

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЫШЕНИЯ ПЛАСТИЧНОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

В.И. Дубинко, В.И. Карась, В.Ф. Клепиков, П.Н. Остапчук*, И.Ф. Потапенко***

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина;*

**Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина;*

***Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия*

Исследован электропластический эффект (ЭПЭ) - повышение пластичности металлов под действием импульсов электрического тока. Рассмотрен механизм ЭПЭ в рамках модели дислокационной струны, преодолевающей стопору в результате возбуждения ее колебаний фононами. На основе модели случайных толчков (по методу Ланжевена), которые совершают фононы, показано, что термодинамический подход описать ЭПЭ не может. Предложен кинетический подход к проблеме ЭПЭ, основанный на вычислении частоты отрыва дислокаций от препятствий через неравновесную функцию распределения фононов, которая является решением двухкомпонентной электрон-фононной системы уравнений в электрическом поле.

1. ВВЕДЕНИЕ

В шестидесятые годы было обнаружено явление резкого уменьшения сопротивления металлов пластической деформации в случае возбуждения в них подсистемы электронов проводимости или облучением, или пропусканием электрического тока высокой плотности $j = 10^4 \dots 10^5$ А/см². Оно не могло быть сведено к тривиальному термическому действию (в макроскопическом проявлении) тока, поэтому возникло предположение о существовании электрон-дислокационного взаимодействия, влияющего на механические свойства кристалла [1, 2].

Явление было предложено называть электропластическим эффектом (ЭПЭ). В наиболее чистом виде ЭПЭ исследовался на металлических монокристаллах Zn, Cd, Sn, Pb при температуре жидкого азота [2]. Если в процессе деформации образцов этих материалов через них пропускать импульсы тока величиной $10^4 \dots 10^5$ А/см², длительностью 10^{-4} с или облучать их ускоренными электронами подпороговых энергий (не создающих стабильных радиационных дефектов), то обнаруживается уменьшение прочности, проявляющееся в виде скачков деформирующего напряжения при постоянной скорости деформации. Установлено, что скачки деформирующего усилия намного меньше на участке квазиупругой деформации, чем за границей текучести. Дальнейшие исследования показали, что ЭПЭ наблюдается в широком температурном интервале от 4,2 до 300 К [3, 4].

Несмотря на широкое применение и большое количество работ по изучению ЭПЭ (см., например, [1-5]), управляющий механизм этого явления на сегодняшний день до конца не ясен. Известные модели ЭПЭ при пропускании электрического тока основаны на следующих механизмах [4]: электронное увлечение дислокаций («электронный

ветер»), механические напряжения около поверхности раздела, динамический пинч-эффект, динамическое температурное поле, влияние электрического тока и магнитного поля на взаимодействие дислокаций с точечными дефектами в металлах, динамическая неравновесность дислокационного ансамбля, эффективный «разогрев» дислокационной подсистемы [6, 7]. В работе [8] предложен механизм, стимулирующий пластическую деформацию металлов при облучении быстрыми частицами. Механизм обусловлен неравновесными флуктуациями энергетических состояний атомов, окружающих дислокации, при рассеянии на них радиационно-индуцированных возбуждений атомной структуры металла - фокусонов.

В данной работе предложен кинетический подход к проблеме ЭПЭ, основанный на вычислении частоты отрыва дислокаций от препятствий через неравновесную функцию распределения фононов.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧАСТОТЫ ОТРЫВА ДИСЛОКАЦИИ ОТ СТОПОРА

Пластическая деформация (ПД) кристаллов, подверженных внешним нагрузкам, в большинстве случаев осуществляется путем скольжения дислокаций. При этом основное уравнение, определяющее кинетику ПД в плоскости скольжения, имеет вид:

$$\dot{\epsilon} = b l \rho_d v_d (\sigma^*, T), \quad (1)$$

где $\dot{\epsilon}$ - скорость ПД; ρ_d - плотность подвижных дислокаций; b - величина вектора Бюргерса; $\sigma^* = \sigma - \sigma_i$ - эффективное сдвиговое деформирующее напряжение; σ_i - сдвиговые внутренние напряжения в плоскости скольжения; T - температура; $v_d(\sigma^*, T)$ - частота преодоления

дислокацией препятствий–стопоров; l - среднее расстояние между ними. При термодинамическом описании ПД в режиме термоактивационного преодоления стопоров для $v_d(\sigma^*, T)$ используют выражение вида

$$v_d(\sigma^*, T) = v_d^0 \exp\left(-\frac{H(\sigma^*)}{k_b T}\right), \quad (2)$$

где v_d^0 - частотный множитель, определяющий частоту «попыток» преодоления стопора. Явный вид $H(\sigma^*)$ зависит от модели потенциального барьера, тормозящего скольжение дислокации (его высоты и формы), и от схемы теоретического описания процесса его преодоления. Такой подход подразумевает равенство температур электронов и решетки, а само понятие температуры – наличие равновесия в электронной и фононной подсистемах, которое не выполняется при пропускании по кристаллу электрического тока. Ниже будет рассмотрен более общий подход, основанный на модели Ландау–Гофмана [9], обобщенной на случай неравновесности фононной подсистемы.

