

УДК 539.219.3; 538.931—405
© 1992ВОЗБУЖДЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ
С ДИФфуЗИОННЫМ МЕХАНИЗМОМ ПРОВОДИМОСТИ
ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Д. В. Алексеев

Показано, что ответственное за бародиффузию размерное взаимодействие носителей заряда (вакансий и междоузельных атомов) с неоднородным давлением в ударной волне приводит к электрической поляризации ее фронта. Получены формулы для плотности дипольного момента в случаях распространения плоской ударной волны в бесконечном кристалле и через образец заданной конечной толщины.

Несмотря на значительное время, прошедшее с открытия поляризации конденсированных сред под воздействием ударных волн (см. обзор [1] и цитированные в нем оригинальные работы), до настоящего времени отсутствует систематическое рассмотрение данного явления для кристаллов на микроскопическом уровне (относительно модели поляризации жидкостей см. [2]). В частности, отсутствует модель двойного электрического слоя на фронте ударной волны, постулируемого в цитированных в [1] феноменологических теориях (например, [3-5]).

В настоящей работе сделана попытка вычисления поляризации на фронте ударной волны в неполярных ионных кристаллах на основе развитого в [6] формализма вычисления баротоков, обусловленных размерным взаимодействием вакансий и междоузельных атомов с изменяющимся во времени неоднородным давлением. Для простоты, как и в [6], будем считать, что дилатационные параметры, определяющие обусловленную давлением поправку в химические потенциалы носителей заряда

$$\delta\mu_{\pm} = \omega_{\pm} P(x, t),$$

удовлетворяют условиям: $\omega_{+} = \omega_{-} = -\omega$ для кристаллов разупорядоченных по Шоттки, $\omega_{+} = -\omega_{-} = \omega$ для кристаллов разупорядоченных по Френкелю ($\omega > 0$).

1. Распределение плотностей тока и заряда
на фронте ударной волны
в бесконечном кристалле

Рассмотрим токовый отклик бесконечного кристалла на возмущение, создаваемое стационарным распространением плоской ударной волны. Сжатие вещества ударной волной приводит к поправкам в характеристики носителей (концентрации, коэффициенты диффузии и т. п.), зависящие от скачка давления ΔP на фронте. Поскольку токовый отклик линеен по ΔP (см. ниже) ввиду сложности последовательного учета зависимости характеристик носителей от давления, будем считать ударную волну слабой (для конденсированных сред сжатие

менее 15 % [7]) и пренебрежем изменением характеристик носителей при переходе через фронт (что соответствует пренебрежению в отклике поправками, нелинейными по ΔP). Кроме того, будем считать концентрацию носителей достаточно малой, чтобы можно было не учитывать их вклад в поток вещества на фронте ударной волны, т. е. полагаем, что ширина фронта обусловлена процессами теплопроводности и вязкости [8].

Профиль давления в ударной волне запишем в виде

$$P(x, t) = P_0 + \frac{\Delta P}{2} \operatorname{th} \left(\frac{x - vt}{2\delta} \right), \quad (1)$$

где 2δ — толщина фронта, v — скорость ударной волны.

Отклик подсистемы носителей заряда на возмущение (1) вычислим по формулам для стационарного баротока (выражения (18), (19) в [6]), в которые необходимо подставить Фурье-компоненту (1)

$$P_{k\Omega} = 2\pi P_0 \delta(\Omega) + \frac{(\pi k \delta)}{ik 2 \operatorname{sh}(\pi k \delta)} \delta(\Omega - vk).$$

Тогда плотности тока представляются в виде

$$j^{(F)}(x, t) = q\alpha \Delta P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{(\pi k \delta)}{2 \operatorname{sh}(\pi k \delta)} \frac{\{(vk)^2 + ivk(1 - \beta^2) Dk^2\}}{[ivk + \lambda_k^{(+)}] [ivk + \lambda_k^{(-)}]} \exp\{ik(x - vt)\}, \quad (2)$$

$$j^{(S)}(x, t) = -\beta q\alpha \Delta P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{(\pi k \delta)}{2 \operatorname{sh}(\pi k \delta)} \frac{(vk)^2}{[ivk + \lambda_k^{(+)}] [ivk + \lambda_k^{(-)}]} \exp\{ik(x - vt)\} \quad (3)$$

