

ТЕХНИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПОСТРОЕНИЯ СИСТЕМ ОПТИЧЕСКИХ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ

Солитоны и солитонные линии связи

Термин «солитон» относится к 1964 г.

Особенность: такая волна при своём движении не разрушается при столкновении с другой волной.

Существование **оптических солитонов** было доказано В.Захаровым и А.Шабатом в 1971 г. в результате решения НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ Шредингера.

ОПТИЧЕСКИЙ СОЛИТОН – это волновой пакет специальной формы, распространяющийся с оптическом материале (среде), для которой характерно действие нелинейных и дисперсионных эффектов в области АНОМАЛЬНОЙ дисперсии.

Форма СОЛИТОНА сохраняется при их столкновении друг с другом. После столкновения восстанавливается **форма, амплитуда, скорость**. Эти объекты демонстрируют свойства, характерные для ЧАСТИЦ.

Основной технический фактор, ограничивающий длину ВОЛС – уширение импульса и влияние нелинейных оптических эффектов (при повышенной входной мощности).

Обычная длина участка регенерации – 40...80 км.

Если повысить входную мощность сигнала → сильные искажения со стороны нелинейных эффектов

Уравнение Шредингера имеет решение для СОЛИТОНА (потенциальная функция):

СОЛИТОН 1-го порядка: $U(\xi, \tau) = \operatorname{sech}(\tau) \cdot \exp\left[\frac{j\xi}{2}\right]$ ξ - параметр координаты,
 τ - параметр времени.

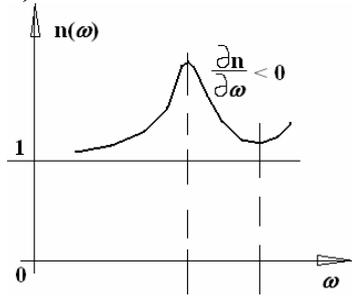
Гиперболическая функция $\operatorname{sech} h(\tau) = \frac{1}{\operatorname{sh}(\tau)} = \frac{2}{e^{\tau} - e^{-\tau}}$.

Тогда: $U(\xi, \tau) = \frac{2}{e^{\tau} - e^{-j\tau}} \cdot e^{\frac{j\xi}{2}}$

Начальная форма импульса должна быть: $U(0, \tau) = -\operatorname{sech}(\tau)$.

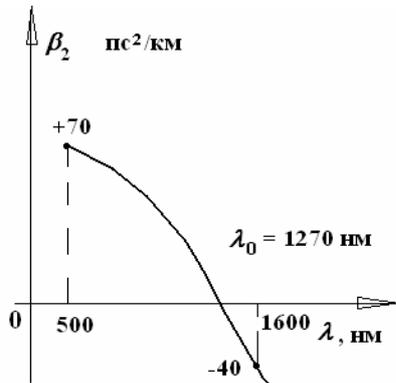
Световой импульс распространяется как СОЛИТОН, если начальный импульс имеет:

- 1) гауссову форму,
- 2) в среде имеет место отрицательная хроматическая дисперсия,
- 3) отсутствует нелинейная частотная модуляция (слабо выражена модуляционная неустойчивость),
- 4) мощность на входе не меньше мощности для СОЛИТОНА порядка N: $P_{вх} > N$



Относительная пиковая мощность СОЛИТОНА на ед. длины: $P_M = \frac{|\beta_2|}{\gamma \cdot \tau_0^2}$

$\gamma = \frac{\Delta\omega}{\omega}$ - расстройка спектра излучения, τ_0 - начальная длительность солитонного импульса,
 β_2 - характеристика хроматической дисперсии ($\text{пс}^2/\text{км}$), τ_0 - длительность начального солитона.



Для $\lambda = 500 \dots 1600$ нм $\beta_2 = +70 \dots -40$ ($\text{пс}^2/\text{км}$).

Начальная форма солитона $N^{\text{го}}$ порядка имеет вид:
 $U(0, \tau) = N \cdot \text{sech}(\tau)$

Пиковая мощность для генерации солитона $N^{\text{го}}$ порядка является в N^2 раз большей, чем необходимая для генерации солитона 1-го порядка.

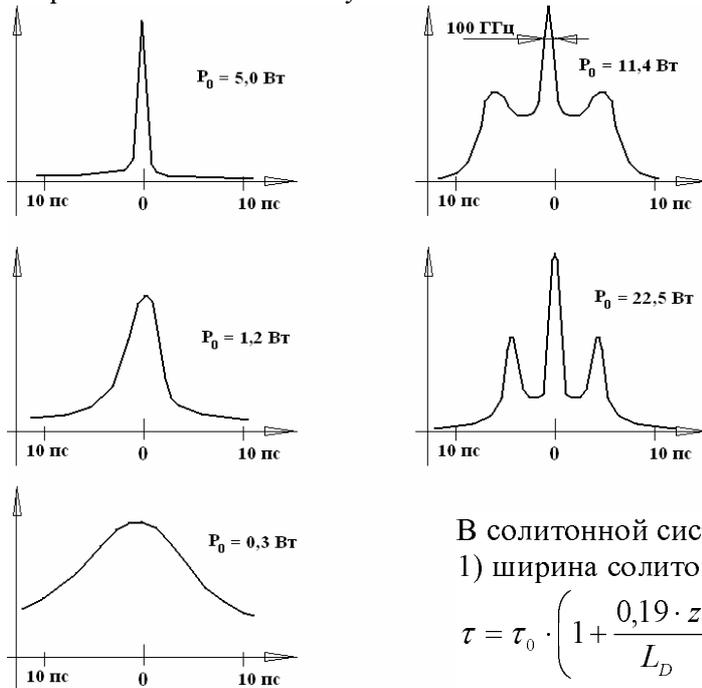
Порядок солитона N:	1	2	3	4	5
Пиковая мощность N^2 :	1	4	9	16	25

Вывод: чем более высокого порядка солитон надо воссоздать, тем более высокую мощность надо вкачать в световодную систему.

Солитон кроме того обладает свойством изменять свою форму по периодическому закону. Та длина, после прохождения которой солитон полностью изменяет свою форму до полного её восстановления (в первоначальное состояние) называется ПЕРИОДОМ СОЛИТОНА.

Обозначается L_D . $L_D = \frac{\tau_0^2}{\beta_2}$

Формы солитонных импульсов в зависимости от пиковой мощности:



В солитонной системе передачи –

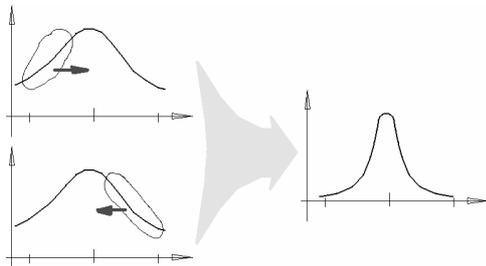
1) ширина солитона растёт с расстоянием z ,

$$\tau = \tau_0 \cdot \left(1 + \frac{0,19 \cdot z}{L_D} \right)$$

2) его амплитуда убывает экспоненциально: $A = A_0 \cdot e^{-\alpha z}$.

Потерю мощности солитонов обычно компенсируют волоконно-оптическими усилителями.

После усиления солитонов (увеличения их амплитуды) происходит СЖАТИЕ солитона во временной области, т.е. укорочение его длительности.



Варианты сжатия: 1) замедление переднего фронта,
2) ускорение заднего фронта.

Кроме того дополнительно для сжатия солитонного импульса используются следующие устройства:

- 1) волоконно-решётчатые компрессоры (для $\lambda < \lambda_0$),
- 2) компрессоры, построенные на эффекте «многосолитонного» сжатия (для $\lambda > \lambda_0$).

Эмпирические соотношения:

$$K_{сж} \approx 4,1 \cdot N, \quad \text{длина сжатия: } L_{сжс} = L_{D,N} \cdot \left(\frac{0,32}{N} + \frac{1,1}{N^2} \right)$$

Отсюда видно, что для солитонов порядков $N = 2, 3$ возможно сжатие в 8...12 раз !

Последовательное использование солитонных компрессоров позволяет получить $K_{сж}$ до 5000 ! (для длины волны **1310 нм**).

Области применения солитонов:

- Создание солитонных лазеров,
- Разработка методов сжатия обычных несолитонных импульсов,
- Создание солитонных оптоволоконных линий связи (СОЛС).

Одной из трудностей на пути создания СОЛС – нежелательное взаимодействие **подряд идущих солитонов**, что приводит к их разрушению с появлением ошибок в линиях связи.

ОПЫТНЫЕ ОБРАЗЦЫ СОЛИТОННЫХ ЛИНИЙ СВЯЗИ:

- 1) Длительность солитонного импульса $\tau_0 = 2 \dots 3$ пс. Применение солитонов позволило БЕЗ КОМПЕНСАЦИИ ИХ ВЗАИМНОГО влияния и разрушения достичь битовой скорости STM-256 (40 Гбит/с).
- 2) Использование не равного нулю сдвига фаз между соседними солитонами $\Delta\phi \neq 0$ для частичной компенсации их взаимодействия позволило построить сеть уровня OC-1536 (80 Гбит/с).
- 3) Использование ортогонально-поляризованных солитонов для компенсации их взаимодействия позволило построить сеть уровня STM-1024 (160 Гбит/с).

