно твердого тела, т.е. совокупности материальных точек, расстояния между которыми постоянны. Движение в общем случае складывается из вращательного и поступательного. Материальное тело можно рассматривать, как материальную точку в тех случаях, когда можно не принимать во внимание вращательную часть движения тела.

Первый закон Ньютона (Закон инерции): Изолированная от внешних воздействий материальная точка сохраняет своё состояние покоя (равномерного прямолинейного движения) пока приложенные силы не заставят её изменить это состояние относительно инерциальных систем отсчёта.

Второй закон Ньютона (основной закон динамики): Произведение массы материальной точки на ускорение, которое она получает под действием данной силы равно по модулю этой силы, а направление ускорения совпадает с направлением силы в инерциальной системе отсчета:

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

То есть при действии на точку одной и той же силы точка с большей массой приобретёт меньшее по величине ускорение (масса является мерой инертности материальной точки).

Если на точку действует несколько сил, то: $\sum \vec{F} = m\vec{a}$

Для твёрдого тела: Твердое тело, в отличие от материальной точки, может обладать поступательным и вращательным движением, в связи с чем основной закон динамики для него примет вид:

1. $\sum_k^{\text{внешн}} \vec{F} = M\vec{a}_c$ (для поступательного движения), где ΣF - векторная сумма внешних сил, \vec{a}_c - ускорение центра масс системы
2. $\sum M_z = J_{z\varepsilon}$ (для вращательного вращения относительно некоторой оси z), где $\sum M_z$ - сумма вращающих моментов сил, J_z - момент инерции относительно оси z, ε - угловое ускорение. Это аналог второго закона Ньютона для вращательного движения, из которого следует, что угловое ускорение $\bar{\varepsilon}$ твердого тела при вращении вокруг неподвижной оси прямо пропорционально врачающему моменту и обратно пропорционально моменту инерции относительно этой оси.

Третий закон Ньютона (закон равенства действия и противодействия):

Две материальные точки действуют друг на друга с силами: 1) равными по модулю; 2) направленными вдоль прямой, соединяющей эти точки, в противоположные стороны. Силы не образуют равновесия, поскольку они приложены к разным точкам.

Для твёрдого тела: при взаимодействии тел сила действия со стороны одного тела на другое равна по величине и противоположна по направлению силе, действующей со стороны другого тела на первое.

Принцип независимости действия сил: Каждая сила, приложенная к материальной точке, сообщает ей одно и то же ускорение, независимо от того действует она одна или в совокупности с другими силами. Закон сохранения энергии: При движении механической системы в потенциальном силовом поле её полная механическая энергия сохраняется. $T_1 + \Pi_1 = T_2 + \Pi_2 = \text{const}$, где T – кинетическая энергия, Π – потенциальная. Для механической системы кинетическая энергия равна арифметической сумме кинетических энергий всех точек механической системы.

Закон сохранения импульса: Импульс (количество движения) точки - векторная динамическая характеристика её движения. Равна произведению массы точки на вектор её скорости ($\vec{p} = m\vec{v}$). Импульс системы материальных точек - геометрическая сумма всех ее импульсов:

$$\vec{p} = \sum_{k=1}^n m_k \vec{v}_k$$

Тогда изменение импульса:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \sum_{k=1}^n m_k \vec{a}_k = \sum_{k=1}^n \vec{F}_k^{\text{внешн}} + \sum_{k=1}^n \vec{F}_k^{\text{внутр}}$$

Учитывая, что сумма всех внутренних сил 0 : $\sum_{k=1}^n \vec{F}_k^{\text{внутр}} = 0$, то:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \sum_{k=1}^n \vec{F}_k^{\text{внешн}}$$

Если система замкнута, то внешние силы на нее не действуют, поэтому изменение импульса будет 0.

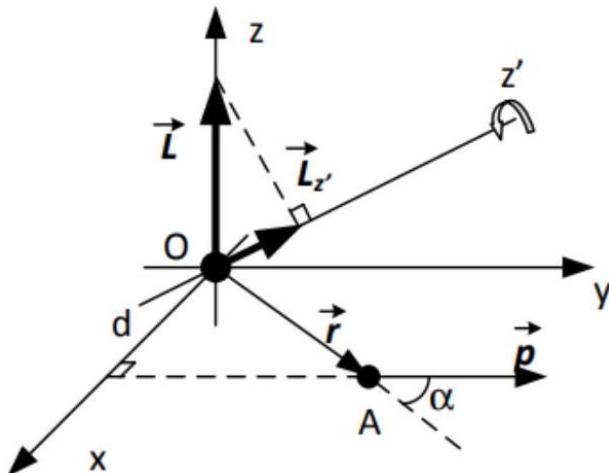
Закон сохранения импульса.

В замкнутой системе векторная сумма импульсов тел не меняется при любых движениях и взаимодействиях между телами системы.

Закон сохранения момента импульса: если сумма моментов относительно данного центра всех приложенных к системе внешних сил равна нулю, то главный момент количества движения системы относительно этого центра будет количественно и по направлению постоянен.

Моментом импульса материальной точки А относительно неподвижной (произвольной) точки О называется физическая величина, определяемая векторным

произведением $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$, где \vec{r} – радиусвектор, проведенный из точки О в точку А, $\vec{p} = m\vec{V}$ – импульс материальной точки. Модуль вектора момента импульса $L = rp \sin \alpha = m V r \sin \alpha = pd$, где α – угол между векторами \vec{r} и \vec{p} , d – плечо вектора \vec{p} относительно точки О :



Моментом импульса относительно оси z называется величина L_z , равная проекции на эту ось вектора момента импульса \vec{L} , определенного относительно произвольной точки О данной оси z. Значение момента импульса L_z не зависит от положения точки О на оси z. При непрерывном распределении массы момент импульса относительно оси z равен:

$$\overrightarrow{L}_z = J_z \overrightarrow{\omega}_z$$

где J_z – момент инерции тела относительно оси z, ω_z – угловая скорость вращения.

Момент импульса материальной точки или твердого тела связан с моментом приложенных сил следующим соотношением, называемым уравнением моментов:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M}$$

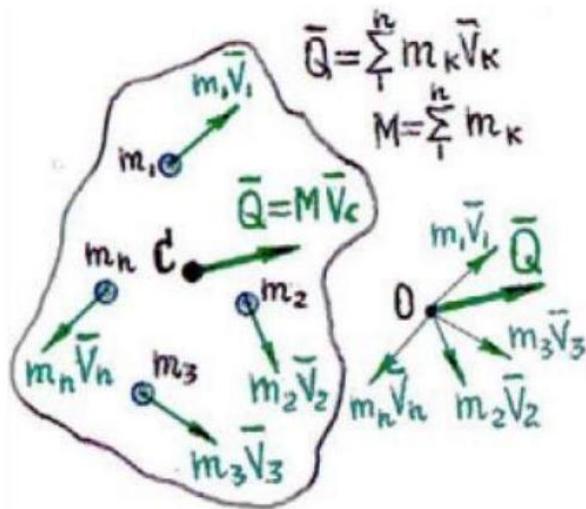
Из уравнения моментов следует, что, если результирующий момент сил, действующий на систему материальных точек или твердое тело равен нулю (замкнутая система), то момент импульса такой системы остается постоянным:

$$\vec{L} = \text{const}$$

Если тело вращается вокруг закрепленной оси z, то сохраняется проекция момента импульса тела на эту ось:

$$\overrightarrow{L}_z = \text{const}$$

3.2 Теоремы об изменении количества движения материальной системы; об изменении главного момента количества движения материальной системы; об изменении кинетической энергии материальной системы.



Теорема об изменении количества движения материальной системы:
 Количество движения mV точки - произведение массы точки на вектор её скорости.
 Количеством движения системы - геометрическая сумма количеств движений всех её точек:

$$\vec{Q} = \sum_{k=1}^n m_k \vec{v}_k$$

Учитывая теорему о движении центра масс:

$$M\vec{V}_c = \sum_{k=1}^n m_k \vec{v}_k$$

Получаем, что:

$$\vec{Q} = M\vec{V}_c$$

Рассмотрим систему из n материальных точек. Составим для этой системы дифференциальные уравнения движения и сложим их почленно:

$$\frac{d\vec{Q}}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^n m_k \vec{v}_k = \sum_{k=1}^n m_k \vec{a}_k = \sum_{k=1}^n \vec{F}_k^{\text{внутр}} + \sum_{k=1}^n \vec{F}_k^{\text{внешн}}$$

С учетом того, что сумма внутренних сил 0 (3 закон Ньютона), то:

$$\frac{d\vec{Q}}{dt} = \sum_{k=1}^n \text{Vec} F_k^{\text{внешн}}$$

Тогда теорема об изменении количества движения материальной системы:

1. В дифференциальной форме: производная по времени от количества движения системы равна геометрической сумме всех действующих на систему внешних сил.
2. В интегральной форме: изменение количества движения системы за некоторый промежуток времени равно сумме импульсов, действующих на систему внешних сил за тот же промежуток времен.

Теорема об изменении главного момента количества движения материальной системы:

Главный момент количества движения (кинетический момент) системы относительно данного центра О - величина K_O , равная геометрической сумме моментов количества движения всех точек системы относительно этого центра:

$$\vec{K}_O = \sum_{k=1}^n \vec{M}_0(m_k \vec{v}_k) = \sum_{k=1}^n [\vec{r}_k \times (m_k \vec{v}_k)]$$

Рассмотрим одну материальную точку системы. Производная моментов количества движения равна (аддитивность сил и моментов):

$$\frac{d}{dt} \vec{M}_0(m_k \vec{v}_k) = \vec{M}_0(\vec{F}_k^{\text{внешн}}) + \vec{M}_0(\vec{F}_k^{\text{внутр}})$$

Где силы - равнодействующие внутренние и внешние составляющие, действующие на данную точку.

Тогда составляя данные уравнения для всех точек системы и складывая их почленно, получаем:

$$\frac{d}{dt} \sum \vec{M}_0(m_k \vec{v}_k) = \sum \vec{M}_0(\vec{F}_k^{\text{внешн}}) + \sum \vec{M}_0(\vec{F}_k^{\text{внутр}})$$

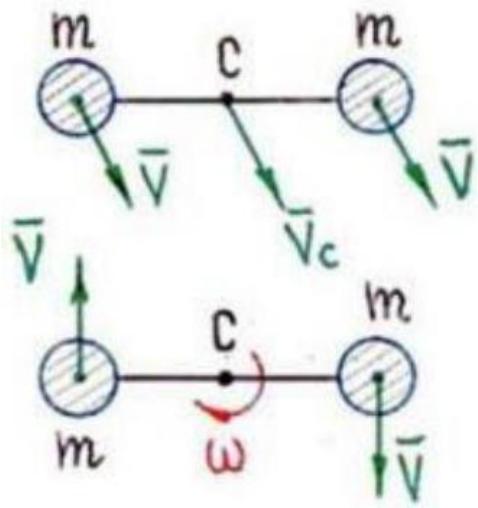
Но последняя сумма равно 0 (так как по 3 закону Ньютона сумма всех внутренних сил скомпенсируется, как и сумма моментов этих сил). Тогда:

$$\frac{d\vec{K}_o}{dt} = \sum \vec{M}_0(\vec{F}_k^{\text{внешн}})$$

Формулировка теоремы: производная по времени от главного момента количества движения системы относительно некоторого неподвижного центра равна сумме моментов всех внешних сил системы относительно того же центра.

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt}$$

Теорема об изменении кинетической энергии:



1) Для материальной точки:

Кинетическая энергия материальной точки - скалярная характеристика ее движения $T = (mv^2/2)$.

В простейшей системе из двух равных по массе точек с поступательным движением v . Тогда очевидно, что

$$T = \frac{mv^2}{2} + \frac{mv^2}{2} = mv^2$$

Если вращательное движение с постоянной угловой скоростью ω , то точки будут иметь одинаковые по величине скорости: $V = \omega r$, тогда суммарная кинетическая энергия:

$$T = \frac{mV^2}{2} + \frac{mV^2}{2} = mV^2$$

То есть система обладает одинаковыми кинетическими энергиями, хотя движения разные. Кинетическая энергия не учитывает направленность движения.

Из второго закона Ньютона силу можно выразить как:

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt}$$

Умножая скалярная данное произведение на $d\vec{r}$ получаем:

$$\vec{F} d\vec{r} = m \frac{d\vec{v}}{dt} d\vec{r} = m \frac{dr}{dt} d\vec{v} = mv d\vec{v} = d \left(\frac{mv^2}{2} \right) = dA$$

Это - математическая трактовка теоремы об элементарном изменении кинетической энергии точки: элементарное изменение кинетической энергии точки равно элементарной работе действующей на точку силы.

2) Для материальной системы:

Кинетической энергией системы называют скалярную величину T , равную сумме кинетических энергий всех точек системы:

$$T = \sum \frac{mv^2}{2}$$

Доказанную выше теорему об элементарной изменении кинетической энергии точки применяем для всех точек системы и складываем почленно, получаем:

$$d \sum \left(\frac{mv^2}{2} \right) = dT = \sum dA^{\text{внешних}} + \sum dA^{\text{внутренних}}$$

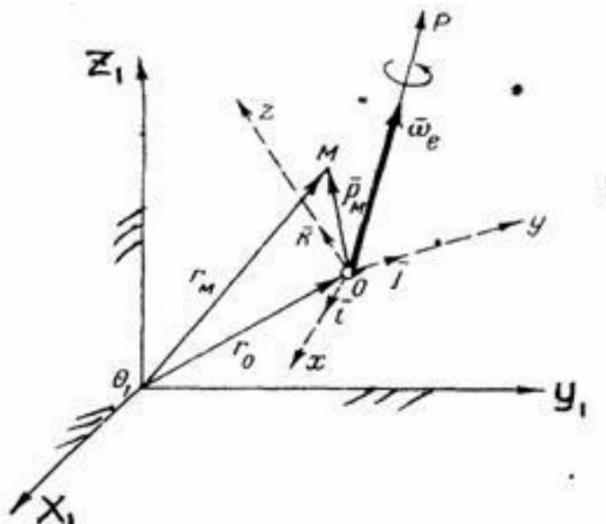
Проинтегрировав обе части получаем:

$$T_1 - T_0 = \sum A^{\text{внешних}} + \sum A^{\text{внутренних}}$$

Это математическое представление теоремы об изменении кинетической энергии механической системы: изменение кинетической энергии системы на некотором её перемещении равно сумме работ всех внешних и внутренних сил, действующих на систему на этом перемещении.

3.3 Относительное движение. Сложное движение. Силы инерции. Связи - идеальные, голономные, неголономные.

Движение точки, рассматриваемое одновременно в неподвижной и подвижной систем отсчёта, называют сложным. При этом движение точки относительно неподвижной системы отсчёта называется абсолютным. Движение точки относительно подвижной системы отсчёта - относительное. Движение подвижной системы отсчета относительно неподвижной - переносное.



$O_1X_1Y_1Z_1$ – неподвижная система координат. Вводится подвижная система координат $OXYZ$, совершающая заданное движение относительно неподвижной.

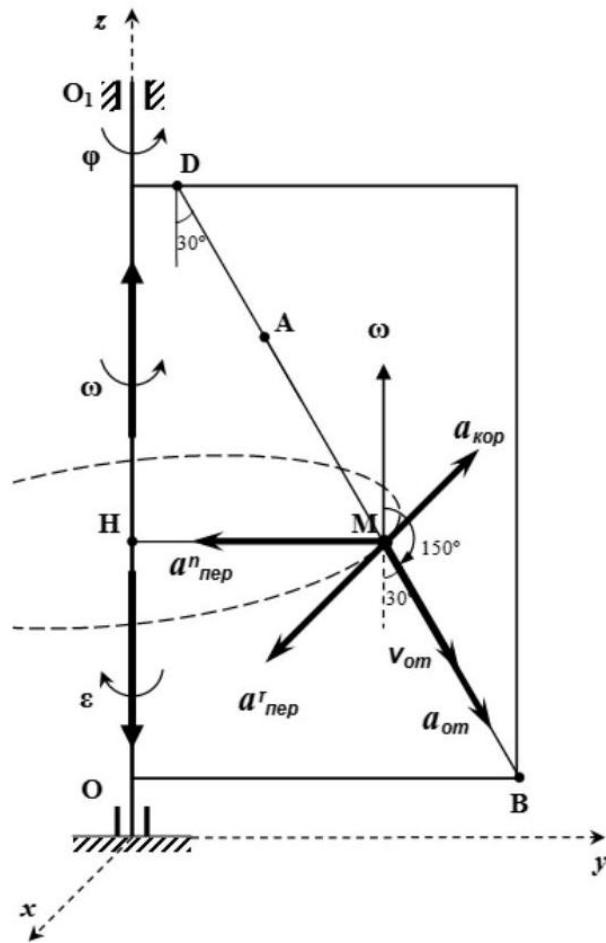
Движение т.М относительно подвижной системы координат называется относительным. Траектории т.М относительно подвижной системы координат называется относительной. Скорость OXYZ относительно O₁X₁Y₁Z₁ называется переменной. Скорость т.М относительно O₁X₁Y₁Z₁ называется абсолютной.

Теорема о сложении скоростей: Вектор абсолютной скорости точки при сложном движении равен геометрической сумме её переносной и относительно скоростей:

$$\bar{v}_{\text{абс}} = \bar{v}_{\text{перен}} + \bar{v}_{\text{отн}}$$

Теорема о сложении ускорений (Теорема Кориолиса):

$$\bar{a}_{\text{абс}} = \bar{a}_{\text{отн}} + \bar{a}_{\text{перен}} + 2\bar{\omega}_{\text{перен}} \times \bar{v}_{\text{отн}}, \quad \text{где } \bar{a}_{\text{кориолисово}} = 2\bar{\omega}_{\text{перен}} \times \bar{v}_{\text{отн}}$$



Кориолисово ускорение характеризует:

1. Изменение модуля и направления переносной скорости точки из-за её относительности движения
2. Изменение направления относительной скорости из-за вращательного переносного движения

Направление кориолисова ускорения определяется по правилу Жуковского: Вектор относительной скорости спроектировать на плоскость, перпендикулярную переносной угловой скорости, и повернуть проекцию на 90° в сторону вращения.

Силы инерции

В общем случае сила инерции - векторная величина, равная произведению массы материальной точки на ее ускорение и направленная противоположно ускорению. Пусть F - активные силы, а R - силы реакции, тогда по второму закону Ньютона:

$$m\vec{a}_{ac} = \sum \vec{F} + \vec{R}$$

Раскрывая абсолютное ускорение по теореме Кориолиса:

$$\begin{aligned} m(\vec{a}_o + \vec{a}_{\text{перен}} + \vec{a}_{\text{кориолиса}}) &= \sum \vec{F} + \vec{R} \\ m\vec{a}_o &= \sum \vec{F} + \vec{R} - m\vec{a}_{\text{перен}} - m\vec{a}_{\text{кориолиса}} \\ m\vec{a}_o &= \sum \vec{F} + \vec{R} + \vec{F}_{\text{перен}} + \vec{F}_{\text{кориолиса}} \end{aligned}$$

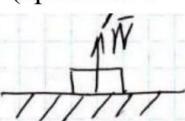
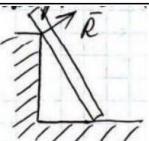
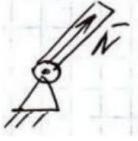
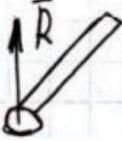
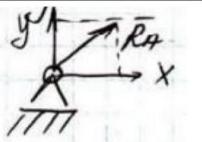
Тогда $\vec{F}_{\text{перен}} = -m\vec{a}_{\text{перен}}$ – переносная сила инерции,
 $\vec{F}_{\text{кориолиса}} = -m\vec{a}_{\text{кориолиса}}$ кориолисова сила инерции.

Связи

Если на движение тела наложены некоторые ограничения, то говорят, что на движение тела наложены связи. Связи - тела, ограничивающие свободу перемещения данной точки или тела, наложенным на данную точку или тело.

Идеальные связи: в которых отсутствует трение. При этом сумма элементарных работ реакций связей на элементарных перемещениях равна нулю.

Основные виды идеальных связей:

Гладкая опорная поверхность (трением о неё можно пренебречь). N по нормали к поверхности в точке касания		Заостренная поверхность. R перпендикулярно касательной плоскости	
Гибкая нерастяжимая связь; Реакция опоры направлена по нити в сторону точки подвеса		Жесткий стержень. N направлена вдоль него	
Сферический шарнир (колено, локоть); Приложена в центре сферического шарнира		Цилиндрический шарнир; R перпендикулярна оси шарнира	
Подвижная шарнирная опора; N перпендикулярна опорной плоскости		Неподвижная шарнирная опора	

Связи, налагающие ограничения на положения точек системы - геометрические, а налагающие ограничения еще и на скорости- кинематические (дифференциальными). Геометрические и интегрируемые дифференциальные связи называют связями голономными, а неинтегрируемые дифференциальные связи - неголономными. По виду связей механические системы тоже разделяют на голономные (с голономными связями) и неголономные (содержащие неголономные связи).

3.4 Уравнения Лагранжа второго рода.

Общее уравнение динамики: Рассмотрим систему материальных точек, на которую наложены стационарные, идеальные, голономные связи. Тогда **принцип возможных перемещений**: При равновесии материальной системы с идеальными и стационарными связями сумма работ всех активных, задаваемых, сил на любом возможном перемещении системы из положения равновесия равна нулю:

$$\sum_{k=1}^n \overrightarrow{F_k^{\text{акт}}} \delta \overrightarrow{r_k} = \sum_{k=1}^n \delta A_k^{\text{акт}} = 0$$

Принцип Даламбера позволяет рассматривать динамическую систему как статическую, если к ней добавить силы инерции:

$$\sum_{k=1}^n \delta A_k^{\text{акт}} + \sum_{k=1}^n \delta A_k^{\text{инерц}} = 0$$

Это общее уравнение динамики.

Обобщенные координаты: Положение механической системы, состоящей из n материальных точек определяется $3n$ декартовыми координатами: $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$. Пусть на систему наложено l геометрических удерживающих связей. Связи накладывают ограничения на декартовы координаты, записываемые в виде соотношений: $f_k(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = 0$ где $k = 1 \dots l$ - уравнения связей. Из уравнения связей определяют $n - l = s$ координат, все декартовы координаты однозначно выражают через s каких-либо независимых параметров q_1, q_2, \dots, q_s , которые называются обобщенными координатами.

Обобщенные координаты - любые независимые параметры, которые полностью и однозначно определяют положение системы. Тогда в обобщенных координатах общее уравнение динамики может быть записано через частные производные:

Где Q_i - обобщенные силы:

$$\sum_{i=1}^s (Q_i^{\text{акт}} + Q_i^{\text{инерц}}) \delta q_i = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_i^{\text{акт}} = \sum_{k=1}^n \overrightarrow{F_k^{\text{акт}}} \frac{\delta \overrightarrow{r_k}}{\delta q_i} - \text{активная часть} \\ Q_i^{\text{инерц}} = \sum_{k=1}^n \overrightarrow{F_k^{\text{инерц}}} \frac{\delta \overrightarrow{r_k}}{\delta q_i} - \text{инерциальная часть} \end{array} \right.$$

Раскрывая обобщенные силы и инерциальную силу расписывая как произведение массы и соответствующего ускорения:

$$\sum_{i=1}^s \left[\sum_{k=1}^n m_k \frac{d\vec{V}_k}{dt} \frac{d\vec{r}_k}{dq_i} - \sum_{k=1}^n \vec{F}_k^{\text{акт}} \right] \delta q_i = 0$$

Рассмотрим преобразования первого слагаемого:

$$\sum_{k=1}^n m_k \frac{d\vec{V}_k}{dt} \frac{d\vec{r}_k}{dq_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dT}{d\dot{q}_l} \right) - \frac{dT}{dq_i}$$

Подставим это выражение в сумму:

$$\sum_{i=1}^s \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{dT}{d\dot{q}_l} \right) - \frac{dT}{dq_i} - Q_i^{\text{акт}} \right] = 0$$

Обобщенные координаты независимы, поэтому сумма может обратиться в 0, только когда каждое из слагаемых будет 0. Тогда уравнение Лагранжа 2 рода (уравнение движения механической системы в обобщенных координатах):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dT}{d\dot{q}_l} \right) - \frac{dT}{dq_i} = Q_i^{\text{акт}}$$

Число таких уравнений соответствует числу степеней свободы s .

Преимущество этих уравнений, что их вид и число не зависит на прямую от количества точек, входящих в систему. Также данные уравнения инвариантны относительно того, как эти тела (точки) движутся.

3.5 Уравнения баланса массы, импульса, момента импульса, энергии в механике сплошной среды. Понятие о замкнутой системе уравнений.

