

ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННОГО МАТРИЧНОГО МЕТОДА УСРЕДНЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ ТОНКИХ СЛОЕВ МУЛЬТИФЕРРОИКОВ

А. С. Старков^а, И. А. Старков^{б*}

^а Институт холода и биотехнологий Санкт-Петербургского Национального исследовательского университета ИТМО
191002, Санкт-Петербург, Россия

^б SIX Research Centre, Brno University of Technology
61600, Brno, Czech Republic

Поступила в редакцию 28 марта 2014 г.

Для нахождения параметров эффективной среды, эквивалентной по своим физическим свойствам набору слоев мультиферроиков, предлагается использовать обобщение матричного метода усреднения. Данный метод позволяет обходиться без решения сложной системы уравнений магнитоэластичности. При получении искомых характеристик системы слоев используются только действия с матрицами, что существенно упрощает вычисления и позволяет рассчитывать многослойные системы. Подход данной работы применим для расчета свойств тонких слоев, когда толщина всей системы много меньше ее длины, радиуса кривизны и длин волн, которые могут распространяться в системе (длинноволновое приближение). Матричный метод усреднения позволяет также получить эффективные характеристики периодической структуры, каждый период которой состоит из тонких слоев мультиферроиков.

DOI: 10.7868/S0044451014110108

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие наблюдается значительный интерес к тонким пленкам из мультиферроиков, что объясняется широким спектром их возможных приложений [1–6]. Применение мультиферроиков основано на магнитоэлектрическом эффекте, который заключается в появлении магнитного поля под действием электрического и наоборот. В природном мультиферроике Cr_2O_3 наибольшее значение магнитоэлектрического коэффициента достигается при температуре 260 К и составляет $3.7 \text{ пс}\cdot\text{м}^{-1}$ [7]. К сожалению, этого не достаточно для практического использования. На два порядка большие величины наблюдались в TbPO_4 [8] и $\text{Ho}_2\text{VaNiO}_5$ [9]. Однако магнитоэлектрический эффект для данного соединения возникает только при низких температурах. Как следствие, в центре внимания исследователей возникли искусственные мультиферроики, в которых связь электрического и магнитного полей осуществляется посредством упругого поля. Для ком-

позитных материалов, т. е. структур, состоящих из чередующихся пьезоэлектрических и магнитоэлектрических слоев, удалось достичь эффекта $20 \text{ пс}\cdot\text{м}^{-1}$ при постоянном магнитном поле и нескольких десятков или сотен $\text{пс}\cdot\text{м}^{-1}$ в переменном магнитном поле на частоте электромеханического резонанса, определяемой размерами образца и параметрами композита [10–13].

Расчет композитных материалов является весьма трудоемкой задачей в силу сложности уравнений, описывающих взаимосвязь электрического, магнитного и упругого полей [13, 14]. Для упрощения вычислений в данной работе предлагается использовать обобщенный матричный метод усреднения (ОММУ), который хорошо себя зарекомендовал в случае решения уравнений теории упругости [15, 16]. В отличие от указанных работ, где рассматривались периодические среды, в настоящей статье исследуется слоистая среда и не накладывается никаких ограничений на дифференциальные уравнения, описывающие систему. В дополнение к этому, в ОММУ для получения эффективных параметров слоистой среды не требуется решать дифференциальные уравнения в частных производных. Все пре-

*E-mail: ferroelectrics@ya.ru

образования сводятся к сложению, умножению и обращению матриц. Для применимости ОММУ необходимо, чтобы толщина слоистой системы была мала как по сравнению с ее другими размерами, так и по сравнению с длинами волн, которые могут распространяться в системе. Иными словами, это означает, что рассматривается длинноволновое приближение. Для расчета, например, твердотельных охладителей на мультиферроиках этого достаточно, так как используемые частоты лежат в области 1–10 Гц и длина волны в этом случае заведомо больше размеров устройства [6, 17]. При рассмотрении цилиндрических [18] или сферических слоев следует еще добавить требование малости толщины слоя по сравнению с радиусом его кривизны. Если физические характеристики слоя зависят от координат, то требуется, чтобы характерный размер неоднородности в слое был много больше его толщины. Кроме того, помимо расчета тонкой слоистой структуры, ОММУ может быть использован для изучения свойств периодической слоистой системы.

Структура данной работы такова. В разд. 2 рассматривается общая схема теоретического подхода, и в качестве иллюстрации приводится пример расчета тепловых свойств слоистой структуры. Далее, в разд. 3 рассматривается основная задача описания магнитоэластических свойств системы слоев из мультиферроиков. Для этого проводится преобразование исходной системы уравнений магнитоэластичности к требуемому ОММУ-виду. Последний разд. 4, посвящен обоснованию ОММУ. Для простоты рассматривается система трансверсально изотропных слоев с общей осью симметрии. Случай произвольной анизотропии слоев приводит просто к матрицам с большим числом ненулевых элементов.

2. ОБОБЩЕННЫЙ МАТРИЧНЫЙ МЕТОД УСРЕДНЕНИЯ

Пусть в системе координат (x_1, x_2, x_3) задана слоистая среда $0 \leq x_3 \leq h$, состоящая из n слоев. Толщину слоя с номером i обозначим через h_i , $i = 1, 2, \dots, n$ ($h_1 + h_2 + \dots + h_n = h$), а относительную толщину — через $\Theta_i = h_i/h$. Выделенную ось x_3 будем также обозначать через $z = x_3$. Предполагается, что система уравнений, описывающих свойства слоя, имеет вид

$$\frac{\partial X}{\partial z} = AX, \quad Y = BX. \quad (1)$$

Здесь $\{X, Y\}$ — столбцы неизвестных, $\{A, B\}$ — матрицы, характеризующие материальные свойства

слоя. Для каждого слоя матрицы A и B свои: $A = A_i(z)$, $B = B_i(z)$ в слое с номером i . Кроме того, матрицы A и B могут зависеть от $\{x_1, x_2\}$ и от производных по $\{x_1, x_2\}$ и по времени t . Переменные X отличаются от Y тем, что первые входят в граничные условия на границе слоев, а вторые — нет. Более того, предполагается, что граничные условия заключаются в непрерывности X . Это естественные требования для системы вида (1), так как в противном случае производная $\partial X/\partial z$ содержит особенности в виде δ -функции Дирака. С физической точки зрения, это означало бы наличие поверхностных зарядов, токов или сил на границе раздела, которые, как мы предполагаем, отсутствуют. В свою очередь, переменные Y могут иметь разрывы на границах слоев.