для кристаллов, разупорядоченных по Френкелю (F) и по Шоттки (S). Вводя безразмерные переменные $z = kv/\gamma$, $\zeta = \delta\gamma/v$, представим (2), (3) в виде

$$j^{(F)}(x, t) = \frac{q\alpha\gamma\Delta P}{v} I_{\zeta}^{(F)}(x, t),$$

$$j^{(S)}(x, t) = -\frac{\beta q\alpha\gamma\Delta P}{v} I_{\zeta}^{(S)}(x, t),$$

где

$$\gamma = 4\pi\sigma/\varepsilon = \tau^{-1}, \quad \alpha = \omega\sigma/q^2, \quad \beta = (D_+ - D_-)/(D_+ + D_-),$$

$$I_{\zeta}^{(F)}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{2\pi} \exp\{iz(x - vt)\gamma/v\} \frac{z^2 \{1 + iz(1 - \beta^2) D\gamma/v^2\}}{[iz + \lambda^{(+)}(z)] [iz + \lambda^{(-)}(z)]} \frac{(\pi\zeta z)}{2 \operatorname{sh}(\pi\zeta z)}, \quad (4)$$

$$I_{\zeta}^{(S)}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{2\pi} \exp\{iz(x - vt)\gamma/v\} \frac{z^2}{[iz + \lambda^{(+)}(z)] [iz + \lambda^{(-)}(z)]} \frac{(\pi\zeta z)}{2 \operatorname{sh}(\pi\zeta z)}, \quad (5)$$

$$\lambda^{(\pm)}(z) = -z^2 \left(\frac{D\gamma}{v^2} \right) - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left\{ 1 + 4\beta^2 z^2 \frac{D\gamma}{v^2} \left(1 + z^2 \frac{D\gamma}{v^2} \right) \right\}^{1/2}.$$

Для оценки интегралов (4), (5) воспользуемся малостью параметра $D\gamma/v^2 \ll 1$, что позволяет записать

$$\lambda^{(+)}(z) \simeq -(1 - \beta^2) z^2 \left(\frac{D\gamma}{v^2} \right),$$

$$\lambda^{(-)}(z) \simeq -1 - (1 + \beta^2) z^2 \left(\frac{D\gamma}{v^2} \right)$$

и оценить (4), (5) по вкладу ближайших к действительной оси полюсов подынтегральных функций. Поскольку из основных параметров задачи — среднего коэффициента диффузии носителей D , скорости ударной волны v и времени релаксации τ_s можно составить два параметра размерности длины D/v и $v\tau_s$, при оценке интегралов $I_{\zeta}^{(F, S)}$ можно выделить следующие предельные случаи: а) $\delta \ll D/v$, б) $D/v \ll \delta \ll v\tau_s$, в) $\delta \gg v\tau_s$. Так как ширина ударной волны много больше постоянной решетки (типичные значения $\delta \sim 10^{-6}$ см [2, 7]), случай «а» практически не реализуем ($D/v < 10^{-8}$ см). В случае «б» получаем

$$j^{(F)}(x, t) \simeq q\kappa \left\{ \frac{\Delta P}{\delta} \theta(x - vt) e^{-(x-vt)/\delta} - \theta(-x + vt) \frac{\Delta P}{v\tau_s} e^{-|x-vt|/v\tau_s} \right\}, \quad (6)$$

а в случае «в»

$$j^{(F)}(x, t) \simeq q\kappa \frac{\Delta P}{\delta} \left(\frac{v\tau_s}{\delta} \right) \{ \theta(x - vt) e^{-(x-vt)/\delta} - \theta(-x + vt) e^{-|x-vt|/\delta} \}. \quad (7)$$

При этом в обоих случаях

$$j^{(S)}(x, t) = -\beta j^{(F)}(x, t) \quad (8)$$

с точностью до поправок, зависящих от типа разупорядоченности и имеющих порядок $(\delta/v\tau_s)^2$ в случае «б» и порядок $(v\tau_s/\delta)^3$ в случае «в».

Аналогично можно получить оценки для распределения заряда $Q(x, t) = q\delta N(x, t)$ в окрестности фронта ударной волны. Опуская промежуточные вычисления, основанные на формулах раздела 2 работы [6], в рамках сделанных выше приближений представим распределение заряда в виде

$$Q^{(F, S)}(x, t) \simeq \frac{1}{v} j^{(F, S)}(x, t), \quad (9)$$

где $j^{(F, S)}$ дается формулами (6)–(8).