Закон сохранения массы: Пусть V - неподвижный объем, из которого вытекает или втекает вещество. Масса внутри объема будет вычисляться по формуле $m = \int_V \rho dV$

Тогда для изменения массы запишем:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{\Sigma} \rho v_n dS = 0$$

Где V_n - скорость потока по нормали к поверхности S объема V , Σ - граница объема V . Второе слагаемое в правой части равенства выражает поток через границу объема, а первый член характеризует изменение плотности внутри V . Далее используя теорему Остроградского- Гаусса:

$$\int_S v_n dS = \int_V \text{div} \vec{v} dV$$

Получаем закон сохранения массы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div}(\vec{v}) = 0$$

Если жидкость несжимаема, то ее плотность постоянна, $\rho = \text{const}$, следовательно, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ и плотность можно вынести из-под оператора дивергенции и сократить. Получим $\operatorname{div}(\vec{v}) = 0$

Закон сохранения импульса: Возьмем тот же объем, импульс объема определяется выражением $\mathbf{q} = \int_V \rho v dV$. Тогда в интегральной форме уравнение сохранения импульса записывается как:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho v dV = \int_V \rho F dV - \int_{\Sigma} \rho v v_n dS + \int_{\Sigma} P_n dS$$

Где левая часть - изменение импульса объема, первое слагаемое в правой части импульс втекающего вещества. \mathbf{P} - тензор напряжений $P_{ij} \mathbf{p}_n = P_{ij} (n_1 n_2 n_3)^T$, $(p_n)_i = = \sum P_{ij} n_j$

Применим теорему Гаусса-Остроградского:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho v dV = \int_V \rho F dV - \sum \int_{\Sigma} \nabla_k (\rho v_i v_n) e_i dS + \sum \int_{\Sigma} \nabla_k P_{ik} dV e_i$$

Тогда баланс импульса примет вид (приравниваем к 0), а интеграл общий, значит подынтегральные выражения должны быть в сумме 0:

где $i = 1, 2, 3$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x^k} (\rho v_i v_k) = \frac{\partial}{\partial x^k} P_{ik} + \rho F_i$$

Раскрывая и применяя закон сохранения массы:

$$\rho a_i = \frac{\partial}{\partial x^k} P_{ik} + \rho F_i$$

Где a_i ускорение.

Баланс момента импульса: Момент импульса можно представить как векторное произведение: $\mathbf{q} = \int_V [r \times \rho v] dV$. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V [r \times \rho v] dV = \int_V [r \times \rho F] dV - \int_{\Sigma} [r \times \rho v] v_n dS + \int_{\Sigma} [r \times P_n] dS$$

1. У среды нет собственного момента импульса при $v \equiv 0$

2. Нет внешних объемных поверхностных моментов

Из уравнения баланса момента импульса в классическом случае следует симметричность тензора напряжений: $P_{ij} = P_{ji}$

Закон сохранения энергии: Пусть дан объем жидкости V , тогда в интегральном виде изменение энергии можно записать в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} \right) dV = \int_V j \cdot f dV + \int_{\Sigma} a \cdot n dS - \int_{\Sigma} q \cdot n dS + \int_V r \cdot p dV$$

Где ε – массовая плотность внутренних энергий, q -вектор плотности потока тепла, a – вектор плотности потока энергии, связанный с работой внутренних напряжений, r – объемная плотность внешних источников энергии, f – вектор массовой плотности внешних сил, j – поток массы, p тензор напряжений, n – вектор нормали.

В результате первое слагаемое – работа внешних сил, второе – работа напряжений, третье – тепловой поток, четвертое – энергия от внешних источников.

Применим аналогичные предыдущим действия (теорема Гаусса-Остроградского + упростим до полной производной) и получим дифференциальную форму:

$$\frac{\partial \left(\rho \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} \right) \right)}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} \right) v_i = j \cdot f + \operatorname{div} a - \operatorname{div} q + r \cdot p$$

Недивергентные слагаемые соответствуют работе внешних сил и внешним источникам тепла

Понятие о замкнутой системе уравнений: В гидромеханической задаче всегда даны связи:

1. Баланс массы
2. Баланс импульса;
3. Баланс момента импульса

Если неизвестных меньше чем уравнений, система называется замкнутой.

Неизвестные: $\rho = \rho(x, y, z, t)$, $v = v(x, y, z, t)$, $P_{ij} = P_{ij}(x, y, z, t)$

Часто задан F , например $F = g$ (сила тяжести)

3.6 Модель идеальной жидкости. Уравнения Эйлера. Полная система уравнений. Типичные граничные условия.

Модель идеальной жидкости – простейшая модель движущейся жидкости. Не учитывает наличие внутреннего трения (вязкости). По площадкам соприкосновения двух объемов действуют только нормальные к площадкам напряжения, касательных нет.

Модель идеальной жидкости применяется для изучения течения с большими скоростями, кавитационных течений, течений со свободными границами. В рамках данной модели считается, что нет потерь механической энергии.

В идеальной жидкости тензор напряжений имеет вид:

$$p_{ij} = -pE_n = \begin{pmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{pmatrix}$$

1. Уравнение движения идеальной жидкости (Уравнение Эйлера):

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right) = -\text{grad} p + \rho \vec{f}$$

Где v - скорость потока, f -вектор массовой плотности внешних сил.

В проекции на координатные оси:

$$\begin{cases} Ox : \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho f_x \\ Oy : \rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho f_y \\ Oz : \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho f_z \end{cases}$$

2. Закон сохранения массы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \text{div}(\vec{v}) = 0$$

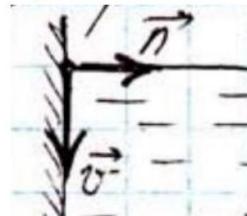
Если жидкость несжимаемая, то есть $\rho = \text{const}$, то $\text{div}(\vec{v}) = 0$.

3. Уравнения состояния: $p = p(\rho)$ или $\rho = \rho(p)$

Система уравнений 1), 2), 3) при заданных начальных и граничных условиях называется полной системой уравнений. Начальные условия: параметры в момент времени $t = 0$: V_0, ρ_0 .

Типичные граничные условия:

1. Граница «жидкость-твердое» (стенка):



- a) если стенка неподвижна, то условие непротекания: $\vec{v} \cdot \vec{n}|_{\text{граница}} = 0$
- б) если стенка движется: $\vec{v} \cdot \vec{n}|_{\text{граница}} = D$ где D -скорость движения стенки по нормали к ней.

2. Граница «жидкость-воздух»

- a) если пренебречь атмосферным давлением: $\vec{v} \cdot \vec{n}|_{\text{граница}} = 0$
- б) $p|_{\Gamma} = p_{\text{атм}}$ – если пренебречь капиллярными эффектами
- в) $p|_{\Gamma} - p_{\text{атм}} = \sigma (1/R_1 - 1/R_2)$ – с учетом капиллярных давлений

3.7 Идеальная жидкость. Уравнения Эйлера в форме Громеки-Лэмба. Интеграл Бернулли. Интеграл Коши-Лагранжа. Примеры.

Модель идеальной жидкости - простейшая модель движущейся жидкости. Не учитывает наличие внутреннего трения (вязкости). По площадкам соприкосновения двух объемов действуют только нормальные к площадкам напряжения, касательных нет.

Модель идеальной жидкости применяется для изучения течения с большими скоростями, кавитационных течений, течений со свободными границами. В рамках данной модели считается, что нет потерь механической энергии.

В идеальной жидкости тензор напряжений имеет вид:

$$p_{ij} = -pE_n = \begin{pmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{pmatrix}$$

Уравнение движения идеальной жидкости (Уравнение Эйлера):

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right) = -\text{grad} p + \rho \vec{f}$$

Где v - скорость потока, f -вектор массовой плотности внешних сил.

Если левую часть переписать в виде:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \text{grad} \frac{v^2}{2} + [\text{rot} \vec{v} \times \vec{v}]$$

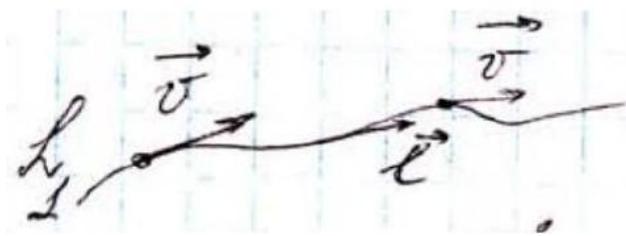
Получится **уравнение Эйлера в форме Громеки-Лэмба**:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \text{grad} \frac{v^2}{2} + [\text{rot} \vec{v} \times \vec{v}] \right) = -\text{grad} p + \rho \vec{f}$$

Данная форма записи позволяет получить вывод интеграла Бернули:

1. Считаем жидкость идеальной
2. Течение стационарно, т.е. $\frac{\partial v}{\partial t} = 0$
3. Жидкость несжимаема $\rho = \text{const}$
4. Объемные силы потенциальны, т.е. $\mathbf{F} = \text{grad}(\mathbf{u})$ (u -потенциальное поле энергий)
5. Будем рассматривать проекции на линии тока, которая совпадает с траекторией

Домножим уравнение Эйлера в форме Громеки-Лэмба на l - вектор касательной к линии тока. Тогда:



$$\rho \left(\operatorname{grad} \frac{v^2}{2} + [\operatorname{rot} \vec{v} \times \vec{v}] \right) = -\operatorname{grad} p + \rho \vec{f} \mid \cdot \vec{l}$$

$$\rho \left(\left(\operatorname{grad} \frac{v^2}{2} \right) \cdot \vec{l} + ([\operatorname{rot} \vec{v} \times \vec{v}]) \cdot \vec{l} \right) = -\operatorname{grad} p \cdot \vec{l} + \rho \vec{f} \cdot \vec{l}$$

$([\operatorname{rot} \vec{v} \times \vec{v}]) \cdot \vec{l} = 0$ так как векторы ортонормальны

$$\vec{f} = \operatorname{grad}(u)$$

Получаем уравнение:

$$\operatorname{grad} \left(\rho \frac{v^2}{2} + p - \rho u \right) \cdot \vec{l} = 0$$

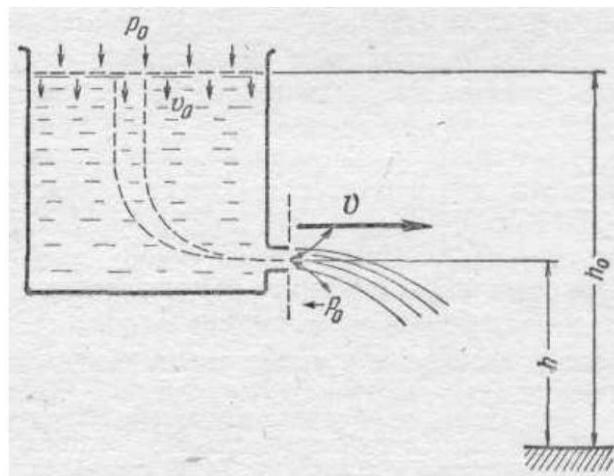
Градиент = 0, если:

$$\rho \frac{v^2}{2} + p - \rho u = \text{const} \text{ вдоль линий тока}$$

Этот закон называется интегралом Бернулли

Примеры:

- а) Стационарное течение жидкости из сосуда



Сверху: $p = p_{\text{атм}}$, $\vec{v} \approx 0$ так как сосуд достаточно большой, $z = h_0$

В дырке на дне: $p = p_{\text{атм}}$, $z = h$

Задача состоит в нахождении скорости вытекания воды v

Пусть $H = h_0 - h$

Тогда запишем уравнение Бернулли для точки сверху и для точки в дырке на дне (они будут равны, так как уравнение Бернулли должно быть постоянным):

Сверху: $p_{\text{атм}} + \rho gh_0$

В дырке: $\rho \frac{v^2}{2} + p_{\text{атм}} + \rho gh$

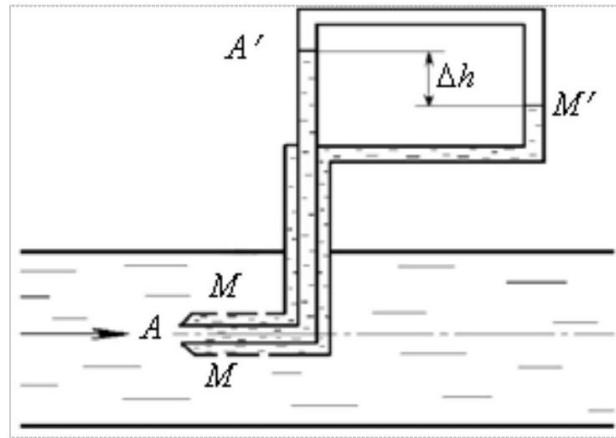
Приравниваем: $\rho \frac{v^2}{2} + p_{\text{атм}} + \rho gh = p_{\text{атм}} + \rho gh_0$

Тогда: $\rho \frac{v^2}{2} = \rho g H$

Выражая скорость из данного уравнения, получаем формулу Торричелли:

$$v = \sqrt{2gH}$$

- б) Работа трубы Пито - Прандтля: аэродинамический прибор для измерения динамического давления.



Через отверстие А происходит измерение динамического давления. Через отверстия М измеряется статическое давление жидкости.

Записываем уравнение Бернуlli для точек А и М:

$$p_M = p_A + \rho \frac{v^2}{2}$$

Тогда скорость потока жидкости:

$$v = \sqrt{\frac{2(p_M - p_A)}{\rho}}$$

Применим для идеальной жидкости в случае потенциальных течений: $\rho = \text{const}$, $\vec{v} = \text{grad}\varphi$, $\vec{f} = \text{grad}\Phi$, где Φ - потенциал массовых сил, ϕ - потенциал скорости. Тогда применим уравнение Эйлера в форме Громеки-Лэмба:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \text{grad} \frac{v^2}{2} + [\text{rot} \vec{v} \times \vec{v}] \right) = -\text{grad}p + \rho \vec{f}$$

С учетом того, что для потенциального поля $\text{rot} = 0$, то

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{\nabla} \varphi}{\partial t} + \text{grad} \frac{(\vec{\nabla} \varphi)^2}{2} + [\text{rot} \vec{v} \times \vec{v}] \right) = -\vec{\nabla}p + \rho \vec{\nabla} \Phi$$

Тогда получаем:

$$\text{grad} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{(\nabla \varphi)^2}{2} + \frac{p}{\rho} - \Phi \right) = 0$$

Градиент будет равен нулю только если выражение в скобках будет константой:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{(\nabla \varphi)^2}{2} + \frac{p}{\rho} - \Phi = \text{const}$$

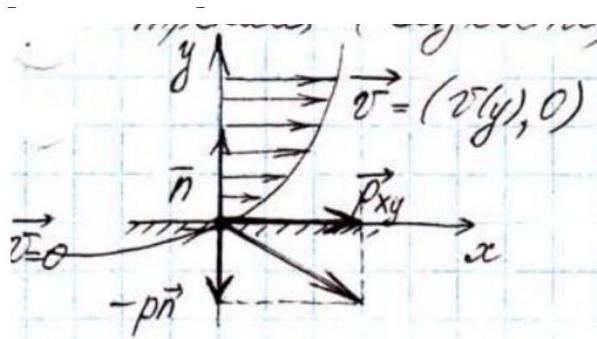
интеграл Коши-Лагранжа, выполняется во всей жидкости. Константа зависит только от времени.

Пример: Жидкость в поле силы тяжести.

3.8 Модель линейно-вязкой несжимаемой жидкости.

Уравнения Навье-Стокса. Полная система уравнений. Условие прилипания на границе с твердым телом. Понятие о ламинарном и турбулентном режимах течения.

В отличие от невязкой идеальной жидкости, в вязкой присутствует внутреннее трение (вязкость), которое приводит к диссипации энергии. Согласно Ньютону: касательные напряжения трения в прямолинейно движущейся вязкой жидкости пропорционально изменению скорости по нормали к направлению движения жидкости: где μ – коэффициент вязкости



$$p_{xy} = \mu \frac{dv}{dy}$$

В вязкой жидкости тензор напряжений имеет вид: $p_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}$, где δ_{ij} – символ Кронекера, τ_{ij} – тензор вязких напряжений. В несжимаемой жидкости: $\tau_{ij} = 2\mu e_{ij}$

Закон Навье-Стокса для несжимаемой жидкости:

$$p_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu e_{ij}$$

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

Тогда тензор напряжений можно записать:

$$(p_{ij}) = \begin{pmatrix} -p & 0 \\ 0 & -p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \mu \frac{dv}{dy} \\ \mu \frac{dv}{dy} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p & \mu \frac{dv}{dy} \\ \mu \frac{dv}{dy} & -p \end{pmatrix}$$

1. Закон сохранения массы для несжимаемой жидкости: $\operatorname{div} v = 0$
2. Уравнение движения жидкости (уравнение Эйлера):

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right) = -\operatorname{grad} p + \rho \vec{f}$$

Где тензор напряжений

$$p_{ij} = -p \delta_{ij} + 2\mu e_{ij} = -p \delta_{ij} + \mu \operatorname{grad} v \cdot \operatorname{vec} v$$

Тогда уравнение движения примет вид (**это уравнение Навье-Стокса**):

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right) = -\operatorname{grad} p + \mu \Delta \vec{v} + \rho \vec{f}$$

Где Δ - оператор Лапласа.

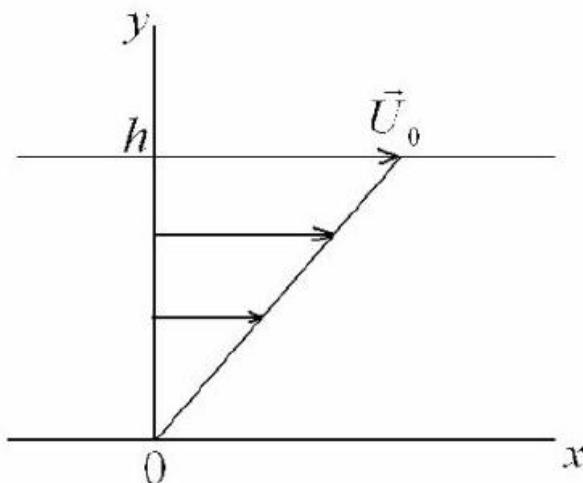
Система уравнений 1 и 2 с заданными граничными условиями - полная система уравнений.

Границные условия:

- а) Жидкость-твердое (стенка): $\mathbf{v}|_{\Gamma} = \mathbf{D}$ – где \mathbf{D} скорость стенки
(В частном случае, для неподвижной стенки $\mathbf{v}|_{\Gamma} = \mathbf{0}$ - **условие прилипания**)
- б) Граница между двумя вязкими жидкостями:

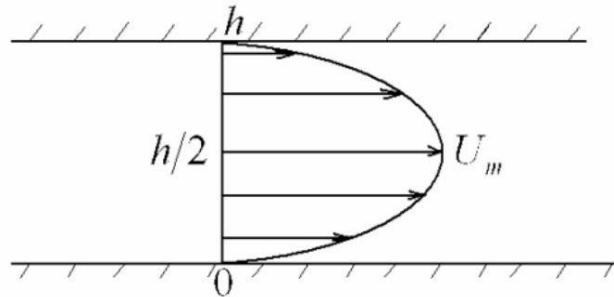
1. $\mathbf{v}_2|_{\Gamma} = \mathbf{v}_1|_{\Gamma}$ – равенство скоростей
2. $(p_{ij}^1 - p_{ij}^2)|_{n_j} = 0$ равенство действующих друг на друга сил

Ламинарное и турбулентное движение жидкости:



Ламинарное движение - плоскопараллельное, когда линии тока - прямые линии. Это выполняется когда скорость направлена только по оси x, а составляющая по y $V_y = 0$.

Пример - движение жидкости между параллельными неподвижными пластинами:



Турбулентное - возмущенное, неустойчивое течение жидкости. Характеристикой, которая разграничивает эти режимы течения, является число Рейнольдса.

Число Рейнольдса - безразмерная величина, характеризующая отношение силы инерции к силе трения:

$$Re = \frac{\rho v^2}{l} : \frac{\mu v}{l^2} = \frac{\rho v l}{\mu}$$

Где v - средняя скорость движения (характерная скорость), l - характерная длина (размер тела или ширина канала), ρ - плотность жидкости. μ - вязкость.

При $Re < Re_{kp}$ наблюдается упорядоченное ламинарное течение.

При $Re > Re_{kp}$ – течение турбулентное, хаотическое.

3.9 Определяющие параметры явления. Класс систем единиц. Размерность физической величины. П-теорема теории размерностей. Моделирование физических процессов на основе П-теоремы. Критерии подобия. Примеры (число Рейнольдса).

Физические величины:

1. Первичные (основные) величины: L - единица длины; M - единица массы; T единица времени. Образуют класс {LMT}. Пример: международная система СИ и СГС.
2. Вторичные (производные) величины: ρ , v , F и тд

Цель физического исследования — поиск связи между численными значениями искомого параметра a и численными значениями других параметров $a_1, a_2, a_3 \dots a_n$ от которых он зависит. a — определяемый параметр. $a_1, a_2, a_3 \dots a_n$ - определяющие параметры.

$$a = f(a_1, a_2, a_3 \dots a_n)$$

Пусть определяемый и определяющие параметры измеряются в системе LMT. Тогда размерность каждой величины представляется в виде:

$$\dim a = [a] = L^\alpha M^\beta T^\gamma$$

$$\dim a_i = [a_i] = L^{\alpha i} M^{\beta i} T^{\gamma i}$$

Если $\alpha, \beta, \gamma = 0$ то такая физическая величина безразмерна.

Определение 1. Параметры $a_1, a_2, a_3 \dots a_n$ размерно независимы, если из них можно составить только тривиальную безразмерную комбинацию, т.е.:

$$[a_1^{k_1} a_2^{k_2} a_3^{k_3} \dots a_n^{k_n}] = 1, \text{ если для всех } k_i = 0, \text{ для любых } i$$

Пример: $v - \text{м/с}, \rho - \text{кг/м}^3$ — размерно независимы

$v - \text{м/с}, \rho - \text{кг/м}^3, l - \text{м}, \mu - \text{кг}/(\text{м}^* \text{с})$ размерно зависимы: из них можно составить безразмерную величину — число Рейнольдса.

(Число Рейнольдса — безразмерная величина, характеризующая отношение силы инерции к силе трения: $Re = \frac{\rho v^2}{l} : \frac{\mu v}{l^2} = \frac{\rho v l}{\mu}$)

Определение 2. Размерно независимые параметры $a_1, a_2, a_3 \dots a_k$ из системы параметров a $a_1, a_2, a_3 \dots a_n (k \leq n)$ образуют максимально размерно независимую подсистему параметров, если $k = n$ или любая подсистема $k + 1$ параметров будет размерно зависимой.

П-теорема:

1. Есть некоторый класс систем единиц
 2. Есть определяемый параметр a и определяющие параметры $a_1, a_2, a_3 \dots a_n$; все параметры измеряются в данном классе; между параметрами существует следующее физическое соотношение:
- $$a = f(a_1, a_2, a_3 \dots a_n)$$
3. Вид функции f не меняется при изменении масштабов в классе
 4. $a_1, a_2, a_3 \dots a_k$ — максимально размерно независимая подсистема параметров

Тогда: Размерность определяемого параметра a выражается через размерности параметров $a_1, a_2, a_3 \dots a_k$, а соотношение между $n + 1$ размерной величиной можно записать в виде соотношения между $n + 1 - k$ безразмерными величинами:

$$\begin{aligned}\Pi &= \varphi(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{n-k}) \\ \Pi &= a / (a_1^{m1} a_2^{m2} a_3^{m3} \dots a_k^{mk}); \\ \Pi_1 &= a_{k+1} / (a_1^{p1} a_2^{p2} a_3^{p3} \dots a_k^{pk}); \\ \Pi_{n-k} &= a_{k+1} / (a_1^{q1} a_2^{q2} a_3^{q3} \dots a_k^{qk})\end{aligned}$$

Подобие физических явлений Одно из важных применений П-теоремы теория подобия. Очень часто нужно установить значения величины a^H натурального объекта по измеренной на модели величине a^M . Если для величин $a_1^M, a_2^M, \dots, a_3^M$ и $a_1^H, a_2^H, \dots, a_3^H$ совпадают соответствующие эти значениям безразличные числа Π_1, \dots, Π_{n-k} . То пользуясь Пи-теоремой находим a^H :

$$a^H = a^M \left(\frac{a_1^H}{a_1^M} \right) \cdot \left(\frac{a_2^H}{a_2^M} \right) \cdots \left(\frac{a_l^H}{a_l^M} \right)$$

Безразмерные числа Π_1, \dots, Π_{n-k} называют критериями подобия. Два явления одной физической природы называются подобными, если их критерии подобия соответственно одинаковы.

Примерами таких критериев подобия в гидродинамике могут являться числа Рейнольдса и Фруда (соотношение между силой инерции и внешней силой $Fr = v^2/gL$).

Так, чтобы добиться одинаковых чисел Рейнольдса, вязкость жидкости, обтекающей модель, должна быть в 1000 раз меньше вязкости воды. Поскольку такие условия создать невозможно, силу трения приходится рассчитывать по эмпирическим формулам.

Число Рейнольдса — безразмерная величина характеризующая отношение силы инерции к силе трения:

$$Re = \frac{\rho v^2}{l} : \frac{\mu v}{l^2} = \frac{\rho v l}{\mu}$$

Где v - характерная скорость (скорость движения тела, средняя скорость в сечении канала) l - характерная длина (размер тела или ширина канала). ρ - плотность жидкости. μ - вязкость. При $Re < Re_{kp}$ наблюдается упорядоченное ламинарное течение. При $Re > Re_{kp}$ – течение турбулентное, хаотическое.