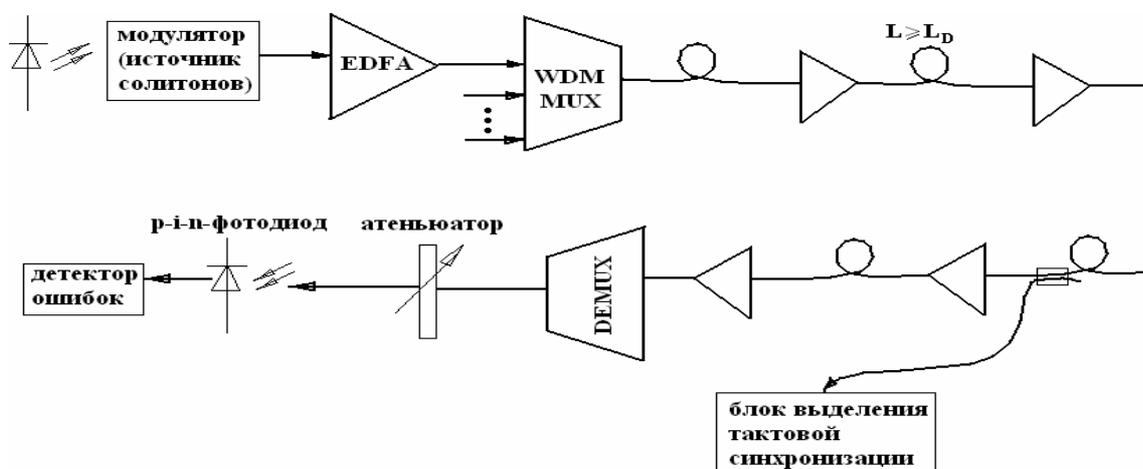
ПРИМЕРЫ СОЛИТОННЫХ ЛИНИЙ СВЯЗИ (СЛС)

А) Топология: «точка - точка».

Б) Важное техническое требование: использование волоконно-оптических усилителей от непрерывно-работающих лазеров.

В) Использование волокон с отрицательной хроматической дисперсией $\beta_2 = -20 \dots -2$ (пс²/км).

Г) Типичная блок-схема СЛС:



Технические трудности и ограничения:

- 1) Случайный шум когерентного усиления (эффект Гордона – Хауэса),
- 2) Аккумуляция усиленного спонтанного излучения ВОУ,
- 3) Солитон-солитонные взаимодействия, приводящие к разрушению импульсов,
- 4) Значительные нелинейные искажения из-за высокой пиковой мощности солитонов.

Направления снижения «солитон-солитонных» взаимодействий:

Уменьшение длительности импульса, излучаемого лазером.

Если информационный импульс имеет длительность $(2,7...3) \cdot 10^{-12}$ с на битовой скорости **160 Гбит/с**, то длительность лазерных импульсов не должна превышать: $10^{-14}...10^{-16}$ с.

С переходом к фемтосекундным импульсам длительностью до 10^{-18} с информационный импульс может составлять **0,4 пс**, и можно использовать битовую скорость до **320 Гбит/с**.

ПРЕИМУЩЕСТВА СОЛИТОННЫХ ЛИНИЙ СВЯЗИ:

Перспектива значительного увеличения длины регенерационного участка.

В реализованной опытной СЛС усилители EDFA были установлены через каждые **50 км**. Линия была замкнута в кольцо. Была осуществлена передача импульсного сигнала **БЕЗ ЕДИНОЙ БИТОВОЙ ОШИБКИ** на длине (при циркуляции по кругу) **180 млн. км. !!!!** Это говорит о том, что предела длины регенерационного участка для СЛС не существует.

Для построения СЛС используют волокна типа NZDSF с отрицательной ненулевой дисперсией. Могут использоваться участки волокон с длинами L_i и дисперсией β_i . Но если суммарное значение дисперсии $\beta_{\text{сум}} < 0$ и дополнительно: $L_{D,i} > \sum_1^N L_i$, то такая оптическая линия может быть использована для передачи солитонов.

Средняя хроматическая дисперсия должна быть подсчитана: $\beta_{cp} = \frac{\sum_1^N L_i \cdot \beta_i}{\sum_1^N L_i}$

Открытые оптические линии связи (ООЛС)

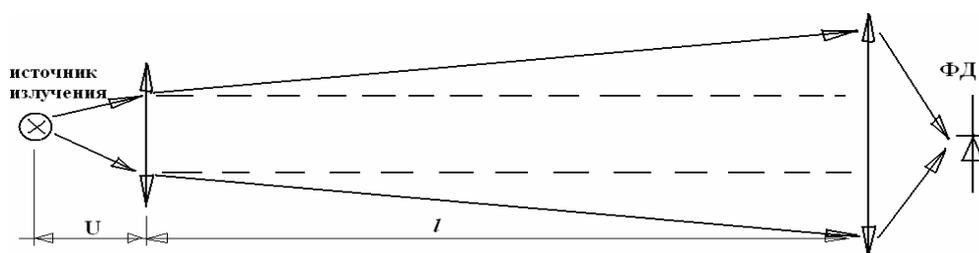
Достоинства ООЛС по отношению к ВОЛС:

- 1) Связь с подвижными объектами.
- 2) Связь на короткие расстояния, где трудно (экономически не целесообразно) строить ВОЛС.

Технические сложности в реализации ООЛС:

- 1) Случайное изменение атмосферной прозрачности – туман, снег....

ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ООЛС:



f – фокусное расстояние, то длина между объектами связи $l \gg f$,

по закону «тонкой» линзы: $\frac{1}{U} = \frac{1}{f} - \frac{1}{l} \approx \frac{1}{l}$

Площадь изображения: $A_{IM} = \frac{A_s \cdot l^2}{U^2} \approx \frac{A_s \cdot l^2}{f^2}$, здесь A_s – площадь светоизлучающей поверхности.

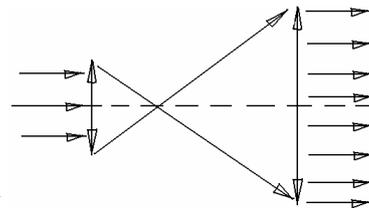
1) Мощность излучения, собираемая линзой передатчика: $\Phi_T = \frac{I_0 \cdot A_T}{U^2} \approx \frac{I_0 \cdot A_T}{f^2}$.

Здесь A_T – эффективная апертура источника излучения, I_0 – мощность источника.

2) Мощность излучения, собираемая линзой приёмника:

$$\Phi_R = \Phi_T \cdot \frac{A_R}{A_{IM}} = \Phi_T \cdot \frac{A_R}{A_{IM}} \cdot \left(\frac{f}{l}\right)^2 = \frac{I_0}{l^2} \cdot \frac{A_T A_R}{A_s} = \frac{L \cdot A_T A_R}{l^2}.$$

Здесь: A_R – эффективная апертура приёмника, $L = I_0/A_R$ – энергетическая яркость источника.



Для снижения относительного значения дифракционной расходимости светового пучка используют РАСШИРИТЕЛИ ПУЧКА:

ПРИМЕР РАСЧЁТА ОТКРЫТОЙ СИСТЕМЫ СВЯЗИ

Пусть используется светодиод с яркостью $L = 0,1 \text{ Вт/мм}^2$ и пусть $A_s = A_T = 10^{-3} \text{ м}^2$.

На расстоянии 1 км мощность излучения, поступающая на ФД, окажется раной:
 $\Phi_R = 10^{-7} \text{ Вт} = 100 \text{ нВт}$.

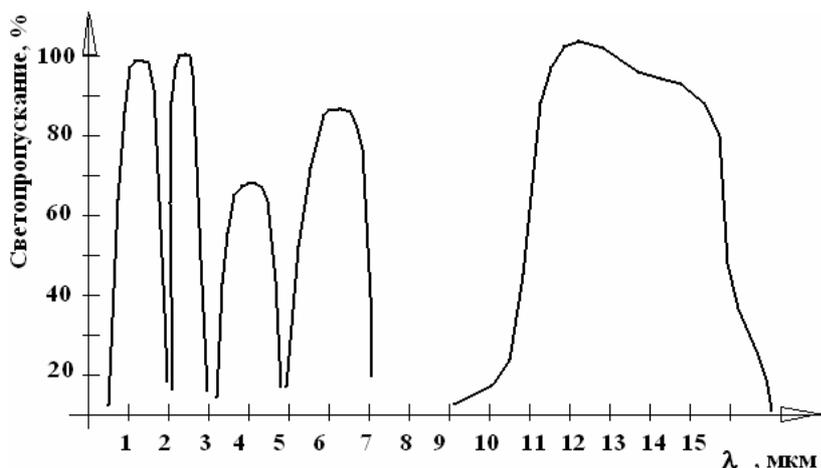
Из-за следующих факторов происходит доп. снижение мощности:

- 1) Затухание в атмосфере: из-за а) рассеяния Рэлея, и б) рассеяния Ми, в) потери на резонансах,
- 2) Дифракционная расходимость,
- 3) Аберрация, рефракция и мерцание оптического изображения.

Имеет место реальная дифракционная картина – *в виде системы тёмных и светлых концентрических колец.*

Источник резонансного поглощения: - водяной пар,
- углекислый газ.

Окна прозрачности атмосферы: 1,5...1,8 мкм; 2...2,5 мкм; 3...4 мкм и 8...14 мкм.



$$d_{\min} = \frac{l}{U} \cdot d_s < \frac{1,22 \cdot \lambda l}{d_T},$$

d_T – диаметр светлого пятна ситочника,

d_s – диаметр поля излучения источника.

$$d_s = \frac{1,22 \cdot U l}{d_T} \approx \frac{1,22 \cdot f \lambda}{d_T}$$

Тогда мощность в районе приёмника имеет вид: $\Phi_R = \frac{\Phi_T \cdot A_T}{\lambda^2} \cdot \frac{A_R}{l^2},$

Φ_T – полная излучённая мощность.

Достаточно важным является требование о МАЛОЙ РАСХОДИМОСТИ (меньше 0,1 мрад). Это можно достичь при высокой стабильности механических элементов системы.

