

ДИНАМИКА НЕРАВНОВЕСНОЙ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И МЕТАЛЛОВ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

*В.И. Карась, И.Ф. Потапенко**

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

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

Изучено формирование нестационарных неравновесных функций распределения (ФР) электронов и фононов при действии на металл сильного импульсного электрического поля. Для конкретности параметры взяты для никеля, имеющего начальную температуру 20 К. Показано: изотропизация электронной ФР происходит в результате соударений с несовершенствами решетки; ФР электронов не становится термодинамически равновесной, так как электрон-электронные соударения в данной ситуации дают существенно меньший вклад, чем электрон-фононные столкновения, а столкновения с «чужой» подсистемой не приводят к термализации; ФР электронов и фононов имеют высокоэнергетичные «хвосты», так как при электрон-фононных соударениях передается импульс при достаточно малой передаче энергии; рождается много фононов при дебаевской энергии, т.е. ФР фононов обогащается дебаевскими фононами.

ВВЕДЕНИЕ

В шестидесятых годах было обнаружено явление резкого уменьшения сопротивления металлов пластической деформации в случае возбуждения в них подсистемы электронов проводимости либо облучением, либо пропусканием электрического тока высокой плотности $j = 10^8 \dots 10^9$ А/м². Оно не могло быть сведено к тривиальному термическому воздействию (в макроскопическом проявлении) тока, поэтому возникло предположение о существовании электрон-дислокационного взаимодействия, влияющего на механические свойства кристаллов [1].

Явление было предложено назвать электропластическим эффектом (ЭПЭ). Механизм ЭПЭ связывался с повышением подвижности дислокации в области источников, а поэтому с интенсификацией работы источников. В наиболее чистом виде ЭПЭ исследовался на металлических монокристаллах Zn, Cd, Sn, Pb [1]. Если в процессе деформирования образцов этих материалов через них пропускать импульсы тока величиной $10^2 \dots 10^3$ А/мм² при длительности последних 10^{-4} с или облучать их ускоренными электронами в направлении скольжения, то обнаруживается разупрочнение, которое выражается в виде скачкообразных спадов деформирующего напряжения. Осцилляции напряжения связаны со скачками пластической деформации объектов. Установлено, что синхронно с прохождением импульсов тока и падением деформирующего усилия появляются пачки полюс скольжения, а также, что скачки деформирующего усилия несоизмеримо меньше на участке квазиупругой деформации, чем за пределом текучести. Эти осцилляции аномально высоки в районе предела текучести материала. Скачки деформирующего усилия на диаграммах уменьшаются при испытании в режиме релаксации напряжений.

Применение импульсного тока позволило обеспечить высокие плотности тока при одновременном исключении доминирующего влияния макроскопического разогрева джоулевым теплом. При длительностях импульсов 100...200 мкс, амплитудах тока 50...1000 А и частоте повторения импульсов $0,1 \dots 10^4$ Гц постоянная составляющая тока ненамного превышала 1 А и не могла обеспечить нагрев образца более чем на 1...5 °С. Интенсивность скачков деформации при действии импульсов тока в монокристаллах с анизотропией скольжения имеет ярко выраженную ориентационную зависимость. Так, в Zn максимум эффекта и минимум напряжений, при которых он начинает заметно проявляться, наблюдается при ориентации деформируемых образцов для легкого базисного скольжения. Эти факты, очевидно, указывают на дислокационную природу ЭПЭ.

ЭПЭ носит пороговый характер, т.е. начинается с определенного значения плотности импульсного тока, которое зависит от сорта деформируемого кристалла и температурно-скоростных условий. Так, для цинка при $T=77$ К оно составляет 400...500 А/мм².

Было установлено, что ЭПЭ весьма чувствителен к внешним факторам. Во-первых, эффект усиливается действием поверхностно-активных сред. Например, удельный кристаллографический сдвиг амальгамированных монокристаллов цинка при температуре 300 К и в условиях воздействия токовых импульсов с параметрами: $j=600 \dots 1000$ А/мм², частоты повторения импульсов 0,1...0,5 Гц и длительности импульса $t_p = 10^{-4}$ с увеличивается на 50...60%.

В результате легирования величина скачка может при активном нагружении возрасти на десятки процентов (до 100%). В пределах относительно небольшого содержания примеси замещения вели-

чина эффекта растет линейно с концентрацией, как это показано в экспериментах с Zn, легированным Cd от 10^{-3} до 10^{-1} ат.% (содержание остальных примесей не превышало $2 \cdot 10^{-3}$ ат.%). В то же время пороговое значение напряжения, с которого начинается эффект, при легировании также увеличивается. Однако этот факт может быть связан с общим повышением критического напряжения сдвига в легированных кристаллах.

Рост скорости испытания сначала приводит к слабому возрастанию величины эффекта, а затем к падению ее. Увеличение частоты следования импульсов понижает общий уровень деформирующего усилия, но уменьшает и амплитуду скачка напряжений ΔP . Рост длительности импульсов тока при неизменной амплитуде линейно увеличивает глубину спада напряжений ΔP . Последнее явление зафиксировано как в опытах по релаксации напряжений, так и по ползучести. В условиях ползучести монокристаллов цинка обнаружено уменьшение порогового значения длительности импульсов, с которого начинается заметный ЭПЭ. Как уже отмечалось, ЭПЭ регистрируется начиная с некоторой пороговой амплитуды импульсов тока, затем величина его растет линейно с этой амплитудой. Данное явление характерно как для активного нагружения, так и для ползучести. Следует также отметить, что активизирует электропластическое действие тока и просто изменение направления тока в соседних импульсах, при котором амплитуда остается постоянной (поляризация действия тока).