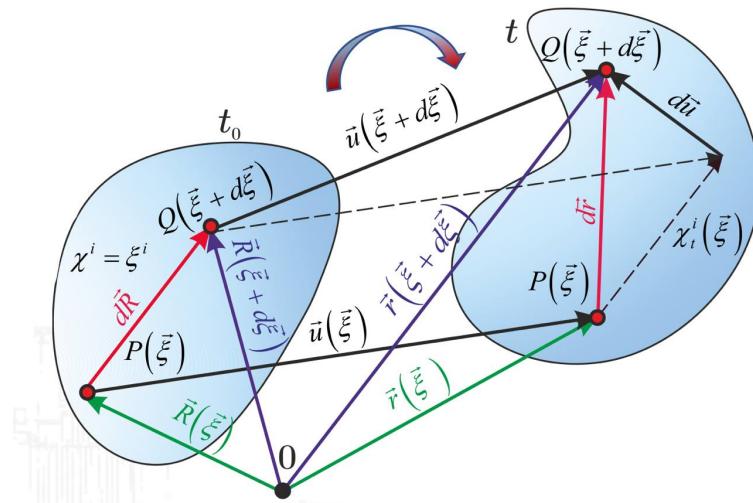
Другие примеры критериев подобия:

- При изучении упругих деформаций конструкции под воздействием внешних сил основным является коэффициент Пуассона (величина отношения относительного поперечного сжатия к относительному продольному растяжению)
- Для механического движения получается из уравнения, выражающего второй закон Ньютона и называется числом Ньютона:

$$Ne = \frac{F t^2}{ml}$$

3.10 Тензор деформаций Грина. Формулы выражения компонент тензора Грина через компоненты вектора перемещения. Вычисление с помощью тензора Грина: относительного изменения длины элементарного волокна; изменения угла между двумя элементарными волокнами; относительного изменения элементарного объема. Тензор малых деформаций Коши и тензор малых поворотов.

Деформацию тела можно изучать пользуясь двумя основными подходами МДТТ – подходом Лагранжа и подходом Эйлера. При Лагранжевом подходе для описания деформации используется **тензор деформации Грина**. Знание его компонентов позволяет вычислять длины отрезков и углы между отрезками после деформации. (При Эйлеровом подходе используется тензор деформаций Альманси. Для описания малых деформаций применяется тензор малых деформаций Коши.)



Рассмотрим два состояния и не будем записывать зависимость от времени. Начальный радиус-вектор выражен через криволинейные координаты:

$$\vec{R} = \vec{R}(\vec{\xi}) \Leftrightarrow X_i = X_i(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$$

При Лагранжевском подходе исходим из закона движения:

$$\vec{r} = \vec{r}(\vec{\xi}) \Leftrightarrow x_i = x_i(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$$

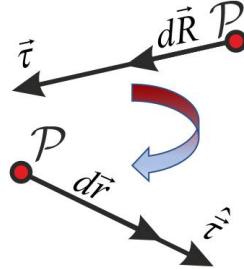
Элементарный вектор до и после деформации:

$$\begin{aligned}
 d\vec{R} &= \frac{\partial \vec{R}}{\partial \xi^i} d\xi^i = \vec{E}_i d\xi^i, d\vec{r} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi^i} d\xi^i = \vec{e}_i d\xi^i \\
 |d\vec{R}|^2 &= d\vec{R} \cdot d\vec{R} = (\vec{E}_i d\xi^i) \cdot (\vec{E}_j d\xi^j) = (\vec{E}_i \cdot \vec{E}_j) d\xi^i d\xi^j = G_{ij} d\xi^i d\xi^j \\
 |d\vec{r}|^2 &= d\vec{r} \cdot d\vec{r} = (\vec{e}_i d\xi^i) \cdot (\vec{e}_j d\xi^j) = (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j) d\xi^i d\xi^j = g_{ij} d\xi^i d\xi^j \\
 |d\vec{r}|^2 - |d\vec{R}|^2 &= g_{ij} d\xi^i d\xi^j - G_{ij} d\xi^i d\xi^j = 2\Gamma_{ij} d\xi^i d\xi^j \\
 \Gamma_{ij} &= \frac{g_{ij} - G_{ij}}{2}
 \end{aligned}$$

Материальный градиент: $\vec{\nabla}_{\vec{R}} \equiv \vec{E}^\alpha \partial / \partial \xi^\alpha$ Выразим тензор Грина через вектор перемещения:

$$\begin{aligned}
 \vec{r} &= \vec{R} + \vec{u} \Rightarrow \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{r} = \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{R} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u} \Leftrightarrow \vec{E}^\alpha \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi^\alpha} = \underbrace{\vec{E}^\alpha}_{\sim} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u} \Leftrightarrow \vec{E}^\alpha \vec{e}_\alpha = \underbrace{\vec{E}^\alpha}_{\sim} + \\
 &+ \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u}, \quad \left(\vec{E}^\beta \vec{e}_\beta \right)^T = \vec{e}_\beta \vec{E}^\beta = \underbrace{\vec{E}^\alpha}_{\sim} \vec{e}_\alpha + \vec{u} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \\
 \underbrace{\mathbf{g}_{\vec{R}}}_{\sim} &= g_{\alpha\beta} \vec{E}^\alpha \vec{E}^\beta = \underbrace{\vec{E}^\alpha \vec{e}_\alpha \cdot \vec{e}_\beta \vec{E}^\beta}_{\sim} = \left(\underbrace{\vec{E}^\alpha}_{\sim} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u} \right) \cdot \left(\underbrace{\vec{E}^\alpha}_{\sim} + \vec{u} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \right) = \underbrace{\vec{E}^\alpha}_{\sim} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u} + \vec{u} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \\
 &+ \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u} \cdot \vec{u} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \\
 \Gamma_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\mathbf{g}_{\vec{R}} - \underbrace{\vec{E}^\alpha}_{\sim} \right) \Rightarrow \Gamma_{ij} = \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u} + \vec{u} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{u} \cdot \vec{u} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \right) \Leftrightarrow \Gamma_{ij} = \\
 &= \frac{1}{2} (u_{j,i} + u_{i,j} + u_{q,i} u_{,j}^q)
 \end{aligned}$$

Обозначим единичные направляющие вектора до и после деформирования как $\vec{\tau}, \hat{\vec{\tau}}$



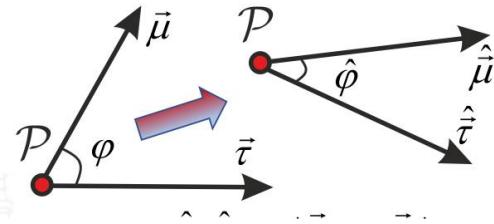
$$\begin{aligned}
 \vec{\tau} &= (\tau^1, \tau^2, \tau^3)_{\vec{R}} = \frac{d\vec{R}}{|d\vec{R}|} = \frac{d\xi^1}{|d\vec{R}|} \vec{E}_1 + \frac{d\xi^2}{|d\vec{R}|} \vec{E}_2 + \frac{d\xi^3}{|d\vec{R}|} \vec{E}_3 \Rightarrow \tau^i = \frac{d\xi^i}{|d\vec{R}|}, |\vec{\tau}| = \sqrt{\tau^i \tau^j G_{ij}} = 1 \\
 \hat{\vec{\tau}} &= (\hat{\tau}_{\vec{r}}^1, \hat{\tau}_{\vec{r}}^2, \hat{\tau}_{\vec{r}}^3)_{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{|d\vec{r}|} = \frac{d\xi^1}{|d\vec{r}|} \vec{e}_1 + \frac{d\xi^2}{|d\vec{r}|} \vec{e}_2 + \frac{d\xi^3}{|d\vec{r}|} \vec{e}_3 \Rightarrow \hat{\tau}_{\vec{r}}^i = \frac{d\xi^i}{|d\vec{r}|}, |\hat{\vec{\tau}}| = \sqrt{\hat{\tau}_{\vec{r}}^i \hat{\tau}_{\vec{r}}^j g_{ij}} = 1 \\
 |d\vec{r}|^2 - |d\vec{R}|^2 &= 2\Gamma_{ij} d\xi^i d\xi^j \Leftrightarrow \frac{|d\vec{r}|}{|d\vec{R}|} = \sqrt{1 + 2\Gamma_{ij} \frac{d\xi^i}{|d\vec{R}|} \frac{d\xi^j}{|d\vec{R}|}} = \sqrt{1 + 2\Gamma_{ij} \tau^i \tau^j} \Leftrightarrow \\
 |d\vec{r}| &= \sqrt{1 + 2 \cdot \Gamma_{ij} \tau^i \tau^j |d\vec{R}|}
 \end{aligned}$$

Относительное изменение длины элементарного волокна в заданном направлении $\vec{\tau}$:

$$\lambda(\vec{r}) = \frac{|d\vec{r}| - |d\vec{R}|}{|d\vec{R}|} = \frac{|d\vec{r}|}{|d\vec{R}|} - 1 = \sqrt{1 + 2 \cdot \Gamma_{ij}\tau^i\tau^j} - 1 \Rightarrow \lambda(\vec{r}) = \sqrt{1 + 2 \cdot \Gamma_{ij}\tau^i\tau^j} - 1$$

Изменения угла между двумя элементарными волокнами

Выразим компоненты единичных векторов через лагранжевы компоненты u^i вектора перемещения т.Р



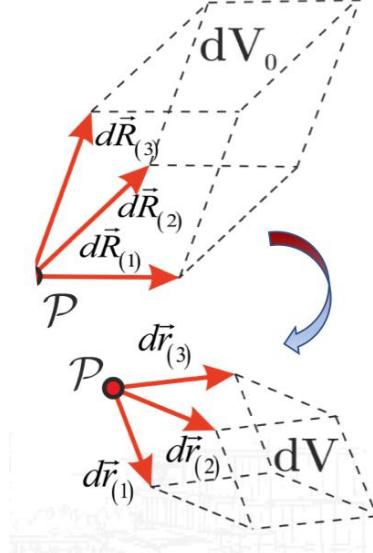
$$\begin{aligned}
 d\vec{r} &= d\vec{R} + d\vec{u} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \xi^m} d\xi^m + \frac{\partial \vec{u}}{\partial \xi^i} d\xi^i = \vec{E}_m d\xi^m + u_{,i}^m \vec{E}_m d\xi^i = (\delta_i^m d\xi^i + u_{,i}^m d\xi^i) \vec{E}_m = \\
 &= (\delta_i^m + u_{,i}^m) d\xi^i \vec{E}_m \\
 \frac{d\xi^i}{|d\vec{R}|} &= \tau^i, \quad |d\vec{r}| = \sqrt{1 + 2 \cdot \Gamma_{ij}\tau^i\tau^j} |d\vec{R}|, \quad d\vec{r} = (\delta_i^m + u_{,i}^m) d\xi^i \cdot \vec{E}_m \\
 \vec{r} &= \tau^i \vec{E}_i, \quad \hat{\vec{\tau}} = \frac{d\vec{r}}{|d\vec{r}|} = \frac{(\delta_i^m + u_{,i}^m) d\xi^i \cdot \vec{E}_m}{\sqrt{1 + 2 \cdot \Gamma_{ij}\tau^i\tau^j} |d\vec{R}|} = \frac{(\delta_i^m + u_{,i}^m) \tau^i}{1 + \lambda(\vec{r})} \vec{E}_m \equiv \hat{\tau}^m \vec{E}_m \\
 \vec{\mu} &= \mu^j \vec{E}_j, \quad \hat{\vec{\mu}} = \frac{(\delta_j^m + u_{,j}^m) \mu^j}{1 + \lambda(\vec{\mu})} \vec{E}_m = \frac{(\delta_j^m + u_{,j}^m) \mu^j}{1 + \lambda(\vec{\mu})} G_{mk} \vec{E}_k = \frac{(\delta_j^m G_{mk} + u_{,j}^m G_{mk}) \mu^j}{1 + \lambda(\vec{\mu})} \vec{E}_k = \\
 &= \frac{(G_{jk} + u_{k,j}) \mu^j}{1 + \lambda(\vec{\mu})} \vec{E}_k \equiv \hat{\mu}_k \vec{E}_k \\
 \cos \hat{\phi} &= \hat{\tau}^k \hat{\mu}_k = \frac{(\delta_i^k + u_{,i}^k) \tau^i}{1 + \lambda(\vec{r})} \frac{(G_{jk} + u_{k,j}) \mu^j}{1 + \lambda(\vec{\mu})} = \frac{(G_{jk} \delta_i^k + \delta_i^k u_{k,j} + u_{,i}^k G_{jk} + u_{,i}^k u_{k,j}) \tau^i \mu^j}{(1 + \lambda(\vec{r}))(1 + \lambda(\vec{\mu}))} = \\
 &= \frac{(G_{ji} + u_{i,j} + u_{j,i} + u_{i,i}^k u_{k,j}) \tau^i \mu^j}{(1 + \lambda(\vec{r}))(1 + \lambda(\vec{\mu}))} \\
 \cos \hat{\phi} &= \frac{(G_{ji} + u_{i,j} + u_{j,i} + u_{ji}^k u_{k,j}) \tau^i \mu^j}{(1 + \lambda(\vec{r}))(1 + \lambda(\vec{\mu}))} = \frac{(G_{ij} + 2 \cdot \Gamma_{ij}) \tau^i \mu^j}{(1 + \lambda(\vec{r}))(1 + \lambda(\vec{\mu}))} = \frac{G_{ij} \tau^i \mu^j + 2 \cdot \Gamma_{ij} \tau^i \mu^j}{(1 + \lambda(\vec{r}))(1 + \lambda(\vec{\mu}))} \\
 \cos \hat{\phi} &= \frac{\cos \varphi + 2 \cdot \Gamma_{ij} \tau^i \mu^j}{(1 + \lambda(\vec{r}))(1 + \lambda(\vec{\mu}))}.
 \end{aligned}$$

Относительного изменения элементарного объема (дилатация)

В точке $(\xi^1, \xi^2, \xi^3) \in V_0$ рассмотрим тройку элементарных векторов $d\vec{R}_{(\alpha)} = d\xi_{(\alpha)}^i \vec{E}_i, \alpha = 1, 2, 3$. Объем косого параллелепипеда, построенного на этих векторах равен:

$$\begin{aligned}
 dV_0 &= d\vec{R}_{(1)} \cdot (d\vec{R}_{(2)} \times d\vec{R}_{(3)}) = (d\xi_{(1)}^i \vec{E}_i) \cdot ((d\xi_{(2)}^j \vec{E}_j) \times (d\xi_{(3)}^k \vec{E}_k)) = \\
 &= \vec{E}_i \cdot (\vec{E}_j \times \vec{E}_k) d\xi_{(1)}^i d\xi_{(2)}^j d\xi_{(3)}^k = \Xi_{ijk} d\xi_{(1)}^i d\xi_{(2)}^j d\xi_{(3)}^k = \sqrt{G} \cdot e_{ijk} d\xi_{(1)}^i d\xi_{(2)}^j d\xi_{(3)}^k
 \end{aligned}$$

После деформации косой параллелепипед становится построенным на векторах $d\vec{r}_{(\alpha)} = d\xi_{(\alpha)}^i \vec{e}_i$, в которые переходят векторы $d\vec{R}_{(\alpha)}$. Частицы, расположенные до деформации



в объеме dV_0 , после деформации займут объем dV , равный:

$$\begin{aligned} dV &= d\vec{r}_{(1)} \cdot (d\vec{r}_{(2)} \times d\vec{r}_{(3)}) = (d\xi_{(1)}^i \vec{e}_i) \cdot \left((d\xi_{(2)}^j \vec{e}_j) \times (d\xi_{(3)}^k \vec{e}_k) \right) = \\ &= \vec{e}_i \cdot (\vec{e}_j \times \vec{e}_k) d\xi_{(1)}^i d\xi_{(2)}^j d\xi_{(3)}^k = \varepsilon_{ijk} d\xi_{(1)}^i d\xi_{(2)}^j d\xi_{(3)}^k = \sqrt{g} \cdot e_{ijk} d\xi_{(1)}^i d\xi_{(2)}^j d\xi_{(3)}^k \\ \theta &\equiv \frac{dV - dV_0}{dV_0} = \frac{dV}{dV_0} - 1 = \sqrt{\frac{g}{G}} - 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{g} &= \vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \times \vec{e}_3) = \left[(\delta_1^i + u_{,1}^i) \vec{E}_i \right] \cdot \left[((\delta_2^j + u_{,2}^j) \vec{E}_j) \times ((\delta_3^k + u_{,3}^k) \vec{E}_k) \right] = \\ &= (\delta_1^i + u_{,1}^i) (\delta_2^j + u_{,2}^j) (\delta_3^k + u_{,3}^k) \vec{E}_i \cdot (\vec{E}_j \times \vec{E}_k) = (\delta_1^i + u_{,1}^i) (\delta_2^j + u_{,2}^j) (\delta_3^k + u_{,3}^k) \Xi_{ijk} = \\ &= (\delta_1^i + u_{,1}^i) (\delta_2^j + u_{,2}^j) (\delta_3^k + u_{,3}^k) e_{ijk} \sqrt{G} = \det(\delta_p^q + u_{,p}^q) \sqrt{G} = \det[\mathbf{B} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}}] \sqrt{G} = \\ &= \det_{\sim} \mathbf{B} \cdot \sqrt{G}, \quad \mathbf{B} \equiv \mathbf{E} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} \end{aligned}$$

$$[B_i^j] = \begin{pmatrix} 1 + u_{,1}^1 & u_{,1}^2 & u_{,1}^3 \\ u_{,2}^1 & 1 + u_{,2}^2 & u_{,2}^3 \\ u_{,3}^1 & u_{,3}^2 & 1 + u_{,3}^3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \det^2 \mathbf{B} &= \det_{\sim} \mathbf{B} \cdot \det \mathbf{B} = \det \mathbf{B} \cdot \det \mathbf{B} = \det(\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) = \det \left(\mathbf{B} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} \right) \cdot \left(\mathbf{B} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} \right)^T = \\ &= \det \left(\mathbf{B} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} \right) \cdot \left(\mathbf{B} + \vec{\mathbf{u}} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \right) = \det \left(\mathbf{B} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} + \vec{\mathbf{u}} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\mathbf{u}}_{\vec{R}} \right) = \\ &= \det \left(\mathbf{B} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} + \vec{\mathbf{u}} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\mathbf{u}}_{\vec{R}} \right) = \det \left(\mathbf{B} + 2 \cdot \Gamma_{\sim} \right) g/G = \det^2 \mathbf{B} = \det(\mathbf{E} + \\ &+ 2 \cdot \Gamma) = \det [\delta_j^i + 2\Gamma_j^i] = e_{ijk} (\delta_1^i + 2\Gamma_1^i) (\delta_2^j + 2\Gamma_2^j) (\delta_3^k + 2\Gamma_3^k) = e_{ijk} \delta_1^i \delta_2^j \delta_3^k + \\ &+ 8e_{ijk} \Gamma_1^i \Gamma_2^j \Gamma_3^k + 2e_{ijk} (\delta_1^i \delta_2^j \Gamma_3^k + \delta_1^i \delta_3^k \Gamma_2^j + \delta_2^j \delta_3^k \Gamma_1^i) + 4e_{ijk} (\delta_1^i \Gamma_2^j \Gamma_3^k + \delta_2^j \Gamma_1^i \Gamma_3^k + \delta_3^k \Gamma_1^i \Gamma_2^j) = e_{123} + \\ &+ 8\det \|\Gamma_j^i\| + 2(e_{12k} \Gamma_3^k + e_{1j3} \Gamma_2^j + e_{i23} \Gamma_1^i) + 4(e_{1jk} \Gamma_2^j \Gamma_3^k + e_{i2k} \Gamma_1^i \Gamma_3^k + e_{ij3} \Gamma_1^i \Gamma_2^j) = 1 + 8\Pi_{\Gamma} + \\ &+ 2(\Gamma_3^3 + \Gamma_2^2 + \Gamma_1^1) + 2(2(\Gamma_2^2 \Gamma_3^3 - \Gamma_2^3 \Gamma_3^2) + 2(\Gamma_1^1 \Gamma_3^3 - \Gamma_1^3 \Gamma_3^1) + 2(\Gamma_1^1 \Gamma_2^2 - \Gamma_2^2 \Gamma_1^1)) = 1 + 2I_{\Gamma} + \end{aligned}$$

$$+ 4\Pi_\Gamma + 8\Pi_\Gamma.$$

$$\theta \equiv \frac{dV - dV_0}{dV_0} = \sqrt{\frac{g}{G}} - 1 = \sqrt{1 + 2I_\Gamma + 4I_\Gamma + 8III_\Gamma} - 1$$

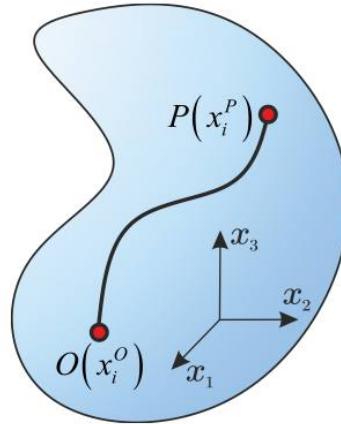
Для описания малых деформаций применяется тензор малых деформаций Коши: Деформации и вращения считаются малыми если все компоненты тензора дисторсии существенно меньше единицы по абсолютной величине $|d_{ij}| = |u_{j,i}| \ll 1$. В этом случае в $\Gamma_{ij} = \frac{1}{2} (u_{j,i} + u_{i,j} + u_{q,i}u_{,j}^q)$ можно пренебречь квадратичными слагаемыми по сравнению с линейными составляющими и тогда $\Gamma_{ij} \approx \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{j,i} + u_{i,j})$.

Получаем: **тензор малых деформаций Коши** $\varepsilon_{ij} = 1/2 (u_{j,i} + u_{i,j})$, **тензор малых поворотов:** $\omega_{ij} = 1/2 (u_{j,i} - u_{i,j})$

3.11 Формулы Чезаро. Уравнения совместности Сен-Венана.

Формулы Чезаро:

Во всех точках тела известно поле деформаций $\varepsilon_{ij}(x_i)$. В точке $O(x_i^o)$ известны перемещения u_i^O и вращения ω_{ij}^O . Требуется найти перемещения в точке $P(x_i^P)$.



Перемещения в точке бесконечно близкой к точке O можно найти по формуле $u_i = u_i^O + du_i = u_i^O + u_{i,j}dx_j = u_i^O + (\varepsilon_{ij} + \omega_{ji})dx_j$. Соединим точки O и P кривой, лежащей целиком в теле. Тогда перемещения в произвольной точке P будут равны

$$u_i^p = u_i^O + \int_{OP} du_i = u_i^O + \int_{x_j^o}^{x_j^P} u_{i,j} dx_j = u_i^O + \int_O^P (\varepsilon_{ij} + \omega_{ji}) dx_j = u_i^O + \int_O^P \varepsilon_{ij} dx_j + \int_O^P \omega_{ji} dx_j$$

Сначала докажем тождество: $\omega_{ji,k} \equiv \varepsilon_{ik,j} - \varepsilon_{kj,i}$.

Используем: $\varepsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i})$, $\omega_{ji} \equiv \frac{1}{2} (u_{i,j} - u_{j,i})$.

$$\begin{aligned}\omega_{ji,k} &= \frac{1}{2} (u_{i,jk} - u_{jk,i}) = \frac{1}{2} (u_{i,jk} + u_{kj,i} - u_{kj,i} - u_{jk,i}) = \frac{1}{2} (u_{i,kj} + u_{kj,i}) - \\ &- \frac{1}{2} (u_{kj,i} + u_{jk,i}) = \frac{1}{2} (u_{i,k} + u_{k,i})_{,j} - \frac{1}{2} (u_{k,j} + u_{j,k})_{,i} = \varepsilon_{ik,j} - \varepsilon_{kj,i}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Проинтегрируем по частям, используя } \omega_{ji}^P - \omega_{ji}^O &= \int_0^P \omega_{ji,k} dx_k \int_O^P \omega_{ji} dx_j = \omega_{ji} x_j|_O^P - \\ &- \int_O^P x_j \omega_{ji,k} dx_k = \omega_{ji}^P x_j^P - \omega_{ji}^O x_j^O - \int_O^P x_j \omega_{ji,k} dx_k = \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + (\omega_{ji}^P - \omega_{ji}^O) x_j^P - \\ &- \int_O^P x_j \omega_{ji,k} dx_k = \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + x_j^P \int_O^P \omega_{ji,k} dx_k - \int_O^P x_j \omega_{ji,k} dx_k = \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + \\ &+ \int_O^P (x_j^P - x_j) \omega_{ji,k} dx_k = \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + \int_O^P (x_j^P - x_j) (\varepsilon_{ik,j} - \varepsilon_{kj,i}) dx_k \stackrel{j \leftrightarrow k}{=} \\ &\omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + \int_O^P (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) dx_j.\end{aligned}$$

$$u_i^P = u_i^O + \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + \int_O^P [\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Соотношения (уравнения) совместности Сен-Венана:

Обозначим $\Psi_{ij} = \varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})$. Для того, чтобы \vec{u} было векторным полем значение интеграла в формулах Чезаро не должно зависеть от выбора пути интегрирования, а зависит только от выбора точек O и P , т.е: $\oint \Psi_{ij} dx_j = 0 \Leftrightarrow \Psi_{ij,l} = \Psi_{il,j}$

$$\begin{aligned}(\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}))_{,l} &= (\varepsilon_{il} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}))_{,j} \\ \varepsilon_{ij,l} - x_{k,l} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il}) &= \varepsilon_{il,j} - x_{k,j} (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}) + \\ &+ (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{il,kj} - \varepsilon_{lk,ij}) \\ (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}) &= \varepsilon_{il,j} - \delta_{kj} (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}) - \varepsilon_{ij,l} + \delta_{kl} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \\ (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}) &= \varepsilon_{il,j} - \varepsilon_{il,j} + \varepsilon_{lj,i} - \varepsilon_{ij,l} + \varepsilon_{ij,l} - \varepsilon_{jl,i} = 0\end{aligned}$$

Получаем 81 формулу: $\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij} = 0, i, j, k, l = 1, 2, 3$.