Будем описывать смещение дислокационного сегмента длиной L под действием однородного напряжения σ в приближении колебаний упругой струны:

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + B \frac{\partial u}{\partial t} - C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = b\sigma + f(t). \quad (3)$$

Здесь $u(y, t)$ - смещение линии дислокации в точке y в направлении x ; $M = \frac{\rho b^2}{2}$ - эффективная масса единицы длины; ρ - плотность материала; B - коэффициент силы динамического трения на единицу длины; $C = \frac{Gb^2}{2}$ - линейное натяжение струны; b - величина вектора Бюргерса в направлении x ; G - модуль сдвига; $f(t)$ - сила случайных толчков, действующих со стороны кристалла, отнесенная к единице длины дислокации. Граничные условия в «точках закрепления» $y = 0$ и $y = L$ берем в виде [9]

$$u'_y(0, t) = \kappa u(0, t); \quad -u'_y(L, t) = \kappa u(L, t); \quad \kappa = \frac{2\zeta}{C}. \quad (4)$$

«Точка закрепления» сегмента представляет собой, по существу, броуновскую частицу в потенциальной яме $U(x)$, на которую действует случайная сила со стороны дислокационной струны. Параметр ζ характеризует параболическую форму потенциальной ямы в направлении движения дислокации и связан с максимальной высотой потенциальной ямы U_0 соотношением:

$$U(x) = \begin{cases} \zeta x^2, & |x| \leq x_{кр} \\ 0, & |x| > x_{кр} \end{cases}, \quad \zeta x_{кр}^2 = U_0. \quad (5)$$

При достижении критического значения $x_{кр}$ «частица» покидает потенциальную яму, т.е.

происходит отрыв дислокации от стопора. Поскольку задача линейная, решение представимо в виде суммы двух слагаемых – статического прогиба $u_{cm}(y)$, под действием внешнего напряжения σ , и колебаний $u_{кол}(y, t)$, под действием случайной силы

$f(t)$:

$$u(y, t) = u_{cm}(y) + u_{кол}(y, t),$$

$$u_{cm}(y) = \frac{by(L-y)\sigma}{2C} + \frac{bL\sigma}{2C\kappa}; \quad (6)$$

$$u_{кол}(y, t) = \sum_{n=1}^N Q_n(t) \left[\sin(q_n y) + \frac{q_n}{\kappa} \cos(q_n y) \right],$$

$$ctg(q_n L) = \frac{q_n^2 - \kappa^2}{2q_n \kappa}, \quad (7)$$

где q_n - волновой вектор n -й гармоники; N - номер, соответствующий максимальному значению волнового вектора ($N \approx L/a$); a - постоянная решетки. Амплитуда n -й гармоники $Q_n(t)$ удовлетворяет уравнению:

$$M\dot{Q}_n(t) + BQ_n(t) + M\omega_n^2 Q_n(t) = f_n(t);$$

$$\omega_n^2 = q_n^2 \frac{C}{M}. \quad (8)$$

В правой части (8) стоит случайная сила толчков, вызывающая колебания n -й гармоники. Рассмотрим «точку закрепления» $y = 0$. Пусть длины сегментов по обе стороны от нее одинаковы и равны L . Тогда суммарное смещение в «точке закрепления» равно:

$$\tilde{u}(0, t) = 2u_{cm}(0) + 2u_{кол}(0, t) \equiv \tilde{u}_{cm}(0) + \delta\tilde{u}(0, t); \quad (9)$$

$$\tilde{u}_{cm}(0) = \frac{bL\sigma}{C\kappa}, \quad \delta\tilde{u}(0, t) = 2 \sum_{n=1}^N Q_n(t) \frac{q_n}{\kappa}.$$

Если в какой-то момент времени осуществилось случайное событие, такое что $\delta\tilde{u}(0, t) \geq \delta\tilde{u}_{кр} \equiv x_{кр} - \tilde{u}_{cm}(0)$, то выполнится условие преодоления препятствия в направлении действия нагрузки: $\tilde{u}(0, t) \geq x_{кр}$. Пусть $f_n(t)$ представляет собой стационарный гауссовский процесс. Поскольку уравнение (8) линейно, то $Q_n(t)$, а вместе с ней и $\delta\tilde{u}(0, t)$ тоже - стационарный гауссовский процесс, для которого теория вероятности дает среднее число выходов процесса за определенный уровень $\delta\tilde{u}_{кр}$ в единицу времени в виде:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\Psi''(0)}{\Psi(0)}} \exp\left\{-\frac{\delta\tilde{u}_{кр}^2}{2\Psi(0)}\right\}, \quad (10)$$

$$\Psi(\tau) = 2 \sum_{n=1}^N \frac{q_n^2}{\kappa^2} \overline{Q_n(t)Q_n(t+\tau)} \equiv 2 \sum_{n=1}^N \frac{q_n^2}{\kappa^2} \Psi(\tau); \quad (11)$$

$$\delta\tilde{u}_{кр} = x_{кр} - \frac{b\sigma L}{C\kappa} = x_{кр} \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_{кр}}\right), \quad \sigma_{кр} \equiv \frac{C\kappa x_{кр}}{bL}, \quad (12)$$

где $\Psi(\tau)$ - корреляционная функция случайного процесса $\delta\tilde{u}(0, t)$, выраженная через

корреляционную функцию $\psi(\tau)$ случайного процесса $Q_n(t)$; $\Psi''(0)$ - вторая производная по τ , взятая при $\tau=0$. Черта в (11) означает усреднение по вероятностям всех значений, которые может иметь величина $Q_n(t)$ в момент времени t и в момент $t+\tau$. Флуктуационное открепление дислокационного сегмента от стопора происходит в области внешних напряжений: $\sigma < \sigma_{кр}$. При $\sigma > \sigma_{кр}$ происходит механическое открепление, соответствующее динамическому режиму движения дислокаций.