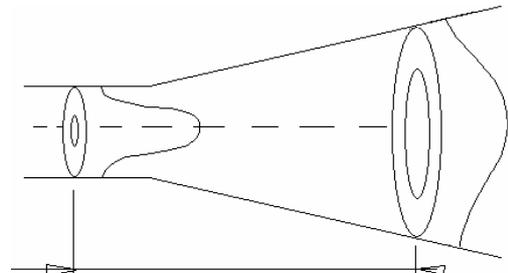
Пусть с учётом данного требования распределение интенсивности в ближней зоне апертуры источника имеет вид:

$$P(r|_{x=0}, 0) = P_0 \cdot e^{-\left(\frac{r}{r_0}\right)^2}$$

Тогда в плоскости при $z = l$ для $\left(l \gg \frac{\pi r_0^2}{\lambda}\right)$ распределение интенсивности будет иметь вид:

$$P(r, 0) = \left(\frac{\pi r_0^2}{\lambda l}\right) \cdot \exp\left[-\left(\frac{\pi r_0 r}{\lambda l}\right)^2\right]$$

Условие малой апертуры означает: $r_R \gg \frac{\lambda l}{\pi_0}$, где $A_R = \pi \cdot r_R^2$, то $\exp\left[-\left(\frac{\pi r_0 r}{\lambda l}\right)^2\right] \approx 1$, и



$$\Phi_R = \left(\frac{\pi r_0^2}{\lambda l} \right) \cdot P_0 \cdot A_R \cong \frac{\pi r_0^2}{(\lambda l)^2} \cdot \Phi_T \cdot A_R.$$

ИСТОЧНИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ СВЯЗИ

- 1) Лазеры на неодимовом стекле Nd^{3+} , с накачкой от криптоновых или галогеновых ламп.
- 2) Газовые лазеры CO_2 , He-Ne,
- 3) Полупроводниковые лазеры инфракрасного диапазона.

ФОТОПРИЁМНИКИ ДЛЯ ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ СВЯЗИ

- 1) Фотоэлектрические умножители, построенные на основе использования внешнего фотоэффекта.

Материал: **InSb** – с длиной волны до 6 мкм,

Cd_xHg_{1-x}, $x = 0,2$ для $\mathcal{E}_\phi = 0,1$ эВ (до 10 мкм).

БАЗОВЫЕ ПРИНЦИПЫ ОБРАБОТКИ СИГНАЛА В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ СВЯЗИ

Гетеродинное детектирование.

- 1) Напряжённость передаваемого электромагнитного поля: $E_R(t) = \hat{E}_R \cdot \cos(\omega_R t + \varphi_R)$

- 2) Поле гетеродина: $E_L(t) = \hat{E}_L \cdot \cos(\omega_L t)$.

В случае амплитудной модуляции: $\hat{E}_R = \hat{E}_{R0} \cdot (1 + f(t))$

В случае фазовой модуляции: $\varphi_R = \varphi_{R0} \cdot (1 + f(t))$.

Значение тока принятого сигнала имеет вид:

$i(t) = \alpha R A (E_R(t) + E_L(t))^2$ или после преобразований:

$$i(t) = RA(P_R + P_L) + \alpha RA \cdot \left[\left(\frac{\hat{E}_R^2}{2} \right) \cdot \cos(2\omega_R t + \varphi_R) + \left(\frac{\hat{E}_L^2}{2} \right) \cdot \cos(2\omega_L t) + \right. \\ \left. + 2\hat{E}_R \cdot \hat{E}_L \cdot (\cos(\omega_R t + \omega_L t + \varphi_R) + \cos(\omega_R t - \omega_L t + \varphi_R)) \right].$$

Здесь суммарная частота $\omega_R + \omega_L$,
разностная частота $\omega_R - \omega_L$

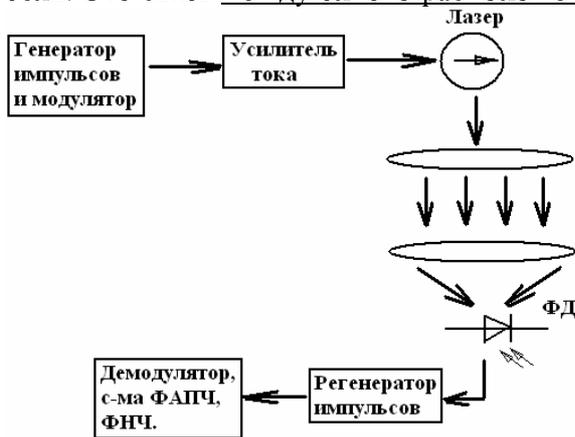
$$\frac{1}{\alpha} = \sqrt{\frac{\mu_r \mu_0}{\varepsilon_r \varepsilon_0}}, \quad R = \frac{\eta e \lambda}{hc} - \text{чувствительность фотодиода,} \quad A - \text{площадь излучательной поверхности ФД.}$$

С использованием гетеродинирования достигаются лучшие характеристики по отношению к квантовому пределу детектирования:

$$K^2 = \frac{\eta \cdot \Phi_R}{h \cdot \Delta f \cdot f}$$

ПРИМЕРЫ ОТКРЫТЫХ ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ СВЯЗИ

1) Наземные ООЛС. Необходимость обусловлена сложностью прокладки оптоволоконного кабеля. Это связь между близко расположенными зданиями, внутри зданий.



2) Космические ООЛС. Связь между подвижными объектами в космосе.

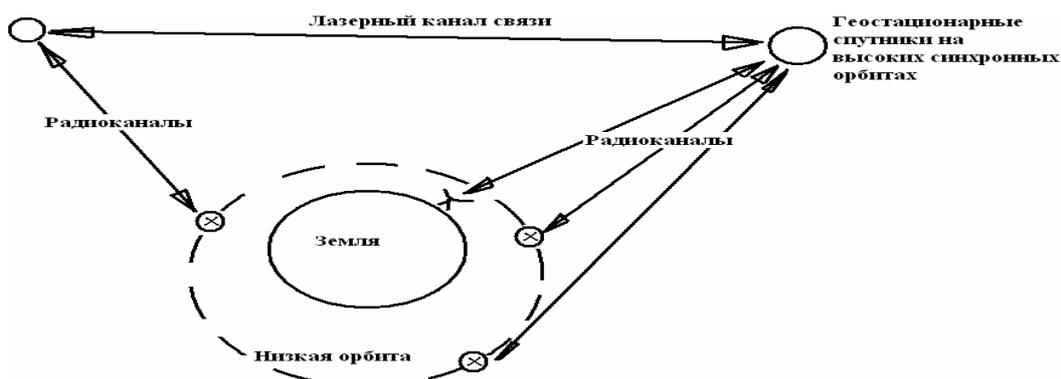
Реальная система построена сотрудниками лаб. НАСА Мс. Elroy J.H. в 1977 г.

Использовался CO_2 -лазер.

Из-за движения спутников имеет место доплеровский сдвиг частоты:

$$\Delta f = f_1 - f_2 = f_2 \cdot \frac{v}{c} \cong \frac{v}{\lambda}$$

Для $v = 8 \text{ км/с}$ и $\lambda = 10,6 \text{ мкм}$ $\Delta f = 755 \text{ МГц}$.



ИНЖЕНЕРНЫЙ РАСЧЁТ МОЩНОСТИ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ СВЯЗИ

1) Мощность передатчика	1 Вт	+ 30 дБм
2) Относительная мощность потерь на трассе	$\left(\frac{\lambda}{4\pi d}\right)^2$	- 275 дБм
3) Относительная мощность дополнительных оптических потерь		- 6 дБм
4) Коэффициент усиления излучающей системы передатчика	$\frac{4\pi \cdot A_T}{\lambda^2}$	+ 92 дБ
5) Коэффициент усиления принимающей системы	$\frac{4\pi \cdot A_R}{\lambda^2}$	+ 92 дБ
6) Оценочное значение полных потерь:		- 97 дБм
7) Итоговая принимаемая мощность:		- 67 дБм

ЛЕКЦИЯ 13.

КВАНТОВЫЙ ПЕРЕХОД, ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ НЕКОТОРЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ Шредингера.

ПЕРЕХОДЫ ПОЛОСЧАТОГО СПЕКТРА (УФ, видимый, ИФ, СВЧ-диапазоны)

Виды квантовых переходов:

- 1) Излучательные (система излучает или поглощает квант электромагнитного поля),
- 2) Безизлучательные (происходит изменение во взаимодействии частиц вещества):
 - 2.1. нагрев (фононы),
 - 2.2. увеличение кинетической энергии частиц (появление быстро движущихся частиц).

Для молекул:

- 3) Переходы между колебательными уровнями,
- 4) Переходы между вращательными уровнями.

Можно говорить об электронно-колебательно-вращательном спектре.

Для сложных молекул:

- 5) Переходы между различными модами колебаний.
- 6) Переходы между уровнями «тонкой структуры» - между вырожденными уровнями.

Условие возникновения линейчатого спектра – при переходе между уровнями.

Условие для возникновения полосчатого спектра – в случае перехода между уровнями и зонами (или между зонами).

СПЛОШНОЙ СПЕКТР – если переход происходит между дискретным уровнем (зоной) и непрерывным энергетическим состоянием, лежащем выше энергии ионизации (для атомов) или энергии диссоциации (для молекул).

- 7) Дипольные переходы – с изменением электрических свойств молекул.
- 8) Магнитные переходы – с изменением магнитных свойств молекул.

КВАНТОВЫЕ ПРАВИЛА ОТБОРА

В квантовой физике есть понятие «ВЕЛИЧИНА». **Величина** – это совокупная (интегральная) мера квантового состояния частицы (системы частиц).

Величина – это значение **Магнитного момента, Электрического момента, Энергии**, и т.д.

Возможны лишь те переходы, для которых изменение Величины не равно 0 !!!

Если для какого-то перехода изменение Величины = 0, то такой переход не возможен.

Метастабильный уровень – это такой возбуждённый уровень (выше стабильного), переход с которого на стабильный уровень не возможен по правилам отбора.