Оказывается (подробнее см. разд. 3), что при некоторых ограничениях на толщины h_i исходная слоистая система ведет себя как слой толщины h , заполненный эффективной средой, характеризующейся матрицами A^{eff} и B^{eff} . Система уравнений для этого слоя имеет вид

$$\frac{\partial X}{\partial z} = A^{eff} X, \quad Y = B^{eff} X, \quad (2)$$

а матрицы A^{eff} и B^{eff} определяются из соотношения

$$A^{eff} = \bar{A} \equiv \sum_{i=1}^n \Theta_i A_i, \quad B^{eff} = \bar{B} \equiv \sum_{i=1}^n \Theta_i B_i. \quad (3)$$

Черта над величиной означает ее усреднение по системе слоев. Формулы (3) являются физически прозрачными и означают, что каждый слой вносит вклад, пропорциональный его толщине. Подчеркнем, что обоснование матричных формул усреднения (3) может быть получено только для уравнений вида (1), а не в произвольном случае. Использование усредненных значений (3) для произвольной системы уравнений может приводить к значительным ошибкам.

Если в пределах слоя матрицы A и B зависят от выделенной координаты z , то уравнение для определения эффективной матрицы A^{eff} в этом случае имеет вид

$$\int_0^h A^{eff}(t) dt = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} A_i(t) dt. \quad (4)$$

Для нахождения B^{eff} имеем аналогичную формулу

$$\int_0^h B^{eff}(t) dt = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} B_i(t) dt. \quad (5)$$

Интегралы в формулах (4), (5) содержат, как правило, известные функции и легко вычисляются. Полученные формулы позволяют достаточно просто находить как физические характеристики эффективной среды, эквивалентной данному набору тонких слоев, так и приближенное решение исходной задачи.

В качестве простой иллюстрации описанного выше подхода рассмотрим задачу об определении эффективных тепловых характеристик слоистой системы. Распределение температуры T в трансверсально изотропной среде описывается уравнением теплопроводности [19]

$$C \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{11} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} \right) + \lambda_{33} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}. \quad (6)$$

Здесь C — теплоемкость, λ_{11} и λ_{33} — коэффициенты теплопроводности. В каждом слое эти тепловые коэффициенты считаем постоянными: $C = C_i$, $\lambda_{11} = \lambda_{11i}$, $\lambda_{33} = \lambda_{33i}$ в слое с номером i ($i = 1, 2, \dots, n$). На границах между слоями должны выполняться условия непрерывности температуры T и теплового потока $q = \lambda_{33} \partial T / \partial z$ [19]. Граничные условия на внешних границах $z = 0$ и $z = h$ на усреднение не влияют, поэтому их не выписываем. Перепишем уравнение (6) в виде системы относительно T и q :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial z} &= \frac{1}{\lambda_{33}} q, \\ \frac{\partial q}{\partial z} &= -\lambda_{11} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} \right) + C \frac{\partial T}{\partial t}. \end{aligned} \quad (7)$$

Если в качестве столбца неизвестных взять $X = (T, q)^{tr}$, где индекс « tr » означает транспонирование, то система (7) будет иметь требуемый ОММУ-вид с матрицей A :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\lambda_{33}} \\ -\lambda_{11} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} \right] + C \frac{\partial T}{\partial t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Отметим, что переменные Y в рассматриваемом примере отсутствуют, $B = 0$.

В результате применения формулы матричного усреднения (3) к матрице (8) получаем, что эффективная среда описывается уравнением теплопроводности

$$C^{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{11}^{eff} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} \right) + \lambda_{33}^{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad (9)$$

а усредненные тепловые коэффициенты задаются соотношениями

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda_{33}^{eff}} &\equiv \sum_{i=1}^n \frac{\Theta_i}{\lambda_{33i}}, \quad \lambda_{11}^{eff} = \overline{\lambda_{11}} \equiv \sum_{i=1}^n \Theta_i \lambda_{11i}, \\ C^{eff} &= \overline{C} \equiv \sum_{i=1}^n \Theta_i C_i. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь и далее индекс « eff » относится к материальным параметрам эффективной среды. Формулы (10) хорошо известны в изотропном случае [20], но для их получения мы не решали исходное уравнение (6). Если не преобразовывать уравнение (6) к виду (7), а проводить его прямое усреднение, то получаются правильные формулы для λ_{11}^{eff} и C^{eff} и неправильная для λ_{33}^{eff} .

Если же слои являются цилиндрическими и границы слоев задаются уравнениями $r = r_0, r = r_1, \dots, r = r_n$, где полярный радиус r определяется соотношением $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$, то в качестве столбца X выбираем следующий, $X = (T; r \lambda_{11} \partial T / \partial r)^{tr}$. Заметим, что появившаяся в X величина $r \lambda_{11} \partial T / \partial r$ пропорциональна тепловому потоку через поверхность цилиндра $r = \text{const}$. Тогда матрица A имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{r \lambda_{11}} \\ r \left[C \frac{\partial T}{\partial t} - \lambda_{33} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

В этом случае даже при постоянных в пределах каждого слоя коэффициентах теплопроводности и теплоемкости матрица A зависит от выделенной координаты. Как и выше, матрица $B = 0$. В результате применения формулы (4) и вычисления простейших табличных интегралов получаем значения усредненных величин

$$C^{eff} = \frac{1}{r_n^2 - r_0^2} \sum_{i=1}^n (r_{i+1}^2 - r_i^2) C_i, \quad (12)$$

$$\lambda_{33}^{eff} = \frac{1}{r_n^2 - r_0^2} \sum_{i=1}^n (r_{i+1}^2 - r_i^2) \lambda_{33,i}, \quad (13)$$

$$\frac{1}{\lambda_{11}^{eff}} = \frac{1}{\ln(r_n/r_0)} \sum_{i=1}^n \ln \left(\frac{r_{i+1}}{r_i} \right) \frac{1}{\lambda_{r,i}}. \quad (14)$$

Для цилиндрических слоев эффективные значения теплоемкости и теплопроводности, как следует из формул (12)–(14), зависят не только от их значений в слоях, но и от радиусов слоев.

3. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ МАГНИТОЭЛЕКТРОУПРУГОСТИ

Перейдем к рассмотрению основной задачи — получению эффективных характеристик магнитоэластичной слоистой среды. Уравнения магнитоэластичности при отсутствии объемных сил, электрических зарядов и токов имеют вид [13]

$$\sigma_{ij,j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad D_{i,i} = 0, \quad B_{i,i} = 0, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= c_{ijkl} u_{kl} + e_{kij} \varphi_{,k} + f_{kij} \psi_{,k}, \\ D_k &= e_{kij} u_{ij} - \varepsilon_{kl} \varphi_{,l} - g_{kl} \psi_{,l}, \\ B_k &= f_{kij} u_{ij} - g_{kl} \varphi_{,l} - \mu_{kl} \psi_{,l}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $\{u_i, u_{ij}, \sigma_{ij}, D_i, B_i, \varphi, \psi\}$ — соответственно компоненты вектора смещения, тензоров деформации и напряжения, электрического смещения, магнитной индукции, электрического и магнитного потенциалов. Здесь индекс после запятой означает дифференцирование по соответствующей переменной. Например, $\varphi_{,k} = \partial \varphi / \partial x_k$. Постоянные $\{\rho, c_{ijkl}, e_{kij}, f_{kij}, \varepsilon_{kl}, \mu_{kl}, g_{kl}\}$ обозначают соответственно плотность, упругие, пьезоэлектрические, пьезомагнитные, диэлектрические, магнитные и магнитоэлектрические коэффициенты. В случае трансверсально изотропной среды из перечисленных констант остаются только 18 независимых, которые включают пять упругих постоянных $\{c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{33}, c_{44}\}$, три пьезоэлектрических $\{e_{31}, e_{15}, e_{33}\}$, три пьезомагнитных $\{f_{31}, f_{15}, f_{33}\}$, две диэлектрических проницаемости $\{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{33}\}$, две магнитных проницаемости $\{\mu_{11}, \mu_{33}\}$ и плотность ρ . Здесь мы перешли к двухиндексной записи Фойгта [19]. Тензор деформаций обычным образом определяется через компоненты вектора смещений $U_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2$. Для преобразования уравнений (15), (16) к искомому виду (1) выпишем их в явном виде для трансверсально изотропной среды: вначале основные уравнения,

$$\sigma_{11,1} + \sigma_{12,2} + \sigma_{13,3} = \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}, \quad (17a)$$

$$\sigma_{12,2} + \sigma_{22,2} + \sigma_{23,3} = \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}, \quad (17b)$$

$$\sigma_{13,3} + \sigma_{23,2} + \sigma_{33,3} = \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2}, \quad (17c)$$

$$D_{1,1} + D_{2,2} + D_{3,3} = 0, \quad (17d)$$

$$B_{1,1} + B_{2,2} + B_{3,3} = 0, \quad (17e)$$

а затем определяющие соотношения,

$$\sigma_{11} = c_{11} u_{1,1} + c_{12} u_{2,2} + c_{13} u_{3,3} + e_{31} \varphi_{,3} + f_{31} \psi_{,3}, \quad (18a)$$

$$\sigma_{22} = c_{12} u_{1,1} + c_{11} u_{2,2} + c_{13} u_{3,3} + e_{31} \varphi_{,3} + f_{31} \psi_{,3}, \quad (18b)$$

$$\sigma_{33} = c_{13} u_{1,1} + c_{13} u_{2,2} + c_{33} u_{3,3} + e_{33} \varphi_{,3} + f_{33} \psi_{,3}, \quad (18c)$$

$$\sigma_{23} = c_{44} (u_{2,3} + u_{3,2}) + e_{15} \varphi_{,2} + f_{15} \psi_{,2}, \quad (18d)$$

$$\sigma_{13} = c_{44} (u_{1,3} + u_{3,1}) + e_{15} \varphi_{,1} + f_{15} \psi_{,2}, \quad (18e)$$

$$\sigma_{12} = c_{66} (u_{1,2} + u_{2,1}), \quad (18f)$$

$$D_1 = e_{15} (u_{1,3} + u_{3,1}) - e_{11} \varphi_{,1} - g_{11} \psi_{,1}, \quad (18g)$$

$$D_2 = e_{15} (u_{2,3} + u_{3,2}) - e_{11} \varphi_{,2} - g_{11} \psi_{,2}, \quad (18h)$$

$$D_3 = e_{31} (u_{1,1} + u_{2,2}) + e_{33} u_{3,3} - \varepsilon_{33} \varphi_{,3} - g_{33} \psi_{,3}, \quad (18i)$$

$$B_1 = f_{15} (u_{1,3} + u_{3,1}) - g_{11} \varphi_{,1} - \mu_{11} \psi_{,1}, \quad (18j)$$

$$B_2 = f_{15} (u_{2,3} + u_{3,2}) - g_{11} \varphi_{,2} - \mu_{11} \psi_{,2}, \quad (18k)$$

$$B_3 = f_{31} (u_{1,1} + u_{2,2}) + f_{33} u_{3,3} - g_{33} \varphi_{,3} - \mu_{33} \psi_{,3}, \quad (18l)$$

где $c_{66} = (c_{11} - c_{12})/2$.

На границах между слоями должны выполняться следующие граничные условия [13, 14]:

$$\begin{aligned} [u_i] &= 0, \quad [\sigma_{i3}] = 0, \quad [D_3] = 0, \quad [B_3] = 0, \\ [\varphi] &= 0, \quad [\psi] = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь символ $[u_i]$ означает скачок величины u при переходе через границу. Условия (19) означают наличие жесткого контакта между слоями и могут быть обобщены на случай неидеального контакта с проскальзыванием [16]. Граничные условия на внешних границах не выписываем, так как они не влияют на ход последующих рассуждений.