Характерной особенностью ЭПЭ в монокристаллах является отсутствие температурной зависимости в широком интервале от 77 до 300 К. Это установлено при исследовании релаксации напряжений в монокристаллах цинка, где измерялся скачок деформирующего усилия, стимулированный первым после остановки нагружающего устройства импульсом тока.

Анализ всех отмеченных закономерностей показывает, что ЭПЭ не может быть сведен просто к тепловому разогреву, а должен быть так или иначе связан с дислокационной подсистемой деформируемого объекта. Более детальное исследование ЭПЭ в режимах ползучести и релаксации напряжений позволило установить дополнительные особенности эффекта [1]. Установлено, что ток влияет в первые секунды после остановки нагружающего устройства при релаксации, а для электростимулирующего воздействия на дне релаксационной ямы необходима смена направлений тока при той же амплитуде. После переключения тока наблюдается время задержки до начала дополнительной пластической деформации. Это свидетельствует о том, что фактор тока эквивалентен появлению эффективных дополнительных напряжений ΔP_c . ΔP_c возрастает при увеличении P и убывает со временем от начала релаксации. Следовательно, он должен быть связан с наличием подвижных дислокаций в образце. Дальнейшие эксперименты по исследованию ЭПЭ в режимах ползучести, внутреннего трения и релаксации напряжений показали, что ЭПЭ обу-

словлен ростом эффективных близкодействующих напряжений T_r . Наконец, биполярные импульсы тока, следующие без промежутка, тормозят пластическую деформацию, и они же ускоряют ее, как ранее уже отмечалось, если между ними интервал порядка $3 \cdot 10^{-3}$ с.

Основные закономерности ЭПЭ, обнаруженные при деформировании монокристаллов в целом проявляются и в экспериментах с поликристаллическими материалами. Так, установлено наличие скачкообразной деформации при растяжении образцов поликристаллических цинка, кадмия, свинца, индия и олова при температуре 77 К и под влиянием одиночных импульсов тока величиной $\sim 10^3$ А/мм². Однако величина эффекта в этом случае была в 5 раз ниже, чем на монокристаллах в соответствующих условиях и не превышала 6...8% [1]. В [1] описано увеличение скорости ползучести проволочных поликристаллических образцов из W, Mo, Zn, а также сплавов Mo-Re, W-Re, стали и др. за счет действия постоянного электрического тока плотностью до $5 \cdot 10^3$ А/мм². Установлено, что логарифмы скорости ползучести растут линейно с квадратом плотности тока и это позволило авторам отказаться от гипотезы чисто теплового воздействия тока, так как образец охлаждался в процессе эксперимента.

При пропускании импульсов тока во время растяжения (сжатия) металлических кристаллов процесс деформации из естественно спорадического и неравномерного превращается в упорядоченный дискретный. Максимум эффекта наблюдается в области предела текучести образцов. У образцов, легированных небольшим количеством примесей, эффект возрастает. Существует оптимальный интервал скоростей деформации, в котором электрический ток в максимальной степени понижает сопротивление металла пластическому деформированию. В широком интервале температур (от 80 до 300 К) величина эффекта практически не зависит от температуры [2].

Аналогичные явления наблюдаются при облучении металла пакетами импульсов ускоренных электронов. Совмещение действия тока и облучения приводит к интенсификации эффекта снижения прочности металла. При электронном воздействии (током и облучением) уменьшается вероятность хрупкого разрушения образцов на начальных стадиях деформации, а кристаллы, деформируемые при одновременном воздействии током и облучением, характеризуются снижением критических скалывающих напряжений, уменьшением коэффициента упрочнения и увеличением скорости ползучести [2].

Показано, что с увеличением энергии электронов за порогом выбивания атомов (в случае цинка $E_{tr} \approx 0,7$ МэВ) на радиационное пластифицирование металла накладывается эффект радиационного упрочнения за счет создания дополнительных стопоров для дислокаций в виде точечных дефектов и их ансамблей. При увеличении плотности электронов в одной порции эффект радиационного пластифицирования первоначально усиливается, а затем уменьшается. Спад эффекта объяснен влиянием возможного частичного вырождения электронного газа в

металле на движение и взаимодействие дислокаций [2].

Показано, что активационный объем в результате облучения металла электронами существенно не изменяется, и увеличение скорости ползучести объясняется уменьшением времени (увеличением частоты) процесса термоактивируемого преодоления дислокациями препятствий [2].