Существует понятие: **ТЕМПЕРАТУРА ПЕРЕХОДА**, например, $T_{1 \rightarrow 2}$ или $T_{\text{пер}}$

$$T_{1 \rightarrow 2} = \frac{\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2}{k \cdot \ln\left(\frac{N_1}{N_2}\right)} = h \cdot \frac{\nu_{12}}{k \cdot \ln\left(\frac{N_1}{N_2}\right)}, \quad N_1 \text{ и } N_2 - \text{населённости уровней 1 и 2.}$$

В равновесном состоянии $T_{\text{пер}} = T_{\text{вещества}}$

В неравновесном состоянии $T_{\text{пер}} \neq T_{\text{вещества}}$

Если в веществе имеет место инверсная заселённость, то $T_{\text{пер}} < 0$

ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ МОЛЕКУЛЫ

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{эл}} + \mathcal{E}_{\text{колеб}} + \mathcal{E}_{\text{вращ}}$$

Квантование вращательной энергии: $\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_{\text{вр}} = \frac{h^2}{8\pi^2 I} \cdot J \cdot (J + 1)$

Здесь: J – вращательное квантовое число, I – момент инерции молекулы;

Вращательный момент количества движения: $M^2 = \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot J \cdot (J + 1)$

Для многоатомной молекулы: $\mathcal{E}_{\text{колеб}} = \sum_{i=1}^R h\nu_i \cdot \left(g_i + \frac{1}{2}\right)$, R – количество степеней свободы,

g_i – колебательные квантовые числа.

Вырожденные уровни – это уровни внутри одного энергетического уровня, которым соответствуют определённые устойчивые энергетические состояния.

Количество (число) таких состояний g на одном энерг. уровне – степень вырождения, кратность или статистический вес.

В атоме водорода $g = 2q^2$. Здесь q – главное квантовое число.
 Вырожденные состояния отличаются другими квантовыми числами.

Основные квантовые числа электрона в атоме:

- 1) Главное квантовое число q – определяет энергию состояния.
- 2) Орбитальное (азимутальное) квантовое число ℓ - определяет относительный момент количества движения электрона вокруг ядра.

$$M_\ell = \sqrt{\frac{h^2}{4\pi^2} \cdot (\ell(\ell + 1))}, \quad M_\ell - \text{орбитальный момент}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, (q - 1).$$

- 3) Проекция M_ℓ на направление электрического или магнитного поля – орбитальное магнитное квантовое число M_z .

$$M_{\ell,z} = \frac{h}{2\pi} \cdot m_\ell, \quad m_\ell = \ell, \ell - 1, \dots, -\ell.$$

- 4) Спиновое магнитное квантовое число: $M_{s,z} = \frac{h}{2\pi} \cdot m_s, \quad m_s = +1/2, -1/2$

Набор квантовых чисел однозначно характеризует **состояние системы**. Количество устойчивых **состояний равно количеству степеней свободы**. Одно и то же состояние (с одной и той же энергией) может быть получено различными комбинациями квантовых чисел.

Различным вырожденным состояниям соответствуют различные **ФОРМЫ** электронного облака. Можно сказать, что вырождение *связано с симметрией электронного облака*.

ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Волновая функция электрона является решением уравнения Шредингера. Представляет интерес рассмотрение МОДЕЛИ движения электрона в кристалле (области, обладающей потенциальной полевой функцией, с трёх-мерной периодичностью).

Уравнение Шредингера в общем случае записывается следующим образом:

$$\frac{h}{2\pi j} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - U(x, y, z, t) \cdot \psi \quad \text{или} \quad j \cdot \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \cdot \psi,$$

где H – оператор Гамильтона электрона (или другой рассматриваемой частицы).

Решением уравнения Шредингера, как правило, бывают комплекснозначные волновые функции. Физический смысл имеет величина, определяющая вероятность нахождения в объёме dV :

$$P(x, y, z, t) \cdot dV = \psi(x, y, z, t) \cdot \psi^*(x, y, z, t) \cdot dV$$

Уравнение Шредингера – основное уравнение движения микромира.

В кристалле волновая функция представляет собой плоскую волну:

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) \cdot e^{j k x} \cdot dk$$

$k = \frac{2\pi \cdot p}{h}$, p – импульс электрона, $C(k)$ – амплитуда в импульсном представлении.

Потенциальная энергия в кристалле имеет вид: $U(x) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} U_i \cdot \exp\left[-\frac{2\pi \cdot j \cdot i x}{a}\right]$,

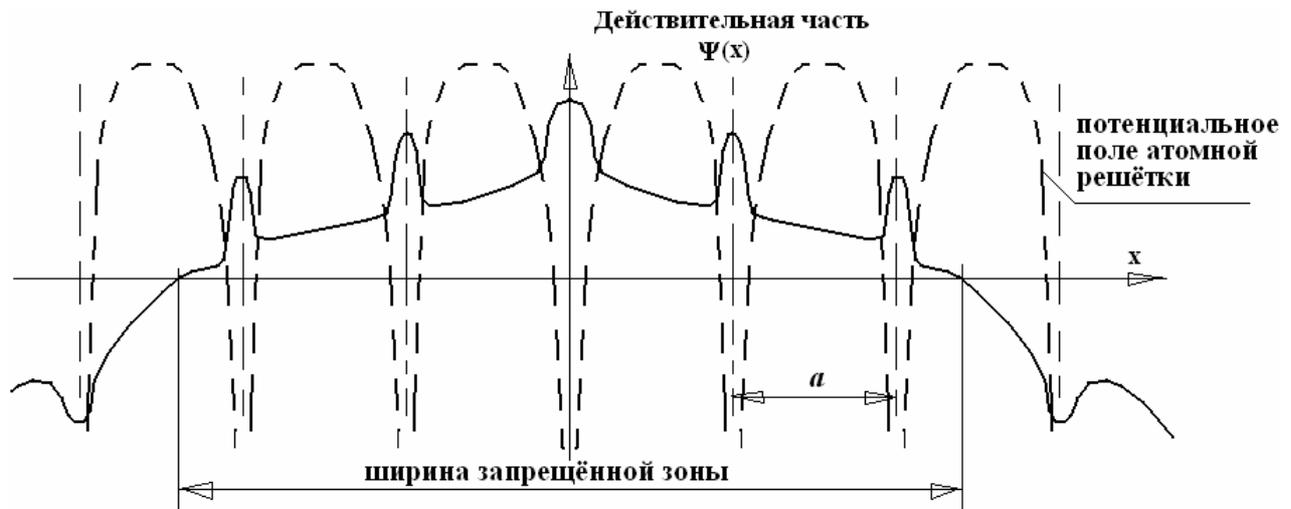
a – параметр кристаллической решётки.

Уровни энергии электрона в периодическом поле представляют квазинепрерывный линейчатый спектр: $E = E_\ell(k)$, $\ell = 1, 2, 3, \dots$

Решение уравнения Шредингера для данного случая имеет вид:

$$\psi_\ell(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \sum_{i=-\infty}^{+\infty} C_\ell \cdot \left(k + \frac{2\pi i}{a}\right) \exp\left[-j\left(k + \frac{2\pi \cdot i}{a}\right) \cdot x\right]$$

Заметим, что волновой вектор $k' = k + \frac{2\pi \cdot i}{a}$ соответствует плоским волнам, модулированным с периодичностью a .



Периодическая функция для энергии в разрешённой зоне имеет вид: $E_\ell(k) = \sum_{i=0}^{\infty} E_{\ell,i} \cdot \cos(jak)$.

При $k \approx 0$ $E(k) = const + \frac{h^2 k^2}{8\pi^2 \cdot m^*}$, $m^* = \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{1}{\left.\frac{d^2 E_\ell(k)}{dk^2}\right|_{k=0}} = \frac{h^2}{4\pi^2 E_\ell a^2}$ – эффективная масса
электрона в кристалле.

Эффективный заряд электрона $e^* = e \cdot \frac{m_e}{m^*}$, $m_e = 9,31 \cdot 10^{-31}$ кг.

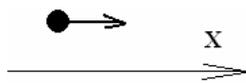
В следствие дефектов в кристалле, тепловых колебаний решётки и дислокаций происходит непрерывное рассеяние электронных волн, что и является одной из причин активного сопротивления электрическому току.

Длина волны де-Бройля (теоретическая): $\lambda_{де-Бр} = \frac{h}{mv}$, v – скорость движения частицы.

Некоторые решения уравнения Шредингера

1) Движение свободной частицы.

Пусть некоторая частица движется вдоль оси X , и пусть потенциальное поле $U(x) = 0$.



Уравнение Шредингера имеет вид: $\frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$,

Решение имеет вид: $\psi(x,t) = \varphi(x) \cdot e^{-i \cdot 2\pi \nu \cdot t} = \varphi(x) \cdot e^{-i \cdot \omega t}$

Здесь $\varphi(x)$ – «амплитуда» частицы. Так как $U = 0$, то E – это только кинетическая энергия частицы, которая имеет вид: $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$, подставляя это значение в уравнение Шредингера, получаем:

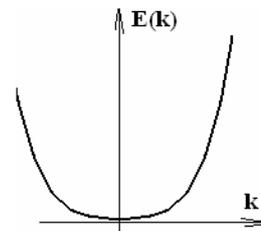
$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot E \cdot \psi = 0$$

То же самое можно переписать в виде: $\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi = 0$ или $\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \cdot \psi = 0$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

Общее решение имеет вид:

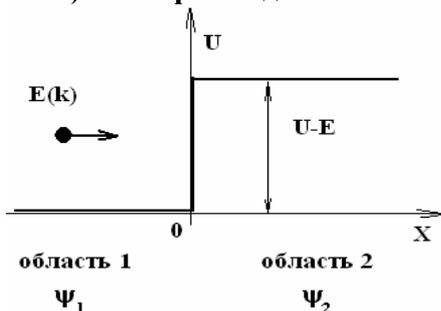
$\psi(x,t) = A \cdot \exp[j \cdot (kx - \omega t)] + B \cdot \exp[-j \cdot (kx + \omega t)]$, что представляет собой суперпозицию плоских волн, распространяющихся в противоположных направлениях.

Энергия свободной частицы имеет вид: $E_{св} = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot k^2$.