Процесс применения ОММУ разбивается на три этапа. Первый этап заключается в преобразовании исходных уравнений к виду (1). На втором этапе проводится усреднение полученных уравнений по формулам (3). На третьем этапе осуществляется обратный переход к исходным уравнениям с усредненными коэффициентами. Для перехода от исходного набора уравнений (17), (18) к виду (1) разделим переменные, входящие в формулы (17), (18), на две группы. К первой группе отнесем десять величин: $\{u_i, \sigma_{i3}, D_3, B_3, \varphi, \psi\}$, непрерывных на границах слоев. Вторую группу образуют семь величин: $\{\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}, D_1, D_2, B_1, B_2\}$, которые могут испытывать разрыв на границах. Введем также два столбца неизвестных:

$$\begin{aligned} X &= (u_1, u_2, u_3, \sigma_{13}, \sigma_{23}, \sigma_{33}, D_3, B_3, \varphi, \psi)^{tr}, \\ Y &= (\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}, D_1, D_2, B_1, B_2)^{tr}. \end{aligned} \quad (20)$$

Вначале из системы трех уравнений (18c), (18i) и (18l) выразим производные $\{\partial u_3 / \partial z, \partial \varphi / \partial z, \partial \psi / \partial z\}$. Производные по z от других элементов столбца X не зависят друг от друга и по отдельности легко находятся из оставшихся уравнений (17), (18). Для этого введем матрицы

$$V = \begin{pmatrix} c_{33} & e_{33} & f_{33} \\ e_{33} & -\varepsilon_{33} & -g_{33} \\ f_{33} & -g_{33} & -\mu_{33} \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$L = \begin{pmatrix} -c_{13} & 1 & 0 & 0 \\ -e_{13} & 0 & 1 & 0 \\ -f_{31} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и вычислим по ним матрицу $K = V^{-1}L$. Для элементов матрицы K введем следующие обозначения:

$$K = \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ l_1 & l_2 & l_3 & l_4 \\ m_1 & m_2 & m_3 & m_4 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Заметим, что три последних столбца матрицы K составляют матрицу V^{-1} . В принятых обозначениях для указанных выше производных получаем следующие выражения:

$$\frac{\partial u_3}{\partial z} = k_1(u_{1,1} + u_{2,2}) + k_2\sigma_{33} + k_3D_3 + k_4B_3,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = l_1(u_{1,1} + u_{2,2}) + l_2\sigma_{33} + l_3D_3 + l_4B_3, \quad (23)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = m_1(u_{1,1} + u_{2,2}) + m_2\sigma_{33} + m_3D_3 + m_4B_3.$$

Преобразование оставшихся в (17), (18) уравнений происходит с использованием равенств (23). В результате получаем систему

$$\frac{\partial u_1}{\partial z} = -u_{3,1} + \frac{\sigma_{13}}{c_{44}} - \frac{e_{15}}{c_{44}}\varphi_{,1} - \frac{f_{15}}{c_{44}}\psi_{,1}, \quad (24a)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial z} = -u_{3,2} + \frac{\sigma_{23}}{c_{44}} - \frac{e_{15}}{c_{44}}\varphi_{,2} - \frac{f_{15}}{c_{44}}\psi_{,2}, \quad (24b)$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial z} = k_1(u_{1,1} + u_{2,2}) + k_2\sigma_{33} + k_3D_3 + k_4B_3, \quad (24c)$$

$$\frac{\partial \sigma_{13}}{\partial z} = \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} - (c_{11} + p_1)u_{1,11} - c_{66}u_{1,22} - (c_{12} + c_{66} + p_1)u_{2,12} - p_2\sigma_{33,1} - p_3D_{3,1} - p_4B_{3,1}, \quad (24d)$$

$$\frac{\partial \sigma_{23}}{\partial z} = \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} - (c_{12} + c_{66} + p_1)u_{1,12} - c_{66}u_{2,11} - (c_{11} + p_1)u_{2,22} - p_2\sigma_{33,2} - p_3D_{3,2} - p_4B_{3,2}, \quad (24e)$$

$$\frac{\partial \sigma_{33}}{\partial z} = \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} - \sigma_{13,1} - \sigma_{23,2}, \quad (24f)$$

$$\frac{\partial D_3}{\partial z} = -\frac{e_{15}}{c_{44}}(\sigma_{13,1} + \sigma_{23,2}) + \left(\frac{e_{15}^2}{c_{44}} + \varepsilon_{11}\right) \times (\varphi_{,11} + \varphi_{,22}) + \left(\frac{e_{15}f_{15}}{c_{44}} + g_{11}\right) (\psi_{,11} + \psi_{,22}), \quad (24g)$$

$$\frac{\partial B_3}{\partial z} = -\frac{f_{15}}{c_{44}}(\sigma_{13,1} + \sigma_{23,2}) + \left(\frac{f_{15}e_{15}}{c_{44}} + g_{11}\right) \times (\varphi_{,11} + \varphi_{,22}) + \left(\frac{f_{15}^2}{c_{44}} + \mu_{11}\right) (\psi_{,11} + \psi_{,22}), \quad (24h)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = l_1(u_{1,1} + u_{2,2}) + l_2\sigma_{33} + l_3D_3 + l_4B_3, \quad (24i)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = m_1(u_{1,1} + u_{2,2}) + m_2\sigma_{33} + m_3D_3 + m_4B_3. \quad (24j)$$

Здесь введены обозначения $p_i = c_{13}k_i + e_{31}l_i + f_{31}m_i$ ($i = 1, 2, 3, 4$). Полученные соотношения (24) однозначно определяют матрицу A размером 10×10 , которую мы не выписываем в силу ее громоздкости. Оставшиеся уравнения (17), (18) записываем в виде

$$\sigma_{11} = (c_{11} + p_1)u_{1,1} + (c_{12} + p_1)u_{2,2} + p_2\sigma_{33} + p_3D_3 + p_4B_3, \quad (25a)$$

$$\sigma_{12} = c_{66}(u_{1,2} + u_{2,1}), \quad (25b)$$

$$\sigma_{22} = (c_{11} + p_1)u_{1,1} + (c_{11} + p_1)u_{2,2} + p_2\sigma_{33} + p_3D_3 + p_4B_3, \quad (25c)$$

