УДК 536.21, 517.93

Матрично-операторный метод расчета эффективных характеристик слоистых сред

Канд. физ.-мат наук **Старков А.С.** stark55@rambler.ru
канд. пед. наук **Багаутдинова А.Ш.** aliyabagaut@mail.ru
Университет ИТМО
191002, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

Система тонких слоев из различных материалов по своим теплофизическим, электрическим, магнитным и упругим свойствам может быть заменена на один слой с некоторыми эффективными характеристиками. Для расчета этих характеристик используется матрично-операторный метод. В качестве примера рассматриваются эффективные теплофизические характеристики системы плоскопараллельных и цилиндрических слоев.

Ключевые слова: тонкие пленки, эффективная теплопроводность, эффективная теплоемкость, мультиферроики, магнитоэлектрический коэффициент.

Matrix-operator method for calculating the effective characteristics of layered media

Ph.D. **Starkov A.S.** stark55@rambler.ru
Ph.D. **Bagautdinova A.S.** aliyabagaut@mail.ru
University ITMO
191002, Russia, St. Petersburg, Lomonosov str., 9

Layered system containing a number of materials which exhibit different thermophysical, electric, magnetic, and elastic properties can be replaced by a single layer with some effective characteristics. For calculation of these characteristics the matrix operator method is used. As an example of the model applicability, we have considered effective thermal properties of the system of plane-parallel and cylindrical layers.

Key words: thin films, the effective thermal conductivity, effective heat capacity, multiferroic, magnetoelectric coefficient.

Значительный интерес к пленочным слоистым структурам вызван широким спектром возможностей их применения, начиная от солнечных батарей и лазеров [1] и кончая твердотельными охладителями [2-5]. Каждый слой в таком охладителе является мультиферроиком – материалом, в котором проявляется взаимосвязь электрического, магнитного и упругого свойства [6]. Взаимодействие сил различной природы приводит к значительному увеличению охлаждающего эффекта. Для расчета распределения температуры и электромагнитоупругого полей в такой структуре приходится решать весьма сложную систему дифференциальных уравнений в частных производных [4]. С ростом числа слоев трудности численного решения многократно возрастают и требуется найти альтернативный способ. В данной работе предлагается новый матрично-операторный метод, являющийся обобщением матричного метода усреднения [7]. В этом подходе многослойная среда заменяется на некоторую эффективную среду с постоянными физическими характеристиками, которые определяются свойствами слоев.

Рассмотрим слоистую среду $0 \le x \le h$, состоящую из n слоев с границами $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_0 = 0, x_n = h$. Толщину слоя с номером i обозначим через $h_i = x_i - x_{i-1}, i = 1, 2, \dots, n$, а относительную толщину через $\theta_i = h_i / h$. Будем предполагать, что уравнения, описывающие поведение среды, могут быть записаны в виде

$$\frac{dU}{dx} = AU + VB. \qquad (1)$$

Здесь $U = (u_1, u_2, \dots, u_m)^{tr}$, $V = (v_1, v_2, \dots, v_l)^{tr}$ – столбцы неизвестных, значок tr – означает транспонирование. Матрицы A и B являются операторными матрицами и могут содержать как другие переменные, так и производные по ним.

Рассмотрим вначале случай, когда A и B не зависят от координаты x. Тогда решение u_i в слое с номером i может быть представлено в виде

$$U(x) = e^{A_i(x - x_{i-1})} U(x_{i-1}), \qquad (2)$$

где A_i – значение матрицы A в слое i. Матрично-операторная экспонента в (2) задаётся в виде обычного ряда Маклорена. Применяя формулу (2) n раз, получаем связь значений столбца U на внешних границах среды

$$U(h) = e^{A_n h_n} e^{A_{n-1} h_{n-1}} \cdots e^{A_1 h_1} U(0). \qquad (3)$$

Учитывая формулу Кэмпбелла-Хаусдорфа для произведения матричных экспонент [8]

$$e^{A_1} e^{A_2} = e^{A_1 + A_2 + \frac{1}{2}[A_1, A_2] + \dots},$$

в которой $[A_1,A_2]=A_1A_2 - A_2A_1$ – коммутатор матриц A_1 и A_2, произведение матриц в правой части (3) можно приближенно записать следующим образом

$$e^{A_n h_n} e^{A_{n-1} h_{n-1}} \cdots e^{A_1 h_1} \approx e^{hA^{eff}}, \qquad (4)$$