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Для количественного описания динамики электрон-фононной системы металлической пленки в работе [3] использовано важное упрощающее предположение о фермиевском виде изотропной части электронной функции распределения с зависящей от времени электронной температурой. Хотя авторы [3] отмечают, что введение электронной температуры, будучи эквивалентно часто используемому предположению о мгновенной термализации электронной подсистемы, не всегда может быть строго обосновано. Так, в области очень низких температур $T_e < T^*$ (температура $T^* \approx T_D^2 / \varepsilon_F$, T_D - дебаевская температура), где электрон-электронные столкновения доминируют над электрон-фононными, электронная функция распределения термализуется за характерные времена электрон-электронного взаимодействия τ_{ee} . В обычных сравнительно чистых металлах $T^* \sim 1$ К, а в специально загрязненных пленках, где электрон-электронное взаимодействие усиливается из-за эффектов слабой локализации, T^* может быть порядка 10 К. При температурах $T_e > T^*$ (но $T_e < T_D$) термализация электронов в относительно толстых пленках происходит вследствие не прямого электрон-электронного взаимодействия, а косвенного, осуществляющегося через обмен фононами. Ранее одним из авторов [3] было показано, что электронная функция распределения, близкая по виду к фермиевской, формируется и в относительно тонких пленках (из которых неравновесные фононы уходят в подложку без перепоглощения электронами) в результате лишь процесса излучения фононов

«горячими» электронами. В обоих случаях характерным временем термализации электронов является время электрон-фононных столкновений τ_{ep} .

Заметим также, что в оптически толстых пленках однородность электронной температуры по толщине пленки обеспечивается быстрым уходом электронов из области скин-слоя и высокой электронной теплопроводностью по сравнению с фононной [3]. Вследствие дополнительного диффузионного уменьшения плотности «горячих» электронов скорость термализации электронной подсистемы существенно возрастает, и поэтому в оптически толстых пленках приближение мгновенной термализации дает хорошее согласие теории с экспериментом. В работе [3] рассматривался случай малых «нагревов», мы же при рассмотрении ЭПЭ имеем дело с очень большими «нагревами», поэтому нам необходимо провести последовательное кинетическое рассмотрение как электронной, так и фононной подсистем, что и составляет основное содержание статьи.

При кинетическом описании поведение электронов подчиняется уравнению Больцмана для функции распределения электронов $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ с соответствующими интегралами столкновений:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = I_{ee} + I_{ep} + I_{ed}, \quad (1)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = e\{\vec{E}(\vec{r}, t) + [\vec{v}, \vec{B}(\vec{r}, t)]\},$$

где I_{ee} - интеграл столкновений электронов с электронами; I_{ep} - интеграл столкновений электронов с фононами; I_{ed} - интеграл столкновений электронов с примесями и дефектами решетки; \vec{v} - скорость; \vec{r} - радиус-вектор; \vec{p} - импульс; t - время; \vec{E} - напряженность электрического поля; \vec{B} - магнитная индукция. В дальнейшем магнитное поле будем считать отсутствующим.

Запишем интегралы столкновений:

$$I_{ee} = \int d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 d\vec{p}_3 w_{ee}(\vec{p}, \vec{p}_1 / \vec{p}_2, \vec{p}_3) \delta(\vec{p} + \vec{p}_1 - \vec{p}_2 - \vec{p}_3) \times \delta(\varepsilon(\vec{p}) + \varepsilon(\vec{p}_1) - \varepsilon(\vec{p}_2) - \varepsilon(\vec{p}_3)) \{f(\vec{p}_2)f(\vec{p}_3)(1 - f(\vec{p}))(1 - f(\vec{p}_1)) - f(\vec{p})f(\vec{p}_1)(1 - f(\vec{p}_2))(1 - f(\vec{p}_3))\},$$

$$I_{ep} = \int d\vec{q} w(\vec{q}) \{ \delta(\varepsilon(\vec{p} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{p}) - \hbar\Omega(\vec{q})) \{ f(\vec{p} + \vec{q}) \times (1 - f(\vec{p})) [N(\vec{q}) + 1] - f(\vec{p})(1 - f(\vec{p} + \vec{q})) N(\vec{q}) \} + \delta(\varepsilon(\vec{p} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{p}) + \hbar\Omega(\vec{q})) \{ f(\vec{p} - \vec{q})(1 - f(\vec{p})) N(\vec{q}) - f(\vec{p})(1 - f(\vec{p} - \vec{q})) [N(\vec{q}) + 1] \},$$

$$I_{ed} = \int d\vec{p}' w_{ed}(\vec{p}' - \vec{p}) \{ \delta(\varepsilon(\vec{p}') - \varepsilon(\vec{p})) \{ f(\vec{p}') - f(\vec{p}) \},$$

$\varepsilon(\vec{p}) = p^2 / 2m$; $\vec{j} = \langle f\vec{v} \rangle$ - плотность электрического тока; под знаком усреднения $\langle \rangle$ понимается умножение на $2/(2\pi\hbar)^3$ и интегрирование по $d\vec{p}$; \hbar - постоянная Планка; m - масса электрона; \vec{q} - импульс фонона.

Функция распределения фононов также подчиняется кинетическому уравнению с интегралами столкновений:

$$\frac{\partial N(\vec{q})}{\partial t} + \vec{v}_q \cdot \frac{\partial N(\vec{q})}{\partial \vec{r}} = I_{pe} + I_{pp} + I_{pd}, \quad (2)$$

где I_{pe} - интеграл столкновений фононов с электронами; I_{pp} - интеграл столкновений фононов с фононами; I_{pd} - интеграл столкновений фононов с

примесями и дефектами решетки; $\vec{v}_q = \hbar \partial \Omega / \partial \vec{q}$ - скорость.

$$I_{pe} = \int d\vec{p} w(\vec{q}) \{ \delta(\varepsilon(\vec{p} + \vec{q}) - \varepsilon(\vec{p}) - \hbar \Omega(\vec{q})) \} \{ f(\vec{p} + \vec{q}) \times (1 - f(\vec{p})) [N(\vec{q}) + 1] - f(\vec{p})(1 - f(\vec{p} + \vec{q})) N(\vec{q}) \},$$

$$I_{pp} = -v_{pp}(\vec{q}) [N(\vec{q}) - N_T(\vec{q})],$$

$$I_{pd} = -v_{pd}(\vec{q}) [N(\vec{q}) - \bar{N}(\vec{q})],$$

где $N_T(\vec{q}) = [\exp(\hbar \Omega / T) - 1]^{-1}$ - термодинамически равновесная функция распределения фононов - функция Бозе-Эйнштейна; $\bar{N}(q) = \frac{1}{4\pi} \int N(\vec{q}) dO$ - усредненная по углам функция распределения фононов.