$$D_1 = \frac{e_{15}}{c_{44}}\sigma_{13} - \left(\frac{e_{15}^2}{c_{44}} + \varepsilon_{11}\right)\varphi_{,1} - \left(\frac{e_{15}f_{15}}{c_{44}} + g_{11}\right)\psi_{,1}, \quad (25d)$$

$$D_2 = \frac{e_{15}}{c_{44}}\sigma_{23} - \left(\frac{e_{15}^2}{c_{44}} + \varepsilon_{11}\right)\varphi_{,2} - \left(\frac{e_{15}f_{15}}{c_{44}} + g_{11}\right)\psi_{,2}, \quad (25e)$$

$$B_1 = \frac{f_{15}}{c_{44}}\sigma_{23} - \left(\frac{e_{15}f_{15}}{c_{44}} + g_{11}\right)\varphi_{,1} - \left(\frac{f_{15}^2}{c_{44}} + \mu_{11}\right)\psi_{,1}, \quad (25f)$$

$$B_2 = \frac{f_{15}}{c_{44}}\sigma_{23} - \left(\frac{e_{15}f_{15}}{c_{44}} + g_{11}\right)\varphi_{,2} - \left(\frac{f_{15}^2}{c_{44}} + \mu_{11}\right)\psi_{,2}. \quad (25g)$$

Матрица B размером 7×7 определяется по коэффициентам в правой части уравнения (25).

Таким образом, первый шаг ОММУ завершен. Система уравнений магнитоэластоупругости (17), (18) записана в виде (1), где матрицы A и B — матрицы соответственно систем (24) и (25). Второй, достаточно простой шаг ОММУ заключается в усреднении матриц A и B по формуле (3). Теперь для получения окончательного результата — материальных коэффициентов эффективной среды — от усредненной системы (24), (25) следует вернуться к стандартной записи уравнений магнитоэластоупругости ви-

да (15), (16) с новыми усредненными коэффициентами. Этот процесс обратен описанному выше и никаких сложностей не вызывает.

Сравнение формул для производных по z , полученных из системы (17), а именно $\{\partial\sigma_{12}/\partial z, \partial\sigma_{23}/\partial z, \partial\sigma_{33}/\partial z, \partial D_3/\partial z, \partial B_3/\partial z\}$, с формулами для других величин, производные которых входят в систему (17), позволяет сделать вывод о том, что и для усредненных величин будет справедлива система, подобная (17), в которой плотность $\rho^{eff} = \bar{\rho}$. Иначе говоря, допустимо прямое усреднение системы (17).

Результат усреднений первых двух строчек матрицы A (или первых двух уравнений (24a), (24b)) записывается в виде

$$\sigma_{13} = C_{44}^{eff}(u_{1,3} + u_{3,1}) + e_{15}^{eff}\varphi_{,1} + f_{15}^{eff}\psi_{,1}, \quad (26a)$$

$$\sigma_{23} = C_{44}^{eff}(u_{2,3} + u_{3,1}) + e_{15}^{eff}\varphi_{,2} + f_{15}^{eff}\psi_{,2}, \quad (26b)$$

где материальные коэффициенты эффективной среды определяются следующим образом:

$$\frac{1}{C_{44}^{eff}} = \overline{\left(\frac{1}{c_{44}}\right)}, \quad e_{15}^{eff} = \overline{\left(\frac{e_{15}}{c_{44}}\right)}C_{44}^{eff}, \quad (27)$$

$$f_{15}^{eff} = \overline{\left(\frac{f_{15}}{c_{44}}\right)}C_{44}^{eff}.$$

Можно проверить, что и последующие уравнения магнитоэлектростроупости для эффективной среды будут иметь такой же вид, что и исходные. Эффективная среда является также трансверсально изотропной и характеризуется 18 параметрами. Вследствие этого, уравнения для эффективной среды выписывать не будем, а укажем только формулы для материальных коэффициентов.

При усреднении коэффициентов в системе (23) (или в уравнениях (24c), (24i) и (24j)) получаем

$$V^{eff} = \left(\overline{V^{-1}}\right)^{-1}, \quad (28)$$

$$\begin{pmatrix} C_{13}^{eff} \\ e_{31}^{eff} \\ f_{31}^{eff} \end{pmatrix} = \overline{V^{-1}} \begin{pmatrix} \overline{k_1} \\ \overline{l_1} \\ \overline{m_1} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Матричные равенства (28), (29) определяют еще девять материальных коэффициентов, среди которых наиболее интересен магнитоэлектрический коэффициент g_{33}^{eff} , который характеризует магнитоэлектрический эффект. Именно этот коэффициент определяет величину вклада в мультикалорический эффект, обусловленный взаимодействием электрического и магнитного полей [21]. Из оставшихся коэффициентов выпишем только три:

$$\varepsilon_{11}^{eff} = \overline{\varepsilon_{11}} + \overline{\left(\frac{e_{15}^2}{c_{44}}\right)} - \overline{\left(\frac{e_{15}}{c_{44}}\right)}e_{15}^{eff}, \quad (30a)$$

$$\mu_{11}^{eff} = \overline{\mu_{11}} + \overline{\left(\frac{f_{15}^2}{c_{44}}\right)} - \overline{\left(\frac{f_{15}}{c_{44}}\right)}f_{15}^{eff}, \quad (30b)$$

$$g_{11}^{eff} = \overline{g_{11}} + \overline{\left(\frac{e_{15}f_{15}}{c_{44}}\right)} - \overline{\left(\frac{e_{15}}{c_{44}}\right)}\overline{\left(\frac{f_{15}}{c_{44}}\right)}(C_{44}^{eff})^2. \quad (30c)$$

Явный вид для коэффициентов $\{c_{11}, c_{12}\}$ не приводим в силу их громоздкости.

Полученные соотношения (27)–(30) позволяют без решения исходной системы уравнений (15), (16) определять параметры эффективной среды. При их нахождении используются операции с матрицами, входящими в уравнения. Описанный метод легко обобщается на случай граничных условий, отличных от (19). Например, можно рассматривать контакты с проскальзыванием на границах [16]. Просто в качестве переменных X следует в этом случае выбирать те, которые непрерывны на границах контакта. Выше мы рассмотрели случай трансверсально изотропной среды, но переход к случаю произвольной анизотропии приводит только к повышению порядка обрабатываемых матриц. Для частных случаев анизотропии слоев (моноклинной, орторомбической, тетрагональной, тригональной, кубической), как нетрудно проверить [16], эффективная среда будет иметь ту же анизотропию, за исключением кубической анизотропии. Такая среда является частным случаем тетрагональной, и эффективная кубическая среда также является тетрагональной.