Обозначим $\chi_{ijkl} \equiv \varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}$ и определим его независимые компоненты.

Переставляем индексы исходя из симметрии:

а) индексы $1 \leftrightarrow 3$: $\chi_{kjil} = \varepsilon_{kj,il} - \varepsilon_{ji,kl} - \varepsilon_{kl,ij} + \varepsilon_{li,kj} = -\chi_{ijkl}$. (Независимых 27)

б) индексы $2 \leftrightarrow 4$: $\chi_{ilkj} = \varepsilon_{il,kj} - \varepsilon_{lk,ij} - \varepsilon_{ij,kl} + \varepsilon_{jk,il} = -\chi_{ijkl}$. (Независимых 9)

в) индексы $1 \leftrightarrow 2$ и $3 \leftrightarrow 4$: $\chi_{jilk} = \varepsilon_{ji,lk} - \varepsilon_{il,jk} - \varepsilon_{jk,li} + \varepsilon_{kl,ji} = \chi_{ijkl}$. (Независимых 6)

Независимые компоненты: $\chi_{1122}, \chi_{1123}, \chi_{1133}, \chi_{1223}, \chi_{2233}, \chi_{1233}$.

$$\chi_{1122} = \varepsilon_{11,22} - \varepsilon_{12,12} - \varepsilon_{12,21} + \varepsilon_{22,11} = 0; \quad \chi_{1123} = \varepsilon_{11,23} - \varepsilon_{12,13} - \varepsilon_{13,21} + \varepsilon_{32,11} = 0$$

$$\chi_{1133} = \varepsilon_{11,33} - \varepsilon_{13,13} - \varepsilon_{13,31} + \varepsilon_{33,11} = 0; \quad \chi_{1223} = \varepsilon_{12,23} - \varepsilon_{22,13} - \varepsilon_{13,22} + \varepsilon_{32,12} = 0$$

$$\chi_{2233} = \varepsilon_{22,33} - \varepsilon_{23,23} - \varepsilon_{23,32} + \varepsilon_{33,22} = 0; \quad \chi_{1233} = \varepsilon_{12,33} - \varepsilon_{23,13} - \varepsilon_{13,23} + \varepsilon_{33,12} = 0$$

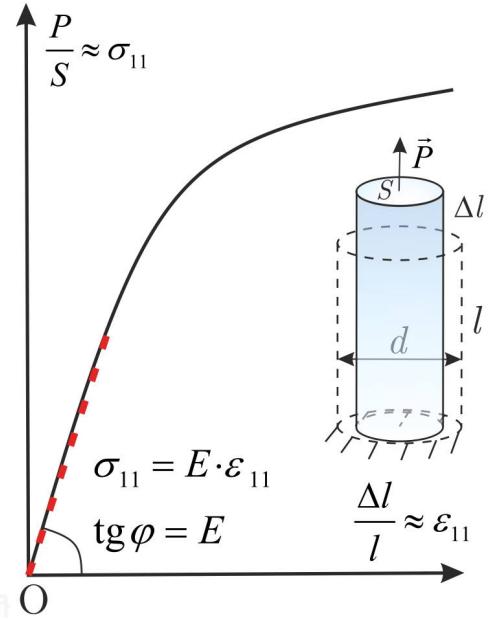
$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{11,22} + \varepsilon_{22,11} = 2\varepsilon_{12,12} \\ \varepsilon_{11,33} + \varepsilon_{33,11} = 2\varepsilon_{13,13} \\ \varepsilon_{22,33} + \varepsilon_{33,22} = 2\varepsilon_{23,23} \end{array} ; \right. \left\{ \begin{array}{l} (\varepsilon_{12,3} - \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2})_{,1} = \varepsilon_{11,23} \\ (\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} - \varepsilon_{31,2})_{,2} = \varepsilon_{22,13} \\ (-\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2})_{,3} = \varepsilon_{33,12} \end{array} \right.$$

Соотношения (уравнения) Сен-Венана:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{11,22} + \varepsilon_{22,11} = 2\varepsilon_{12,12} \\ \varepsilon_{11,33} + \varepsilon_{33,11} = 2\varepsilon_{13,13} \\ \varepsilon_{22,33} + \varepsilon_{33,22} = 2\varepsilon_{23,23} \end{array} ; \right. \left\{ \begin{array}{l} (\varepsilon_{12,3} - \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2})_{,1} = \varepsilon_{11,23} \\ (\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} - \varepsilon_{31,2})_{,2} = \varepsilon_{22,13} \\ (-\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2})_{,3} = \varepsilon_{33,12} \end{array} \right.$$

3.12 Обобщенный изотермический линейный закон Гука. Потенциал линейно-упругого тела. Три общих типа симметрии упругих констант. Три специальных типа симметрии: ортотропный, трансверсально-изотропный и изотропный материалы. Материальные константы Ламе. Технические константы. Формулы, которые связывают константы Ламе и технические константы.

В упругом теле приложение нагрузки приводит к мгновенному появлению деформаций в теле, которые не изменяются с течением времени и полностью исчезают после снятия нагрузки. Связь между напряжениями и деформациями может быть нелинейной. Однако многие материалы при небольших нагрузках показывают линейную зависимость напряжений от деформаций. Такие материалы называются **линейно-упругими материалами**. При постоянной температуре линейные связи $\sigma \sim \sim \mathcal{E}$ и $\mathcal{E} \sim \sim \sigma$ осуществляются с помощью тензоров четвертого ранга: ($\tilde{\mathbf{C}}$ - тензор упругих



модулей; $\tilde{\mathbf{J}}$ - тензор упругих податливостей).

$$\begin{aligned}\sigma &= \tilde{\mathbf{C}} : \tilde{\mathcal{E}} \equiv \tilde{\mathbf{C}} \cdot \tilde{\mathcal{E}} \Leftrightarrow \tilde{\mathcal{E}} = \tilde{\mathbf{J}} : \sigma \equiv \tilde{\mathbf{J}} \cdot \sigma \\ \sigma^{ij}(\vec{x}) &= C^{ijkl}(\vec{x})\varepsilon_{kl}(\vec{x}) \Leftrightarrow \varepsilon_{kl}(\vec{x}) = J_{kl}{}^{ij}(\vec{x})\sigma^{ij}(\vec{x})\end{aligned}$$

В декартовой системе координат:

$$\begin{aligned}C_{ijpq} &= C_{ijqp}, \varepsilon_{pq} = \varepsilon_{qp} \Rightarrow \sigma_{ij} = C_{ij11}\varepsilon_{11} + C_{ij22}\varepsilon_{22} + C_{ij33}\varepsilon_{33} + C_{ij23}(2\varepsilon_{23}) + \\ &+ C_{ij13}(2\varepsilon_{13}) + C_{ij12}(2\varepsilon_{12}), i, j = 1, 2, 3 (\text{зав. от 6 компонент } \varepsilon) \\ (\varepsilon_{11}^* &= \varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}^* = \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}^* = \varepsilon_{33}, \varepsilon_{12}^* = 2\varepsilon_{12}, \varepsilon_{23}^* = 2\varepsilon_{23}, \varepsilon_{13}^* = 2\varepsilon_{13})\end{aligned}$$

Изотермические потенциалы линейно-упругого материала:

$$W(\varepsilon_{kl}^*) : \sigma^{ij} = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}^*}, \quad W(\sigma^{ij}) : \varepsilon_{ij}^* = \frac{\partial W}{\partial \sigma^{ij}}$$

Три общих типа симметрии упругих констант:

$$\begin{aligned}1. \quad \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_{kl}^* \partial \varepsilon_{ij}^*} &= \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{kl}^*} \left(\frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}^*} \right) = \frac{\partial \sigma^{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}^*} = \frac{\partial C^{ijpq}\varepsilon_{pq}}{\partial \varepsilon_{kl}^*} = C^{ijpq}\delta_p^k\delta_q^l = C^{ijkl} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_{kl}^* \partial \varepsilon_{ij}^*} &= \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{ij}^*} \left(\frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{kl}^*} \right) = \frac{\partial \sigma^{kl}}{\partial \varepsilon_{ij}^*} = \frac{\partial C^{klpq}\varepsilon_{pq}}{\partial \varepsilon_{ij}^*} = C^{klpq}\delta_p^i\delta_q^j = C^{kl}{}^{ij} \Rightarrow \\ C^{ijkl} &= C^{kl}{}^{ij} \quad J_{ijkl} = J_{kl}{}^{ij} \quad W = \frac{1}{2}C^{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl} \quad W = \frac{1}{2}J_{ijkl}\sigma^{ij}\sigma^{kl} = W\end{aligned}$$

$$2. \text{ Симметрирование: } \text{Sym}_{34} \tilde{\mathbf{C}} \Leftrightarrow C^{ij[kl]} = \frac{1}{2}(C^{ijkl} + C^{ijlk}).$$

$$\text{Альтернирование: } \text{Alt}_{34} \tilde{\mathbf{C}} \Leftrightarrow C^{ij[k]} = \frac{1}{2}(C^{ijkl} - C^{ijlk})$$

$$(\text{свёртка антисимметрично и симметричного}) C^{ij[kl]}\varepsilon_{kl} = 0$$

$$\Rightarrow C^{ijkl}\varepsilon_{kl} = (C^{ij(kl)} + C^{ij[kl]})\varepsilon_{kl} = C^{ij(kl)}\varepsilon_{kl} \Rightarrow C^{ijkl} = C^{ij(kl)} = C^{ijlk}$$

$$3. \quad \sigma^{ij} = \sigma^{ji} \Rightarrow C^{ijkl} = C^{jikl} \quad C^{ijkl} = C^{jikl} = C^{ijlk} = C^{klij} \quad J_{ijkl} = J_{jikl} = J_{ijlk} = J_{klij}$$

Установленные типы симметрии оставляют 21 независимых компонент.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ 2\varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_6 \end{pmatrix}$$

(Правило соответствия индексов $(i, i) \leftrightarrow i$, $(i, j) \leftrightarrow 9 - (i + j)$)

Ортотропный материал — это материал, у которого есть три перпендикулярные оси симметрии упругих свойств. Эти оси называются главными осями ортотропии. Ортотропный материал характеризуется девятью независимыми упругими константами:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ 2\varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_6 \end{pmatrix}$$

Трансверсально-изотропный — это ортотропный материал, у которого одна из плоскостей ортотропии является плоскостью упругой изотропии (т.е. любое преобразование координат в этой плоскости не меняет значений упругих констант). Трансверсально-изотропный упругий материал характеризуется пятью независимыми константами.

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{pmatrix}$$

Изотропный упругий материал обладает одинаковыми свойствами по всем направлениям и характеризуется двумя независимыми константами. Эти константы

называются константы (коэффициенты) Ламе : $C_{11} - C_{12} = 2\mu$, $C_{12} = \lambda$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ 2\varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_6 \end{pmatrix}$$

Квадратичная форма $W = \frac{1}{2}C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}$ является положительно-определенной (критерий

Сельвестра) \Rightarrow ограничения на константы Ламе: $\begin{cases} \mu > 0 \\ 3\lambda + 2\mu > 0 \\ \lambda + 2\mu > 0 \end{cases}$

Константа λ не имеет явного физического смысла.

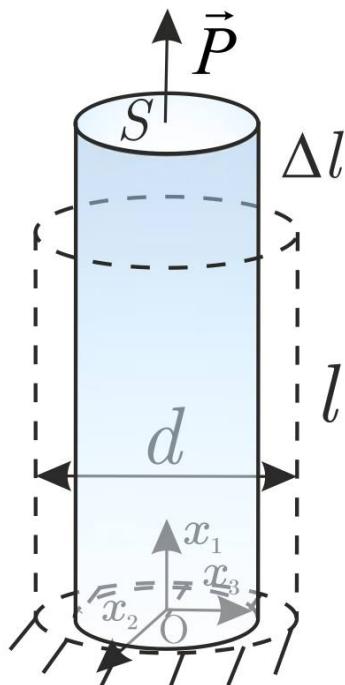
Если в теле реализована деформация сдвига $\varepsilon_{12} = \gamma/2$, то $\sigma_{12} = 2\mu\varepsilon_{12} = \mu\gamma \Rightarrow$. Модуль сдвига : $G \equiv \mu$

(Закон Гука при чистом сдвиге: $\tau = G\gamma$. Далее, в формулах прямого закона Гука произведем свертку:

$$\sigma_{ij} = \lambda\theta\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij} \Rightarrow \sigma_{ii} = \lambda\theta\delta_{ii} + 2\mu\varepsilon_{ii} \Rightarrow 3\sigma = 3\lambda\theta + 2\mu\theta \Rightarrow \sigma = \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\theta$$

Модуль объёмного сжатия : $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu > 0$ это коэффициент пропорциональности в выражении среднего напряжения через дилатацию.)

Технические константы: модуль Юнга и коэффициент Пуассона



Экспериментальный закон Гука: при одноосном растяжении призматического тела

относное удлинение пропорционально приложенной силе на единицу площади $P/S = E \cdot \Delta l/l$, E — модуль Юнга, $\sigma_{11} \approx P/S \equiv p$ — напряжение, $\varepsilon_{11} \approx \Delta l/l$ — деформация $\Rightarrow \sigma_{11} = E\varepsilon_{11}$.

Экспериментальный закон Пуассона: продольное растяжение приводит к равномерному поперечному сжатию $\Delta d/d = -v \cdot \Delta l/l \Rightarrow \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = -v\varepsilon_{11}$. Коэффициент Пуассона $-v$.

Рассмотрим обратный закон Гука и выразим его уравнения через технические константы.

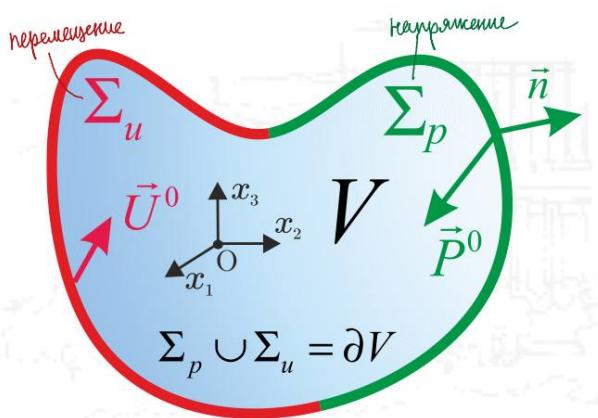
$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= p\delta_{1i}\delta_{1j} \Rightarrow \varepsilon_{ij} = -\frac{3\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)}\sigma\delta_{ij} + \frac{1}{2\mu}\sigma_{ij} = \left(-\frac{\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)}\delta_{ij} + \frac{1}{2\mu}\delta_{1i}\delta_{1j}\right)p \\ \sigma &= p/3 \quad \varepsilon_{11} = \left(-\frac{\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)} + \frac{1}{2\mu}\right)p = \frac{\lambda+\mu}{\mu(3\lambda+2\mu)}p \Rightarrow E = \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu} \\ \varepsilon_{22} &= \varepsilon_{33} = \frac{-\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)}p = \frac{-\lambda}{2\mu(3\lambda+2\mu)}(E\varepsilon_{11}) = \frac{-\lambda}{2(\lambda+\mu)}\varepsilon_{11} \Rightarrow v = \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}\end{aligned}$$

Выразим коэффициенты Ламе через технические константы.

$$\begin{aligned}1-2v &= \mu/(\lambda+\mu) \\ 1+v &= (3\lambda+2\mu)/2(\lambda+\mu) \Rightarrow \frac{Ev}{(1-2v)(1+v)} = \\ &= \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu} \cdot \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)} \cdot \frac{\lambda+\mu}{\mu} \cdot \frac{2(\lambda+\mu)}{3\lambda+2\mu} = \lambda \\ \frac{E}{2(1+v)} &= \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu} \cdot \frac{\lambda+\mu}{3\lambda+2\mu} = \mu, \quad \frac{E}{3(1-2v)} = \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu} \cdot \frac{\lambda+\mu}{3\mu} = \lambda + \frac{2}{3}\mu = K \\ E &= \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu}, \quad v = \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}, \quad \lambda = \frac{Ev}{(1-2v)(1+v)}, \quad G = \mu = \frac{E}{2(1+v)}, \\ K &= \frac{E}{3(1-2v)} \\ \Rightarrow (из критерия Сельвестра) \quad &1 < v < 0.5 \text{ и } E > 0\end{aligned}$$

3.13 Общая постановка статической краевой задачи теории упругости при малых деформациях и малых поворотах: неизменность геометрической области, занятой деформируемым телом; система пятнадцати уравнений во внутренних точках области; объяснить необходимость условий Сен-Венана; три типа краевых условий. Принцип суперпозиции линейных задач. Теорема единственности решения статической задачи. Постановка задачи теории упругости в **перемещениях. Уравнение Ламе.**

В случае малых деформаций и малых вращений элементарные отрезки до и после деформирования различаются мало и по длине и по направлению: $d\vec{r} \approx d\vec{R}$. Следовательно, отсчетная конфигурация тела и его актуальная конфигурация практически совпадают, и в этом случае пропадает разница между Лагранжевыми и Эйлеровыми координатами, т.е. $x_i \approx X_i$. Пропадает разница $\partial/\partial x_i \approx \partial/\partial X_i$ между пространственными и материальными градиентами и между тензорами Грина, Альманси и Коши: $A_{ij} \approx \Gamma_{ij} \approx \varepsilon_{ij} = 1/2(u_{j,i} + u_{i,j})$. При этом вектор перемещений в многих случаях теряет физический смысл и его рассматривают лишь как векторное поле, определенное в трехмерном евклидовом пространстве.



Упругое равновесие изотропного тела описывается системой 15-ти уравнений на 15-ть функций:

$$\sigma_{ij}n_j|_{\vec{y} \in \Sigma_p} = P_i^0(\vec{y}) - \text{условия Неймана}$$

$$\sigma_{ij,j} = -\rho F_i - \text{уравнения равновесия}$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} - \text{закон Гука}$$

$$u_i|_{\vec{y} \in \Sigma_u} = U_i^0(\vec{y}) - \text{условия Дирихле}$$

$$\varepsilon_{ij} = \Delta_{ijkl} u_{l,k} - \text{уравнения Коши}$$

$$e_{ikl} e_{jpq} \varepsilon_{kp,lq} = 0 - \text{уравнения Сен-Венана}$$

$$i, j = 1, 2, 3$$

Необходимость условий Сен-Венана: Пусть известны шесть компонент ε_{ij} тензора деформаций. Требуется по этим компонентам найти три u_i непрерывные компоненты вектора перемещений. Формулы компонент тензора Коши можно считать системой из шести дифференциальных уравнений в частных производных относительно трех компонент вектора перемещений. Уравнений больше чем неизвестных, поэтому решение может не существовать (система переопределена). Требуются дополнительные условия на компоненты тензора Коши, которые гарантируют существование вектора перемещения. Таким условием является в частности формула Чезаро:

$$u_i^P = u_i^O + \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + \int_O^P [\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Обозначим $\Psi_{ij} = \varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})$. Для того, чтобы \vec{u} было векторным полем значение интеграла в формулах Чезаро не должно зависеть от выбора пути интегрирования, а зависит только от выбора точек начальной и конечной точек (O и P), т.е: $\oint \Psi_{ij} dx_j = 0 \Leftrightarrow \Psi_{ij,l} = \Psi_{il,j}$

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}))_{,l} = (\varepsilon_{il} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}))_{,j} \\ & \varepsilon_{ij,l} - x_{k,l} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il}) = \varepsilon_{il,j} - x_{k,j} (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}) + \\ & + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{il,kj} - \varepsilon_{lk,ij}) \\ & (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}) = \varepsilon_{il,j} - \delta_{kj} (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}) - \varepsilon_{ij,l} + \delta_{kl} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \\ & (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}) = \varepsilon_{il,j} - \varepsilon_{il,j} + \varepsilon_{lj,i} - \varepsilon_{ij,l} + \varepsilon_{ij,l} - \varepsilon_{jl,i} = 0 \end{aligned}$$

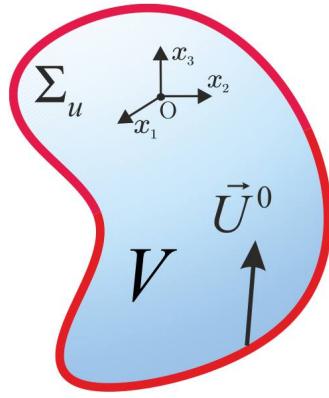
Получаем 81 формулу: $\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij} = 0, i, j, k, l = 1, 2, 3$.

Обозначим $\chi_{ijkl} \equiv \varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}$ и определим его независимые компоненты. Переставляя индексы исходя из симметрии, получаем 6 независимых компонент: $\chi_{1122}, \chi_{1123}, \chi_{1133}, \chi_{1223}, \chi_{2233}, \chi_{1233}$. Соотношения (уравнения) Сен-Венана:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{11,22} + \varepsilon_{22,11} = 2\varepsilon_{12,12} \\ \varepsilon_{11,33} + \varepsilon_{33,11} = 2\varepsilon_{13,13} \\ \varepsilon_{22,33} + \varepsilon_{33,22} = 2\varepsilon_{23,23} \end{array} ; \right\} \left\{ \begin{array}{l} (\varepsilon_{12,3} - \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2}),_1 = \varepsilon_{11,23} \\ (\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} - \varepsilon_{31,2}),_2 = \varepsilon_{22,13} \\ (-\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2}),_3 = \varepsilon_{33,12} \end{array} \right.$$

3 типа краевых условий:

Первая краевая задача (задача Дирихле, задача в перемещениях)



На границе тела заданы перемещения. Для однородного материала:

$$\begin{cases} (\lambda + \mu) \text{grad} \cdot \vec{u} + \mu \Delta \vec{u} + \rho \vec{F} = \vec{0} \\ u_i(\vec{y})|_{\vec{y} \in \partial V} = U_i^0(\vec{y}), i = 1, 2, 3, \vec{x} \in V \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} (\lambda + \mu) u_{j,ji}(\vec{x}) + \mu u_{i,jj}(\vec{x}) = -\rho F_i(\vec{x}) \\ u_i(\vec{y})|_{\vec{y} \in \partial V} = U_i^0(\vec{y}), i = 1, 2, 3, \vec{x} \in V \end{cases}$$

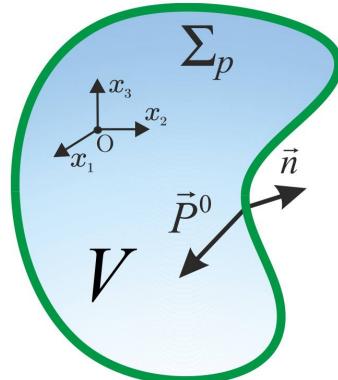
После того, как найден вектор перемещений, по формулам Коши находим тензор деформаций:

$$\varepsilon \underset{\approx}{=} \Delta \cdot (\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) \Rightarrow \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{j,i} + u_{i,j})$$

Определяем тензор напряжений с помощью закона Гука:

$$\sigma \underset{\approx}{=} (\lambda g \underset{\approx}{\otimes} g + 2\mu \Delta \underset{\approx}{\otimes}) \cdot \varepsilon \Rightarrow \sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}$$

Вторая задача (задача Неймана, задача в напряжениях)



На границе тела заданы напряжения, 6 функций. Для однородного материала:

$$\begin{aligned} \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{33} + \sigma_{,33} &= -\frac{2(1+v)}{3}\rho F_{3,3} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)}\rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{23} + \sigma_{23} &= -\frac{1+v}{3}\rho(F_{2,3} + F_{3,2}) \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{13} + \sigma_{,13} &= -\frac{1+v}{3}\rho(F_{1,3} + F_{3,1}) \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{22} + \sigma_{,22} &= -\frac{2(1+v)}{3}\rho F_{2,2} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)}\rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{11} + \sigma_{,11} &= -\frac{2(1+v)}{3}\rho F_{1,1} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)}\rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{12} + \sigma_{,12} &= -\frac{1+v}{3}\rho(F_{1,2} + F_{2,1}) \\ \sigma_{ij}n_j|_{\vec{y} \in \partial V} &= P_i^0(\vec{y}), \quad \sigma_{ij,j} = -\rho F_i, \quad \vec{x} \in V \end{aligned}$$

Из обратного закона Гука вычисляем тензор деформаций:

$$\tilde{\varepsilon} = \left(-\frac{v}{E} \mathbf{g} \otimes \mathbf{g} + \frac{1+v}{E} \tilde{\Delta} \right) \cdot \cdot \tilde{\sigma} \Rightarrow \varepsilon_{ij} = -\frac{3v}{E} \sigma_{ij} + \frac{1+v}{E} \sigma_{ij}$$

Найдем вектор перемещения с помощью формул Чезаро:

$$u_i^P = u_i^O + \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + \int_0^P [\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Смешанная краевая задача

Частично задаются напряжения и перемещения (см. полуобратный метод Сен-Венана), комбинация 1 и 2 задач.