Таким образом, из (6)–(9) следует, что ударная волна приводит к поляризации среды в окрестности ее фронта, обусловленной бародиффузией носителей заряда. При этом в случае реализации разупорядоченности по Шоттки поляризация имеет место лишь при различии коэффициентов диффузии носителей разных знаков ($\beta \neq 0$). Плотность дипольного момента на фронте волны вычисляется по формуле

$$D^{(F, S)} = \int_{-\infty}^{+\infty} duuQ^{(F, S)}(x, t)|_{u=x-vt},$$

что после подстановки (6)–(9) и интегрирования дает

$$D^{(F)} = \frac{q\kappa}{\gamma} \left(1 + \frac{\delta}{v\tau_s} \right) \Delta P \simeq \frac{\varepsilon}{4\pi} \left(\frac{\omega}{q} \right) \Delta P, \quad \delta \ll v\tau_s, \quad (10a)$$

$$D^{(F)} = 2 \frac{q\kappa}{\gamma} \Delta P = 2 \frac{\varepsilon}{4\pi} \left(\frac{\omega}{q} \right) \Delta P, \quad \delta \gg v\tau_s, \quad (10б)$$

$$D^{(S)} = -\beta D^{(F)},$$

т. е. в рассмотренных предельных случаях плотность дипольного момента не зависит от ширины ударной волны и определяется характеристиками носителей (ω/q) и величиной скачка давления на фронте ΔP . Так как при $\delta/v\tau_s \sim 1$ (10a) переходит в (10б), равенство (10a) можно использовать в качестве первого приближения для «сшивки» предельных случаев.

Поскольку при переходе через фронт ударной волны наряду с давлением претерпевает скачок и температура [7, 8], сделаем порядковую оценку относи-

тельного вклада баро- и термотоков в полный ток. Исходя из френкелевского выражения для вероятности перескока

$$W \sim \exp\left(-\frac{u + \omega P}{k_B T}\right)$$

(u — энергия активации), в линейном приближении получаем

$$|j_P/j_T| \sim \frac{\omega T}{u} \frac{\Delta P}{\Delta T},$$

что с использованием оценки скачка температуры при переходе через фронт [7, 8]

$$\Delta T \simeq \frac{\alpha T}{C_P} \Delta P$$

(α — коэффициент теплового расширения) для типичных значений параметров ($\alpha \sim 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $u \sim 0.1 \div 1 \text{ эВ}$, $\omega \sim 10^{-29} \text{ м}^3$, $C_P \sim 10^6 \div 10^7 \text{ Дж/м}^3$) дает

$$|j_P/j_T| \sim \frac{\omega C_P}{\alpha u} \sim 10 \div 10^3,$$

т. е. вклад баротоков доминирует. Приведем также порядковую оценку численного значения плотности дипольного момента и напряженности электрического поля на фронте ударной волны при $\Delta P \sim 1 \text{ кбар}$ (10^8 Па)

$$D \sim \frac{\omega}{q} \Delta P \sim 10^2 \text{ Кл/м}, \quad E \sim \frac{\omega}{q} \frac{\Delta P}{\delta} \sim 10^6 \text{ В/м}.$$

2. Поляризационный отклик образца конечной толщины

Вычисление поляризации возбуждаемой плоской ударной волной, нормально падающей на бесконечный плоский образец толщины L , проведем в рамках указанных выше приближений в пределе $\delta \rightarrow 0$. Дипольный момент вычисляется по формуле

$$D(t) = \int_0^L x q \delta N(x, t) dx, \quad (11)$$

где $q \delta N(x, t)$ — обусловленное баротоками распределение заряда, рассчитываемое в рамках формализма [6] как реакция на возмущение

$$P(x, t) = \theta(t) \theta(x) \theta(L - x) \theta(x - vt),$$

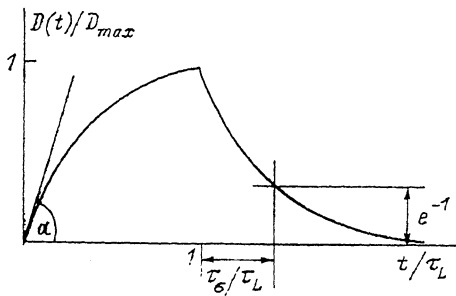
$\theta(u)$ — θ -функция Хевисайда.

Учет граничных условий обращения в нуль потоков носителей заряда за пределы образца приводит к решению в виде ряда Фурье по косинусам [11]

$$q \delta N^{(F, S)}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} q \delta N_{k_n}^{(F, S)}(t) \frac{2}{L} \cos(k_n x), \quad (12)$$

$$k_n = \pi n / L,$$

$$q \delta N_{k_n}^{(FS)}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} e^{-i\Omega t} q \delta N_{k_n \Omega}^{(F, S)}, \quad (13)$$



Форма импульса поляризации (18). $\text{tg } \alpha = \tau_L / \tau_\sigma$.