Учитывая, что соударения электронов с примесями, фононами и дефектами приводят к изотропизации функции распределения электронов, будем ее искать в виде

$$I_{ep} \{ f(\varepsilon) \} = \sqrt{\frac{2\pi^2 m}{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq w(q) q \left[N(q) + \frac{1}{2} \right] \times (\hbar \Omega(q))^2 + [f(\varepsilon)(1 - f(\varepsilon))] \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq q w(q) \hbar \Omega(q) \right\}, \quad (5)$$

$$I_{pe} \{ N(q) \} = 2\pi m^2 \int_{\frac{q^2}{8m}}^{\infty} d\varepsilon \frac{w(q)}{q} \left\{ [f(\varepsilon)(1 - f(\varepsilon))] + [N(q) + 1 - f(\varepsilon)] \left[\hbar \Omega \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \frac{(\hbar \Omega)^2}{2} \frac{\partial^2 f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right] \right\}. \quad (6)$$

Учитывая конкретный вид зависимости вероятности перехода $w(q)$, а также частот соударений фононов с фононами $v_{pp}(q)$

$$w(q) = w_0 q; \quad w_0 = \frac{\varepsilon_{1A}^2}{2(2\pi\hbar)^3 \hbar \rho} \quad \text{и} \quad v_{pp}(q) = v_{pp0} q^2;$$

$$\text{где} \quad v_{pp0} = \frac{T^3 s}{a_c T_D^4 M_c}; \quad \hbar \Omega(q) = sq; \quad \varepsilon_{1A} - \text{константа}$$

деформационного потенциала; T - температура решетки; T_D - температура Дебая; a_c - постоянная

$$I_{ep} \{ f(\varepsilon) \} = \sqrt{\frac{2\pi^2 m}{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} w_0 s^2 \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq q^4 \left[N(q) + \frac{1}{2} \right] + [f(\varepsilon)(1 - f(\varepsilon))] w_0 s \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq q^3 \right\}; \quad (7)$$

$$I_{pe} \{ N(q) \} = 2\pi m^2 w_0 \int_{\frac{q^2}{8m}}^{\infty} d\varepsilon \left\{ [f(\varepsilon)(1 - f(\varepsilon))] + [N(q) + 1 - f(\varepsilon)] \left[sq \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \frac{(sq)^2}{2} \frac{\partial^2 f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right] \right\}; \quad (8)$$

$$I_{pp} = -v_{pp0} q [N(\vec{q}) - N_T(\vec{q})]; \quad (9)$$

$$I_{ed} \left\{ \vec{f}_1(\varepsilon) \frac{\vec{p}}{p} \right\} = -v_{ed} \vec{f}_1(\varepsilon) \frac{\vec{p}}{p}; \quad (10)$$

$$I_{ep} \left\{ \vec{f}_1(\varepsilon) \frac{\vec{p}}{p} \right\} = -v(\varepsilon) \vec{f}_1 \frac{\vec{p}}{p}, \quad (11)$$

$$f(\vec{p}, t) = f(\varepsilon(p)) + \vec{f}_1(\varepsilon(p)) \frac{\vec{p}}{p}. \quad (3)$$

Учитывая, что при столкновениях электронов с фононами передача энергии очень мала, упростим интегралы столкновений электронов с фононами, а именно разложим изотропную часть функции распределения электронов по малой передаче энергии вплоть до квадратичных членов

$$f(\vec{p} \pm \vec{q}) \equiv f(\varepsilon(\vec{p}) \pm \hbar \Omega(q)) = f(\varepsilon(p)) \pm \frac{\partial f(\varepsilon(p))}{\partial \varepsilon} \hbar \Omega + \frac{\partial^2 f(\varepsilon(p))}{\partial \varepsilon^2} \frac{(\hbar \Omega)^2}{2} \quad (4)$$

и подставим это разложение в интегралы столкновений, что позволит их существенно упростить, так интеграл столкновений электронов с фононами примет вид:

решетки; M_c - суммарная масса двух атомов; s - скорость звука; ρ - плотность вещества.