Таким образом, задача заключается в вычислении $\Psi(\tau)$. Переходя от $Q_n(t)$ к фурье-компонентам, $\psi(\tau)$ можно переписать в виде

$$\psi(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} (Q_n^2)_{\omega} e^{-i\omega\tau} d\omega, \quad (13)$$

где в качестве определения величины $(Q_n^2)_{\omega}$ следует рассматривать соотношение

$$\overline{(Q_n)_{\omega}(Q_n)_{\omega'}} = (Q_n^2)_{\omega} \delta(\omega+\omega'), \quad (14)$$

связывающее спектральную плотность $(Q_n^2)_{\omega}$ с фурье-компонентами. Каждую n -ю гармонику колебаний исследуемого дислокационного сегмента (8) формально можно рассматривать как самостоятельный флуктуирующий осциллятор с трением и частотой ω_0 :

$$m\ddot{Q} + \chi\dot{Q} + m\omega_0^2 Q = F, \quad (15)$$

где m - его «масса», т.е. коэффициент пропорциональности между обобщенным импульсом и скоростью \dot{Q} ; χ - коэффициент трения; F - случайная сила. При этом параметры (15) связаны с аналогичными параметрами в (8) следующими соотношениями:

$$m = M \frac{L\xi_n}{2}, \quad \chi = B \frac{L\xi_n}{2}, \quad F = f_n \frac{L\xi_n}{2},$$

$$\xi_n = 1 - \frac{2}{\kappa L} + \frac{q_n^2}{\kappa^2}. \quad (16)$$

Переходя в к фурье-компонентам, получим формулу:

$$(Q^2)_{\omega} = \frac{(F^2)_{\omega}}{m^2(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \chi^2\omega^2}, \quad (17)$$

$$\Psi''(0) = -\frac{4}{Ca\kappa^2} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\hbar\omega_n^2}{2\xi_n} \left\{ \frac{\omega_n^2 - \frac{B^2}{2M^2}}{A_n} \frac{sh \frac{\hbar A_n}{k_b T}}{ch \frac{\hbar A_n}{k_b T} - ch \frac{iB\hbar}{2Mk_b T}} + \frac{B}{M} \frac{\sin \frac{B\hbar}{2Mk_b N}}{ch \frac{\hbar A_n}{k_b T} - ch \frac{iB\hbar}{2Mk_b T}} \right\}. \quad (22)$$

Коэффициенты A_n предполагаются вещественными, т.е. $\omega_n > \frac{B}{2M}$, что справедливо для достаточно малых длин дислокационного сегмента

где $(F^2)_{\omega}$ - спектральная плотность случайной силы. В общем случае она определяется энергией колебаний решетки, которая может быть выражена через функцию распределения решеточных фононов $N_p(\omega)$:

$$(F^2)_{\omega} = \frac{\chi}{\pi} \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + N_p(\omega) \right). \quad (18)$$

Таким образом, задача нахождения частоты отрыва дислокации от стопора сводится к задаче о нахождении функции распределения решеточных фононов $N_p(\omega)$, которая будет рассмотрена ниже в двух предельных случаях.

3. ОДНОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ (ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ)

В случае термодинамических флуктуаций распределение фононов по частоте ω описывается функцией Бозе-Эйнштейна:

$$N_0(T, \omega) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_b T}\right) - 1 \right]^{-1},$$

подстановка которой в (18) приводит к известному выражению для $(F^2)_{\omega}$ (см., например, [10]):

$$(F^2)_{\omega} = \frac{\chi}{\pi} \frac{\hbar\omega}{2} cth \frac{\hbar\omega}{2k_b T}. \quad (19)$$

Поэтому с учетом (16) и (19) для $(Q_n^2)_{\omega}$ получаем

$$(Q_n^2)_{\omega} = \frac{2}{\pi L\xi_n} \frac{B \frac{\hbar\omega}{2} cth \frac{\hbar\omega}{2k_b T}}{M^2(\omega^2 - \omega_n^2)^2 + B^2\omega^2}. \quad (20)$$

Подставляя (20) в (13), (11), найдем искомые корреляционные функции:

$$\Psi(0) = \frac{4}{Ca\kappa^2} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\hbar\omega_n^2}{2\xi_n A_n} \frac{sh \frac{\hbar A_n}{k_b T}}{ch \frac{\hbar A_n}{k_b T} - ch \frac{iB\hbar}{2Mk_b T}};$$

$$A_n \equiv \sqrt{\omega_n^2 - \frac{B^2}{4M^2}}; \quad (21)$$

и значений динамического трения B (результаты в обратном случае получаются из (21), (22) заменой

$$A_n = i\sqrt{\frac{B^2}{4M^2} - \omega_n^2}.$$

В «классическом» пределе $\hbar \rightarrow 0$ получаем:

$$\Psi(0) \rightarrow \frac{4k_b T}{Ca\kappa^2} S_1, \quad S_1 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{1}{\xi_n},$$

$$\Psi''(0) \rightarrow -\frac{4k_b T}{Ca\kappa^2} S_2, \quad S_2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\omega_n^2}{\xi_n}; \quad (23)$$

$$v = v_0 \exp \left\{ -\frac{H_0}{k_b T} \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_{sp}} \right)^2 \right\}, \quad v_0 \equiv \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{S_2}{S_1}},$$

$$H_0 \equiv \frac{Ca\kappa^2 x_{sp}^2}{8S_1} = \frac{aL^2}{4S_1 G} \sigma_{sp}^2. \quad (24)$$

Это результат авторов работы [9], применимый для достаточно высоких температур. Для оценки S_1 и S_2 перейдем от суммирования к интегрированию по правилу [11]:

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\omega_n) \rightarrow \frac{1}{\omega_{\max}} \int_0^{\omega_{\max}} f(\omega) d\omega, \quad (25)$$

где ω_{\max} - максимальная частота, соответствующая максимальному значению волнового вектора

$$q_{\max} \equiv \frac{\pi}{a}. \text{ В результате получим:}$$

$$S_1 = \frac{\kappa}{q_{\max} \sqrt{1 - \frac{2}{\kappa L}}} \arctg \left(\frac{q_{\max}}{\kappa} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2}{\kappa L}}} \right),$$

$$S_2 = \frac{C\kappa^2}{M} \left[1 - \left(1 - \frac{2}{\kappa L} \right) S_1 \right]. \quad (26)$$

Если значения величин, фигурирующих в (26), принять такими же, как в [9], то $S_1 \approx \frac{a\kappa}{2} = 5 \cdot 10^{-3}$,

$$S_2 \approx \frac{G\kappa^2}{\rho} = 2.5 \cdot 10^{21} c^{-2}, \text{ и для частоты попыток}$$

флуктуационного преодоления препятствия получим оценку $v_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{S_2}{S_1}} \approx \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2G\kappa}{\rho a}} \approx 10^{11} c^{-1}$,

что совпадает с аналогичной оценкой в [9].