Из линейности этих уравнений описывающих граничные условия по напряжениям, деформациям и перемещениям следует **принцип суперпозиции линейных задач** — возможность наложения различных решений системы уравнений при условии, что их сумма удовлетворяет граничным условиям. (Принцип суперпозиции позволяет выделить четыре основные задачи: о растяжении, чистом изгибе, о кручении и об изгибе силой.)

Теорема о единственности решения краевой статической задачи

Докажем, что однородная статическая задача в отсутствии массовых сил имеет единственное решение.

$$\begin{aligned} \sigma_{ij,j} &= 0, \quad \sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} \quad \sigma_{ij}n_j|_{\vec{y} \in \Sigma_p} = 0 \\ \varepsilon_{ij} &= \Delta_{ijkl} u_{l,k}, \quad e_{ikl} e_{jpq} \varepsilon_{kp,lq} = 0 \quad u_i|_{\vec{y} \in \Sigma_u} = 0 \end{aligned}$$

Преобразуем уравнения равновесия, свернув его с вектором перемещения. Результат проинтегрируем по всему телу: $0 = \sigma_{ij,j} u_i = (\sigma_{ij} u_i)_{,j} - \sigma_{ij} u_{i,j} = (\sigma_{ij} u_i)_{,j} - \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} \Rightarrow 0 = \int_V ((\sigma_{ij} u_i)_{,j} - \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}) d\vec{x} = \int_V (\sigma_{ij} u_i)_{,j} d\vec{x} - \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\vec{x} = \int_{\partial V} \sigma_{ij} u_i n_j d\Sigma -$

$$\begin{aligned}
-\int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\vec{x} &= \int_{\Sigma_p} \sigma_{ij} u_i n_j d\Sigma + \int_{\Sigma_u} \sigma_{ij} u_i n_j d\Sigma - \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\vec{x} = \int_{\Sigma_p} P_i^0 u_i d\Sigma + \int_{\Sigma_u} \sigma_{ij} n_j u_i d\Sigma - \\
-\int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\vec{x} &= -\int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\vec{x} \Rightarrow \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\vec{x} = \int_V (K\theta^2 + G\Gamma^2) d\vec{x} = 0 \Rightarrow \\
\begin{cases} \theta = 0 \Rightarrow \varepsilon_{ij} = e_{ij} \\ \Gamma = 0 \Rightarrow e_{ij} \equiv 0 \end{cases} &\Rightarrow \varepsilon_{ij} \equiv 0
\end{aligned}$$

Из формул Чезаро получаем $u_i = u_i^0 + \omega_{ji}^0 (x_j - x_j^0)$.

Из закона Гука получаем $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \equiv 0$. Вывод: решением однородной статической краевой задачи упругости является движение абсолютно твердого тела (перемещение и вращение).

Теперь рассмотрим неоднородную задачу и предположим, что существует два различных решения: $(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}', \tilde{\boldsymbol{\sigma}}', \tilde{\boldsymbol{u}}')$ и $(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}'', \tilde{\boldsymbol{\sigma}}'', \tilde{\boldsymbol{u}}'')$. Рассмотрим разность этих двух задач:

$$\left\{
\begin{array}{l}
\sigma'_{ij,j} = -\rho F_i \\
\sigma'_{ij} = \lambda\theta'\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon'_{ij} \\
e_{ikl}e_{jpq}\varepsilon'_{kp,lq} = 0 \\
\varepsilon'_{ij} = \Delta_{ijkl}u'_{l,k} \\
\sigma'_{ij}n_j|_{\bar{y} \in \Sigma_p} = P_i^0 \\
u'_i|_{\bar{y} \in \Sigma_u} = U_i^0
\end{array}
\right. - \left\{
\begin{array}{l}
\sigma''_{ij,j} = -\rho F_i \\
\sigma''_{ij} = \lambda\theta''\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon''_{ij} \\
e_{ikl}e_{jpq}\varepsilon''_{kp,lq} = 0 \\
\varepsilon''_{ij} = \Delta_{ijkl}u''_{l,k} \\
\sigma''_{ij}n_j|_{\bar{y} \in \Sigma_p} = P_i^0 \\
u''_i|_{\bar{y} \in \Sigma_u} = U_i^0
\end{array}
\right. = \left\{
\begin{array}{l}
(\sigma'_{ij} - \sigma''_{ij})_{,j} = 0 \\
(\sigma'_{ij} - \sigma''_{ij}) = \lambda(\theta' - \theta'')\delta_{ij} + \\
+ 2\mu(\varepsilon'_{ij} - \varepsilon''_{ij}) \\
e_{ikl}e_{jpq}(\varepsilon'_{kp} - \varepsilon''_{kp})_{,lq} = 0 \\
(\varepsilon'_{ij} - \varepsilon''_{ij}) = \Delta_{ijkl}(u'_l - u''_l) \\
(\sigma'_{ij} - \sigma''_{ij})n_j|_{\bar{y} \in \Sigma_p} = 0 \\
(u'_i - u''_i)|_{\bar{y} \in \Sigma_u} = 0
\end{array}
\right.$$

Два решения отличаются на движение абсолютно твёрдого тела: $(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}' - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}'', \tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}'', \tilde{\boldsymbol{u}}' - \tilde{\boldsymbol{u}}'')$

Для исследования свойств системы уравнений равновесия и получения аналитических решений можно исключить из системы уравнений компоненты напряжения и деформации с помощью закона Гука и кинематических соотношений, тогда получаются **уравнения в перемещениях** (см. первую краевую задачу). Деформации и напряжения определяются по ним. Можно не рассматривать перемещения, а только условия совместности, закон Гука и уравнения равновесия, тогда можно получить **уравнения в напряжениях** (см. вторую краевую задачу).

Уравнение Ламе

Подставим уравнения Коши в закон Гука (для изотропной однородной среды) и полученный результат подставим в уравнения движения:

$$\begin{aligned}
\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\lambda\tilde{\mathbf{g}} \otimes \tilde{\mathbf{g}} + 2\mu\tilde{\boldsymbol{\Delta}}) \cdot \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \lambda\tilde{\mathbf{g}} \otimes \tilde{\mathbf{g}} \cdot \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} + 2\mu\tilde{\mathbf{D}}^S = \lambda\tilde{\mathbf{g}}\theta + \mu\tilde{\mathbf{D}}^T + \mu\tilde{\mathbf{D}} \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \lambda\vec{\nabla} \otimes \theta + \\
+ \mu\vec{\nabla} \cdot (\vec{\mathbf{u}}' \otimes \vec{\nabla}) + \mu\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \otimes \vec{\mathbf{u}}') &= \lambda\vec{\nabla} \otimes \theta + \mu\theta \otimes \vec{\nabla} + \mu\Delta \vec{\mathbf{u}}' = (\lambda + \mu)\vec{\nabla}\theta + \mu\Delta \vec{\mathbf{u}}' = (\lambda + \mu)\text{graddiv} \vec{\mathbf{u}}' + \mu\Delta \vec{\mathbf{u}}'
\end{aligned}$$

$$(\lambda + \mu)\text{graddiv} \vec{\mathbf{u}}' + \mu\Delta \vec{\mathbf{u}}' + \rho\vec{F} = \rho \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{u}}'}{\partial t^2}$$

Уравнения Ламе в координатной форме (порядок индексов несущественен):

В декартовых координатах: $(\lambda + \mu)\frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial x_\alpha \partial x_i} + \mu\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_\alpha \partial x_\alpha} + \rho F_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, i = 1, 2, 3$.

Разделение на потенциальные:

$$(\lambda + 2\mu) \text{graddiv} \vec{u} - \text{rotrot} \vec{u} + \rho \vec{F} = \rho \partial^2 \vec{u} / \partial t^2$$

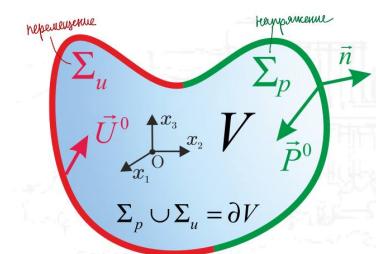
и вихревые слагаемые:

$$(\lambda + 2\mu) u_{\alpha\beta}^\alpha g^{i\beta} - \mu (\text{rotrot} \vec{u})^i + \rho F^i = \rho \partial^2 u^i / \partial t^2, i = 1, 2, 3.$$

уравнение равновесия Ламе: $(\lambda + \mu) \text{graddiv} \vec{u} + \mu \Delta \vec{u} + \rho \vec{F} = \vec{0}$

3.14 Общая постановка статической краевой задачи теории упругости при малых деформациях и малых поворотах: неизменность геометрической области, занятой деформируемым телом; система пятнадцати уравнений во внутренних точках области; объяснить необходимость условий Сен-Венана; три типа краевых условий. Постановка задачи теории упругости в напряжениях. Уравнения Бельтрами-Митчелла.

В случае малых деформаций и малых вращений элементарные отрезки до и после деформирования различаются мало и по длине и по направлению: $d\vec{r} \approx d\vec{R}$. Следовательно, отсчетная конфигурация тела и его актуальная конфигурация практически совпадают, и в этом случае пропадает разница между Лагранжевыми и Эйлеровыми координатами, т.е. $x_i \approx X_i$. Пропадает разница $\partial/\partial x_i \approx \partial/\partial X_i$ между пространственными и материальными градиентами и между тензорами Грина, Альманси и Коши: $A_{ij} \approx \Gamma_{ij} \approx \varepsilon_{ij} = 1/2(u_{j,i} + u_{i,j})$. При этом вектор перемещений в многих случаях теряет физический смысл и его рассматривают лишь как векторное поле, определенное в трехмерном евклидовом пространстве.



Упругое равновесие изотропного тела описывается системой 15-ти уравнений на 15-

ть функций:

$$\sigma_{ij}n_j|_{\vec{y} \in \Sigma_p} = P_i^0(\vec{y}) - \text{условия Неймана}$$

$$\sigma_{ij,j} = -\rho F_i - \text{уравнения равновесия}$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} - \text{закон Гука}$$

$$u_i|_{\vec{y} \in \Sigma_u} = U_i^0(\vec{y}) - \text{условия Дирихле}$$

$$\varepsilon_{ij} = \Delta_{ijkl} u_{l,k} - \text{уравнения Коши}$$

$$e_{ikl} e_{jlp} \varepsilon_{kp,lq} = 0 - \text{уравнения Сен-Венана}$$

$$i, j = 1, 2, 3$$

Необходимость условий Сен-Венана: Пусть известны шесть компонент ε_{ij} тензора деформаций. Требуется по этим компонентам найти три u_i непрерывные компоненты вектора перемещений. Формулы компонент тензора Коши можно считать системой из шести дифференциальных уравнений в частных производных относительно трех компонент вектора перемещений. Уравнений больше чем неизвестных, поэтому решение может не существовать (система переопределена). Требуются дополнительные условия на компоненты тензора Коши, которые гарантируют существование вектора перемещения. Таким условием является в частности формула Чезаро:

$$u_i^P = u_i^O + \omega_{ji}^O (x_j^P - x_j^O) + \int_O^P [\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Обозначим $\Psi_{ij} = \varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})$. Для того, чтобы \vec{u} было векторным полем значение интеграла в формулах Чезаро не должно зависеть от выбора пути интегрирования, а зависит только от выбора точек начальной и конечной точек (О и Р), т.е: $\oint \Psi_{ij} dx_j = 0 \Leftrightarrow \Psi_{ij,l} = \Psi_{il,j}$

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}))_{,l} = (\varepsilon_{il} + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}))_{,j} \\ & \varepsilon_{ij,l} - x_{k,l} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il}) = \varepsilon_{il,j} - x_{k,j} (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}) + \\ & + (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{il,kj} - \varepsilon_{lk,ij}) \\ & (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}) = \varepsilon_{il,j} - \delta_{kj} (\varepsilon_{il,k} - \varepsilon_{lk,i}) - \varepsilon_{ij,l} + \delta_{kl} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \\ & (x_k^P - x_k) (\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}) = \varepsilon_{il,j} - \varepsilon_{il,j} + \varepsilon_{lj,i} - \varepsilon_{ij,l} + \varepsilon_{ij,l} - \varepsilon_{jl,i} = 0 \end{aligned}$$

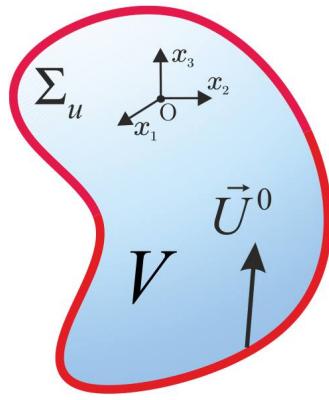
Получаем 81 формулу: $\varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij} = 0, i, j, k, l = 1, 2, 3$.

Обозначим $\chi_{ijkl} \equiv \varepsilon_{ij,kl} - \varepsilon_{jk,il} - \varepsilon_{il,kj} + \varepsilon_{lk,ij}$ и определим его независимые компоненты. Переставляя индексы исходя из симметрии, получаем 6 независимых компонент: $\chi_{1122}, \chi_{1123}, \chi_{1133}, \chi_{1223}, \chi_{2233}, \chi_{1233}$. Соотношения (уравнения) Сен-Венана:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{11,22} + \varepsilon_{22,11} = 2\varepsilon_{12,12} \\ \varepsilon_{11,33} + \varepsilon_{33,11} = 2\varepsilon_{13,13} \\ \varepsilon_{22,33} + \varepsilon_{33,22} = 2\varepsilon_{23,23} \end{array} ; \right\} \quad \left\{ \begin{array}{l} (\varepsilon_{12,3} - \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2}),_1 = \varepsilon_{11,23} \\ (\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} - \varepsilon_{31,2}),_2 = \varepsilon_{22,13} \\ (-\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2}),_3 = \varepsilon_{33,12} \end{array} \right.$$

3 типа краевых условий:

Первая краевая задача (задача Дирихле, задача в перемещениях)



На границе тела заданы перемещения. Для однородного материала:

$$\begin{cases} (\lambda + \mu) \text{grad} \operatorname{div} \vec{\mathbf{u}} + \mu \Delta \vec{\mathbf{u}} + \rho \vec{F} = \vec{0} \\ u_i(\vec{y})|_{\vec{y} \in \partial V} = U_i^0(\vec{y}), i = 1, 2, 3, \vec{x} \in V \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} (\lambda + \mu) u_{j,ji}(\vec{x}) + \mu u_{i,jj}(\vec{x}) = -\rho F_i(\vec{x}) \\ u_i(\vec{y})|_{\vec{y} \in \partial V} = U_i^0(\vec{y}), i = 1, 2, 3, \vec{x} \in V \end{cases}$$

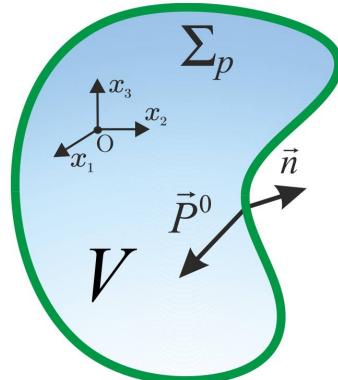
После того, как найден вектор перемещений, по формулам Коши находим тензор деформаций:

$$\varepsilon \underset{\approx}{=} \Delta \cdot (\vec{\nabla} \otimes \vec{\mathbf{u}}) \Rightarrow \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{j,i} + u_{i,j})$$

Определяем тензор напряжений с помощью закона Гука:

$$\sigma \underset{\approx}{=} (\lambda g \underset{\approx}{\otimes} g + 2\mu \Delta \underset{\approx}{\otimes}) \cdot \varepsilon \Rightarrow \sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}$$

Вторая задача (задача Неймана, задача в напряжениях)



На границе тела заданы напряжения, 6 функций. Для однородного материала:

$$\begin{aligned} \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{33} + \sigma_{,33} &= -\frac{2(1+v)}{3}\rho F_{3,3} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)}\rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{23} + \sigma_{23} &= -\frac{1+v}{3}\rho(F_{2,3} + F_{3,2}) \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{13} + \sigma_{,13} &= -\frac{1+v}{3}\rho(F_{1,3} + F_{3,1}) \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{22} + \sigma_{,22} &= -\frac{2(1+v)}{3}\rho F_{2,2} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)}\rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{11} + \sigma_{,11} &= -\frac{2(1+v)}{3}\rho F_{1,1} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)}\rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3}\Delta\sigma_{12} + \sigma_{,12} &= -\frac{1+v}{3}\rho(F_{1,2} + F_{2,1}) \\ \sigma_{ij}n_j|_{\vec{y} \in \partial V} &= P_i^0(\vec{y}), \quad \sigma_{ij,j} = -\rho F_i, \quad \vec{x} \in V \end{aligned}$$

Из обратного закона Гука вычисляем тензор деформаций:

$$\tilde{\varepsilon} = \left(-\frac{v}{E}\mathbf{g} \otimes \mathbf{g} + \frac{1+v}{E}\tilde{\Delta} \right) \cdot \cdot \tilde{\sigma} \Rightarrow \varepsilon_{ij} = -\frac{3v}{E}\sigma_{ij} + \frac{1+v}{E}\sigma_{ij}$$

Найдем вектор перемещения с помощью формул Чезаро:

$$u_i^P = u_i^O + \omega_{ji}^O(x_j^P - x_j^O) + \int_0^P [\varepsilon_{ij} + (x_k^P - x_k)(\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Смешанная краевая задача

Частично задаются напряжения и перемещения (см. полуобратный метод Сен-Венана), комбинация 1 и 2 задач.

Для исследования свойств системы уравнений равновесия и получения аналитических решений можно исключить из системы уравнений компоненты напряжения и деформации с помощью закона Гука и кинематических соотношений, тогда получаются **уравнения в перемещениях** (см. первую краевую задачу). Деформации и напряжения определяются по ним. Можно не рассматривать перемещения, а только условия совместности, закон Гука и уравнения равновесия, тогда можно получить **уравнения в напряжениях** (см. вторую краевую задачу).

Уравнения Бельтрами–Митчела

Уравнения Бельтрами–Митчелла применяют для решения статических задач однородного, изотропного линейно-упругого тела. Получим их подстановкой закона Гука в уравнения совместности и равновесия.

$$\begin{cases} \varepsilon_{11,22} + \varepsilon_{22,11} = 2\varepsilon_{12,12} \\ \varepsilon_{11,33} + \varepsilon_{33,11} = 2\varepsilon_{13,13} \\ \varepsilon_{22,33} + \varepsilon_{33,22} = 2\varepsilon_{23,23} \end{cases}; \begin{cases} (\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2}),_1 = \varepsilon_{11,23} \\ (\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} - \varepsilon_{31,2}),_2 = \varepsilon_{22,13} \\ (-\varepsilon_{12,3} + \varepsilon_{23,1} + \varepsilon_{31,2}),_3 = \varepsilon_{33,12} \end{cases}$$

$$\sigma_{ij,j} + \rho F_i = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad \varepsilon_{ij} = -\frac{3v}{E}\sigma_{ij} + \frac{1+v}{E}\sigma_{ij}$$

Подставим обратный закон Гука в уравнения Сен-Венана. Получим шесть уравнений Сен-Венана, выраженные через компоненты тензора напряжений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{11,22} + \sigma_{22,11} - \frac{3v}{1+v} (\sigma_{,11} + \sigma_{,22}) = 2\sigma_{12,12} \\ \sigma_{11,33} + \sigma_{33,11} - \frac{3v}{1+v} (\sigma_{,11} + \sigma_{,33}) = 2\sigma_{13,13} \\ \sigma_{22,33} + \sigma_{33,22} - \frac{3v}{1+v} (\sigma_{,22} + \sigma_{,33}) = 2\sigma_{23,23} \end{array} ; \right. \left\{ \begin{array}{l} \sigma_{11,23} - \frac{3v}{1+v} \sigma_{,23} = (\sigma_{12,3} - \sigma_{23,1} + \sigma_{31,2})_{,1} \\ \sigma_{22,13} - \frac{3v}{1+v} \sigma_{,13} = (\sigma_{12,3} + \sigma_{23,1} - \sigma_{31,2})_{,2} \\ \sigma_{33,12} - \frac{3v}{1+v} \sigma_{,12} = (-\sigma_{12,3} + \sigma_{23,1} + \sigma_{31,2})_{,3} \end{array} \right.$$

Продифференцируем первое уравнение равновесия по \boldsymbol{x}_1 , второе по \boldsymbol{x}_2 , третье уравнение по \boldsymbol{x}_3 . Теперь сложим первых два уравнения и вычтем третье. Повторим операцию ещё 2 раза: сложим первое и третье уравнения и вычтем второе, а затем сложим второе и третье уравнения и вычтем первое:

$$\begin{aligned} \sigma_{11,1} + \sigma_{12,2} + \sigma_{13,3} + \rho F_1 &= 0 & \sigma_{11,11} + \sigma_{12,21} + \sigma_{13,31} + \rho F_{1,1} &= 0 \\ \sigma_{21,1} + \sigma_{22,2} + \sigma_{23,3} + \rho F_2 &= 0 \Rightarrow \sigma_{21,12} + \sigma_{22,22} + \sigma_{23,32} + \rho F_{2,2} &= 0 \Rightarrow \\ \sigma_{31,1} + \sigma_{32,2} + \sigma_{33,3} + \rho F_3 &= 0 & \sigma_{31,13} + \sigma_{32,23} + \sigma_{33,33} + \rho F_{3,3} &= 0 \\ \\ \underline{\sigma_{11,11}} + \underline{\underline{\sigma_{22,22}}} - \sigma_{33,33} &= \rho (-F_{1,1} - F_{2,2} + F_{3,3}) - 2\sigma_{12,12} \\ \sigma_{11,11} - \sigma_{22,22} + \sigma_{33,33} &= \rho (-F_{1,1} + F_{2,2} - F_{3,3}) - 2\sigma_{13,13} \\ - \sigma_{11,11} + \sigma_{22,22} + \sigma_{33,33} &= \rho (F_{1,1} - F_{2,2} - F_{3,3}) - 2\sigma_{23,23} \end{aligned}$$

Сложим первое равенство и первое уравнение Сен-Венана

$$\begin{aligned} \underline{\sigma_{11,22}} + \underline{\sigma_{22,11}} - (3v/1+v) (\sigma_{,11} + \sigma_{,22}) &= 2\sigma_{12,12} : \\ (\sigma_{11} + \sigma_{22}),_{11} + (\sigma_{11} + \sigma_{22}),_{22} - \sigma_{33,33} - \frac{3v}{1+v} (\sigma_{,11} + \sigma_{,22}) &= \rho (-F_{1,1} - F_{2,2} + F_{3,3}) \\ (3\sigma - \underline{\sigma_{33}}),_{11} + (3\sigma - \underline{\sigma_{33}}),_{22} - \underline{\sigma_{33,33}} - \frac{3v}{1+v} (\sigma_{,11} + \sigma_{,22}) &= \rho (-F_{1,1} - F_{2,2} + F_{3,3}) \\ 3(\sigma_{,11} + \sigma_{,22}) - (\sigma_{33,11} + \sigma_{33,22} + \sigma_{33,33}) - \frac{3v}{1+v} (\sigma_{,11} + \sigma_{,22}) &= \rho (-F_{1,1} - F_{2,2} + F_{3,3}) \\ \frac{3}{1+v} (\Delta\sigma - \sigma_{,33}) - \Delta\sigma_{33} &= \rho (F_{3,3} - F_{2,2} - F_{1,1}) \Rightarrow \\ \Delta\sigma - \frac{1+v}{3} \Delta\sigma_{33} - \sigma_{,33} &= \frac{1+v}{3} \rho (F_{3,3} - F_{2,2} - F_{1,1}) \end{aligned}$$