4. ОБОСНОВАНИЕ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА МАТРИЧНОГО УСРЕДНЕНИЯ

Переменные X непрерывны в любой точке, в том числе и на границе. Значит, столбец X всюду определен. Тогда решение первого матричного уравнения в формуле (1) в слое с номером i может быть представлено в виде

$$X(z) = \exp[A_i(z - z_i)]X(z_i), \quad (31)$$

где $z_i = \sum_{j=1}^{i-1} h_j$, $z_0 = 0$. Уравнение $z = z_i$ описывает нижнюю границу слоя с номером i . Матрично-операторную экспоненту в формуле (31) зададим равенством

$$\begin{aligned} \exp[A_i(z - z_i)] &= \\ &= I + A_i(z - z_i) + \frac{A_i^2(z - z_i)^2}{2!} + \dots, \quad (32) \end{aligned}$$

где I — единичная матрица. Для сходимости ряда (32) необходима ограниченность элементов матрицы A . Числовые величины, входящие в A , естественно, ограничены. Но в матрицу A могут входить производные по времени t и координатам x_1, x_2 . Поэтому требование ограниченности элементов матрицы A , в первую очередь, означает ограниченность указанных производных. Основная идея ОММУ заключается в том, что при малых h ($h_i, |z - z_i|$) можно ограничиться только первыми двумя членами ряда (32). Третье слагаемое в правой части (32) тогда будет оценивать погрешность данного приближения. Например, для гармонических колебаний с частотой ω матрица A из разд. 3 содержит ω^2 . Следовательно, погрешность будет мала при малых частотах, т. е. в длинноволновом приближении.

Как следует из (31), значения переменных X на верхней и нижней границах слоев $X(h)$ и $X(0)$ связаны точным соотношением

$$X(h) = \exp(A_n h_n) \times \exp(A_{n-1} h_{n-1}) \dots \exp(A_1 h_1) X(0). \quad (33)$$

Соотношение (33) представляет собой точную запись решения (1) через произведения матричных экспонент. С практической точки зрения, это соотношение особой ценности не представляет. Если число слоев составляет несколько десятков, то вычисления по формуле (33) требуют большего количества операций, чем стандартные вычислительные схемы. Для практического применения соотношения (33) преобразуем его, используя малость толщины слоев. Учитывая формулу Кэмпбелла – Хаусдорфа для произведения матричных экспонент [22]

$$\exp(A_1) \exp(A_2) = \exp(A_1 + A_2 + [A_1, A_2] + \dots), \quad (34)$$

где $[A_1, A_2] \equiv A_1 A_2 - A_2 A_1$ — коммутатор матриц A_1 и A_2 , произведение матриц в правой части (33) можно приближенно заменить одной экспонентой, в которую войдет бесконечный набор коммутаторов вида $[A_i h_i, A_j h_j] = (A_i A_j - A_j A_i) h_i h_j$ [22]. Пренебрегая указанными коммутаторами (они содержат дополнительные степени h по сравнению с главным слагаемым), получаем приближенное соотношение:

$$X(h) \approx \exp[(A_1 \theta_1 + A_2 \theta_2 + \dots + A_n \theta_n) h] X(0). \quad (35)$$

Соотношение (35) как раз и означает, что эффективная среда определяется первым из соотношений (3). Возникающую при отбрасывании коммутаторов погрешность δ можно оценить следующим образом:

$$\delta = \sum_{i=1}^n \|A_i^2\| h_i^2 + \sum_{i < j} \|[A_i, A_j]\| h_i h_j, \quad (36)$$

где $\|A\|$ — норма оператора в каком-либо нормированном пространстве (например, L^2 [23]). Для применимости метода ОММУ необходима малость δ . С физической точки зрения, как уже говорилось выше во Введении, для этого необходима малость длин, характеризующих систему, по сравнению с ее толщиной h . Следовательно, для каждой частоты существует такое значение h^* , при котором для всех толщин, меньших h^* , исходная слоистая система эквивалентна эффективной однородной среде.

При усреднении второго набора уравнений в (2) используем более грубое приближение для X , когда экспонента в (31) заменяется только на первый член ряда (32). Возникающая при этом погрешность имеет порядок $O(h)$ и стремится к нулю при $h \rightarrow 0$. Для нестационарных задач с гармонической зависимостью от времени вида $\exp(i\omega t)$ с частотой ω возникает дополнительная погрешность пропорциональная $\omega h/v$, где v — характерная скорость распространения волн в системе. Требование малости этой погрешности накладывает ограничение на применимость ОММУ.

Выводы о замене системы слоев на один эффективный слой справедливы только при рассмотрении системы в целом. Физические характеристики системы слоев и эффективного слоя могут различаться внутри слоев. Совпадают только интегральные характеристики. Например, масса системы, заключенной между нулем и z , имеет вид

$$\int_0^z \rho(z) dz, \quad \int_0^z \bar{\rho}(z) dz \quad (37)$$

соответственно для системы слоев и для эффективного слоя. Значения (37) совпадают при $z = h$. И средние значения электрического и магнитного полей в системе связаны посредством эффективных магнитоэлектрических коэффициентов g_{11}^{eff} и g_{33}^{eff} .