Квантовое обобщение выражений (23), (24) приведем для случая $B=0$ ¹. При этом $A_n = \omega_n$, и формулы (21), (22) принимают вид:

$$\Psi(0) = \frac{4}{Ca\kappa^2} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{1}{\xi_n} \beta_n(T),$$

$$\Psi''(0) = -\frac{4}{Ca\kappa^2} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\omega_n^2}{\xi_n} \beta_n(T). \quad (27)$$

Подставляя (27) в (10), получаем:

$$v = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N \frac{\omega_n^2}{\xi_n} \beta_n(T)}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{\xi_n} \beta_n(T)}} \exp \left\{ -\frac{H_0}{k_b T_{ef}(T)} \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_{sp}} \right)^2 \right\},$$

$$\beta_n(T) = \frac{\hbar \omega_n}{2th \frac{\hbar \omega_n}{2k_b T}}. \quad (28)$$

Видим, что учет квантовых эффектов приводит к появлению эффективной температуры

$$T_{ef}(T) = \frac{1}{k_b N S_1} \sum_{n=1}^N \frac{1}{\xi_n} \beta_n(T) =$$

$$-T^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{N S_1} \sum_{n=1}^N \frac{1}{\xi_n} \ln \left(2sh \frac{\hbar \omega_n}{2k_b T} \right), \quad (29)$$

которая в высокотемпературном пределе совпадает с обычной температурой. Заметим, что модель дислокационного сегмента с жестко закрепленными концами соответствует пределу $\zeta \rightarrow \infty$ и, как следствие, $\xi_n \rightarrow 1$. При этом (29) переходит в аналогичное выражение работы [12].

Для оценки (29) снова воспользуемся соотношением (25), введя безразмерную переменную $z = \frac{\hbar \omega}{k_b T}$ и «одномерную» температуру

Дебая для одномерных (дислокационных) фононов, $k_B \theta = \hbar \omega_{\max}$ ($\theta \approx 250 \text{ K}$). Тогда (29) принимает вид:

$$T_{ef}(T) = -\frac{T^2}{S_1} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{T^{\theta/T}}{\theta} \int_0^{\frac{z}{2}} \frac{\ln(2sh \frac{z}{2})}{\xi(z^2)} dz \right], \quad (30)$$

где $\xi(z^2) = 1 - \frac{2}{L\kappa} + \frac{q_{\max}^2}{\kappa^2} \left(\frac{T}{\theta} \right)^2 z^2$ согласно

определению (16). Используя тождество $\ln(2sh \frac{z}{2}) = \frac{z}{2} + \ln(1 - e^{-z})$, для эффективной температуры получаем

$$T_{ef}(T) = \frac{\theta}{4S_1} \frac{\kappa^2}{q_{\max}^2} \ln \left(1 + \frac{q_{\max}^2}{\kappa^2} \frac{1}{1 - \frac{2}{\kappa L}} \right) +$$

$$\frac{T}{S_1} \left\{ \frac{T^{\theta/T}}{\theta} \int_0^{\frac{z}{2}} \frac{z dz}{(e^z - 1) \xi(z^2)} \right\}. \quad (31)$$

При $T \approx \theta$ эффективная температура стремится к константе в полном качественном соответствии с результатами [13, 14]:

$$T_{ef} \rightarrow \frac{\theta}{4S_1} \frac{\kappa^2}{q_{\max}^2} \ln \left(1 + \frac{q_{\max}^2}{\kappa^2} \frac{1}{1 - \frac{2}{\kappa L}} \right), \quad (32)$$

а значит, формально ($T_{ef} \approx 2 \text{ K}$) имеется конечная вероятность преодоления стопоров даже при очень низких температурах. Значение коэффициента при T в (31) практически не меняется уже при $T \geq 3 \text{ K}$ и имеет порядок 0.75...1. Поэтому второе слагаемое

¹ Влияние трения на флуктуационное открепление дислокации от стопора подробно исследовано в работе [12].

в (31) становится существенным при $T \geq 3K$ и далее растет практически пропорционально температуре.

Для предэкспоненциального множителя учет квантовых эффектов в случае отсутствия трения ($B=0$) дает следующие соотношения:

$$T^*(T) = \theta \left[\frac{1}{4} \frac{\kappa^2}{q_{\max}^2} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{2}{\kappa L}\right) \frac{\kappa^2}{q_{\max}^2} \ln \left(1 + \frac{q_{\max}^2}{\kappa^2} \frac{1}{1 - \frac{2}{\kappa L}} \right) \right\} + \left(\frac{T}{\theta} \right)^4 \int_0^{\theta/T} \frac{z^3 dz}{(e^z - 1)\xi(z^2)} \right] \quad (34)$$

При выбранных значениях параметров частота «попыток» $\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\Psi''(0)}{\Psi(0)}}$ имеет порядок величины 10^{11} с^{-1} и практически не зависит от температуры.

При $T \approx \theta$ ($z \approx 1$) выражение в фигурных скобках в (31) переходит в сумму S_1 , а $T_{ef}(T) \rightarrow T$, что соответствует «классическому» пределу (24).