Аналогично ещё два раза: сложим второе измененное уравнение равновесия и второе уравнение Сен-Венана, а затем сложим третье измененное уравнение равновесия

$$\text{и третье уравнение Сен-Венана: } \left\{ \begin{array}{l} \Delta\sigma - \frac{1+v}{3} \Delta\sigma_{33} - \sigma_{,33} = \frac{1+v}{3} \rho (F_{3,3} - F_{2,2} - F_{1,1}) \\ \Delta\sigma - \frac{1+v}{3} \Delta\sigma_{22} - \sigma_{,22} = \frac{1+v}{3} \rho (-F_{3,3} + F_{2,2} - F_{1,1}) \\ \Delta\sigma - \frac{1+v}{3} \Delta\sigma_{11} - \sigma_{,11} = \frac{1+v}{3} \rho (-F_{3,3} - F_{2,2} + F_{1,1}) \end{array} \right.$$

$$3\Delta\sigma - (1+v)\Delta\sigma - \Delta\sigma = -\frac{1+v}{3} \rho F_{k,k} \Rightarrow (1-v)\Delta\sigma = -\frac{1+v}{3} \rho F_{k,k} \Rightarrow \Delta\sigma = -\frac{1+v}{3(1-v)} \rho F_{k,k}$$

Далее, заменим в первом уравнении $\Delta\sigma$ с помощью уравнения Пуассона и умножим

это уравнение на -1:

$$\begin{aligned} \frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{33} + \sigma_{,33} &= -\frac{1+v}{3} \rho (F_{3,3} - F_{2,2} - F_{1,1}) - \frac{1+v}{3(1-v)} \rho F_{k,k} = \\ &- \frac{2(1+v)}{3} \rho F_{3,3} + \frac{1+v}{3} \rho (F_{3,3} + F_{2,2} + F_{1,1}) - \frac{1+v}{3(1-v)} \rho F_{k,k} = \\ &= -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{3,3} + \left(\frac{1+v}{3} - \frac{1+v}{3(1-v)} \right) \rho F_{k,k} = -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{3,3} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)} \rho F_{k,k} \end{aligned}$$

Аналогично для второго и третьего уравнения Сен-Венана. Получим первые три уравнения Бельтрами-Митчелла:

$$\begin{aligned} \frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{33} + \sigma_{,33} &= -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{3,3} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)} \rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{22} + \sigma_{,22} &= -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{2,2} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)} \rho F_{k,k} \\ \frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{11} + \sigma_{,11} &= -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{1,1} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)} \rho F_{k,k} \end{aligned}$$

Продифференцируем второе уравнение равновесия по x_3 , третье уравнение равновесия по x_2 и сложим их с четвертым уравнением Сен-Венана:

$$\begin{cases} \underline{\sigma_{21,13}} + \underline{\sigma_{22,23}} + \underline{\sigma_{23,33}} = -\rho F_{2,3} \\ \underline{\sigma_{31,12}} + \underline{\sigma_{32,22}} + \underline{\sigma_{33,32}} = -\rho F_{3,2} \\ \sigma_{11,23} - \frac{3v}{1+v} \sigma_{,23} = \sigma_{12,31} - \sigma_{23,11} + \sigma_{31,12} \end{cases}$$

$$(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})_{,23} + (\sigma_{23,11} + \sigma_{32,22} + \sigma_{23,33}) - \frac{3v}{1+v} \sigma_{,23} = -\rho (F_{2,3} + F_{3,2})$$

$$\Delta \sigma_{23} + \left(3 - \frac{3v}{1+v} \right) \sigma_{,23} = -\rho (F_{2,3} + F_{3,2})$$

$$\frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{23} + \sigma_{23} = -\frac{1+v}{3} \rho (F_{2,3} + F_{3,2})$$

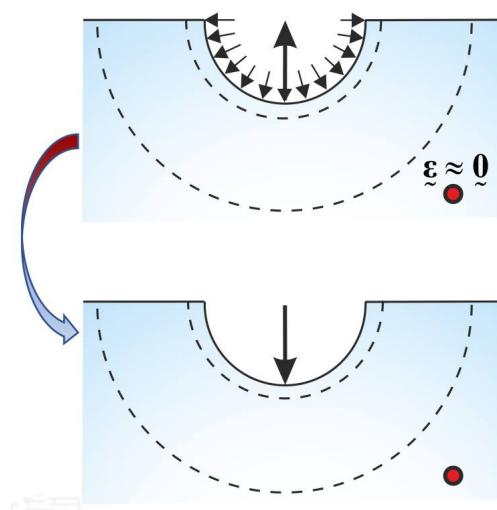
Аналогично: 1-ое уравнение равновесия дифференцируем по \boldsymbol{x}_3 , 3-ее уравнение - по \boldsymbol{x}_1 и сложим их с 5-м уравнением Сен-Венана. Далее: 1ое уравнение равновесия дифференцируем по \boldsymbol{x}_2 , 2-ое уравнение - по \boldsymbol{x}_1 и сложим их с 6-м уравнением Сен-Венана.

Получаем ещё три уравнения Бельтрами-Митчелла:

$$\begin{aligned}
\frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{23} + \sigma_{,23} &= -\frac{1+v}{3} \rho (F_{2,3} + F_{3,2}) \\
\frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{13} + \sigma_{,13} &= -\frac{1+v}{3} \rho (F_{1,3} + F_{3,1}) \\
\frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{12} + \sigma_{,12} &= -\frac{1+v}{3} \rho (F_{1,2} + F_{2,1}) \\
\frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{33} + \sigma_{33} &= -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{3,3} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)} \rho F_{k,k} \\
\frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{22} + \sigma_{22} &= -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{2,2} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)} \rho F_{k,k} \\
\frac{1+v}{3} \Delta \sigma_{11} + \sigma_{11} &= -\frac{2(1+v)}{3} \rho F_{1,1} - \frac{v(1+v)}{3(1-v)} \rho F_{k,k}
\end{aligned}$$

Система уравнений Бельтрами-Митчелла пригодна только для случая линейно-упругого изотропного однородного тела при изотермическом или адиабатическом процессе статического деформирования, тогда как шесть уравнений совместности Сен-Венана пригодны для любого тела при любых нагрузках.

3.15 Ослабление граничных условий: принцип Сен-Венана. Определение простейших задачах теории упругости. Формула Чезаро для простейших задач. Полуобратный метод Сен-Венана: решение задачи о растяжении призматического бруса под действием собственного веса.



Точный учёт граничных условий (усилий и перемещений) делает краевую задачу

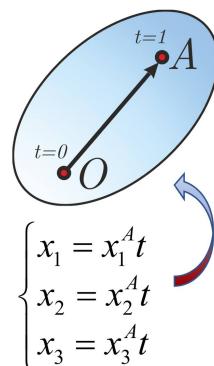
очень сложной. Принцип Сен-Венана гласит, что **уравновешенная система внешних сил, приложенная к упругому телу, когда все точки приложения сил этой системы лежат внутри некоторой сферы, производит пренебрежимо малые деформации в точках тела, на расстояниях от сферы, достаточно больших по сравнению с её радиусом**. Таким образом, при решении задач заданная система сил, приложенная к небольшой части упругого тела, заменяется другой, удобной для упрощения задачи, статически эквивалентной системой сил (т.е. имеющей те же главный вектор и главный момент), приложенной к той же части тела.

Простейшие задачи теории упругости – это краевые задачи равновесия (также называются задачи статики или статические задачи) однородных изотропных тел, в которых в любой точке тела компоненты напряжений (а значит и деформаций) постоянны или линейно зависят от координат. Уравнения совместности выполнены тождественно, потому что вторые частные производные от констант и линейных функций равны нулю. Уравнения Бельтрами-Митчелла выполняются тождественно (что не гарантирует выполнения уравнений равновесия), если массовые силы являются константами, т. е. не зависят от координат точек тела. В ином случае эти уравнения являются условиями, которым должны удовлетворять массовые силы, чтобы в теле было реализовано простейшее напряженно-деформированное состояние.

Полуобратный метод Сен-Венана – метод решения задач, при котором частично задаются напряжения и перемещения, а затем при помощи уравнений теории упругости определяются условия, которым должны удовлетворять неизвестные компоненты напряжений и перемещений. На последнем этапе решения можно воспользоваться формулами Чезаро:

$$u_i^A = u_i^O + \omega_{ji}^O (x_j^A - x_j^O) + \int_O^A [\varepsilon_{ij} + (x_k^A - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Упростим формулы Чезаро для случая, когда все компоненты $\varepsilon_{ij,k}$ являются константами: Примем за O начало координат и исключим движение абсолютно твердого тела: $x_i^O = u_i^O = \omega_{ij}^O = 0$. Криволинейный интеграл не зависит от пути интегрирования. Предполагая тело выпуклым, соединим точки O и A прямолинейным отрезком и параметризуем переменной $t \in [0; 1]$.



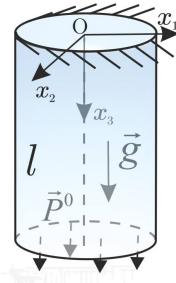
Тогда

$$\begin{aligned} x_k &= x_k^A t & : \int_0^A (x_k^A - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) dx_j = (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \int_0^1 (x_k^A - x_k^A t) x_j^A dt = \\ x_j &= x_j^A t & = (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) x_k^A x_j^A \int_0^1 (1-t) dt = \frac{(\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})}{2} x_k^A x_j^A \\ u_i &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{ij}^1 (x_1 t, x_2 t, x_3 t) dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \end{aligned}$$

Если все компоненты постоянны: $u_i = x_j \int_0^1 \varepsilon_{ij} dt = x_j \varepsilon_{ij} \int_0^1 dt = \varepsilon_{ij} x_j$

$$u_i = \varepsilon_{ij} x_j, \vec{u} = \underbrace{\varepsilon}_{\sim} \cdot \vec{r} = \underbrace{\vec{r}}_{\sim} \cdot \varepsilon \Rightarrow \vec{u} = \vec{u}^O - \underbrace{\omega^O}_{\sim} \cdot \vec{r} + \underbrace{\varepsilon}_{\sim} \cdot \vec{r} = \vec{u}^O + \left(\underbrace{\varepsilon}_{\sim} - \underbrace{\omega^O}_{\sim} \right) \cdot \vec{r}$$

Задача о растяжении призматического бруса под действием собственного веса.



Призматический брус закреплен вертикально в поле силы тяжести. Начало координат выбрали в центре масс закрепленного торца. Третья координатная ось вдоль оси бруса. $\vec{F} = g\vec{k}_3$. Предположим, что: $\sigma_{ij} = (ax_3 + b)\delta_{i3}\delta_{j3}$. Уравнения Бельтрами-Митчелла выполнены. Также выполнены первых два уравнения равновесия. Подставим в третье: $\sigma_{3j,j} = -\rho g \Rightarrow a = -\rho g \Rightarrow \sigma_{ij} = (-\rho g x_3 + b)\delta_{i3}\delta_{j3}$. Проверим свободу от нагрузки на боковой поверхности бруса, где $\vec{n} = (n_1, n_2, 0)$: $P_i^{(\vec{n})} \Big|_{\Sigma_{\text{bos}}} = \sigma_{ij} n_j = (ax_3 + b)\delta_{i3}\delta_{j3} n_j = 0$. На нижнем торце бруса имеем $\vec{n} = (0, 0, 1)$: $P_i^{(\vec{n})} \Big|_{\Sigma_{\text{max}}} = (al + b)\delta_{i3}\delta_{j3} n_j = (al + b)\delta_{i3} = 0$. Получаем: $b = -al \Rightarrow \sigma_{ij} = \rho g(l - x_3)\delta_{i3}\delta_{j3}$. Определим усилия на верхнем торце $\vec{n} = (0, 0, -1)$: $P_i^{(\vec{n})} \Big|_{\Sigma_{\text{segs}}} = -\rho g l \delta_{i3} \Rightarrow PS = \rho g l S = Mg$. Такое распределение соответствует идеальному закреплению, когда существуют только нормальные равномерно распределенные напряжения.

$$[\sigma_{ij}] = \rho g (l - x_3) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

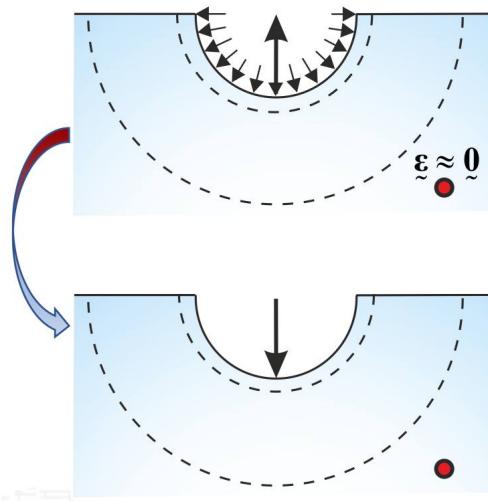
Принцип Сен-Венана позволяет применять найденные формулы вдали от зоны закрепления и при неидеальном закреплении. Далее, применяем обобщенный закон Гука и находим компоненты тензора деформаций Коши: $\sigma_{ij} = \rho g (l - x_3) \delta_{i3}\delta_{j3}$; $\sigma = \frac{\sigma_{kk}}{3} = \frac{\rho g}{3} (l - x_3) \Rightarrow \varepsilon_{ij} = -\frac{3v}{E} \sigma \delta_{ij} + \frac{1+v}{E} \sigma_{ij} = \left(-\frac{v}{E} \delta_{ij} + \frac{1+v}{E} \delta_{i3}\delta_{j3} \right) \rho g (l - x_3) \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} =$

$$= -\frac{v}{E} \rho g (l - x_3); \varepsilon_{33} = \frac{\rho g}{E} (l - x_3); \varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0.$$

Компоненты деформаций зависят только от x_3 , а матрица - диагональная.

$$\begin{aligned} u_1 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{1j}(x_3 t) dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{1j,k} - \varepsilon_{jk,1}) = x_1 \int_0^1 \varepsilon_{11}(x_3 t) dt + \frac{x_3 x_1}{2} \varepsilon_{11,3} = \\ &= \frac{vx_1}{Ex_3} \rho g \int_0^1 (l - x_3 t) d(l - x_3 t) + \frac{x_3 x_1}{2} \frac{v}{E} \rho g = \frac{vx_1}{E} \frac{\rho g}{2x_3} (l - x_3 t)^2 \Big|_0^1 + \frac{x_3 x_1}{2} \frac{v}{E} \rho g = \\ &= \frac{v\rho g}{2E} x_1 \left(\frac{(l - x_3)^2 - l^2}{x_3} + x_3 \right) = -\frac{v\rho g}{E} x_1 (l - x_3) u_2 = x_j \int_0^1 \varepsilon_{2j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{2j,k} - \varepsilon_{jk,2}) = \\ &= x_2 \int_0^1 \varepsilon_{22}(x_3 t) dt + \frac{x_3 x_2}{2} \varepsilon_{22,3} = \frac{vx_2}{Ex_3} \rho g \int_0^1 (l - x_3 t) d(l - x_3 t) + \frac{x_3 x_2}{2} \frac{v}{E} \rho g = \\ &= \frac{vx_2}{Ex_3} \rho g \frac{(l - x_3)^2}{2} \Big|_0^1 + \frac{x_3 x_2}{2} \frac{v}{E} \rho g = \frac{v\rho g}{2E} x_2 \left(\frac{(l - x_3)^2 - l^2}{x_3} + x_3 \right) = -\frac{v\rho g}{E} x_2 (l - x_3) \\ u_3 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{3j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{3j,k} - \varepsilon_{jk,3}) = x_3 \int_0^1 \varepsilon_{33} dt + \frac{x_k x_j}{2} \varepsilon_{3j,k} - \frac{x_k x_j}{2} \varepsilon_{jk,3} = \\ &= x_3 \int_0^1 \varepsilon_{33}(x_3 t) dt + \frac{x_3 x_3}{2} \varepsilon_{33,3} - \frac{x_3 x_3}{2} \varepsilon_{33,3} - \frac{x_2 x_2}{2} \varepsilon_{22,3} - \frac{x_1 x_1}{2} \varepsilon_{11,3} = - \\ &- \frac{\rho g}{E} \int_0^1 (l - x_3 t) d(-x_3 t) - \frac{v\rho g}{2E} [(x_2)^2 + (x_1)^2] = - \frac{\rho g}{E} \frac{(l - x_3 t)^2}{2} \Big|_0^1 - \frac{v\rho g}{2E} [(x_2)^2 + (x_1)^2] = \\ &= -\frac{\rho g}{2E} ((x_3)^2 + v [(x_2)^2 + (x_1)^2] - 2lx_3) \end{aligned}$$

Получаем: $u_1 = -\frac{v}{E} \rho g (l - x_3) x_1; u_2 = -\frac{v}{E} \rho g (l - x_3) x_2;$
 $u_3 = -\frac{\rho g}{2E} ((x_3)^2 + v [(x_2)^2 + (x_1)^2] - 2lx_3)$



3.16 Ослабление граничных условий: принцип Сен-Венана. Определение простейших задачах теории упругости. Формула Чезаро для простейших задач. Полуобратный метод Сен-Венана: решение задачи о кручении призматического бруса круглого сечения.

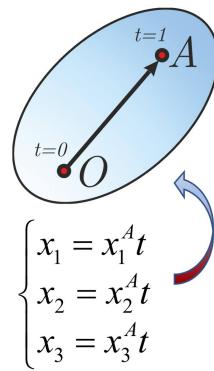
Точный учёт граничных условий (усилий и перемещений) делает краевую задачу очень сложной. Принцип Сен-Венана гласит, что **уравновешенная система внешних сил, приложенная к упругому телу, когда все точки приложения сил этой системы лежат внутри некоторой сферы, производит пренебрежимо малые деформации в точках тела, на расстояниях от сферы, достаточно больших по сравнению с её радиусом**. Таким образом, при решении задач заданная система сил, приложенная к небольшой части упругого тела, заменяется другой, удобной для упрощения задачи, статически эквивалентной системой сил (т.е. имеющей те же главный вектор и главный момент), приложенной к той же части тела.

Простейшие задачи теории упругости – это краевые задачи равновесия (также называются задачи статики или статические задачи) однородных изотропных тел, в которых в любой точке тела компоненты напряжений (а значит и деформаций) постоянны или линейно зависят от координат. Уравнения совместности выполнены тождественно, потому что вторые частные производные от констант и линейных функций равны нулю. Уравнения Бельтрами-Митчелла выполняются тождественно (что не гарантирует выполнения уравнений равновесия), если массовые силы являются константами, т. е. не зависят от координат точек тела. В ином случае эти уравнения являются условиями, которым должны удовлетворять массовые силы, чтобы в теле было реализовано простейшее напряженно-деформированное состояние.

Полуобратный метод Сен-Венана – метод решения задач, при котором частично задаются напряжения и перемещения, а затем при помощи уравнений теории упругости определяются условия, которым должны удовлетворять неизвестные компоненты напряжений и перемещений. На последнем этапе решения можно воспользоваться формулами Чезаро:

$$u_i^A = u_i^O + \omega_{ji}^O (x_j^A - x_j^O) + \int_O^A [\varepsilon_{ij} + (x_k^A - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Упростим формулы Чезаро для случая, когда все компоненты $\varepsilon_{ij,k}$ являются константами: Примем за O начало координат и исключим движение абсолютно твердого тела: $x_i^O = u_i^O = \omega_{ij}^O = 0$. Криволинейный интеграл не зависит от пути интегрирования. Предполагая тело выпуклым, соединим точки O и A прямолинейным отрезком и параметризуем переменной $t \in [0; 1]$.



Тогда

$$\begin{aligned} x_k &= x_k^A t & : \int_0^A (x_k^A - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) dx_j = (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \int_0^1 (x_k^A - x_k^A t) x_j^A dt = \\ x_j &= x_j^A t & = (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) x_k^A x_j^A \int_0^1 (1-t) dt = \frac{(\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})}{2} x_k^A x_j^A \\ u_i &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{ij}^1 (x_1 t, x_2 t, x_3 t) dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \end{aligned}$$

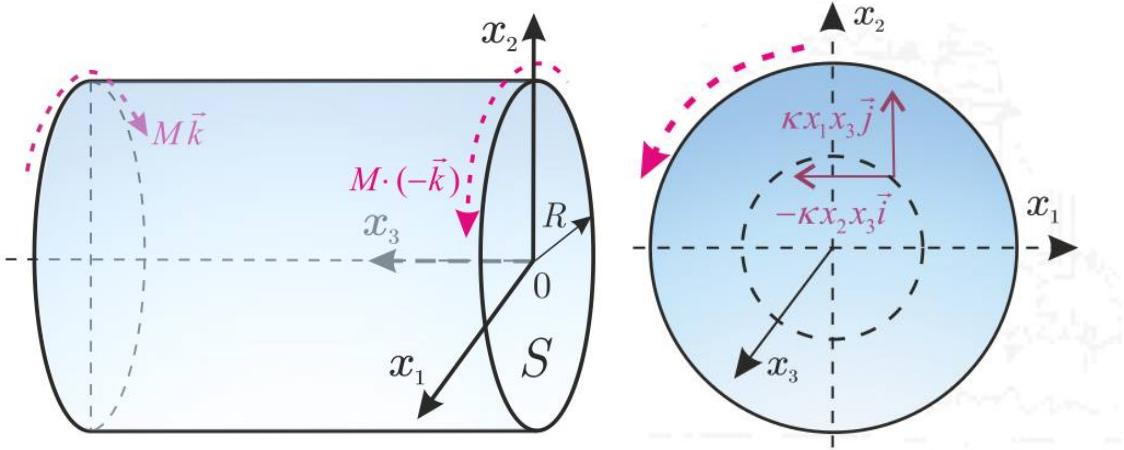
Если все компоненты постоянны: $u_i = x_j \int_0^1 \varepsilon_{ij} dt = x_j \varepsilon_{ij} \int_0^1 dt = \varepsilon_{ij} x_j$

$$u_i = \varepsilon_{ij} x_j, \vec{u} = \underbrace{\varepsilon}_{\sim} \cdot \vec{r} = \vec{r} \cdot \underbrace{\varepsilon}_{\sim} \Rightarrow \vec{u} = \vec{u}^O - \underbrace{\omega^O}_{\sim} \cdot \vec{r} + \underbrace{\varepsilon}_{\sim} \cdot \vec{r} = \vec{u}^O + \left(\underbrace{\varepsilon}_{\sim} - \underbrace{\omega^O}_{\sim} \right) \cdot \vec{r}$$

Задача о кручении призматического бруса круглого сечения

На торцах круглого призматического бруса с осью Ox_3 действуют пары сил, моменты которых равны по величине и имеют противоположные знаки.

Боковая поверхность свободна, массовые силы не учитываются. Предположим, что



возникшая деформация чистого кручения описывается тензором деформации:

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{\kappa}{2}x_2 \\ 0 & 0 & \frac{\kappa}{2}x_1 \\ -\frac{\kappa}{2}x_2 & \frac{\kappa}{2}x_1 & 0 \end{pmatrix}$$

Исключим движение абсолютно твердого тела и найдем вектор перемещения из формул Чезаро, приняв: $u_i^O = \omega_{ji}^O = x_i^O = 0$. Учтем, что диагональные элементы равны нулю и нет зависимости от x_3 :

$$\begin{aligned} u_1 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{1j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{1j,k} - \varepsilon_{jk,1}) = x_3 \int_0^1 \varepsilon_{13} dt + \frac{x_2 x_3}{2} \varepsilon_{13,2} - \frac{x_3 x_2}{2} \varepsilon_{23,1} - \frac{x_2 x_3}{2} \varepsilon_{32,1} = \\ &= x_3 \int_0^1 \left(-\frac{\kappa x_2 t}{2} \right) dt + \frac{x_2 x_3}{2} \varepsilon_{13,2} - x_2 x_3 \varepsilon_{23,1} = -\frac{\kappa}{2} x_2 x_3 \int_0^1 t dt - \frac{\kappa x_2 x_3}{2} - \frac{\kappa}{2} x_2 x_3 = \\ &= \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \right) \kappa x_2 x_3 = -\kappa x_2 x_3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_2 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{2j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{2j,k} - \varepsilon_{jk,2}) = x_3 \int_0^1 \varepsilon_{23} dt + \frac{x_1 x_3}{2} \varepsilon_{23,1} - \frac{x_3 x_1}{2} \varepsilon_{13,2} - \frac{x_1 x_3}{2} \varepsilon_{31,2} = \\ &= x_3 \int_0^1 \frac{\kappa x_1 t}{2} dt + \frac{x_1 x_3}{2} \varepsilon_{23,2} - x_1 x_3 \varepsilon_{13,2} = \frac{\kappa}{2} x_1 x_3 \int_0^1 t dt + \frac{\kappa x_1 x_3}{2} + \frac{\kappa}{2} x_1 x_3 = \frac{\kappa}{2} x_1 x_3 \frac{1}{2} + \frac{\kappa x_1 x_3}{4} + \\ &+ \frac{\kappa}{2} x_1 x_3 = \kappa x_1 x_3 \end{aligned}$$

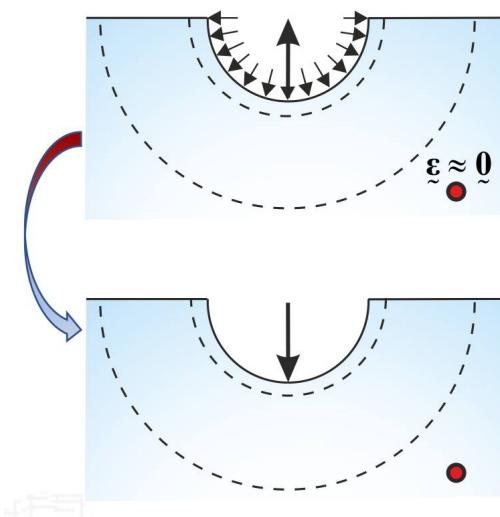
$$\begin{aligned} u_3 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{3j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{3j,k} - \varepsilon_{jk,3}) = x_1 \int_0^1 \varepsilon_{31} dt + x_2 \int_0^1 \varepsilon_{32} dt + \frac{x_2 x_1}{2} \varepsilon_{31,2} + \frac{x_1 x_2}{2} \varepsilon_{32,1} = \\ &= x_1 \int_0^1 -\frac{\kappa x_2 t}{2} dt + x_2 \int_0^1 \frac{\kappa x_1 t}{2} dt + \frac{x_2 x_1}{2} (-\kappa) + \frac{x_1 x_2}{2} \kappa = 0 \end{aligned}$$

Получаем: $u_1 = -\kappa x_2 x_3$; $u_2 = \kappa x_1 x_3$; $u_3 = 0$ \Rightarrow Поперечные сечения остаются плоскими и поворачиваются на некоторый угол, который различен для разных сечений.