В результате конкретизации получим

$$\text{где} \quad v(\varepsilon) = \frac{\pi w_0}{\sqrt{m\varepsilon^3}} \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq q^3 \left[N(q) + \frac{1}{2} \right], \quad v_{ed} - \text{частота}$$

столкновений электронов с примесями и дефектами решетки, которая в рассматриваемом случае (низких температур) является определяющей изотропизацию электронной функции распределения.

$$\frac{\partial \bar{f}_1}{\partial t} \frac{\bar{p}}{p} - e\bar{E}v \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial \varepsilon} \frac{\bar{p}}{p} = -v_{ed} \bar{f}_1(\varepsilon) \frac{\bar{p}}{p}. \quad (12)$$

Считая анизотропную добавку к электронной функции распределения \bar{f}_1 стационарной и пренебрегая пространственной дисперсией, получаем оконча-

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} - \frac{2e^2}{3m\nu_{ed}} E^2 \cdot \frac{1}{\varepsilon^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\varepsilon^{3/2} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right] &= \sqrt{\frac{2\pi^2 m}{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \times \right. \\ &\times w_0 s^2 \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq q^4 \left[N(q) + \frac{1}{2} \right] + [f(\varepsilon)(1-f(\varepsilon))] w_0 s \times \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq q^3 \left. \right\} + I_{ee}, \quad (13) \\ \frac{\partial N(q)}{\partial t} &= I_{pp} + I_{pd} + 2\pi m^2 w_0 \int_{\frac{q^2}{8m}}^{\infty} d\varepsilon \{ [f(\varepsilon)(1-f(\varepsilon))] + [N(q)+1-f(\varepsilon)] \left[sq \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + \frac{(sq)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^2} \right] \}. \end{aligned}$$

Функции распределения как электронов $f(\varepsilon)$, так и фононов $N(q)$ - безразмерные величины, которые удовлетворяют таким условиям нормировки

$$\frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon = n; \quad (14)$$

где n - плотность электронов в валентной зоне (она же у металлов является и зоной проводимости, так как заполнена лишь частично).

$$\frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{1}{\hbar^3} \right) \int_0^{q_D} q^2 N(q) dq < \infty, \quad (15)$$

где q_D - дебаевский импульс фонона, который определяется из равенства

$$k_B T_D = sq_D,$$

где $k_B = 1.38 \cdot 10^{-16}$ эрг/К постоянная Больцмана; s - скорость звука; T_D - дебаевская температура. Конкретно далее все величины приведены для никеля (для которого можно сравнить расчеты с экспериментальными результатами [4]): $s = 5 \cdot 10^5$ см/с,

$T_D = 375$ К, откуда максимальный импульс фонона будет $1 \cdot 10^{-19}$ (г·см)/с, плотность электронов в валентной зоне $n = 2.5 \cdot 10^{22}$ см⁻³, плотность никеля

тельную систему двух уравнений для изотропных функций распределения электронов f и акустических фононов $N(q)$, которую и необходимо решить:

$\rho = 8.9$ г·см⁻³, постоянная решетки (расстояние между соседними атомами) $a = 3.5 \cdot 10^{-8}$ см.

В состоянии термодинамического равновесия функция распределения электронов $f(\varepsilon)$ является функцией Ферми-Дирака:

$$f(\varepsilon) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T_e} \right) + 1 \right]^{-1}, \quad (16)$$

где $\varepsilon_F = 5 \cdot 10^{-12}$ эрг, T_e - температура электронной компоненты (в экспериментах она составляла 20 и 80 К) совпадала с решеточной (фононной температурой) первоначально (до включения электрического поля $E = 0.08$ CGSE (24 В/см)). По остаточному сопротивлению никеля $\rho_{cur} = 3 \cdot 10^{-6}$ Ом·см находим частоту столкновений электронов с примесями и дефектами решетки $\nu_{ed} = 3 \cdot 10^{13}$ с⁻¹. Энергию электронов ε и фононов sq обезразмериваем на $k_B T_e$, время же будем измерять в характерных временах электрон-фононных соударений

$$\tau_{ep0} = \frac{(2\pi\hbar)^3 \hbar \rho}{\pi m^3 s \varepsilon_{1A}^2} = 10^{-7} \text{ с.}$$

Тогда система уравнений принимает вид:

$$\frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} - \Delta \tilde{\varepsilon} \cdot \frac{4}{\tilde{\varepsilon}^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\varepsilon}} \left[\tilde{\varepsilon}^{3/2} \frac{\partial f}{\partial \tilde{\varepsilon}} \right] = \beta \frac{\partial}{\partial \tilde{\varepsilon}} \left\{ \frac{\partial f}{\partial \tilde{\varepsilon}} \int_0^{4\sqrt{\alpha \tilde{\varepsilon}}} d\tilde{\varepsilon}_{ph} \times \tilde{\varepsilon}_{ph}^4 \left[N(\tilde{\varepsilon}_{ph}) + \frac{1}{2} \right] + [f(\tilde{\varepsilon})(1-f(\tilde{\varepsilon}))] 2\sqrt{\alpha} \int_0^{4\sqrt{\alpha \tilde{\varepsilon}}} d\tilde{\varepsilon}_{ph} \tilde{\varepsilon}_{ph}^3 \right\}; \quad (17)$$

$$\frac{\partial N(\tilde{\varepsilon}_{ph})}{\partial \tilde{t}} = \gamma \int_{\frac{\tilde{\varepsilon}_{ph}^2}{16\alpha}}^{\infty} d\tilde{\varepsilon} \{ [f(\tilde{\varepsilon})(1-f(\tilde{\varepsilon}))] + [N(\tilde{\varepsilon}_{ph}) + 1 - f(\tilde{\varepsilon})] \left[2\sqrt{\alpha} \tilde{\varepsilon}_{ph} \frac{\partial f(\tilde{\varepsilon})}{\partial \tilde{\varepsilon}} + (\tilde{\varepsilon}_{ph})^2 \frac{\partial^2 f(\tilde{\varepsilon})}{\partial \tilde{\varepsilon}^2} \right] \}, \quad (18)$$