Перейдем теперь к исследованию случая, когда матрицы A и B являются переменными, т. е. матрица A меняется (скачкообразно) от слоя к слою и, кроме того, меняется в пределах каждого слоя. В рассматриваемом общем случае матрица $A = A_i(z)$ не является постоянной для произвольного слоя с номером i , а зависит еще и от координаты z . Воспользуемся тем обстоятельством, что для тонких слоев изменение A и B в пределах одного слоя является малым. Это позволяет записать приближенное решение в слое i в виде формального ряда

$$X(z) = \left[I + \int_{x_i}^x A_i(t) dt + \frac{1}{2} \left(\int_{x_i}^x A_i(t) dt \right)^2 + \dots \right] X(z_i). \quad (38)$$

Если пренебречь в (38) квадратичным слагаемым, то уравнения для определения эффективных матриц A^{eff} и B^{eff} записываются в этом случае в виде (4), (5). В приведенных выше примерах материальные постоянные в пределах каждого слоя считались постоянными, и зависимость матриц от z задавалась параметрами выбранной системы координат. Для цилиндрической и сферической систем координат интегралы в (4), (5) содержат известные функции и легко вычисляются. Полученные формулы позволяют достаточно просто находить физические характеристики эффективной среды, эквивалентной данному набору тонких слоев, если свойства среды слабо меняются поперек слоя.

Случай периодической среды, когда исходный набор слоев периодически повторяется, так что $A(z+h) = A(z)$, $B(z+h) = B(z)$, приводит к аналогичным формулам [16]: свойства эффективной периодической среды также определяются матрицами \bar{A} и \bar{B} такими же, что и в формулах (3).

Предлагаемый подход не требует обязательности вещественности всех коэффициентов. В частности, диэлектрическую проницаемость можно считать комплексной величиной, включив в нее удельную проводимость и зависимость от частоты. Для слоистых сред точность ОММУ возрастает при уменьшении толщины слоя. В случае включений произвольной формы погрешность ОММУ не стремится к нулю даже при уменьшении размера включений. По-видимому, в этом случае для получения эффективных характеристик следует использовать другие методы, например, метод Максвелла – Гарнетта [24].

5. ПРИМЕР ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДА

Для иллюстрации эффективности разработанного подхода мы провели расчеты эффективных характеристик по формуле (28) для двухслойной и трехслойной систем. Зависимости элементов матрицы \bar{V} от приведенной толщины слоев представлены соответственно на рис. 1 и рис. 2. В качестве материалов рассмотрены BaTiO_3 — для первого слоя с толщиной h_1 , CoFe_2O_4 — для второго слоя с толщиной h_2

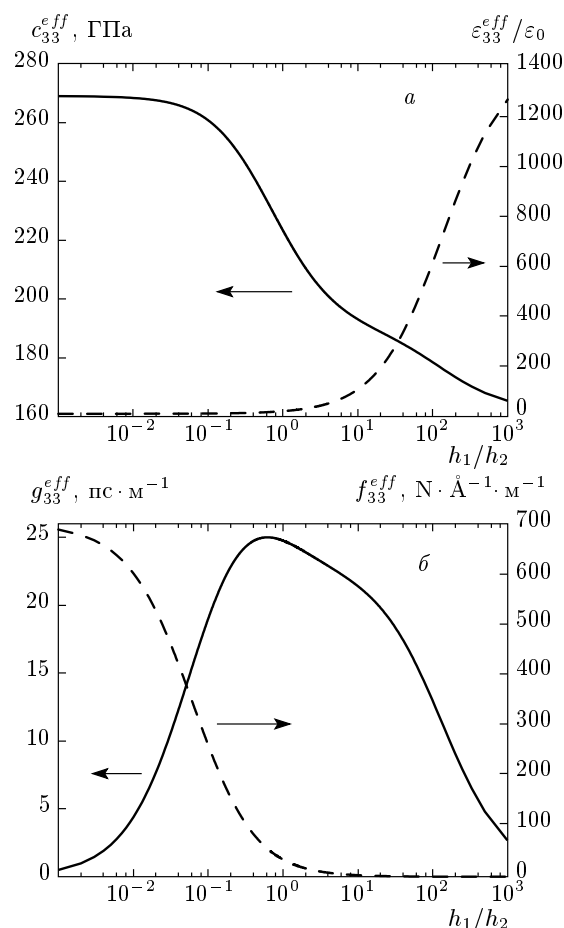


Рис. 1. Зависимость эффективных характеристик двухслойной структуры $\{\text{BaTiO}_3, \text{CoFe}_2\text{O}_4\}$ от отношения толщин слоев: a — относительная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_{33}^{eff}/\varepsilon_0$ и модуль упругости c_{33}^{eff} , b — магнитоэлектрический коэффициент g_{33}^{eff} и пьезомагнитный модуль f_{33}^{eff}

и PZT-4 — для третьего слоя с толщиной h_3 . Значения материальных постоянных были взяты из работ [14, 25]. Следует отметить, что зависимость от толщины третьего слоя построена при отношении толщины первых двух, удовлетворяющих условию максимальности магнитоэлектрического коэффициента g_{33}^{eff} . Как видно на рис. 1, для двухслойной структуры зависимость от толщины второго слоя является монотонной для коэффициентов ε_{33}^{eff} , f_{33}^{eff} и c_{33}^{eff} , а магнитоэлектрический коэффициент имеет четко выраженный максимум. В свою очередь, для трехслойной системы максимум при определенной толщине третьего слоя имеется также и для коэффициента c_{33}^{eff} .

Как и следовало ожидать, в случае, когда тол-

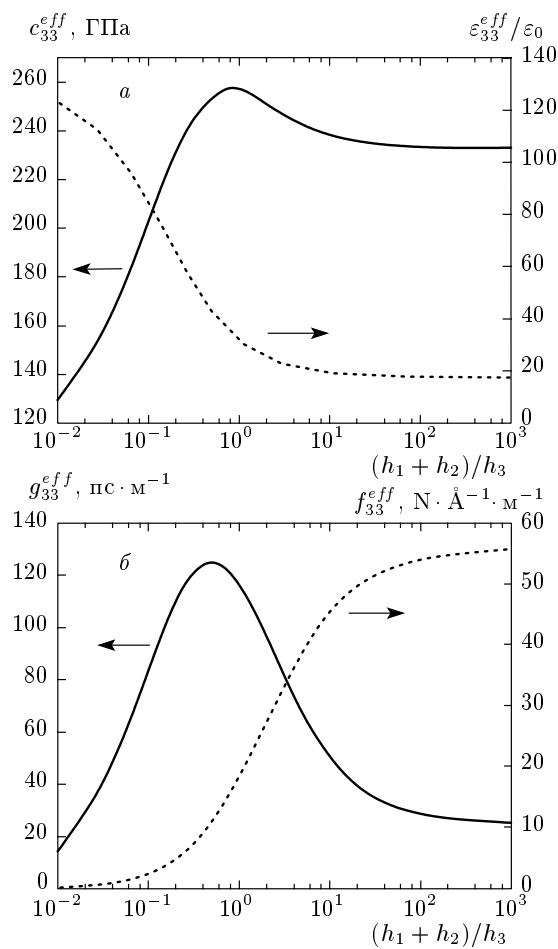


Рис. 2. Зависимость эффективных характеристик трехслойной среды {BaTiO₃, CoFe₂O₄, PZT-4} от относительной толщины третьего слоя: *a* — относительная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_{33}^{eff}/\epsilon_0$ и модуль упругости c_{33}^{eff} , *б* — магнитоэлектрический коэффициент g_{33}^{eff} и пьезомагнитный модуль f_{33}^{eff}