Принимая во внимание (1), (2) и (28), запишем уравнение для скорости ПД:

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp \left[-\frac{H_0}{k_b T_{eff}(T)} \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_{sp}} \right)^2 \right], \quad (35)$$

из которого получим зависимость напряжения пластического течения σ от скорости деформации:

$$\sigma = \sigma_{sp} - \sqrt{\frac{4S_1 G}{aL^2} k_b T_{ef}(T) \ln \frac{\dot{\epsilon}_0}{\dot{\epsilon}}}. \quad (36)$$

При пропускании по кристаллу электрического тока на дефекты действует сила электронного увлечения F_j , пропорциональная дрейфовой скорости электронов $V_j = -j/en$ (j - плотность электрического тока; e - элементарный заряд; n - концентрация электронов проводимости). В результате такого эффекта на дислокацию действует дополнительное напряжение со стороны «электронного ветра» [3]:

$$\sigma_j = \frac{P_F}{e} j, \quad (37)$$

где P_F - импульс электрона на поверхности Ферми.

Первоначально «электронный ветер» рассматривался в качестве основного механизма ЭПЭ. Однако теоретическое значение $\sigma_j \approx 10^4 \text{ дин} \cdot \text{см}^{-2}$ при $j = 10^5 \text{ А} \cdot \text{см}^{-2}$ оказывается примерно на два порядка меньше напряжения пластического течения, что явно не достаточно для объяснения ЭПЭ.

Помимо «электронного ветра» импульсное воздействие тока приводит к джоулеву нагреву, который максимален в адиабатическом режиме. При этом конечная температура образца T связана с плотностью тока и длительностью импульса t_i следующим соотношением:

$$\Psi''(0) = -\frac{4}{Ca\kappa^2} \left(\frac{k_b \theta}{\hbar} \right)^2 k_b T^*(T),$$

$$\Psi(0) = \frac{4S_1}{Ca\kappa^2} k_b T_{ef}(T); \quad (33)$$

$$j^2 t_i = \int_{T_n}^T \frac{c_V(T)}{\rho_L(T)} dT, \quad (38)$$

где ρ_L - удельное сопротивление материала; c_V - его объемная теплоемкость; T_n - начальная температура образца. При рассматриваемых ниже температурах в выражении для напряжения течения (36) $T_{ef}(T)$ соответствует температуре образца, так что скачок напряжения внешней нагрузки при постоянной скорости деформации, связанный с пропусканием импульса тока, определяется разностью выражений (36) при начальной и конечной температурах образца.

Зависимость температуры разогрева и соответствующего скачка напряжения внешней нагрузки от плотности тока при материальных параметрах из таблицы и $T_n = 78 \text{ К}$ показана на рис.1.

Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными [2] показывает, что термодинамический подход описать ЭПЭ не может. Поэтому в следующем разделе теория обобщается на случай неравновесного распределения фононов, связанного с воздействием электрического тока.

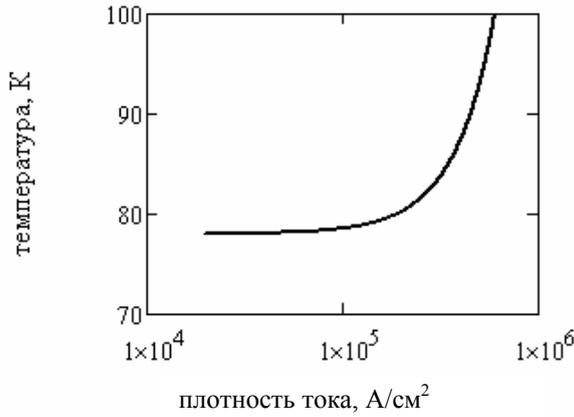
4. ДВУХТЕМПЕРАТУРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Рассмотрим пропускание электрического тока через металлическую пленку, находящуюся в тепловом контакте с подложкой, температура которой поддерживается постоянной T_b . Если (как это обычно предполагается [15, 16]) распределение электронов описывается функцией Ферми-Дирака, то эффективная «температура» электронов начинает зависеть от плотности тока, толщины пленки и материальных параметров. При этом фононы пленки взаимодействуют с «горячими» электронами и «холодными» фононами подложки.

В результате функция распределения фононов пленки описывается кинетическим уравнением, которое в τ -приближении имеет вид [15]:

$$\frac{\partial N_p(\omega)}{\partial t} = \frac{N_0(T_e, \omega) - N_p(\omega)}{\tau_{pe}(\omega)} + \frac{N_p(\omega) - N_0(T_b, \omega)}{\tau_b}, \quad (39)$$

где $\tau_b \approx \eta \frac{d}{s}$ - характерное время подстройки распределения фононов к температуре подложки; d - толщина пленки; s - средняя скорость звука; η - коэффициент акустического рассогласования границы металл-подложка; $\tau_{pe}(\omega)^{-1} = \frac{E^2 m_e^2 \omega}{2\pi \hbar^3 \rho s_l}$ -



обратное время релаксации фононного распределения к температуре электронов T_e ; E - константа деформационного потенциала; m_e - масса электрона; ρ - плотность металла; s_l - продольная скорость звука в металле.

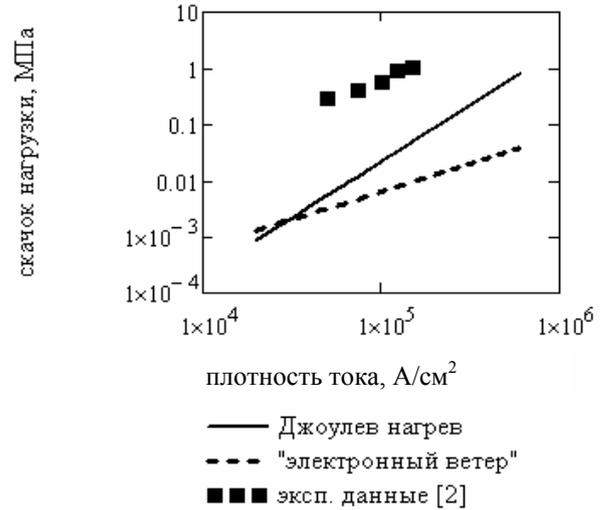


Рис. 1. Зависимость температуры разогрева и соответствующего скачка напряжения внешней нагрузки от плотности тока в режиме адиабатического джоулевого нагрева. Пунктирной линией показан эффект «электронного ветра» согласно (37), экспериментальные данные для монокристаллов цинка взяты из работы [2]; $T_n = 78$ К