где $\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{k_B T_e} = \frac{p^2}{2mk_B T_e}$; $\tilde{\varepsilon}_{ph} = \frac{sq}{k_B T_e}$; $\tilde{p} = \frac{p}{\sqrt{2mk_B T_e}}$; $\tilde{q} = \frac{q}{\sqrt{2mk_B T_e}}$;

$$\alpha = \frac{ms^2}{k_B T_e}, \quad \Delta \tilde{\varepsilon} = \frac{e^2 E^2 \tau_{ep0}}{6m\nu_{ed} k_B T_e}, \quad \beta^{-1} = 8 \cdot (\alpha)^{5/2}, \quad \gamma^{-1} = 2\alpha ..$$

Перепишем систему уравнений (16)-(17) с интегрированием по импульсам

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\tilde{p})}{\partial \tilde{t}} - \Delta \tilde{\varepsilon} \frac{1}{\tilde{p}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{p}} \left[p^2 \frac{\partial f(\tilde{p})}{\partial \tilde{p}} \right] = \\ = \frac{1}{\tilde{p}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{p}} \left\{ \frac{\partial f(\tilde{p})}{\tilde{p} \partial \tilde{p}} \times \int_0^{2\tilde{p}} d\tilde{q} \tilde{q}^4 \left[N(\tilde{q}) + \frac{1}{2} \right] + [f(\tilde{p})(1 - f(\tilde{p}))] \sqrt{\frac{1}{\alpha}} \cdot \int_0^{2\tilde{p}} d\tilde{q} \tilde{q}^3 \right\}; \end{aligned} \quad (19)$$

$$\frac{\partial N(\tilde{q})}{\partial \tilde{t}} = \int_{\tilde{q}/2}^{\infty} d\tilde{p} \tilde{p} \left\{ \frac{1}{\alpha} [f(\tilde{\varepsilon})(1 - f(\tilde{\varepsilon}))] + [N(\tilde{q}) + 1 - f(\tilde{\varepsilon})] \left[\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \tilde{q} \frac{\partial f(\tilde{p})}{\tilde{p} \partial \tilde{p}} + \tilde{q}^2 \frac{\partial}{2\tilde{p} \partial \tilde{p}} \frac{\partial f(\tilde{p})}{\tilde{p} \partial \tilde{p}} \right] \right\}, \quad (20)$$

где $0 < 2\tilde{p} \leq 85$; $\Delta \tilde{\varepsilon} = 0.3$; $0 < \tilde{\varepsilon} \leq 1800$;

$0 < \tilde{\varepsilon}_{ph} \leq 18$; $0 < \tilde{q} \leq \tilde{q}_D = 42.5$;

$$\alpha = \frac{ms^2}{2k_B T_e} = 0.045.$$

Интегрирование приведенной системы уравнений проводилось с помощью полностью консервативных разностных схем. Консервативность схемы является обязательным требованием, так как она обеспечивает отсутствие накопления ошибок при расчетах на больших временах (см., например, [5]). Суть состоит в удовлетворении нескольким законам сохранения, в данном случае речь идет об удовлетворении законов сохранения энергии и частиц.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В результате проведенных численных расчетов были найдены нестационарные функции распределения электронов $f(p)$ и фононов $N(q)$ по импульсам. На рис. 1 показана зависимость функции распределения электронов от безразмерного импульса в различные моменты времени.

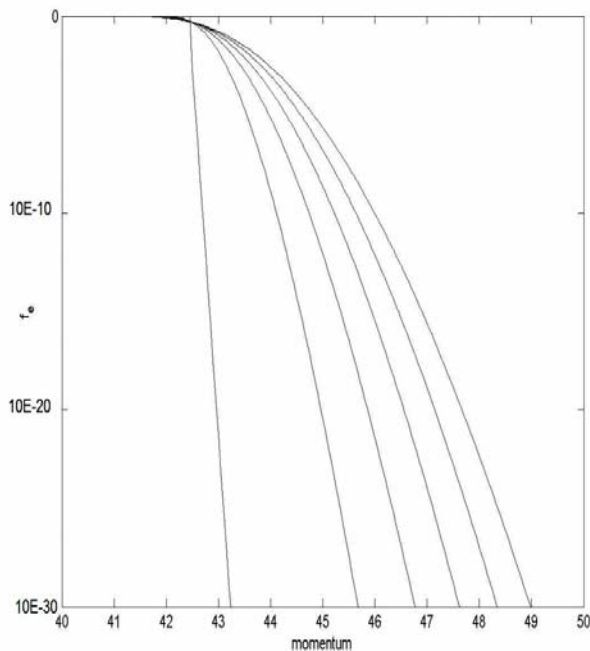


Рис. 1. Зависимость функции распределения электронов в различные моменты времени ($t = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$) от безразмерного импульса, кривые расположены слева – направо соответственно

Крайняя левая кривая соответствует термодинамически равновесной функции (16), которая взята в качестве начальной при решении системы уравнений (19)-(20). Из рисунка видно (кривые с увеличением промежутка времени смещаются слева – направо), что со временем функция распределения электронов все более отличается от термодинамически равновесной, приобретая высокоэнергетичный «хвост».

Таким образом, установлено, что энергия, получаемая электронной подсистемой от внешнего электрического поля, в результате электрон-фононных столкновений частично (малая часть из-за квазиупругости электрон-фононных столкновений) передается фононной подсистеме, а большая часть идет не на установление термодинамически равновесной функции распределения электронов (как это часто предполагается (см. [1-4])), а на формирование интенсивных высокоэнергетичных «хвостов» у электронной функции распределения.