где матрица A^{eff} задана равенством

$$A^{eff} = \sum_{i=1}^{n} A_i \theta_i. \qquad (5)$$

Если ввести столбец неизвестных U^{eff}, который удовлетворяет матричному уравнению

$$\frac{dU^{eff}}{dx} = A^{eff} U^{eff}, \qquad (6)$$

то можно показать, что U и U^{eff} будут близки между собой, а отличие одного столбца от другого δ описывается отброшенными в (4) слагаемыми и

$$\delta \sim (A_1 l_1)^2 + (A_2 l_2)^2 + \ldots + (A_n l_n)^2. \qquad (7)$$

Таким образом, при малых δ можно заменять решение уравнений (1) с кусочно-постоянной матрицей A на решение системы (6) с постоянной матрицей A^{eff}, не зависящей от слоя. Аналогично, при подстановке полученного усредненного значения U^{eff} во второе уравнение (1), получаем формулу для эффективного значения матрицы B

$$B^{eff} = \sum_{i=1}^{n} B_i c_i. \qquad (8)$$

Формулы (5) и (6) означают, что эффективные значения матриц A и B получаются как взвешенные средние значения матриц A_i и B_i с весами, пропорциональными толщине слоя.

Перейдем теперь к исследованию случая, когда матрицы A и B могут зависеть от переменной x. Для тонких слоев изменение A и B в пределах одного слоя является малым, что позволяет записать приближенное решение в слое i в виде ряда

$$U(x) = \left(I + \int_{x_i}^{x} A_i(t)\,dt + \frac{1}{2}\left(\int_{x_i}^{x} A_i(t)\,dt \right)^2 + \ldots \right) U(x_i). \qquad (9)$$

Здесь I – единичная матрица размером $m \times m$. Пренебрегая в (9) квадратичным слагаемым, получаем уравнение для определения эффективной матрицы A^{eff} в этом случае

$$\int_0^h A^{eff}(t)\,dt = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} A_i(t)\,dt. \qquad (10)$$

Для B^{eff} имеем аналогичную формулу

$$\int_0^h B^{eff}(t)\,dt = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} B_i(t)\,dt. \qquad (11)$$

В качестве примера применения полученных формул рассмотрим нестационарное уравнение теплопроводности в трансверсально-изотропной среде

$$C\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \lambda_r\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}\right). \qquad (12)$$

Здесь (r, z) – цилиндрические координаты, Т – температура, С – теплоемкость, λ_z и λ_r – теплопроводность в соответствующем направлении.

Если слои расположены параллельно друг другу и перпендикулярно оси *z*, то в качестве столбца *U* выбираем $U = \left(T, \lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)^{tr}$. Тогда

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\lambda_z} \\ C\frac{\partial}{\partial t} - \lambda_r\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) & 0 \end{pmatrix}, \quad B = 0. \qquad (13)$$

Матрица *A* в этом случае не зависит от переменной *z* и применение формулы (5) позволяет определить эффективные характеристики среды в этом случае

$$\tilde{N}^{eff} = \overline{C}, \quad \frac{1}{\lambda_{z^{eff}}} = \overline{\left(\frac{1}{\lambda}\right)}, \quad \lambda_{r^{eff}} = \overline{\lambda_r}. \qquad (14)$$

Здесь и в дальнейшем используется следующее обозначение: черта над величиной означает её усреднение по системе слоёв с весом, пропорциональным толщине слоя

$$\overline{a} = \sum_{i=1}^{n} a_i \Theta_i.$$

Отметим, что теплопроводность в радиальном направлении λ_r и в направлении оси *z* λ_z усредняются по разным формулам. Теплоемкость и теплопроводность λ_r, в соответствии с формулой (14), являются аддитивными величинами. Отметим, что даже в том случае, когда каждый слой является однородным, эффективная среда, полученная в результате осреднения, будет являться анизоропной.

Если же слои являются цилиндрическими и границы слоев задаются уравнениями $r = r_0, r_1, \ldots r_n$, то в качестве столбца U выбираем следующий $U = \left(T, r\lambda_r \dfrac{\partial T}{\partial r}\right)^{tr}$. Тогда матрица A имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{1}{r\lambda_r} \\ r\left(C\dfrac{\partial}{\partial t} - \lambda_z \dfrac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрица также как и в предыдущем случае отсутствует, $B = 0$. В результате применения формулы (10) получаем значения усредненных величин

$$C^{eff} = \frac{1}{r_n^2 - r_0^2} \sum_{i=1}^{n} \left(r_i^2 - r_{i-1}^2\right) C_i, \tag{15}$$

$$\frac{1}{\lambda_r^{eff}} = \frac{1}{\ln \frac{r_n}{r_0}} \sum_{i=1}^{n} \frac{\ln \frac{r_i}{r_{i-1}}}{\lambda_{r_i}}. \tag{16}$$

Формула для λ_z^{eff} подобна формуле (15). Для цилиндрических слоев эффективные значения теплоемкости и теплопроводности, как следует из (15), (16), зависят не только от их значений в слоях, но и от радиусов слоев.