В стационарном режиме (время импульса много больше характерных времен релаксации) формируется однородная стационарная неравновесная функция распределения фононов, которая в нижней части спектра близка к бозе-функции при температуре подложки, а в верхней – к бозе-функции при «температуре» электронов:

$$N_p^{st}(\omega) = \frac{\tau_b}{\tau_{pe}(\omega) + \tau_b} N_0(T_e, \omega) + \frac{\tau_{pe}(\omega)}{\tau_{pe}(\omega) + \tau_b} N_0(T_b, \omega),$$

$$N_0(T, \omega) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_b T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (40)$$

Уже в этом простейшем приближении процесс отрыва дислокации от стопора не может быть корректно описан в рамках термодинамики. В то же время развитый выше кинетический подход позволяет это сделать аналитически. Для этого вернемся к соотношению (18). Замена в (18) $N_p(T) \rightarrow N_p^{st}(\omega)$ приводит (20) к виду:

$$(Q_n^2)_\omega = \frac{2}{\pi L \xi_n} \frac{B \frac{\hbar\omega}{2} \left[\frac{|\omega|}{\omega_c + |\omega|} \text{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_b T_e} + \frac{\omega_c}{\omega_c + |\omega|} \text{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_b T_b} \right]}{M^2 (\omega^2 - \omega_n^2)^2 + B^2 \omega^2},$$

$$\omega_c = \frac{2\pi \hbar^3 \rho s_l s}{E^2 m_e^2 \eta d}, \quad (41)$$

(наличие модуля связано с физическим смыслом частоты фонона, как вещественной и

положительной величины), ω_c - формально имеет размерность частоты. Снова подставляем (41) в (13), (11) и находим искомый коррелятор $\Psi(\tau)$. Значение коррелятора в нуле определяет эффективную «температуру» в показателе экспоненты (10):

$$\Psi(0) = \frac{4S_1}{Ca\kappa^2} k_b T_{ef}(T_e, T_b), \text{ где}$$

$$T_{ef}(T_e, T_b) = \frac{1}{k_b N S_1} \sum_{n=1}^N \frac{\hbar \omega_n^2}{2 \xi_n A_n} \left[\frac{\omega_n}{\omega_c + \omega_n} \frac{sh \frac{\hbar A_n}{k_b T_e}}{ch \frac{\hbar A_n}{k_b T_e} - ch \frac{iB\hbar}{2Mk_b T_e}} + \frac{\omega_c}{\omega_c + \omega_n} \frac{sh \frac{\hbar A_n}{k_b T_b}}{ch \frac{\hbar A_n}{k_b T_b} - ch \frac{iB\hbar}{2Mk_b T_b}} \right] \quad (42)$$

Как и ранее, рассмотрим случай без диссипации $B = 0$. Формула (42) существенно упрощается:

$$\Psi(0) = \frac{4}{Ca\kappa^2} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\hbar \omega_n}{2 \xi_n} \left[\frac{\omega_n}{\omega_c + \omega_n} \text{cth} \frac{\hbar \omega_n}{2T_e} + \frac{\omega_c}{\omega_c + \omega_n} \text{cth} \frac{\hbar \omega_n}{2T_b} \right] \quad (43)$$

Далее перейдем от суммирования к интегрированию по правилу (25) и используем соотношение (29). Опуская громоздкие вычисления, получаем:

$$T_{ef}(T_{e,b}) = \frac{\theta}{4S_1} \frac{\kappa^2}{q_{\max}^2} \ln \left(1 + \frac{q_{\max}^2}{\kappa^2} \frac{1}{1 - \frac{2}{\kappa L}} \right) + \frac{T_e}{S_1} \left\{ \frac{T_e}{\theta} \int_0^{\theta/T_e} \frac{z^2 dz}{(e^z - 1) \left(\frac{T_e}{T_e} + z \right) \xi_e(z^2)} \right\} + \frac{T_e}{S_1} \left\{ \frac{T_b}{\theta} \int_0^{\theta/T_b} \frac{z dz}{(e^z - 1) \left(\frac{T_e}{T_b} + z \right) \xi_b(z^2)} \right\}, \quad (44)$$

где $\xi_{e,b}(z^2) = 1 - \frac{2}{L\kappa} + \frac{q_{\max}^2}{\kappa^2} \left(\frac{T_{e,b}}{\theta} \right)^2 z^2$; $k_b T_c \equiv \hbar \omega_c$.

Первое и последнее слагаемые в (44) полностью определяются материальными параметрами и температурой подложки, второе - балансом тепла, вносимого в систему электрическим током и уносимого в подложку фононами.

Таким образом, эффективная «температура», определяющая скорость отрыва дислокации от стопора, зависит от плотности тока и лежит в интервале от T_b до T_e .