Видно, что ограничений на её энергетический спектр нет. Спектр такой частицы – сплошной.

2) Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект.



Запишем уравнение Шредингера отдельно для областей 1 и 2.

$$\frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot E \cdot \psi_1 = 0 \text{ и тоже: } \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + k_1^2 \cdot \psi_1 = 0,$$

$$\text{тогда } k_1 = \frac{2\pi}{h} \cdot \sqrt{2mE}$$

Для области 2:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot (E - U) \cdot \psi_2 = 0 \text{ и тоже: } \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2 \cdot \psi_2 = 0, \text{ тогда } k_2 = \frac{2\pi}{h} \cdot \sqrt{2m(E-U)}$$

Общие решения этих уравнений имеют вид:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1 \cdot e^{jk_1x} + B_1 \cdot e^{-jk_1x}, & x < 0; \\ \psi_2(x) = A_2 \cdot e^{jk_2x} + B_2 \cdot e^{-jk_2x}, & x > 0; \end{cases}$$

Волна, отражённая от барьера

Коэффициент отражения частицы от барьера: $R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$,

Коэффициент прозрачности барьера: $D = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \cdot \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}$. Если ввести «коэффициент преломления

волн де-Бройля» $n_{де-Б}$, то он равен: $n_{де-Б} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}$. Кроме этого заметим, что $B_2 \equiv 0$, т.к. отражённой волны в области 2 нет. **Получаем: $R + D = 1$.**

Следовательно, частица, пройдя через барьер, либо отразится от него, либо пройдёт через него. Если $U < E$, то имеет место «низкий» барьер и R равен: $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$.

E/U	1,0	1,11	1,25	2,0	10
R	1,0	0,27	0,146	0,03	0,0007

- 1) Видно, что $R \neq 0$ даже если энергия частицы много больше высоты барьера.
- 2) Если $U = E$, то $R = 1$ и проникновение частицы в область 2 **НЕВОЗМОЖНО**.
- 3) Для «высокого» барьера при $U > E$ число k_2 – мнимое, $k_2 = j \cdot \frac{2\pi}{h} \cdot \sqrt{2m|E-U|}$. Можно говорить о «глубине проникновения» частицы в область 2.

Вернёмся к рассмотрению случая 2: для $U = E$. С учётом того, что в системе уравнений

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1 \cdot e^{jk_1x} + B_1 \cdot e^{-jk_1x}, & x < 0; \\ \psi_2(x) = A_2 \cdot e^{jk_2x}, & x > 0; \end{cases}$$

значение $A_2 \neq 0$, то имеется определённая вероятность проникновения частицы в область 2.

Эта вероятность равна: $P_2 = |\psi_2|^2 = A_2^2 \cdot \exp\left[-\frac{4\pi}{h} \cdot \sqrt{2m(E-U)} \cdot x\right]$

Если барьер имеет конечную толщину, то вероятность «просачивания» частицы за него не равна нулю. Это есть **ТОННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ**.

Коэффициент прозрачности барьера толщиной d : $D = D_0 \cdot \exp\left[-\frac{4\pi}{h} \cdot \sqrt{2m(E-U)} \cdot d\right]$.

Технический результат туннельного эффекта:

- 1) Холодная эмиссия электронов в полупроводниках,
- 2) Контактные явления на границе твёрдых тел,
- 3) Самопроизвольное деление атомных ядер, α -распад частиц, и т.д.

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ (ЭЧ)

ЭЧ – это такие квантовые структуры, которым на современном этапе развития физики **невозможно приписать определённой внутренней структуры**.

Внутренняя структура ЭЧ не является стационарной и определяет вид взаимодействия данной ЭЧ с другими ЭЧ. Внутренняя структура является отражением этих взаимодействий.

Параметры классификации ЭЧ:

- 1) масса,
- 2) изотопический спин,
- 3) электрический заряд,
- 4) вид (способ) взаимодействия с другими ЭЧ.

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Лептоны (лёгкие частицы), 2. Мезоны (средние по массе частицы), 3. Барионы (тяжёлые частицы). |
|--|

- | |
|---|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Положительно заряженные, 2. Отрицательно заряженные, 3. Нейтральные. |
|---|

Изотопический спин частиц может принимать следующие значения:

- 1) $\pm \frac{1}{2} \hbar$ - для частиц вещества,
- 2) 0 или 1 – для фотонов или частиц других полей (гравитационного, ядерного, ...).

К лептонам относятся:

- 1). Нейтрино и антинейтрино,
- 2). Электрон и позитрон,
- 3). Отрицательный и положительный мюоны.

К мезонам относятся:

- 1). π^+ , π^- , π^0 ;
- 2). k^+ , k^- , k^0 ;
- 3). Анти- k^0 мезоны.

К барионам относятся:

- 1) нуклоны: протон, антипротон, нейтрон, антинейтрон,
- 2) гипероны: λ^0 (анти λ^0); σ^+ (анти σ^+); σ^- (анти σ^-); σ^0 ; Θ^- (анти Θ^-); Θ^0 (анти Θ^0).

Характерное свойство частиц поля: $m_{\text{покоя}} = 0$.

Для частиц вещества: выраженные корпускулярные свойства $E_{\text{кинет}} \ll m_0 c^2$

Заметное проявление полевых (волновых) свойств: $E_{\text{кинет}} \cong m_0 c^2$

Не допускается разграничение между полевыми и корпускулярными свойствами

$$E_{\text{кинет}} > m_0 c^2$$

Базовые законы сохранения в физике:

- 1) закон сохранения энергии – связан с однородностью хода времени;
- 2) закон сохранения момента импульса – связан с изотропностью пространства;
- 3) закон сохранения чётности (в замкнутой системе частиц сохраняется суммарное количество их свойств) – связан с симметричностью пространства.

ВОЗМОЖНОЕ ПРИБЛИЗИТЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ ЭЧ:

Частица типа электрона (позитрона):



Частица типа нуклона:

Плотность, уменьшающаяся к внешней границе частицы



ВНУТРЕННЯЯ СТРУКТУРА ТВЁРДЫХ ТЕЛ

Между атомами и молекулами действуют силы Ван-дер-Ваальса (ВдВ).

Уравнения ВдВ имеют вид:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) \cdot (V - b) = R \cdot T$$

Это же уравнение справедливо для неидеального газа (плотного газа). Константа b учитывает силы отталкивания между частицами вещества.

Силы ВдВ возникают между **электрически заряженными** и **электрически нейтральными** частицами. Притяжение нейтральных атомов в веществе **обусловлено синхронностью движения электронов**, расположенных на внешних орбитах.

1) Если связанные заряды удалить на небольшое расстояние друг от друга, то они начнут совершать механическое движение с частотой

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{m}}, \text{ где } m - \text{масса частицы, } k - \text{коэффициент жёсткости связи.}$$

Потенциальная энергия осциллятора определяется: $U = \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2$, подставляя её в уравнение Шредингера, получим:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} \cdot \left(E - \frac{1}{2}kx^2\right) \cdot \Psi = 0.$$

Его решение даёт для кинетической энергии E следующие соотношения: $E_n = h\nu_0 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)$,

где n – главное квантовое число. Отсюда видно, что имеет место так называемая «нулевая» энергия, которая не исчезает при $T = 0$ К:

$$E_0 = \frac{1}{2} \cdot h\nu_0 \text{ или } E_0 = \frac{1}{4\pi} \cdot h \cdot \sqrt{\frac{k}{m}} - \text{характеризует особенность квантового движения осциллятора.}$$

2) При сближении атомов (частиц, зарядов...) на небольшое расстояние каждый из них начинает совершать сложные «модулированные» движения с близкими к ν_0 частотами:

$$\nu_1 = \nu_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 kr^3}} \text{ и } \nu_2 = \nu_0 \cdot \sqrt{1 + \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 kr^3}}.$$

Суммарная энергия двух осцилляторов: $E_0' = \frac{1}{2}h\nu_1 + \frac{1}{2}h\nu_2 = h\nu_0 \cdot \left(1 - \frac{e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2 k^2 r^6}\right)$.

Нулевая энергия взаимодействия этих осцилляторов:

$$E_0 = \frac{1}{2}h\nu_0 + \frac{1}{2}h\nu_0 = h\nu_0$$

Взаимодействие осцилляторов приводит к уменьшению их суммарной энергии на величину:

$$U_g = E_0' - E_0 = -h\nu_0 \cdot \frac{e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2 k^2 r^6}.$$

Это и приводит к возникновению силы притяжения между ними:

$$F_g = -\frac{\partial U_g}{\partial r} = h\nu_0 \cdot \frac{3e^4}{16\pi^2 \varepsilon_0^2 k^2} \cdot \frac{1}{r^7}.$$

СУЩЕСТВОВАНИЕ СИЛ ПРИТЯЖЕНИЯ МЕЖДУ НЕЙТРАЛЬНЫМИ ЧАСТИЦАМИ (АТОМАМИ И МОЛЕКУЛАМИ) ОБЯЗАНО НАЛИЧИЮ НУЛЕВОЙ ЭНЕРГИИ, КОТОРАЯ УМЕНЬШАЕТСЯ ПРИ ИХ СБЛИЖЕНИИ.

Это приводит к появлению структуры вида:



Которая нарушается действием температуры (или температура нарушает порядок в строении молекул).

При низких температурах энергия ориентационного взаимодействия записывается следующим образом:

$$U_g^{op,T} = U_g^{(min T)} = -\frac{2M^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r^3}, \quad M = -e\tau - \text{момент атома.}$$

При высоких температурах: $U_g^{op,T} = U_g^{(max T)} = -\frac{M^4}{24\pi^2 \varepsilon_0^2 kT} \cdot \frac{1}{r^6}.$

Для значительно поляризуемых молекул появляется «индуцированное» взаимодействие:

$$U_{ind} = -\frac{\alpha M^2}{8\pi^2 \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{r^6}, \quad \text{где } \alpha - \text{коэффициент поляризуемости молекулы.}$$

Тогда **полная энергия взаимодействия** имеет вид: $U_{\Sigma} = U_g + U_g^{op,T} + U_{ind}.$

Процентное соотношение значений энергий для различных веществ:

U_g	$U_g^{op,T}$	U_{ind}	Вещество
Энергия притяжения	Ориентационные эффекты	Индукционный эффект	
19 %	77 %	4 %	Вода
50 %	45 %	5 %	Аммиак
81 %	15 %	4 %	Хлористый водород

ВИДЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ (СВЯЗЕЙ) В ВЕЩЕСТВЕ

1) **Ионная связь:** между атомами металлов и галогенов.