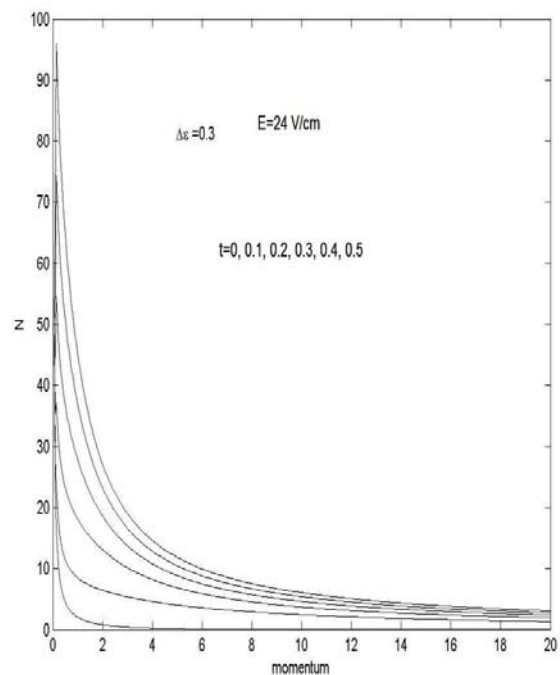


Рис. 2. Зависимость функции распределения фононов в различные моменты времени ($t = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$) для напряженности электрического поля $E = 24$ В/см от безразмерного импульса, кривые расположены

снизу – вверх соответственно

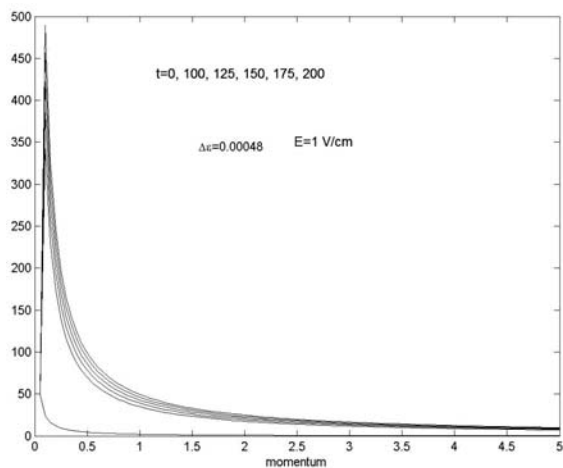


Рис. 3. Зависимость функции распределения фононов (в логарифмическом масштабе по оси ординат) в различные моменты времени ($t = 0, 100, 125, 150, 175, 200$) для малой напряженности электрического поля $E = 1 \text{ В/см}$ от безразмерного импульса, кривые расположены снизу – вверх соответственно

Такое кардинальное изменение функции распределения электронов приводит к формированию фо-

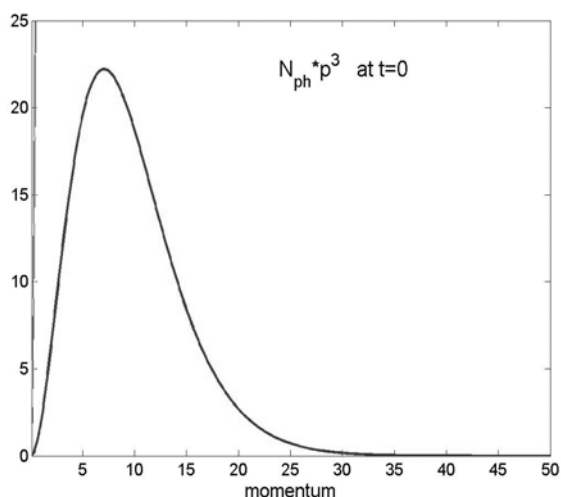


Рис. 4. Зависимость произведения термодинамически равновесной функции распределения фононов (функция Бозе-Эйнштейна (в момент времени $t=0$)) на куб импульса от безразмерного импульса

Как видно из рис. 5, у функций распределения фононов со временем формируются все более мощные высокоэнергетичные «хвосты», так как при электрон-фононных соударениях передается импульс при достаточно малой передаче энергии, рождается много фононов при дебаевской энергии, т.е. ФР фононов обогащается дебаевскими фононами.

Проведенный в работе [6] подробный анализ влияния такого аномального поведения электрон-фононной системы в сильном электрическом поле на поведение образцов под механической нагрузкой позволяет объяснить аномальные электропластиче-

ской функции распределения с очень сильно обогащенной фононами энергией, близкой к дебаевской (рис.2 и 3), в отличие от работы [4], в которой фононная функция распределения в этой области импульсов практически соответствует функции Бозе-Эйнштейна, но с температурой, соответствующей температуре электронной подсистемы.

Как показало наше численное моделирование, «температура» (точнее говорить, средняя энергия электронов, так как электронная функция распределения сильно отличается от термодинамически равновесной) электронной функции распределения изменяется незначительно, т.е. не происходит термализация полученной от электрического поля энергии, а формируются высокоэнергетические «хвосты», которые и приводят к такому кардинальному изменению фононной функции распределения.

Далее проведем сравнение зависимостей произведения функции распределения фононов на куб безразмерного импульса для термодинамически равновесной ситуации (функция Бозе-Эйнштейна (в момент времени $t=0$) рис. 4) и фононной функции в различные моменты времени после начала действия электрического поля (рис. 5).