Согласно [15] связь T_e с плотностью тока в квазистационарном приближении можно найти из соотношения:

$$j^2 \rho_L = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \hbar s_l q \frac{N_0(T_e, q) - N_p^{st}}{\tau_{pe}(q)}. \quad (45)$$

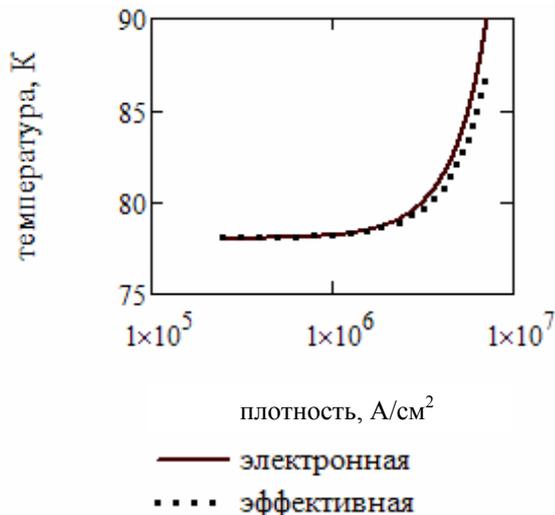


Рис. 2. Зависимость электронной температуры и эффективной температуры дислокационных фононов от плотности тока согласно (44)-(46) при толщине пленки 10^2 см и материальных параметрах из таблицы; $T_n = 78$ К

Слагаемое в левой части – энергия, закачиваемая в единицу времени в электронную подсистему током, в правой – энергия, передаваемая в единицу времени фононам с функцией распределения $N_p^{st}(\omega)$. Подставляя в (45) явные выражения всех величин, получаем:

$$[D_4(T_e) - D_4(T_b)] = \frac{\rho_L j^2 2\pi^2 (\hbar s_l)^3 \eta d}{k_b^4 s},$$

$$D_4(T) = T^4 \int_0^{\theta/T} \frac{z^4}{\left(z + \frac{T_c}{T} \right) (e^z - 1)} dz, \quad (46)$$

где Θ - температура Дебая кристалла (в отличие от ее одномерного аналога θ , фигурирующего в(44)). Зависимости T_e и $T_{ef}(T_e, T_b)$ от плотности тока показаны на рис. 2, из которого следует, что существенно «оторвать» эффективную температуру дислокационных фононов от температуры подложки при экспериментально реализуемых плотностях тока ($j \leq 10^6$ А·см⁻²) не представляется возможным, а значит, и «двухтемпературный» подход описать ЭПЭ не может.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В данной работе предложен кинетический подход к проблеме ЭПЭ, основанный на вычислении неравновесной функции распределения фононов, которая является решением двухкомпонентной электрон-фононной системы уравнений в электрическом поле. Для аналитического описания электрон-фононной системы металлической пленки в неравновесном состоянии выше было использовано важное упрощающее предположением о фермиевском виде изотропной части электронной функции распределения. В общем случае необходимо последовательное кинетическое рассмотрение как электронной, так и фононной подсистем [17-19]. Решение двухкомпонентной электрон-фононной системы уравнений в электрическом поле удастся провести только численно и на малых временах, позволяющих не учитывать электрон-электронные взаимодействия [19]. При этом оказывается, что у функций распределения электронов и фононов со временем формируются все более мощные высокоэнергетичные «хвосты», так как при электрон-фононных соударениях передается импульс при достаточно малой передаче энергии. В результате рождается много фононов при дебаевской энергии, т.е. функция распределения фононов обогащается высокоэнергетичными дебаевскими фононами.

Заметим, что средняя энергия фононной системы при учете неравновесных «хвостов» существенно не меняется (по сравнению с обычным джоулевым нагревом), и соответственно существенного увеличения эффективной температуры дислокационных фононов произойти не должно. Несмотря на это, обогащение кристалла дебаевскими фононами может иметь важные физические следствия. Дело в том, что при этом может значительно возрасти вероятность (или скорость) образования нелинейных, сильно локализованных атомных колебаний (так называемых «дискретных бризеров»), время жизни которых значительно превосходит времена

релаксации фононов [20, 21]. Дискретные бризеры (ДБ) могут распространяться на значительные расстояния и взаимодействовать с кристаллическими дефектами [20]. В работе [21] показано, что учет ДБ приводит к увеличению скорости флуктуационно-индуцированных процессов на несколько порядков, что позволяет объяснить аномально низкотемпературные фазовые превращения (при 600 К вместо обычных 1200 К) в некоторых минералах. При этом в [21] рассматривался «термодинамический» механизм образования ДБ со скоростью, экспоненциально возрастающей с ростом температуры. При

температуре 600 К этот механизм оказывается достаточно эффективным, но вряд ли следует ожидать того же при азотных температурах, рассмотренных выше. В то же время образование неравновесных дебаевских фононов под действием импульсов тока представляется весьма вероятным механизмом возникновения неравновесных флуктуаций и, как следствие, – долгоживущих ДБ. Взаимодействие ДБ с дислокациями может стимулировать их отрыв от стопоров, т.е. приводить к ЭПЭ. Количественное обоснование предлагаемой гипотезы требует дальнейших исследований.

Модуль сдвига G , эрг·см ⁻³	$1.2 \cdot 10^{12}$
Высота потенциального барьера U_0 , эВ	5
Критическое значение смещения $x_{кр}$, см	$0.2b$
Длина дислокационного сегмента L , см	10^{-4}
Продольная скорость звука s_l , см/с	$5 \cdot 10^5$
Плотность металла ρ , г/см ³	8.9
Температура Дебая для дислокационных фононов θ , К	250
Коэффициент акустического согласования η	1
Толщина образца d , см	10^{-2}
Энергия Ферми E_F , эрг	$5.64 \cdot 10^{-12}$
Величина вектора Бюргерса дислокации b , см	$3.52 \cdot 10^{-8}$
Температура Дебая кристалла Θ , К	375

Авторы благодарны НТЦУ за частичную финансовую поддержку работы по проекту № 4368.