У металлов 1 «лишний» электрон в оболочке, у галогенов – 1-го электрона недостаёт до завершённой оболочки. Такие вещества называются солями. Их образование обусловлено действием кулоновских сил притяжения между разноимёнными зарядами. «Лишний» электрон от металла переходит в область атома галогена, появляются положительный и отрицательный ионы, которые взаимодействуют по закону Кулона.

2) **Обменная (валентная, атомная) связь.**

Эта связь устанавливается, когда кулоновское (полярное) взаимодействие или ВдВ-взаимодействие не являются эффективными. Речь идёт о соединениях вида H_2 , O_2 , N_2 и т.д. Объяснением может служить следующее: при сближении атомов на расстояние $r \cong 2...3 \text{ \AA}$ происходит перекрытие соседних электронных оболочек. Атомы как-бы обмениваются внешними электронами.

Частота перехода электрона от одного атома к другому составляет порядок 10^{-14} с^{-1} . Внешние электроны становятся «обобществлёнными», происходит «втягивание» внешних электронных облаков в пространство между ядрами.

Состояние системы с повышенной плотностью электронного облака между ядрами приводит к возникновению сил притяжения. Эти силы и образуют молекулы вида H_2 , O_2 , N_2 и т.д.

Молекулы могут обладать двумя уровнями энергии:

$$U_S = 2E_0 + \frac{K + A}{1 + S^2} \text{ и } U_U = 2E_0 + \frac{K + A}{1 - S^2}, \text{ где}$$

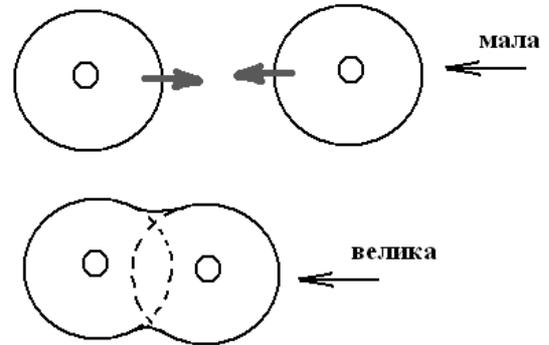
S – интеграл неортогональности, $0 \leq S \leq 1$;

$2E_0$ – энергия 2-х изолированных атомов,

K – энергия электростатического взаимодействия,

A – энергия обменного взаимодействия (из-за перекрытия электронных облаков).

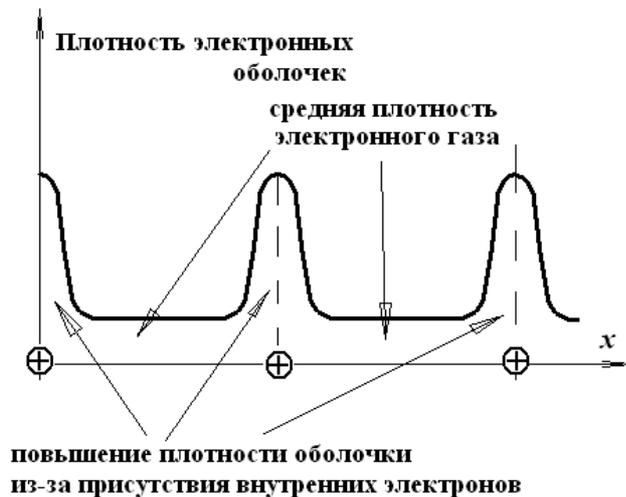
Вероятность нахождения электрона в области соседнего атома:



U_S – симметрическое состояние, U_U – антисимметрическое состояние.

3) Металлическая связь.

В этом случае валентные электроны покидают свой атом и свободно распространяются в металле. Взаимодействие обеспечивается однородным распределением **отрицательного электричества** в **положительной решётке** ионов. По-сути это Кулоновское взаимодействие.



КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ТВЁРДЫХ ТЕЛ

Кристаллическая решётка (структура) – это пространственная сетка, в узлах которой располагаются частицы.

Элемент решётки – пространственная форма основной ячейки решётки – пространственный параллелепипед. Основные параметры решётки:

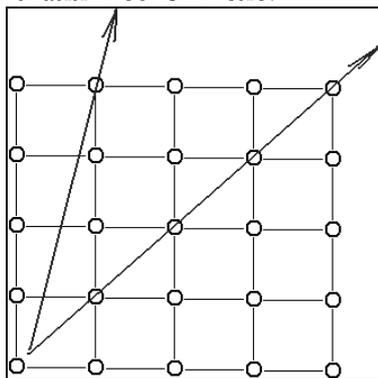
А) Значения углов: α , β , γ .

Б) Значения длин рёбер: a , b , c .

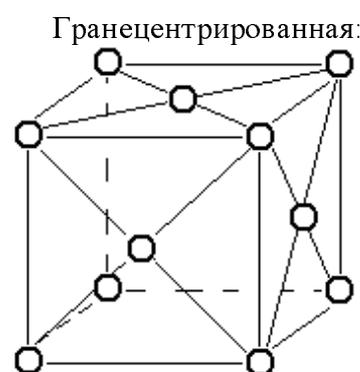
Решётка определяет анизотропию материала.

Анизотропия материала: различие свойств твёрдого тела по различным пространственным направлениям.

Одной из причин анизотропии является **различное количество частиц** по тому или иному пространственному направлению в кристаллическом теле:



Основные виды кристаллических решёток:



В зависимости от структуры различают **МОНО-** и **ПОЛИ-**кристаллические тела. Если вещество обладает большим количеством центров образования решётки – то это поликристалл. Внешняя хаотичность и неправильность структуры поликристалла не отражает правильную внутреннюю структуру поликристалла. Поликристалл изотропен всилу усреднения анизотропных свойств в макро-объёме.

Искажения кристаллической решётки – причина дополнительной энергии в кристалле.

Классификация видов решёток в зависимости от вида связи:

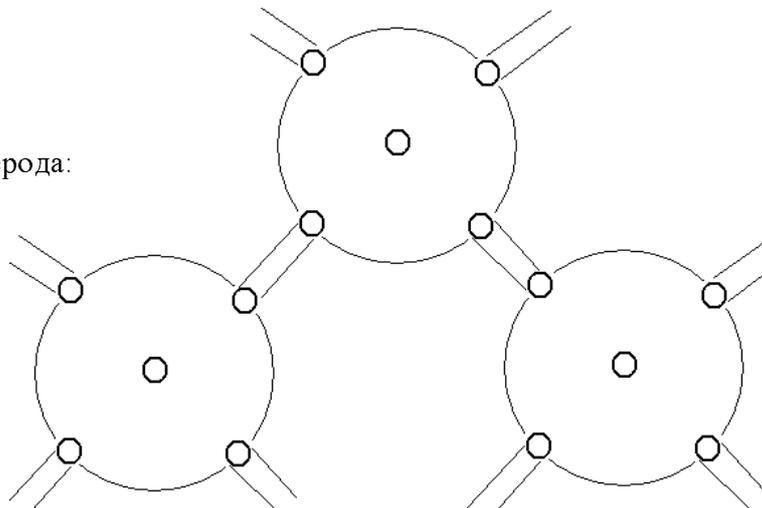
- 1) Ионные (координационные) решётки – с ионной связью атомов;
- 2) Поляризационные (молекулярные) решётки – образованные силами ВдВ;
- 3) Атомные решётки – образованы силами валентной связи;
- 4) Металлические решётки – действием металлических сил.

Явление «полиморфизма» - это когда одному химическому элементу свойственны несколько видов кристаллических структур.

«Модификации» вещества – характеризуют переход вещества от одной полиморфной формы к другой. Это есть полиморфные превращения.

Такие материалы, как кремний (Si) и углерод (C), представляющие собой полупроводники, образуют кристаллиты по правилу: $8 - N$, где каждый атом окружён количеством соседей, равным $8 - N$, здесь N – номер группы элемента.

Типичная решётка кремния или углерода:



Кроме того, для кристаллов (кристаллитов) характерна **МОЗАИЧНАЯ** структура. Эта структура представлена блоками правильного строения (зёрен). Характерные размеры зёрен могут составлять 10.....1000 нм.

На границах зёрен решётка искажается. Следовательно – граница зерна представляет собой источник дополнительной энергии.

Примеси и дефекты также искажают структуру решётки.

Виды дефектов:

- 1) **Замещение:** когда атом какого-либо другого вещества расположен на месте атома (с определённым порядковым номером) данной решётки;
- 2) **Внедрение:** посторонний атом находится вне зоны порядкового номера;
- 3) **Вакансия (дислокация):** свободное место, т.е. отсутствие атома в узле решётки.

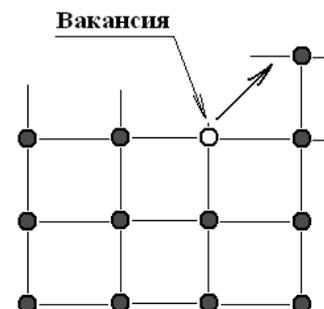
3.1. Дефект по Френкелю: полное покидание атома своего места в кристаллической решётки,

3.2. Дефект по Шоттки: неполное покидание атомом своего места.