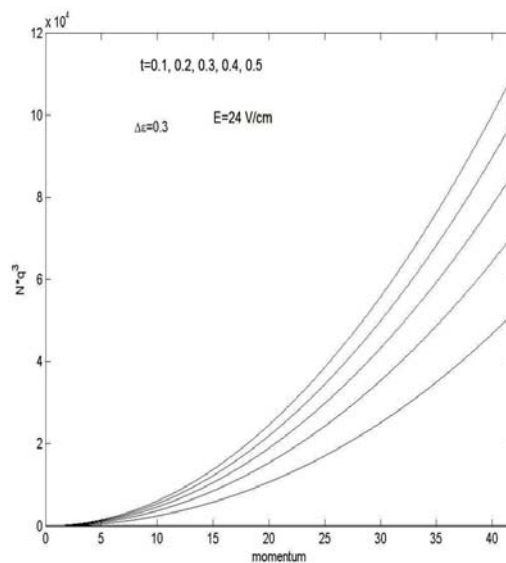


Рис. 5. Зависимость произведения функции распределения фононов (в моменты времени $t = 0; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5$) на куб импульса от безразмерного импульса кривые расположены снизу – вверх соответственно

ские свойства металлов и полупроводников, наблюдаемые в экспериментальных исследованиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучено формирование нестационарных неравновесных функций распределения электронов и фононов при действии на металл сильного импульсного электрического поля. Для конкретности параметры взяты для никеля, имеющего начальную температуру 20 К. Показано: изотропизация электронной ФР происходит в результате соударений с несовершенствами решетки; ФР электронов не становится

термодинамически равновесной, так как электрон-электронные соударения в данной ситуации дают существенно меньший вклад, чем электрон-фононные столкновения, а столкновения с «чужой» подсистемой не приводят к термализации; ФР электронов и фононов имеют высокоэнергетичные «хвосты», так как при электрон-фононных соударениях передается импульс при достаточно малой передаче энергии, рождается много фононов при дебаевской энергии, т.е. ФР фононов обогащается дебаевскими фононами. Такое поведение электрон-фононной системы в сильном электрическом поле позволяет объяснить аномальные электропластические свойства металлов и полупроводников, наблюдаемые в экспериментальных исследованиях (более подробно см. [6]).

Авторы благодарны Научно-технологическому центру в Украине за частичную финансовую поддержку работы по проекту № 4368.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Е. Громов, В.Я. Целлермайер, В.И. Базайкин. *Электростимулированное волочение: анализ*

процесса и микроструктура. М.: «Недра», 1996, 166 с.

2. В.И. Спицын, О.А. Троицкий. Исследование электронного воздействия на пластическую деформацию металла // *Металлофизика*. 1974, т. 51, с. 18-45.

3. 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.

4. N. Perrin and H. Budd. Phonon Generation by Joule Heating in Metal Films // *Phys. Rev. Lett.* 1972, v. 28, #26, p. 1701-1703/

5. 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.

6. В.И. Дубинко, В.И. Карась, В.Ф. Клепиков, П.Н. Остапчук, И.Ф. Потапенко. Моделирование повышения пластичности материалов под действием импульсов электрического тока // *Наст. номер*, с. 158-166.

Статья поступила в редакцию 05.09.2008 г.

ДИНАМІКА НЕРІВНОВАЖНОЇ ЕЛЕКТРОН-ФОНОННОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ НАПІВПРОВІДНИКІВ ТА МЕТАЛІВ У СИЛЬНОМУ ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ

В.І. Карась, І.Ф. Потапенко

Вивчено формування нестационарних нерівноважних функцій розподілу (ФР) електронів та фононів при дії на метал сильного імпульсного електричного поля. Для конкретності параметри взяті для нікеля, який має початкову температуру 20 К. Показано: ізотропізація електронної ФР відбувається внаслідок зіткнень з дефектами ґратки; ФР електронів не стає термодинамічно рівноважною, тому що електрон-електронні зіткнення у даній ситуації дають суттєво менший внесок, ніж електрон-фононні зіткнення, а зіткнення з «чужою» підсистемою не приводять до термалізації; ФР електронів і фононів мають високоенергетичні «хвости», тому що при електрон-фононних зіткненнях передається імпульс при досить малій передачі енергії; народжується багато фононів навколо дебаєвської енергії, тобто ФР фононів збагачується дебаєвськими фононами.

DYNAMICS OF NON EQUILIBRIUM ELECTRON-PHONON SYSTEM FOR SEMICONDUCTORS AND METALS IN A STRONG ELECTRICAL FIELD

V.I. Karas', I.F. Potapenko

Formation of non-stationary nonequilibrium electron and phonon distribution functions (DFs) is investigated at action on metal of a strong pulse electric field. For concreteness parameters are taken for the nickel having reference temperature of 20 K. It is shown: (i) electron distribution function occurs as a result of impacts to imperfections of a lattice; (ii) electron distribution function does not become thermodynamically equilibrium as electron-electron impacts in the given situation give essentially smaller contribution, than electron-phonon collisions, and collisions with a "another's" subsystem do not result to thermalization; (v) electron and phonon distribution functions have high-energy "tails" as at electron-phonon impacts the momentum is transferred by enough small transfer of energy, is born much phonons at Debye energy, i.e. phonon distribution function have maximum for Debye phonons.