щина одного слоя стремится к нулю, эффективные коэффициенты для усредненной среды стремятся к соответствующим значениям для коэффициентов второго слоя. Напомним, что для получения искомым зависимостей для материальных параметров усредненной среды нам, в отличие от авторов работ [11, 13], не пришлось решать сложную систему дифференциальных уравнений при непростых граничных условиях на границах слоев. Например, магнитоэлектрический коэффициент g_{33}^{eff} — наиболее интересный с точки зрения приложений — получается в результате простого усреднения матрицы V^{-1} (28). Этот коэффициент определяется только величинами, входящими в матрицу V (21), и не зависит от других материальных констант. Кроме того,

в рассматриваемом приближении усредненные величины оказываются не зависящими от порядка следования слоев. И при наличии нескольких слоев из одного материала в эффективные характеристики войдет только суммарная толщина этих слоев.

6. ВЫВОДЫ

Слоистая структура из n слоев мультиферроиков суммарной толщины h ведет себя подобно эффективному слою той же толщины. Для определения материальных коэффициентов этого слоя при малых h предложено использовать обобщенный матричный метод усреднения, который не требует решений уравнений электромагнитоупругости. Искомые коэффициенты получаются в результате простейших операций над матрицами, характеризующими свойства отдельных слоев. От числа слоев количество вычислений зависит слабо. Полученные в работе формулы (27)–(30) позволяют определять, например, зависимость магнитоэлектрических коэффициентов g_{11}^{eff} и g_{33}^{eff} от относительной толщины слоев, что важно при создании искусственных мультиферроиков. Для простоты изложения рассмотрен случай трансверсально изотропных слоев, но ОММУ применим и для слоев с произвольной анизотропией.

Предложенный в работе метод основывался на линейных уравнениях. Поскольку любое нелинейное уравнение может быть линеаризовано вблизи фиксированных значений параметра нелинейности, метод применим и для нелинейных уравнений. Например, для сегнетоэлектрических слоев зависимость диэлектрической проницаемости от напряженности электрического поля является нелинейной. В результате усреднения получаем эффективную среду с нелинейной зависимостью от поля уже всех коэффициентов, входящих в матрицу V .

Работа выполнена при финансовой поддержке правительства РФ (грант № 074-U01), а также Технологического университета г. Брно (SIX project CZ.1.05/2.1.00/03.0072; CZ.1.07/2.3.00/30.0039).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Fiebig, J. Phys. D Appl. Phys. **38**, R123 (2005).
2. W. Eerenstein, N. Mathur, and J. F. Scott, Nature **442**, 759 (2006).

3. R. Ramesh and N. A. Spaldin, *Nat. Mater.* **6**, 21 (2007).
4. J. Scott and R. Blinc, *J. Phys.–Condens. Mat.* **23**, 299401 (2011).
5. А. П. Пятаков, А. К. Звездин, *УФН* **182**, 593 (2012).
6. A. Starkov, O. Pakhomov, and I. Starkov, *Ferroelectrics* **430**, 108114 (2012).
7. Д. Н. Астров, *ЖЭТФ* **38**, 984 (1960).
8. G. T. Rado, J. M. Ferrari, and W. G. Maisch, *Phys. Rev. B* **29**, 4041 (1984).
9. G. Nénert and T. Palstra, *Phys. Rev. B* **76**, 024415 (2007).
10. М. И. Бичурин, В. М. Петров, Д. А. Филиппов, Г. Сринивасан, С. В. Нан, *Магнитоэлектрический эффект в композиционных материалах*, Великий Новгород (2005).
11. C.-W. Nan, M. Bichurin, S. Dong, D. Viehland et al., *J. Appl. Phys.* **103**, 031101 (2008).
12. J. Ma, J. Hu, Z. Li, and C.-W. Nan, *Adv. Mater.* **23**, 1062 (2011).
13. M. I. Bichurin and D. Viehland, *Magnetoelectricity in Composites*, Pan Stanford Pub., Singapore (2011).
14. E. Pan, *J. Appl. Mech.–T ASME* **68**, 608 (2001).
15. L. Molotkov, *J. Math. Sci.* **62**, 3103 (1992).
16. Л. А. Молотков, *Исследование распространения волн в пористых и трещиноватых средах на основе эффективных моделей Био и слоистых сред*, Наука, Санкт-Петербург (2001).
17. I. Starkov and A. Starkov, *Int. J. Refrig.* **37**, 249 (2014).
18. H. Wang, E. Pan, and W. Chen, *J. Appl. Phys.* **107**, 093514 (2010).
19. J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*, Oxford University Press, New York (1985).
20. Г. Н. Дульнев, *Тепло- и массообмен в радиоэлектронной аппаратуре*, Высшая школа, Москва (1984), с. 247.
21. А. С. Старков, И. А. Старков, *ЖЭТФ* **148**, 297 (2014).
22. V. E. Nazaïkinskii, V. E. Shatalov, and B. I. U. Sternin, *Methods of Noncommutative Analysis: Theory and Applications*, Walter de Gruyter, Berlin (1996).
23. М. Ш. Бирман, Т. А. Суслина, *Алгебра и анализ* **15**, 1 (2003).
24. J. C. Maxwell Garnett, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **203**, 385 (1904).
25. F. Ramirez, P. R. Heyliger, and E. Pan, *J. Sound. Vibr.* **292**, 626 (2006).