Количество дислокаций пропорционально значению

$$e^{-\frac{\varepsilon_g}{kT}}, \text{ в данном случае } \varepsilon_g - \text{энергия образования дефекта.}$$

Для кремния характерно: $\varepsilon_g \cong 1 \dots 2$ эВ,



тогда среднее количество дефектов: $N_g = N \cdot F \cdot e^{-\frac{\varepsilon_g}{kT}},$

где N – общее количество атомов, F параметр, для кварца равный $10^3 \dots 10^4$.

При комнатной температуре $T = 300$ К получаем:

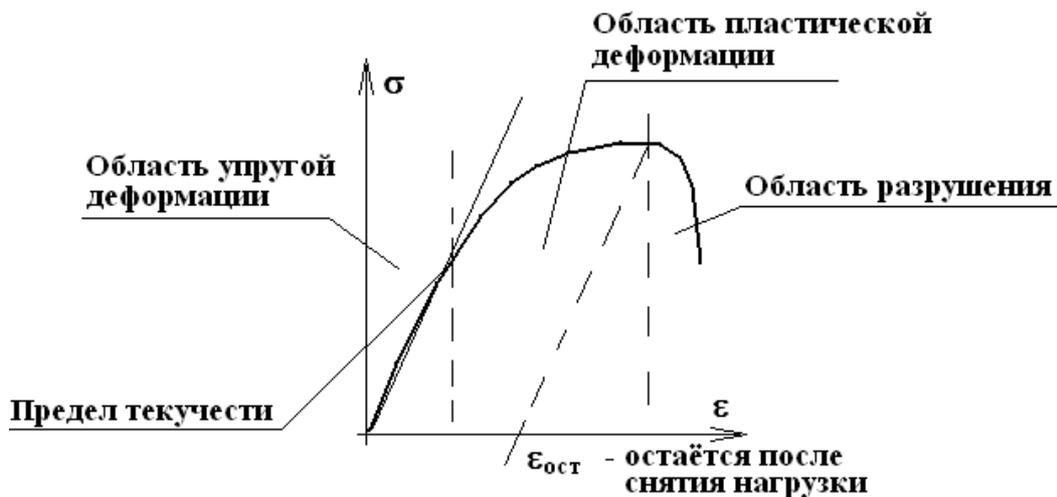
$$\frac{N_g}{N} \cong 10^{-12} \quad \%$$

ОСНОВНЫЕ МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ ТЕЛ

Одной из характеристик является **механическое напряжение** $\sigma = \frac{\sum F_i}{s}$, F_i – силы, действующие на тело, s – площадь поверхности, на которую действуют силы.

Механическое напряжение может быть выражено через модуль Юнга $E_{ю}$ и относительное изменение геометрических размеров: Δl и l : $\sigma = E_{ю} \cdot \frac{\Delta l}{l} = E_{ю} \cdot \varepsilon$, где ε – относительная деформация образца.

Деформация бывает УПРУГОЙ и ПЛАСТИЧЕСКОЙ. Если после снятия деформирующих сил образец не возвращается в первоначальную геометрическую форму, то произошла пластическая деформация; возвращается – упругая деформация.



От количества дефектов зависит прочность материала:



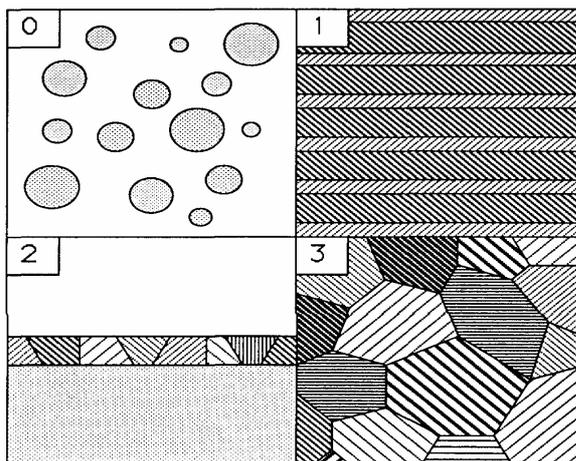
НАНОСТРУКТУРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (НСМ)

НСМ – это такие материалы, которые имеют тот же химический состав (что и эти же материалы в крупнозернистом состоянии (КЗС)), но существенно меньший среднестатистический размер кристаллитных образований (зёрен) по отношению к КЗС.

НСМ, получаемые методами деформации, имеют средний размер зерна порядка 100 и менее нанометров. Отсюда и их характерное название.

НСМ **подразделяются по степени измельчённости зерна**. К наноструктурным материалам, согласно терминологии, принятой международным журналом «Наноструктурные материалы» «NanoStructured Materials», относят кристаллические материалы со средним размером зерен или других структурных единиц, менее 100 нм или порядка этой величины.

Существует классификация таких материалов. По геометрическим признакам их можно разделить на ноль-мерные атомные кластеры и частицы (0), одно- и двухмерные мультислои, покрытия и ламинарные структуры (1 и 2), трехмерные объемные нанокристаллические (3) и нанофазные материалы (1 или 3).



Далее рассматриваются трехмерные объемные нанокристаллические материалы, преимущественно полученные на базе хрупких материалов (т.е. не металлов, а керамики, полупроводников).

Методы получения НСМ:

- 1) Интенсивная пластическая деформация (ИПД),
- 2) Газовая конденсация с последующим компактированием,
- 3) Шаровой размол с последующей консолидацией.

Основные требования к методам получения:

1. Низкая температура, и
2. Высокое давление.

Представляет интерес рассмотрение **ПРОЗРАЧНОГО ХРУПКОГО** материала – с целью применения его в системах телекоммуникаций. Очевидно, что такой материал должен обладать высокой оптической чистотой, т.е. быть прозрачным (не затуманенным). А материалы, получаемые методами 2) и 3) будут менее прозрачными, чем получаемые методом 1).

Поэтому будем рассматривать НСМ, получаемые ИПД-обработкой. ИПД подразделяется на 2-а основных метода:

- 1.1). Интенсивное кручение под высоким давлением (ИКВД),
- 1.2). Равноканально-угловое прессование (РКУ), и
- 1.3). Всесторонняя ковка.

Метод 1.3) практически не применим к хрупким материалам, поэтому подробно будем рассматривать 1.1) и 1.2).

Степень деформации при ИКВД:

$$\varepsilon = \ln(\vartheta \cdot r / l)$$

ϑ — угол вращения в радианах,

r и l — радиус и толщина образца.

Давление создаётся в несколько ГПа.

Логарифмическая степень деформации ε	$2r$	l
6	20 мм	1 мм
5	10 мм	0,2 мм



В центре образцов $\varepsilon_{ц} = 0$, и максимальна по краям. При дополнительном кручении нижнего бойка степень деформации увеличивается на величину: $\gamma(R) = \frac{2\pi RN}{l}$, где N число его оборотов, l - толщина образца, R – расстояние от оси образца до исследуемой точки. В результате после деформации $l_{кон} \cong 0,5 \cdot l_0$. Имеет место также изменение объёма образца: $\Delta V/V = 4 \cdot 10^{-4}$.

Существенное измельчение кристаллитной структуры наблюдается уже после 0,5 оборота. Для создания однородной структуры необходимы несколько оборотов.

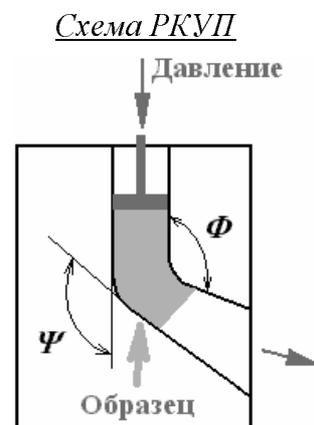
Степень деформации при РКУП:

$$\varepsilon = N \times \left\{ \frac{2ctg(\Phi/2 + \Psi/2) + \Psi \operatorname{cosec}(\Phi/2 + \Psi/2)}{\sqrt{3}} \right\}$$

N – количество проходов (продавливаний),

Ψ - угол установки заготовки в оснастку, Φ - угол изгиба.

Образцы имеют круглое или квадратное сечение с диагональю (радиусом) порядка 20 мм.



Всесторонняя ковка – многократное повторение операций «осадка - протяжка». Однородность деформации получается ниже по отношению к РКУ или ИКВД. Но позволяет в большей

степени (с более высоким измельчением) получать наноструктурное состояние хрупких материалов, так как обработку начинают при повышенных температурах. Метод реализуется в следующем интервале температур: $(0,1 \dots 0,5)$ от $T_{пл}$.

ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОСТРУКТУРЫ

- 1) Среднестатистический размер зерна,
- 2) Однородность степени деформации по объёму.

Наблюдение (регистрация) внутренней структуры проводится:

- А) Спектроскопическими методами,
- Б) Фотографированием под электронным микроскопом,
- В) Рентгеноструктурный анализ;
- Г) Мёсбауэрография;
- Д) Дифференциальная сканирующая калориметрия.

При деформации зёрна меняют свою конфигурацию:

- 1) Ломаются,
- 2) Искривляются с появлением неровностей. Среднеквадратическое смещение атомов линейно убывает с уменьшением температуры.

Нечёткость изображения (на фотоснимках) – свидетельство напряжений (областей, содержащих внутреннюю энергию упругих деформаций). При деформации больших по размерам зёрен (400...500 нм) сначала формируются суб-зёрна, в средних по размерам зёрнах (200...300 нм) появляются дефекты и дислокации. При дальнейшей деформации средняя плотность решётчатых дислокаций составляет порядок $5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, плотность зернограничных дислокаций: $1 \cdot 10^8 \text{ м}^{-1}$.

Однородность структуры связана с

- 1). Степенью деформации,
- 2) Режимом деформации (прессования, наличия разогрева при РКУ-прессовании, и т.д.).