Закон Гука при кручении круглого призматического бруса:

$$-G\kappa I_O \vec{k} = \vec{L} = M \cdot (-\vec{k}) \Rightarrow \kappa = \frac{M}{GI_O}$$

3.17 Ослабление граничных условий: принцип Сен-Венана. Определение простейших задачах теории упругости. Формула Чезаро для простейших задач. Полуобратный метод Сен-Венана: решение задачи о чистом изгибе призматического бруса.



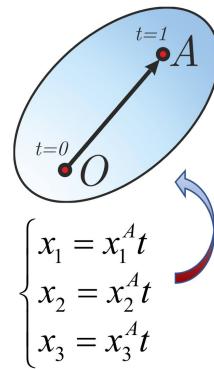
Точный учёт граничных условий (усилий и перемещений) делает краевую задачу очень сложной. Принцип Сен-Венана гласит, что **уравновешенная система внешних сил, приложенная к упругому телу, когда все точки приложения сил этой системы лежат внутри некоторой сферы, производит пренебрежимо малые деформации в точках тела, на расстояниях от сферы, достаточно больших по сравнению с её радиусом**. Таким образом, при решении задач заданная система сил, приложенная к небольшой части упругого тела, заменяется другой, удобной для упрощения задачи, статически эквивалентной системой сил (т.е. имеющей те же главный вектор и главный момент), приложенной к той же части тела.

Простейшие задачи теории упругости – это краевые задачи равновесия (также называются задачи статики или статические задачи) однородных изотропных тел, в которых в любой точке тела компоненты напряжений (а значит и деформаций) постоянны или линейно зависят от координат. Уравнения совместности выполнены тождественно, потому что вторые частные производные от констант и линейных функций равны нулю. Уравнения Бельтрами-Митчелла выполняются тождественно (что не гарантирует выполнения уравнений равновесия), если массовые силы являются константами, т. е. не зависят от координат точек тела. В ином случае эти уравнения являются условиями, которым должны удовлетворять массовые силы, чтобы в теле было реализовано простейшее напряженно-деформированное состояние.

Полуобратный метод Сен-Венана – метод решения задач, при котором частично задаются напряжения и перемещения, а затем при помощи уравнений теории упругости определяются условия, которым должны удовлетворять неизвестные компоненты напряжений и перемещений. На последнем этапе решения можно воспользоваться формулами Чезаро:

$$u_i^A = u_i^O + \omega_{ji}^O (x_j^A - x_j^O) + \int_O^A [\varepsilon_{ij} + (x_k^A - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})] dx_j.$$

Упростим формулы Чезаро для случая, когда все компоненты $\varepsilon_{ij,k}$ являются константами: Примем за O начало координат и исключим движение абсолютно твердого тела: $x_i^O = u_i^O = \omega_{ij}^O = 0$. Криволинейный интеграл не зависит от пути интегрирования. Предполагая тело выпуклым, соединим точки O и A прямолинейным отрезком и параметризуем переменной $t \in [0; 1]$.



Тогда

$$\begin{aligned} x_k &= x_k^A t & : \int_0^A (x_k^A - x_k) (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) dx_j = (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \int_0^1 (x_k^A - x_k^A t) x_j^A dt = \\ x_j &= x_j^A t & = (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) x_k^A x_j^A \int_0^1 (1-t) dt = \frac{(\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i})}{2} x_k^A x_j^A \\ u_i &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{ij}^1 (x_1 t, x_2 t, x_3 t) dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{ij,k} - \varepsilon_{jk,i}) \end{aligned}$$

Если все компоненты постоянны: $u_i = x_j \int_0^1 \varepsilon_{ij} dt = x_j \varepsilon_{ij} \int_0^1 dt = \varepsilon_{ij} x_j$

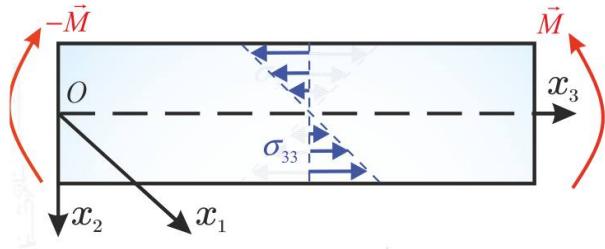
$$u_i = \varepsilon_{ij} x_j, \vec{u} = \varepsilon \cdot \vec{r} = \vec{r} \cdot \varepsilon \Rightarrow \vec{u} = \vec{u}^O - \omega^O \cdot \vec{r} + \varepsilon \cdot \vec{r} = \vec{u}^O + (\varepsilon - \omega^O) \cdot \vec{r}$$

Задача о чистом изгибе призматического бруса

Массовыми силами пренебрегаем $\vec{F} = \vec{0}$. Примем $\sigma_{ij} = ax_2 \delta_{i3} \delta_{j3}$. Уравнения Бельтрами-Митчелла удовлетворяются тождественно. Уравнения равновесия тоже выполнены: $\sigma_{ij,j} = ax_{2,j} \delta_{i3} \delta_{j3} = a\sigma_{2j} \delta_{i3} \delta_{j3} = a\delta_{i3} \delta_{23} = 0$.

Найдем вектор напряжений на боковине с $\vec{n} = (n_1, n_2, 0)$: $P_i^{(\vec{n})} = \sigma_{ij} n_j = 0$

На торцах с $\vec{n} = (0, 0, \mp 1)$: $P_i^{(\mp \vec{k})} = \mp ax_2 \sigma_{i3}$



Боковая поверхность является свободной от внешних сил. На торцах действуют линейно-распределенные нормальные напряжения. Определим главный вектор и главный момент сил, действующих на торцах:

$$\int_S P_3^{(\mp \vec{k})} d\Sigma = \mp a \int_S x_2 d\Sigma = \mp a S x_2^{\text{IM}} = 0 = \int_S P_1^{(\mp \vec{k})} d\Sigma = \int_S P_2^{(\mp \vec{k})} d\Sigma$$

$I = I_{22}$ - момент инерции сечения относительно нейтральной оси Ox_1 . (Т.к. Ox_1 и Ox_2 - главные оси инерции сечения, то $I_{12} = 0$.)

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \int_S \vec{r} \times \vec{P}^{(\vec{k})} d\Sigma = \int_S \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x_1 & x_2 & 0 \\ 0 & 0 & ax_2 \end{vmatrix} d\Sigma = \left(a \int_S x_2^2 d\Sigma \right) \vec{i} - \left(a \int_S x_1 x_2 d\Sigma \right) \vec{j} = \\ &= a I_{22} \vec{i} - a I_{12} \vec{j} = a I_{22} \vec{i} \equiv a I \cdot \vec{i} \end{aligned}$$

Практически приложить внешние силы вида $\vec{P}^{(\pm \vec{k})} = \pm ax_2 \vec{k}$ невозможно. Следуя принципу Сен-Венана, приложим нагрузку с главным изгибающим моментом: $\vec{M} = \vec{L} \Rightarrow M = aI \Rightarrow \sigma_{ij} = (M/I)x_2 \delta_{i3} \delta_{j3}$. По обобщенному закону Гука:

$$\sigma = \sigma_{kk} = \frac{M}{3I_{22}} x_2; \quad \varepsilon_{ij} = -\frac{3v}{E} \sigma \delta_{ij} + \frac{1+v}{E} \sigma_{ij} = \left(-\frac{v}{E} \delta_{ij} + \frac{1+v}{E} \delta_{i3} \delta_{j3} \right) \frac{M}{I} x_2$$

Главные оси бруса совпадают с главными осями тензоров напряжений и деформаций. Компоненты тензоров зависят только от x_2 , а матрица в главных осях является диагональной.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{12} &= \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0; \quad \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = -\frac{vM}{EI} x_2; \quad \varepsilon_{33} = \frac{M}{EI} x_2; \\ u_3 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{3j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{3j,k} - \varepsilon_{jk,3}) = x_3 \int_0^1 \varepsilon_{33} (x_2 t) dt + \frac{x_2 x_3}{2} \varepsilon_{33,2} = x_3 \frac{M}{EI} x_2 \int_0^1 t dt + \\ &+ \frac{x_2 x_3}{2} \frac{M}{EI} = \frac{M}{EI} x_2 x_3 \\ u_1 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{1j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{1j,k} - \varepsilon_{jk,1}) = x_1 \int_0^1 \varepsilon_{11} (x_2 t) dt + \frac{x_2 x_1}{2} \varepsilon_{11,2} = \\ &= -\frac{vM}{EI} x_1 x_2 \left(\int_0^1 t dt + \frac{1}{2} \right) = -\frac{vM}{EI} x_1 x_2 \\ u_2 &= x_j \int_0^1 \varepsilon_{2j} dt + \frac{x_k x_j}{2} (\varepsilon_{2j,k} - \varepsilon_{jk,2}) = x_2 \int_0^1 \varepsilon_{22} dt + \frac{x_2 x_2}{2} \varepsilon_{22,2} - \frac{x_1 x_1}{2} \varepsilon_{11,2} - \frac{x_2 x_2}{2} \varepsilon_{22,2} - \end{aligned}$$

$$-\frac{x_3 x_3}{2} \varepsilon_{33,2} = -\frac{v M}{EI} x_2^2 \int_0^1 t dt + \frac{x_1^2 v M}{2 EI} - \frac{x_3^2 M}{2 EI} = \frac{-M}{2 EI} (x_3^2 + v [x_2^2 - x_1^2])$$

$$\text{Получаем: } u_2 = \frac{-M}{2EI} (x_3^2 + v [x_2^2 - x_1^2]); \quad u_1 = -\frac{v M}{EI} x_1 x_2; \quad u_3 = \frac{M}{EI} x_3 x_2$$

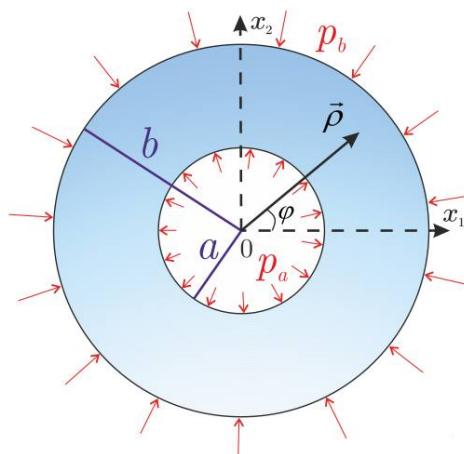
Найдем, как деформируется ось бруса: $x_1 = x_2 = 0 \Rightarrow u_2 = \frac{-M}{2EI} x_3^2, u_1 = u_3 = 0 \Rightarrow$
Ось бруса остается в плоскости изгиба Ox_2x_3 и деформируется в параболу. Кривизна оси бруса с точностью до малых высшего порядка равна: $K = \frac{1}{R} = \frac{d^2 u_2}{dx_3^2} \Rightarrow K = \frac{-M}{EI} \Rightarrow$
Закон Гука при чистом изгибе: $\frac{1}{R} = \frac{-M}{EI}$

3.18 Использование криволинейных координат:

задача Ламе о деформировании толстостенной упругой однородной изотропной трубы под действием внешнего и внутреннего давления (кинематическая гипотеза; сведение задачи к краевой задаче обыкновенного дифференциального уравнения; уравнение Леви; формулы ненулевых компонент тензора напряжений).

Задача Ламе о толстостенной трубе - задача о равновесии цилиндрической трубы, находящейся под действием внутреннего и внешнего давления. $\vec{F} = \vec{0}$

Кинематическая гипотеза: $\vec{u} = u(\rho) \vec{e}_\rho$.



Запишем уравнения Ламе и граничные условия в цилиндрической системе координат. $\xi^1 = \rho, \xi^2 = \varphi, \xi^3 = z; x_1 \equiv x = \rho \cos \varphi, x_2 \equiv y = \rho \sin \varphi, x_3 \equiv z = z.$ ($\Gamma_{12}^2 = \Gamma_{21}^2 = 1/\rho, \Gamma_{22}^1 = -\rho$) ($g_{11} = g_{33} = 1, g_{22} = \rho^2; \sqrt{g} = \rho; g^{11} = g^{33} = 1, g^{22} = \rho^{-2}$)

Проверяем кинематическую гипотезу: $\left\{ \begin{array}{l} \vec{e}_\rho = \vec{e}_1 = \vec{e}^1 \\ \vec{e}_\varphi = \rho^{-1} \vec{e}_2 = \rho \vec{e}^2 \\ \vec{e}_z = \vec{e}_3 = \vec{e}^3 \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} u_\rho = u_1 = u^1 = u(\rho) \\ u_\varphi = \rho u^2 = \rho^{-1} u_2 = 0 \\ u_z = u^3 = u_3 = 0 \end{array} \right.$

$$\operatorname{div} \vec{u} = \frac{\partial u_\rho}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \phi} + \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{u_\rho}{\rho} = \frac{du}{d\rho} + \frac{u}{\rho} \Rightarrow \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{u} = \vec{e}^i \frac{\partial \operatorname{div} \vec{u}}{\partial \xi^i} = \vec{e}_\rho \frac{d}{d\rho} \left(\frac{du}{d\rho} + \frac{u}{\rho} \right)$$

$$u_{1,2} = \frac{\partial u}{\partial \varphi} - u_q \Gamma_{12}^q = -u_2 \Gamma_{12}^2 \equiv 0 \quad u_{1,3} = \frac{\partial u}{\partial z} - u_q \Gamma_{13}^q \equiv 0$$

$$\operatorname{rot} \vec{u} = \frac{1}{\sqrt{g}} \det \begin{pmatrix} \vec{e}^1 & \vec{e}^2 & \vec{e}^3 \\ \nabla_1 & \nabla_2 & \nabla_3 \\ u_1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{g}} \left(u_{1,3} \vec{e}^2 - u_{1,2} \vec{e}^3 \right) \equiv \overrightarrow{0}$$

Уравнение Ламе в отсутствии массовых сил: $(\lambda + 2\mu) \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{u} + \mu \operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{u} = 0$.

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{u} = 0 &\stackrel{\vec{F} = \overrightarrow{0}}{\Rightarrow} \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{u} = 0 \stackrel{\vec{u} = \vec{u}(\rho)}{\Rightarrow} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d(\rho u)}{d\rho} \right) = 0 \Leftrightarrow \frac{d(\rho u)}{d\rho} = 0 \Leftrightarrow \frac{d(\rho u)}{d\rho} = \\ &= A\rho \Leftrightarrow u = \frac{A\rho}{2} + \frac{B}{\rho} \quad u' = \frac{A}{2} - \frac{B}{\rho^2} \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2} (u_{j,i} + u_{i,j}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial \xi^i} - u_q \Gamma_{ji}^q + \frac{\partial u_i}{\partial \xi^j} - u_q \Gamma_{ij}^q \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi^j} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi^i} \right) - u_q \Gamma_{ij}^q = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial \xi^1} + \frac{\partial u_1}{\partial \xi^1} \right) \delta_{i1} \delta_{j1} - u_1 \Gamma_{22}^1 \delta_{i2} \delta_{j2} = u' \delta_{i1} \delta_{j1} + \rho u \delta_{i2} \delta_{j2} = \left(\frac{A\rho}{2} - \frac{B}{\rho^2} \right) \delta_{i1} \delta_{j1} + \left(\frac{A}{2} \rho^2 + B \right) \delta_{i2} \delta_{j2} \\ \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon^{ij} = g^{ip} g^{jq} \varepsilon_{pq} \\ \varepsilon_i^j = g^{jq} \varepsilon_{iq} \end{array} \right. \\ \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{11} = u' = \frac{A}{2} - \frac{B}{\rho^2} \\ \varepsilon_{22} = \rho u \\ \varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = \varepsilon_{33} = 0 \end{array} \right. \\ \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_1^1 = \varepsilon^{11} = \varepsilon_{\rho\rho} = u' \\ \varepsilon^{22} = \rho^{-3} u \\ \varepsilon_2^2 = \rho^{-1} u = \varepsilon_{\varphi\varphi} \\ \varepsilon_{zz} = \varepsilon_3^3 = \varepsilon^{12} = \varepsilon^{13} = \varepsilon_{i=j}^{23} = \varepsilon^{33} = \varepsilon_2^1 = \varepsilon_3^1 = \varepsilon_3^2 = \varepsilon_3^3 = 0 \end{array} \right. \end{aligned}$$

$$\theta = \varepsilon_i^i = u' + \rho^{-1} u = A \Rightarrow \theta = A \text{ (одинакова во всех точках)}$$

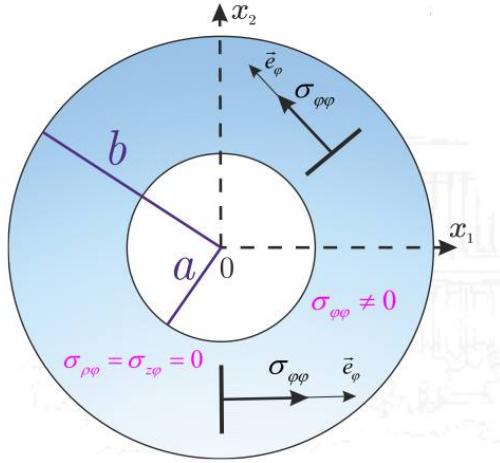
$$\begin{aligned} \text{Закон Гука: } \sigma_i^j &= \lambda \theta \delta_i^j + 2\mu \varepsilon_i^j \Rightarrow \sigma_{ii}^{\phi \text{ физ}} = A\lambda + 2\mu \varepsilon_{ii}^{\phi \text{ физ}} \quad (j = i). \\ \left\{ \begin{array}{l} \sigma_{\rho\rho} = A\lambda + 2\mu u' \\ \sigma_{\varphi\varphi} = A\lambda + 2\mu \rho^{-1} u \\ \sigma_{zz} = A\lambda \\ \sigma_{\rho\varphi} = \sigma_{\rho z} = \sigma_{\varphi z} = 0 \end{array} \right. \end{aligned}$$

$$\sigma_{\rho\rho} + \sigma_{\varphi\varphi} = 2A\lambda + 2\mu(u' + \rho^{-1}u) = 2A(\lambda + \mu) = \sigma_{zz} \cdot 2(\lambda + \mu)/\lambda = \sigma_{zz}/v$$

Уравнение Леви: $\sigma_{zz} = v (\sigma_{\rho\rho} + \sigma_{\varphi\varphi})$

$$\vec{n} = -\vec{e}_\rho \Rightarrow \vec{P}(-\vec{e}_\rho) \Big|_{\rho=a} = \sigma^{ij} n_i \vec{e}_j = -\sigma^{1j} \vec{e}_j = -\sigma_{\rho\rho} \vec{e}_\rho$$

$$\vec{n} = \vec{e}_\rho \Rightarrow \vec{P}(\vec{e}_\rho) \Big|_{\rho=b} = \sigma^{ij} n_i \vec{e}_j = \sigma^{1j} \vec{e}_j = \sigma_{\rho\rho} \vec{e}_\rho$$



$$\begin{aligned}
 -\sigma_{\rho\rho}|_{\rho=a} = p_a \Rightarrow A\lambda + \mu(A - 2a^{-2}B) = -p_a &\Rightarrow \begin{cases} 2\mu a^{-2}B - (\lambda + \mu)A = p_a \\ 2\mu b^{-2}B - (\lambda + \mu)A = p_b \end{cases} \\
 \sigma_{\rho\rho}|_{\rho=b} = -p_b \Rightarrow A\lambda + \mu(A - 2b^{-2}B) = -p_b & \\
 A = \frac{p_a b^{-2} - p_b a^{-2}}{(\lambda + \mu)(a^{-2} - b^{-2})}; \quad B = \frac{p_a - p_b}{2\mu(a^{-2} - b^{-2})} &\Rightarrow \\
 A = \frac{p_a a^2 - p_b b^2}{(\lambda + \mu)(b^2 - a^2)}; \quad B = \frac{a^2 b^2 (p_a - p_b)}{2\mu(b^2 - a^2)} & \\
 \sigma_{\rho\rho}(\rho) = \frac{p_a a^2 - p_b b^2}{b^2 - a^2} - \frac{a^2 b^2 (p_a - p_b)}{b^2 - a^2} \frac{1}{\rho^2} = \frac{p_a a^2}{b^2 - a^2} \left(1 - \frac{b^2}{\rho^2}\right) - \frac{p_b b^2}{b^2 - a^2} \left(1 - \frac{a^2}{\rho^2}\right) & \\
 \sigma_{\varphi\varphi}(\rho) = A\lambda + 2\mu\rho^{-1}u = A\lambda + \mu(A + 2\rho^{-2}B) = A(\lambda + \mu) + 2\mu B\rho^{-2} & \\
 \sigma_{\varphi\varphi}(\rho) = \frac{p_a a^2}{b^2 - a^2} \left(1 + \frac{b^2}{\rho^2}\right) - \frac{p_b b^2}{b^2 - a^2} \left(1 + \frac{a^2}{\rho^2}\right) &
 \end{aligned}$$

При условии: $b > a, a \approx b, p_a \gg p_b \Rightarrow A > 0, B > 0$

$$\sigma_{\varphi\varphi} > 0, \max |\sigma_{\varphi\varphi}| = \sigma_{\varphi\varphi}(a) = \frac{p_a a^2 + b^2(p_a - 2p_b)}{b^2 - a^2}$$

$$\sigma_{zz} = v(\sigma_{\rho\rho} + \sigma_{\varphi\varphi}) = 2v \frac{p_a a^2 - p_b b^2}{b^2 - a^2} > 0$$

Компоненты зависят только от геометрических характеристик трубы.

3.19 Эффективные определяющие соотношения. Эффективный модуль Фойхта. Прямая формула смесей.

- **Определяющие соотношения** - это соотношения между причинами и следствиями процессов, которые происходят в телах. Примеры: уравнение Менделеева-Клайперона; закон Гука; закон Навье-Стокса.

- **Эффективные определяющие соотношения** - это соотношения, связывающие между собой средние по представительному объёму значения причин и следствий.

Материальные константы и материальные функции, входящие в эти соотношения, называются эффективными физико-механическими свойствами (характеристиками) композита.

- Экспериментальное определение всего комплекса эффективных свойств композита является дорогим и долгим процессом. Поэтому необходимы математические методы вычисления эффективных характеристик, позволяющие с разной степенью точности вычислять эффективные свойства.

- В МДТТ под эффективными определяющими соотношениями понимаются соотношения позволяющие выразить средние напряжения через средние деформации ($\langle \sigma \rangle \sim \langle \varepsilon \rangle$ - это прямые соотношения), либо наоборот средние деформации через средние напряжения ($\langle \varepsilon \rangle \sim \langle \sigma \rangle$ - это обратные соотношения).

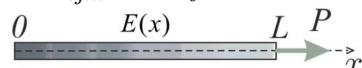
- Материальные константы и материальные функции, входящие в эти соотношения, называются эффективными константами и соответственно эффективными функциями композита.