ЛИТЕРАТУРА

1. О.А.Троицкий. Электромеханический эффект в металлах // *Письма в ЖЭТФ*. 1969, №10, с 18-22.
2. О.А. Троицкий, В.И. Спицын. Исследование электронного воздействия на пластическую деформацию металла // *Металлофизика*. 1974, т. 51, с. 18-45.
3. A.F. Sprecher, S.L. Mannan, H. Conrad. On the Mechanism for the Electroplastic Effect in Metals // *Acta Metall.* 1986, v. 34, # 7, p. 1145-1162.
4. О.А. Троицкий, Ю.В. Баранов, Ю.С. Аврамов, А.Д. Шляпин. *Физические основы и технологии обработки современных материалов*. Москва-Ижевск, 2004, 590 с.
5. И.Л. Батаронов. Механизмы электропластичности // *Соросовский образовательный журнал*. 1999, №10, с.93-99.
6. В.И. Дубинко, В.Ф. Клепиков. Кинетический механизм электропластичности металлов // *Изв. РАН, сер. Физическая*. 2008, т. 72, с. 1257-1258.
7. V.I. Dubinko, V.F. Klepikov. Kinetic Mechanism of the Electroplastic Effect in Metals // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2008, v. 72, №9, p. 1188–1189.
8. В.И. Дубинко, В.Ф. Клепиков. Влияние неравновесных флуктуаций на пластичность металлов под облучением // *Вестник ХГУ. «Ядра, частицы, поля»*. 2005, в.3/28, №710, с.87-92.
9. А.И. Ландау, Ю.И. Гофман. Анализ процесса выхода дислокации из параболической потенциальной ямы на основе стохастического метода Ланжевена // *ФТТ*. 1974, т.16, в.11, с. 3427-3433.
10. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика*. М.: «Наука», 1964.
11. А.М. Рошупкин, В.Е. Милошенко. Об эффективной температуре в проблеме флуктуационного открепления дислокаций от центров пиннинга // *ФНТ*. 1977, т.3, №9, с.1203-1207.
12. В.Д. Нацик, А.М. Рошупкин. Влияние вязкости на квантовое движение дислокационных сегментов // *ФНТ*. 1980, т.6, №1, с.101-111.
13. V.D. Natsik, A.I. Osetskii, V.P. Soldatov, V.I. Startsev. The influence of quantum effects on the low-temperature creep of zinc crystals // *Phys.stat.sol. (b)*. 1972, v.54, N1, p.99-111
14. В.Д. Нацик. Квантовое движение дислокаций через локальные барьеры // *ФНТ*. 1979, т.5, №4, с.400-414.

15. N. Perrin, H. Budd. Phonon generation by Joule heating in metal films // *Phys.Rev.Lett.* 1972, v.28, N26, p.1701-1703.

16. А.И. Безуглый, В.А. Шкловский. Кинетика низкотемпературной электрон-фононной релаксации в металлической пленке после мгновенного нагрева электронов // *ЖЭТФ.* 1997, т.111, в.6, с.2106-2133.

17. В.И. Карась, И.Ф. Потапенко. Квазистационарные функции распределения частиц для уравнений типа Ландау-Фоккера-Планка при наличии источников // *Журнал вычислительной математики и математической физики.* 2006, т. 46, №2, с. 307-317.

18. I.F. Potapenko, V.I. Karas`. Numerical Simulation of Non-Steady Non-Equilibrium Electron and Phonon System Behavior for Semiconductors and

Metals: Strong Electric Field Action // *Proc. XVIII th International Conference on Physics of Radiation Phenomena and Radiation Material Science (8-13 September 2008, Alushta, Crimea, Ukraine)*, p. 397-399.

19. В.И. Карась, И.Ф. Потапенко. Динамика неравновесной электрон-фононной системы для полупроводников и металлов в сильном электрическом поле // *Наст. номер*, с. 150-157.

20. F.M. Russell, J.C. Eilbeck, Evidence for moving breathers in a layered crystal insulator at 300 K, arXiv/cond-mat/0612066 v1, 2 Dec 2006.

21. J.F.R. Archilla, J. Cuevas, M.D. Alba, M. Naranjo, J.M. Trillo, Discrete Breathers for Understanding Reconstructive Mineral Processes at Low Temperatures // *J. Phys. Chem. B.* 2006, v.110, p.24112-24120.

Статья поступила в редакцию 13.05.2009 г.

МОДЕЛЮВАННЯ ПІДВИЩЕННЯ ПЛАСТИЧНОСТІ МАТЕРІАЛІВ ПІД ДІЄЮ ІМПУЛЬСІВ ЕЛЕКТРИЧНОГО СТРУМУ

В.І. Дубінко, В.І. Карась, В.Ф. Клепиков, П.М. Остапчук, І.Ф. Потапенко

Досліджено електропластичний ефект (ЕПЕ) - підвищення пластичності металів під дією імпульсів електричного струму. Розглянуто механізм ЕПЕ у рамках моделі дислокаційної струни, що долає стопори внаслідок збудження її коливань фононами. На основі моделі випадкових товчків (за методом Ланжевена), які здійснюють фонони, показано, що термодинамічно рівноважний підхід ефекту ЕПЕ описати не вміє. Запропоновано кінетичний підхід до проблеми ЕПЕ, що заснований на обчисленні нерівноважної функції розподілу фононів, яка є розв'язком двохкомпонентної електрон-фононної системи рівнянь у електричному полі.

SIMULATION OF ENHANCEMENT OF MATERIAL PLASTICITY UNDER ELECTRIC CURRENT IMPULSES

V.I. Dubinko, V.I. Karas`, V.F. Klepikov, P.N. Ostapchuk, I.F. Potapenko

Enhancement of plasticity of metals under electric current pulses – so called electro-plastic effect (EPE) is investigated. The EPE mechanism is considered in the model of dislocation string overcoming local obstacles due to phonon-induced vibrations. It is shown that phonon-induced vibrations in the thermodynamic equilibrium are too weak to explain the EPE. A kinetic approach is proposed based on evaluation of non-equilibrium distribution functions of electrons and phonons by solving numerically the two-component system of kinetic equations describing electrons and phonons in electric field.