Выведенные выше формулы позволяют находить эффективную температуропроводность слоистых структур и по критерию Фурье определять время, необходимое для нагрева или охлаждения рассматриваемой структуры.

В качестве второго примера рассмотрим уравнения электромагнитоупругости для трансверсально-изотропной среды [9]. В качестве столбцов U и V выбираем следующие

$$U = \left(u_1, u_2, u_3, \sigma_{13}, \sigma_{23}, \sigma_{33}, D_3, B_3, \varphi, \psi\right)^{tr},$$

$$V = \left(\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}, D_1, D_2, B_1, B_2\right)^{tr}$$

Здесь u_i, D_i, B_i – компоненты векторов смещения, электрической и магнитной индукции, соответственно; σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, i, j = 1,2,3, φ, ψ потенциалы электрического и магнитного поля. Разделение переменных на две группы проводилось по следующему принципу. В столбец U включены те величины, которые являются непрерывными на границах раздела сред. Переменные же из столбца V могут испытывать на границах раздела разрыв первого рода. Явные формулы для матриц A (размером 10×10) и B (7×10) не выписываем в силу их громоздкости.

Результаты усреднения выпишем только для случая плоскопараллельных границ раздела $z=z_0, z_1, \ldots, z_l$ и только для интересующей нас части материальных параметров. Введем матрицу

$$Q=\begin{pmatrix} c_{33} & e_{33} & f_{33} \\ e_{33} & -\varepsilon_{33} & -g_{33} \\ f_{33} & -g_{33} & -\mu_{33} \end{pmatrix}.$$

В матрице Q коэффициент c_{33} есть модуль упругости, e_{33} и f_{33} – пьезоэлектрический и пьезомагнитный модули, ε_{33} – диэлектрическая постоянная, μ_{33} – магнитная проницаемость, g_{33} – магнитоэлектрический коэффициент. Для эффективных параметров из матрицы Q согласно описанной выше схеме имеем

$$Q^{eff}=\left\langle Q^{-1}\right\rangle^{-1}. \tag{17}$$

Важным моментом является то, что величины, входящие в Q, при усреднении влияют друг на друга. И даже при отсутствии магнитоэлектрического коэффициента в слоях усредненная среда будет иметь отличный от 0 модуль g_{33}^{ef} за счёт упругого взаимодействия. Именно этим и хороши композитные материалы: появлением у системы свойств, которые отсутствуют у ее составляющих. Аналогичные формулы для цилиндрических слоев позволяют объяснить усиление магнитоэлектрического эффекта, вызванного наличием кривизны слоя [9].

Вариант матричного метода осреднения, предложенный в настоящей работе, может быть использован для расчёта эффективных характеристик не только слоистых, но и блочных структур. Более того, этот метод годится для расчёта структур, границы в которых являются координатными поверхностями в такой системе координат, для которой исходные уравнения допускают применение метода разделения переменных.

Список литературы

1. Ж.И. Алферов. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников, 1998, Т.32, №1, С.3-18.
2. A.S Starkov, S.F Karmanenko, O.V Pakhomov, Electrocaloric response of a ferroelectric capacitor to a periodic electric field // Physics of the Solid State , 2009, № 7, С.1510-1514.

3. А.С. Старков, О.В. Пахомов, И.А. Старков. Параметрическое усиление электрокалорического эффекта при периодическом изменении внешнего поля // Письмо в ЖТФ, 2011, № 23, С.105-110.
4. A.S. Starkov, O.V. Pakhomov, I.A. Starkov. Solid-State Cooler: New opportunities // Ferroelectrics, 2012, v.430, P. 108-114.
5. S Karmanenko, A Semenov, A Dedyk, A Es'kov, New Approaches to Electrocaloric-Based Multilayer Cooling //Electrocaloric Materials, Engineering Materials , 2014, v. 34, P. 183-223.
6. А.П. Пятаков, А.К. Звездин. Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики // УФН, 2012, Т.182, №6, С.593-620.
7. Л.А.Молотков. Исследование распространения волн в пористых и трещиноватых средах на основе эффективных моделей Био и слоистых сред. СПб.: Наука, 2001, 348с.
8. V.E. Nazaikinskii, V. E. Shatalov, B. Yu. Sternin Methods of Noncommutative Analysis: Theory and Applications. Berlin: De Gruyter, 1996, 373p.
9. M.I. Bichurin, D. Viehland. Magnetoelectricity in composites. Pan Stanford Publishing Ptd Ltd, 2012, 314c.
10. H.M. Wang, E. Pan, W.Q. Chen. Enhancing magnetoelectric effect via the curvature of composite cylinder // J. Appl. Phys, 2010, v.107, P.093514.