- В общем случае эффективные материальные константы и функции, получаемые из прямых и обратных определяющих соотношений, не являются взаимно обратными, то есть эффективные прямые и обратные соотношения не обязательно совпадают.

$$\langle \bullet \rangle \equiv \frac{1}{V} \int_V (\bullet) dV \quad \lambda = \frac{E\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)} \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

Эффективный модуль Фойхта определим при следующих предположениях:

- 1) фазы являются изотропными и линейно-упругими; 2) нет массовых сил; 3) тело находится в состоянии статического равновесия; 4) поле деформаций однородно: $\varepsilon_{ij} = \text{const} \Rightarrow \langle \sigma_{ij}(\vec{x}) \rangle = \langle C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \rangle = \langle C_{ijkl} \rangle \varepsilon_{kl} = \langle C_{ijkl} \rangle \langle \varepsilon_{kl} \rangle \Rightarrow C_{ijkl}^F = \langle C_{ijkl} \rangle$



Рассмотрим линейно упругий однородный отрезок:

$$x \in (0; L), \varepsilon(x) \equiv \varepsilon = \langle \varepsilon \rangle_x, \sigma(x) = E(x)\varepsilon \Rightarrow \langle \sigma(x) \rangle_x = \langle E(x)\varepsilon \rangle_x = \langle E(x) \rangle_x \varepsilon = \langle E(x) \rangle_x \langle \varepsilon \rangle_x \Rightarrow E_x^F = \langle E(x) \rangle_x \equiv \frac{1}{L} \int_0^L E(x) dx$$

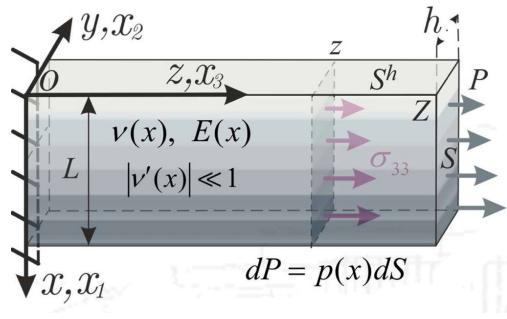
Эффективный модуль Фойхта можно приближенно определить из решения 3D краевой задачи на одноосное растяжение неоднородного стержня, когда нагруженная грань остаётся плоской и перпендикулярной оси стержня. Рассмотрим градиентный по ширине прямоугольный стержень, такой, что коэффициент Пуассона меняются мало: $|v'(x)| \ll 1$. Пусть $u_3 = \varepsilon z$, $u_1 = -v\varepsilon x$, $u_2 = -v\varepsilon y$, $\varepsilon = \text{const}$ - относительное удлинение стержня. Условия Сен-Венана выполнены тождественно. Убедимся, что тензор деформаций является приближенно постоянным и оси $OXYZ$ - главные:

$$\varepsilon_{33} = u_{3,3} = \varepsilon, \quad \varepsilon_{11} = u_{1,1} = -v'(\varepsilon x) - v\varepsilon \approx -v\varepsilon, \quad \varepsilon_{22} = u_{2,2} = -v\varepsilon, \quad 2\varepsilon_{12} = u_{1,2} + u_{2,1} = u_{2,1} = -v'\varepsilon y \approx 0, \quad \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$$

$$\sigma_{ij} = \lambda(x)\theta\delta_{ij} + 2\mu(x)\varepsilon_{ij} \Rightarrow \sigma_{33} = \lambda\theta + 2\mu\varepsilon_{33} = (\lambda(1-2v) + 2\mu)v\varepsilon = E(x)\varepsilon$$

$$\sigma_{11} = \lambda\theta + 2\mu\varepsilon_{11} = (\lambda(1-2v) - 2\mu v)v\varepsilon = \left(\frac{Ev}{1+v} - \frac{Ev}{1+v}\right)\varepsilon = 0 = \sigma_{22} = \sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} \\ (\Delta Z/Z = u_3(Z)/Z = \varepsilon = \langle \varepsilon_{33} \rangle)$$

Уравнение равновесия:



$$\sigma_{ij,1} = 0 \Rightarrow \sigma_{11,1} + \sigma_{12,2} + \sigma_{13,3} = 0, \sigma_{21,1} + \sigma_{22,2} + \sigma_{23,3} = 0, \sigma_{31,1} + \sigma_{32,2} + \sigma_{33,3} = 0$$

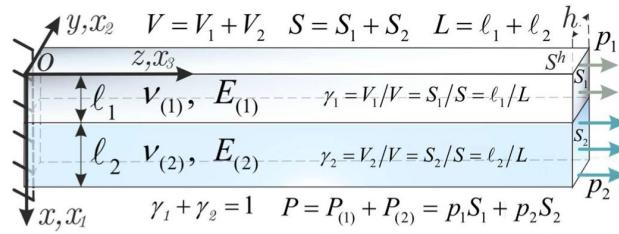
Среднее по объему третьей компоненты напряжения:

$$\sigma_{33,3} = 0 \Rightarrow \langle \sigma_{33} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{33} dV = \frac{1}{V} \int_0^Z dz \int_S \sigma_{33} dS = \frac{Z}{V} \int_S \sigma_{33} dS = \frac{1}{S} \int_S p dS = \frac{P}{S}$$

Расчетное и экспериментальное определения эффективного модуля Фойхта:

$$\langle \sigma_{33} \rangle = \langle E \varepsilon \rangle = \langle E \rangle \varepsilon^V = \langle E \rangle \langle \varepsilon_{33} \rangle \Rightarrow \langle E(x) \rangle = E^F = \frac{P}{\varepsilon S}$$

Кусочно-однородный стержень с сильно различными константами. Считаем, что в каждой из фаз приближенно реализовано состояние равномерного растяжения, так что:



$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(x) &= \sigma(x) \delta_{i3} \delta_{j3}, \sigma(x) = \begin{cases} p_1, x \in [0; \ell_1] \\ p_2, x \in (\ell_1; L] \end{cases}, \frac{p_1}{E_{(1)}} = \varepsilon = \frac{p_2}{E_{(2)}} (x = \ell_1) \\ \frac{P}{S} &= \frac{P_{(1)}}{S} + \frac{P_{(2)}}{S} = \frac{S_1}{S} \frac{P_{(1)}}{S_1} + \frac{S_2}{S} \frac{P_{(2)}}{S_2} = \gamma_1 P_1 + \gamma_2 P_2 = \gamma_1 E_{(1)} \frac{p_1}{E_{(1)}} + \gamma_2 E_{(2)} \frac{p_2}{E_{(2)}} = \\ &= (\gamma_1 E_{(1)} + \gamma_2 E_{(2)}) \varepsilon \Rightarrow \gamma_1 E_{(1)} + \gamma_2 E_{(2)} = \frac{P}{\varepsilon S} \\ \langle \sigma_{33} \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \sigma(x) dV = \frac{1}{V} \int_{V_1} p_1 dV + \frac{1}{V} \int_{V_2} p_2 dV = \frac{V_1}{V} p_1 + \frac{V_2}{V} p_2 = \gamma_1 p_1 + \gamma_2 p_2 \\ \Rightarrow \langle \sigma_{33} \rangle &= \frac{P}{S} \Rightarrow E^F \equiv \frac{\langle \sigma_{33} \rangle}{\varepsilon} = \frac{PS}{\varepsilon S} = \gamma_1 E_{(1)} + \gamma_2 E_{(2)} \\ \varepsilon_{33}^{(1)} &= \varepsilon_{33}^{(2)} = \dots = \varepsilon_{33}^{(N)} = \varepsilon, \langle \sigma_{33} \rangle = \sum_{i=1}^N \gamma_i p_i = \frac{P}{S}, \end{aligned}$$

Прямая формула смесей: $\sum_{i=1}^N \gamma_i E_{(i)} = E^F = \frac{Z \cdot P}{\Delta Z \cdot S}$

3.20 Эффективные определяющие соотношения. Эффективный модуль Рейсса. Обратная формула смесей.

- **Определяющие соотношения** - это соотношения между причинами и следствиями процессов, которые происходят в телах. Примеры: уравнение Менделеева-

Клайперона; закон Гука; закон Навье-Стокса.

- **Эффективные определяющие соотношения** - это соотношения, связывающие между собой средние по представительному объёму значения причин и следствий. Материальные константы и материальные функции, входящие в эти соотношения, называются эффективными физико-механическими свойствами (характеристиками) композита.

- Экспериментальное определение всего комплекса эффективных свойств композита является дорогим и долгим процессом. Поэтому необходимы математические методы вычисления эффективных характеристик, позволяющие с разной степенью точности вычислять эффективные свойства.

- В МДТТ под эффективными определяющими соотношениями понимаются соотношения позволяющие выразить средние напряжения через средние деформации ($\langle \tilde{\sigma} \rangle \sim \langle \tilde{\varepsilon} \rangle$ - это прямые соотношения), либо наоборот средние деформации через средние напряжения ($\langle \tilde{\varepsilon} \rangle \sim \langle \tilde{\sigma} \rangle$ - это обратные соотношения).

- Материальные константы и материальные функции, входящие в эти соотношения, называются эффективными константами и соответственно эффективными функциями композита.

- В общем случае эффективные материальные константы и функции, получаемые из прямых и обратных определяющих соотношений, не являются взаимно обратными, то есть эффективные прямые и обратные соотношения не обязательно совпадают.

Эффективный модуль Рейсса определим при следующих предположениях: 1) фазы являются изотропными и линейно-упругими; 2) нет массовых сил; 3) тело находится в состоянии статического равновесия; 4) поле напряжений однородно:

$$\sigma_{ij} = \text{const.} \Rightarrow \langle \varepsilon_{ij}(\vec{x}) \rangle = \langle C_{ijkl}^{-1} \sigma_{kl} \rangle = \langle C_{ijkl}^{-1} \rangle \sigma_{kl} = \langle C_{ijkl}^{-1} \rangle \langle \sigma_{kl} \rangle \Rightarrow C_{ijkl}^R = \langle C_{ijkl}^{-1} \rangle^{-1}.$$


Рассмотрим сначала линейно-упругий одномерный отрезок:

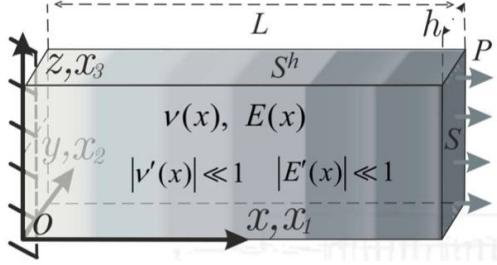
$$x \in (0; L), \sigma(x) \equiv \sigma = \langle \sigma \rangle \quad \varepsilon(x) = \frac{\sigma}{E(x)} \Rightarrow \langle \varepsilon(x) \rangle_x = \left\langle \frac{1}{E(x)} \sigma \right\rangle_x = \left\langle \frac{1}{E(x)} \right\rangle_x \sigma = \\ = \left\langle \frac{1}{E(x)} \right\rangle_x \langle \sigma \rangle_x \Rightarrow E_x^R = \left\langle \frac{1}{E(x)} \right\rangle_x^{-1} \equiv \left\langle \frac{1}{L} \int_0^L \frac{1}{E(x)} dx \right\rangle$$

Эффективный модуль Рейсса можно приближенно определить из решения 3D краевой задачи на одноосное растяжение неоднородного стержня, когда нагруженная грань остаётся плоской и перпендикулярной оси стержня. Рассмотрим градиентный по длине прямоугольный стержень такой, что свойства меняются мало:

$$|v'(x)| \ll 1, |E'(x)| \ll 1$$

$$\text{Предположим, что: } \sigma_{ij} = p \delta_{i1} \delta_{j1} \Rightarrow \text{tr} \sigma = p \Rightarrow \varepsilon_{ij}(x) = -\frac{v(x)}{E(x)} p \delta_{ij} + \frac{1+v(x)}{E(x)} \sigma_{ij} \quad \varepsilon_{ij}(x) = \\ = \frac{p}{E(x)} (-v(x) \delta_{ij} + (1+v(x)) \delta_{i1} \delta_{j1}) \Rightarrow \varepsilon_{22}(x) = \varepsilon_{33}(x) = \frac{-v(x)}{E(x)} p, \varepsilon_{11}(x) = \frac{p}{E(x)}, \varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \\ = \varepsilon_{23} = 0$$

Уравнения совместности Сен-Венана: $\varepsilon_{11,22} + \varepsilon_{22,11} = 2\varepsilon_{12,12} \Rightarrow \varepsilon_{22,11} = 0$
 $\left(\frac{-v(x)}{E(x)} p \right)_{,11} \approx 0 (?)$ Предложенное решение является приближенным. (Уравнения



равновесия, краевые условия и четыре ур-ия Сен-Венана выполнены точно. Два ур-ия выполнены приближенно.)

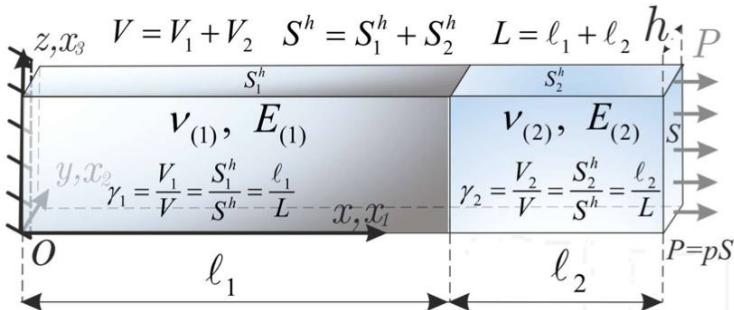
Средняя по объему продольная деформация:

$$\varepsilon_{11,2} = \varepsilon_{11,3} = 0 \Rightarrow \langle \varepsilon_{11} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{11} dV = \frac{1}{V} \int_S dS \int_0^L \varepsilon_{11} dx = \frac{S}{V} \int_0^L \varepsilon_{11} dx = \frac{\Delta L}{L}$$

Расчетное и экспериментальное определения эффективного модуля Рейсса

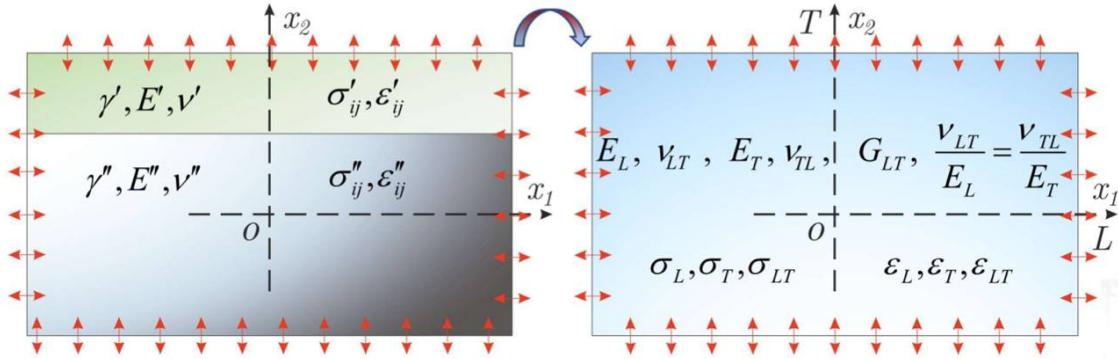
$$\langle \varepsilon_{11} \rangle = \left\langle \frac{p}{E} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{E} \right\rangle p = \left\langle \frac{1}{E} \right\rangle \langle \sigma_{11} \rangle \Rightarrow \left\langle \frac{1}{E(x)} \right\rangle^{-1} = E^R = \frac{pL}{\Delta L}$$

Кусочно-однородный стержень с сильно различными константами. Считаем, что в каждой из фаз приближенно реализовано состояние равномерного растяжения, так что:



$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = p\delta_{i1}\delta_{j1}, \varepsilon_{11}(x) &= \begin{cases} \varepsilon_{(1)}, x \in [0; \ell_1) \\ \varepsilon_{(2)}, x \in (\ell_1; L] \end{cases}, E_{(1)}\varepsilon_{(1)} = p = E_{(2)}\varepsilon_{(2)} \\ \frac{\Delta L}{L} &= \frac{\Delta\ell_1}{L} + \frac{\Delta\ell_2}{L} = \frac{\ell_1}{L} \frac{\Delta\ell_1}{\ell_1} + \frac{\ell_2}{L} \frac{\Delta\ell_2}{\ell_2} = \gamma_1\varepsilon_{(1)} + \gamma_2\varepsilon_{(2)} = \frac{\gamma_1}{E_{(1)}} E_{(1)}\varepsilon_{(1)} + \frac{\gamma_2}{E_{(2)}} E_{(2)}\varepsilon_{(2)} = \\ &= \left(\frac{\gamma_1}{E_{(1)}} + \frac{\gamma_2}{E_{(2)}} \right) p \Rightarrow \frac{\gamma_1}{E_{(1)}} + \frac{\gamma_2}{E_{(2)}} = \frac{\Delta L}{pL} \\ \langle \varepsilon_{11} \rangle &= \frac{1}{V} \iint_V \varepsilon(x) dV = \frac{1}{V} \int_{V_1} \varepsilon_{(1)} dV + \frac{1}{V} \int_{V_2} \varepsilon_{(2)} dV = \frac{V_1}{V} \varepsilon_{(1)} + \frac{V_2}{V} \varepsilon_{(2)} = \gamma_1\varepsilon_{(1)} + \gamma_2\varepsilon_{(2)} \Rightarrow \langle \varepsilon_{11} \rangle = \frac{\Delta L}{L} \Rightarrow \frac{1}{E^R} \equiv \frac{\langle \varepsilon_{11} \rangle}{p} = \frac{\Delta L}{pL} = \frac{\gamma_1}{E_{(1)}} + \frac{\gamma_2}{E_{(2)}} \\ \sigma_{11}^{(1)} &= \sigma_{11}^{(2)} = \dots = \sigma_{11}^{(N)} = p, \langle \varepsilon_{11} \rangle = \sum_{i=1}^N \gamma_i \varepsilon_{(i)}, \\ \text{Обратная формула смесей: } &\sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i}{E_{(i)}} = \frac{1}{E^R} = \frac{S \cdot \Delta L}{P \cdot L} \end{aligned}$$

3.21 Эффективные модули слоисто-волокнистого композита в плоско-напряженном состоянии в главных осях. Формула Акасаки для эффективного трансверсального модуля.



$$(\sigma_L, \sigma_T, \sigma_{LT}) = (\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}); (\epsilon_L, \epsilon_T, \epsilon_{LT}) = (\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, 2\epsilon_{12})$$

Эффективные плоские модули определим при следующих предположениях: 1) фазы являются линейно-упругими и изотропными; 2) нет массовых сил; 3) тело находится в состоянии статического равновесия; 4) состояние является плоско-напряженным и главные оси тензора напряжений сонаправлены со сторонами пластины.

(E_L эффективный продольный модуль Юнга, E_T эффективный поперечный модуль Юнга)

При указанных условиях проверим гипотезу, что модель композита является ортотропной с главными осями LT .

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \epsilon'_1 \\ \epsilon'_2 \\ \epsilon'_6 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1/E' & -v'/E' & 0 \\ -v'/E' & 1/E' & 0 \\ 0 & 0 & 1/G' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma'_1 \\ \sigma'_1 \\ \sigma'_6 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \epsilon''_1 \\ \epsilon''_2 \\ \epsilon''_6 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1/E'' & -v''/E'' & 0 \\ -v''/E'' & 1/E'' & 0 \\ 0 & 0 & 1/G'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma''_1 \\ \sigma''_1 \\ \sigma''_6 \end{pmatrix} ??? \begin{pmatrix} \epsilon_L \\ \epsilon_T \\ \epsilon_{LT} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1/E_L & -v_{TL}/E_T & 0 \\ -v_{LT}/E_L & 1/E_T & 0 \\ 0 & 0 & 1/G_{LT} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_L \\ \sigma_T \\ \sigma_{LT} \end{pmatrix} ??? \end{aligned}$$

Примем принцип суперпозиции двух одномерных задач. Это позволит нам определить средние по объему значения диагональных компонент тензоров напряжений и деформаций. Средние значения совпадают со значениями в модели композита:

$$\begin{aligned} \epsilon'_1 = \epsilon''_1 &= \langle \epsilon_{11} \rangle \equiv \epsilon_L; \quad \gamma' \sigma'_1 + \gamma'' \sigma''_1 = \langle \sigma_{11} \rangle \equiv \sigma_L \\ \sigma'_2 = \sigma''_2 &= \langle \sigma_{22} \rangle \equiv \sigma_T; \quad \gamma' \epsilon'_2 + \gamma'' \epsilon''_2 = \langle \epsilon_{11} \rangle \equiv \epsilon_T \end{aligned}$$

Запишем получившуюся систему уравнений. Из этих равенств надо исключить: $\varepsilon'_1, \varepsilon'_2, \sigma'_1, \sigma'_2, \varepsilon''_1, \varepsilon''_2, \sigma''_1, \sigma''_2$.

$$\begin{cases} \varepsilon'_1 = \varepsilon''_1 = \varepsilon_L \\ \gamma' \sigma'_1 + \gamma'' \sigma''_1 = \sigma_L \\ \sigma'_2 = \sigma''_2 = \sigma_T \\ \gamma' \varepsilon'_2 + \gamma'' \varepsilon''_2 = \varepsilon_T \end{cases} \quad \begin{cases} E' \varepsilon'_1 = \sigma'_1 - v' \sigma'_2 \\ E' \varepsilon'_2 = \sigma'_2 - v' \sigma'_1 \\ E'' \varepsilon''_1 = \sigma''_1 - v'' \sigma''_2 \\ E'' \varepsilon''_2 = \sigma''_2 - v'' \sigma''_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} E' \varepsilon_L = \sigma'_1 - v' \sigma_T \mid \cdot \gamma' \\ E'' \varepsilon_L = \sigma''_1 - v'' \sigma_T \mid \cdot \gamma'' \end{cases} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
& (\gamma' E' + \gamma'' E'') \varepsilon_L \stackrel{\gamma' \sigma'_1 + \gamma'' \sigma''_1 = \sigma_L}{=} \underbrace{(\gamma' \sigma'_1 + \gamma'' \sigma''_1)}_{\sigma_L} - (\gamma' v' + \gamma'' v'') \sigma_T \Rightarrow \\
& \varepsilon_L = \frac{1}{\gamma' E' + \gamma'' E''} \sigma_L - \frac{\gamma' v' + \gamma'' v''}{\gamma' E' + \gamma'' E''} \sigma_T \quad \Rightarrow \quad E_L = \gamma' E' + \gamma'' E'', \quad \frac{v_{TL}}{E_T} = \frac{\gamma' v' + \gamma'' v''}{\gamma' E' + \gamma'' E''} \\
& \begin{cases} \varepsilon'_2 = 1/E' (\sigma_T - v' \sigma'_1) \mid \cdot \gamma' \\ \varepsilon''_2 = 1/E'' (\sigma_T - v'' \sigma''_1) \mid \cdot \gamma'' \end{cases} \\
& \varepsilon_T = \left(\frac{\gamma'}{E'} + \frac{\gamma''}{E''} \right) \sigma_T - \frac{\gamma' v'}{E'} \underbrace{(E' \varepsilon_L + v' \sigma_T)}_{\sigma'_1} - \frac{\gamma'' v''}{E''} \underbrace{(E'' \varepsilon_L + v'' \sigma_T)}_{\sigma''_1} \\
& \varepsilon_T = \left(\frac{\gamma'}{E'} + \frac{\gamma''}{E''} - \frac{\gamma' (v')^2}{E'} - \frac{\gamma'' (v'')^2}{E''} \right) \sigma_T - (\gamma' v' + \gamma'' v'') \underbrace{\left(\frac{\sigma_L}{E_L} - \frac{\gamma' v' + \gamma'' v''}{E_L} \sigma_T \right)}_{\varepsilon_L} \\
& \varepsilon_T = - \overbrace{\frac{\gamma' v' + \gamma'' v''}{E_L} \sigma_L}^{v_{LT}} + \left(\frac{\gamma'}{E'} + \frac{\gamma''}{E''} - \frac{\gamma' (v')^2}{E'} - \frac{\gamma'' (v'')^2}{E''} + \frac{(\gamma' v' + \gamma'' v'')^2}{\underbrace{\gamma' E' + \gamma'' E''}_{E_L}} \right) \sigma_T \\
& \Rightarrow (\varepsilon_T = - \frac{v_{LT}}{E_L} \sigma_L + \frac{1}{E_T} \sigma_T) \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{E_T} = \left(\frac{\gamma'}{E'} + \frac{\gamma''}{E''} \right) - \frac{\gamma' (v')^2}{E'} - \frac{\gamma'' (v'')^2}{E''} + \frac{(\gamma' v' + \gamma'' v'')^2}{\gamma' E' + \gamma'' E''} = \left(\frac{\gamma'}{E'} + \frac{\gamma''}{E''} \right) - \frac{*}{E' E'' E_L} \Rightarrow$$

$$* = \gamma' (v')^2 E'' (\gamma' E' + \gamma'' E'') + \gamma'' (v'')^2 E' (\gamma' E' + \gamma'' E'') - E' E'' (\gamma' v' + \gamma'' v'')^2 =$$

$$\left((\gamma' v')^2 + (\gamma'' v'')^2 - (\gamma' v' + \gamma'' v'')^2 \right) E' E'' + \gamma' \gamma'' \left((v' E'')^2 + (v'' E')^2 \right) = -2\gamma' v' \gamma'' v'' E' E'' +$$

$$+ \gamma' \gamma'' \left((v' E'')^2 + (v'' E')^2 \right) = \gamma' \gamma'' (v' E'' - v'' E')^2 \Rightarrow$$

Формула Акасаки: $\frac{1}{E_T} = \left(\frac{\gamma'}{E'} + \frac{\gamma''}{E''} \right) - \gamma' \gamma'' \frac{(v'/E' - v''/E'')^2}{\gamma'/E'' + \gamma''/E'}$

$$v_{LT} = \gamma' v' + \gamma'' v''; \quad E_L = \gamma' E' + \gamma'' E''; \quad v_{TL} = \frac{E_T}{E_L} v_{LT};$$

$$\frac{1}{G_{LT}} = \frac{\gamma'}{G'} + \frac{\gamma''}{G''} \Leftarrow \sigma'_{12} = \sigma''_{12} = \sigma_{LT}$$