Техническая задача при формировании наноструктур – изучение эволюции микроструктуры. Установлено, что обычно эта эволюция имеет **СТАДИЙНЫЙ** характер:

- 1) 1-я стадия имеет место при $\frac{1}{4} \dots 1$ обороте (при ИКВД). Получается ячеистая структура с размером ячеек порядка 400 нм.
- 2) 2-я стадия: после 1...3 оборотов. Происходит искажение формы зёрен с появлением признаков ячеистой структуры и наноструктуры. Причины искажений: далекодействующие напряжения от неравновесных границ.
- 3) 3-я стадия: формирование однородной по объёму структуры со средним размером зёрен порядка или менее 100 нм.

Компоненты тензора упругих деформаций представляются:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\pi b}{(1-\nu)} \cdot \frac{x}{D^2 \cdot ch^2 \{2\pi x/D\}}, \text{ где: } x - \text{расстояние до границы зерна,}$$

D – среднее расстояние между зернограничными дислокациями,
 b – вектор Бюргерса, $b = 2,56 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, ν - коэффициент Пуассона.

НСМ обладают термонестабильностью. Рост зёрен начинается с температуры 0,4 от $T_{пл}$. При нагреве наноструктуры можно проследить следующие характерные стадии:

- 1) релаксация внутренних напряжений (аннигиляция дефектов на границах и внутри зёрен),
- 2) аномальный рост зёрен (по скорости роста),
- 3) дальнейший рост зёрен с меньшей скоростью (характерной при нагреве данного материала).

Режим изменения наноструктуры зависит от:

- А) скорости нагрева,
- Б) времени отжига,
- В) химического состава материала.

Характерные признаки сформированной наноструктуры:

- 1) *наличие неравновесных границ зёрен* с избыточно высокой плотностью дефектов. Если получаемое зерно имеет характерный размер 10...20 нм, то оно всё (по всему объёму) является неравновесным.
- 2) *Появление избыточной энергии* – из-за дальнедействующих упругих напряжений.

Это приводит к изменению ряда фундаментальных физических свойств материала:

- упругих механических модулей,
- температуры Дебая, Кюри, ...
- гистерезисные магнитные свойства,
- оптические свойства полупроводниковых материалов,
- коррозионные свойства чистых металлов.

Выявлено, что в НСМ происходит изменение физических свойств на величину порядка 10...20 % по отношению к крупнозернистому состоянию. Выявлено значительное увеличение коэрцитивной силы намагничивания в чистых металлах. Это перспективно при создании постоянных магнитов. В отношении оптических свойств полупроводников обнаружено появление люминесцентного свечения в видимой области спектра (в сравнении с этими же материалами в крупнозернистом состоянии): 650 нм с шириной линии 80 нм (в противовес 1550 нм, 1310 нм).

В отношении механических свойств: появляется высокопрочное состояние. Это обеспечивает возможность низкотемпературной (высокоскоростной) пластичности. Далее – увеличение микротвёрдости, что объясняется затруднением в зарождении и движении дислокаций вдоль границ. Наблюдается СВЕРХПЛАСТИЧНОЕ ТЕЧЕНИЕ материала.

Сверхпластичность: явление увеличения формы образца в сотни и тысячи раз при удлинении (сжатии) без разрушения образца.

Краткие результаты получения наноструктур на базе различных материалов.

I. Чистые металлы.

ИКВД-методом получается средний размер зёрен порядка 100 нм.
РКУ – 200...300 нм ($\epsilon = 7$, $P = 7$ ГПа, $T = 300$ К).

II. В сплавах.

Конечная зёрненная структура зависит от исходной микроструктуры.

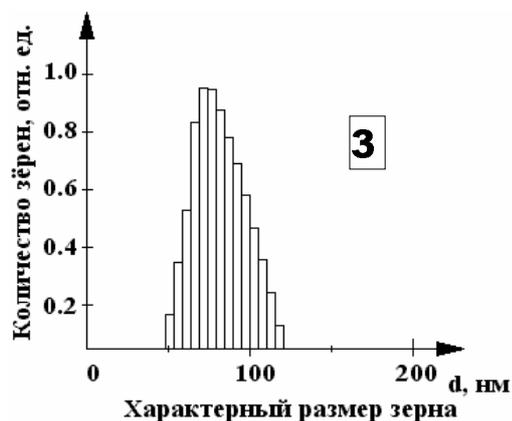
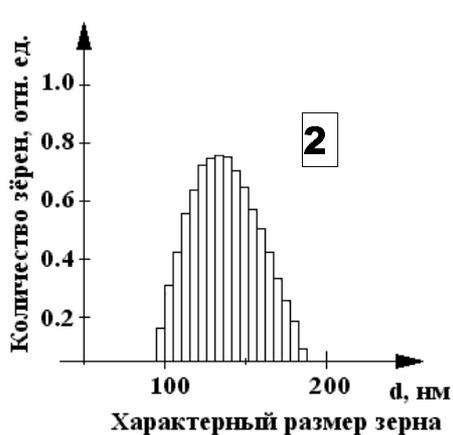
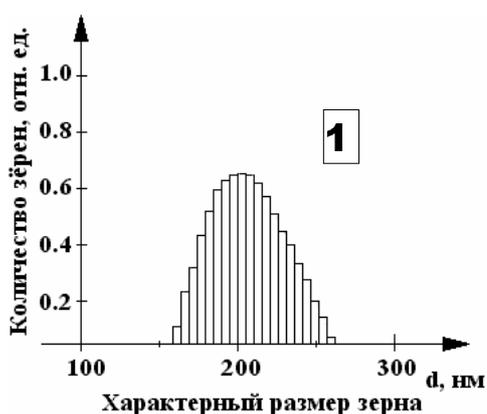
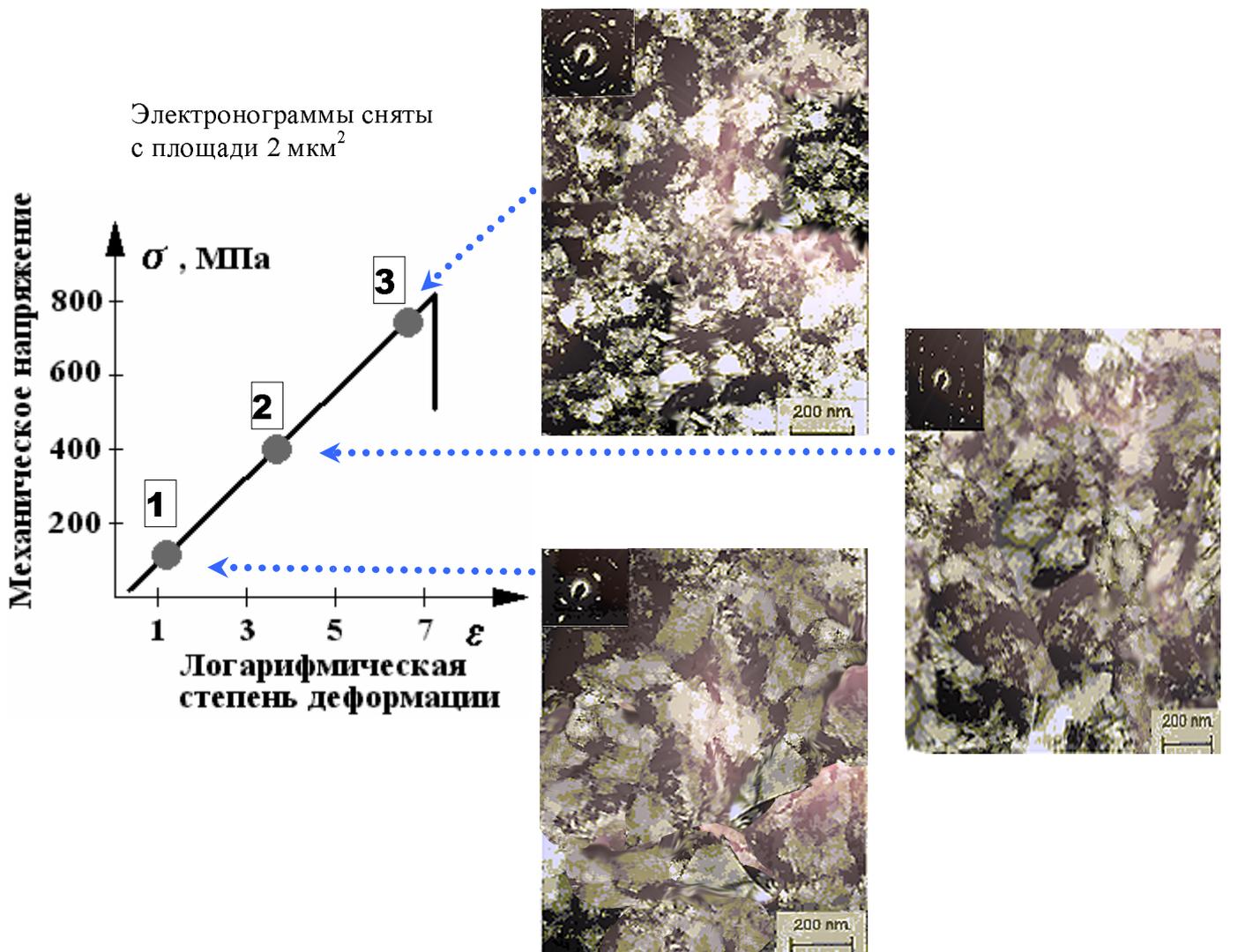
В многофазных твёрдых растворах – зависит от морфологии вторых фаз. Здесь можно получить более мелкие зёрна – порядка 20 нм. Это позволяет также получать **перенасыщенные твёрдые растворы**.

III. В полупроводниковых материалах (Si и Ge)

С кристаллитной структурой типа алмаза полученные методом ИКВД наноструктуры характеризуются логарифмическим нормальным распределением зёрен со средними размерами 17...24 нм. Приложенное давление составляет 7 ГПа.

IV. В металлокерамических композитах

Измельчение структуры происходит от начального размера 0,2...5 мкм до 60...200 нм.



МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

- Объект исследования** – 1) неравновесное состояние границ зёрен;
2) значение избыточной энергии границ зёрен,
3) эволюция дальнедействующих упругих напряжений.