где

$$q \delta N_{k_n \Omega}^{(F)} = q v \Delta P k_n^2 \{ (-1)^n e^{i \Omega L / v} - 1 \} \frac{\{ i \Omega - (1 - \beta^2) D k_n^2 \}}{(k_n^2 v^2 - \Omega^2) (i \Omega + \lambda_{k_n}^{(+)})(i \Omega + \lambda_{k_n}^{(-)})}, \quad (14)$$

$$q \delta N_{k_n \Omega}^{(S)} = - \frac{\beta i \Omega}{i \Omega - (1 - \beta^2) D k_n^2} q \delta N_{k_n \Omega}^{(F)} \quad (15)$$

для кристалла разупорядоченного по Френкелю и по Шоттки соответственно. Отметим, что (14), (15) удовлетворяют правилу сумм

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} q \delta N_{k_n \Omega}^{(F, S)} = 0, \quad (16)$$

которое, согласно (13), обеспечивает электронейтральность начального состояния, а также непрерывность $\delta N(t)$ при $t = \tau_L = L/v$.

Подстановка (12)–(15) в (11) позволяет получить замкнутое выражение для $D^{(F)}(t)$, $D^{(S)}(t)$ в виде ряда Фурье по нечетным модам $k_n = (2l+1)\pi/L$, $l=0, 1, 2, \dots$, которые ввиду их громоздкости не выписываются. Формулы для $D^{(F, S)}(t)$ могут быть существенно упрощены в приближении с точностью до поправок, пропорциональных малому параметру $D\tau_\sigma/L^2$, характеризующему вклад диффузионной моды в бароток. Тогда

$$D_n^{(F)}(t) \simeq 4q \left(\frac{x}{\gamma} \right) \Delta P \left(\frac{\tau_\sigma}{\tau_L} \right) \left\{ \frac{\theta(t) + \theta(t - \tau_L) e^{\tau_L / \tau_\sigma}}{\pi^2 n^2 \left(\frac{\tau_\sigma}{\tau_L} \right)^2 + 1} e^{-t/\tau_\sigma} - \theta(t) \theta(\tau_L - t) \times \right. \\ \left. \times \frac{\cos\left(\frac{\pi n t}{\tau_L}\right) - \frac{\tau_L}{\pi n \tau_\sigma} \sin\left(\frac{\pi n t}{\tau_L}\right)}{\pi^2 n^2 \left(\frac{\tau_\sigma}{\tau_L} \right)^2 + 1} \right\} + O(D\tau_\sigma/L^2). \quad (17)$$

При этом ряд

$$D(t) = \sum_{n=2L+1} D_n(t)$$

суммируется точно при помощи теории вычетов [9], что позволяет окончательно представить поляризацию в виде

$$D^{(F)}(t) \simeq q \left(\frac{x}{\gamma} \right) \Delta P \{ \theta(t) \theta(\tau_L - t) (1 - e^{-t/\tau_\sigma}) -$$

$$-\theta(t - \tau_L)(1 - e^{\tau_L/\tau_\sigma})e^{-t/\tau_\sigma} + O\left(\frac{D\tau_\sigma}{L^2}\right), \quad (18)$$

$$D^{(S)}(t) = -\beta D^{(F)}(t).$$

Из (18) видно (см. рисунок), что поляризация имеет форму импульса, непрерывно нарастающего при прохождении ударной волны через образец ($0 < t \leq \tau_L$) и релаксирующего с характерным временем τ_σ при $t > \tau_L$. Максимальное значение поляризации

$$D_{\max} = D(\tau_L) = \frac{\varepsilon}{4\pi} \left(\frac{\omega}{q}\right) \Delta P (1 - e^{-\tau_L/\tau_\sigma})$$

является функцией отношения времен τ_L/τ_σ . При $\tau_L/\tau_\sigma \gg 1$

$$D_{\max} \simeq \frac{\varepsilon}{4\pi} \left(\frac{\omega}{q}\right) \Delta P,$$

т. е. совпадает с поляризацией на фронте ударной волны в бесконечной среде (см. формулу (10а), соответствующую тонким ударным волнам). В противоположном случае $\tau_L/\tau_\sigma \ll 1$

$$D_{\max} \simeq \frac{\varepsilon}{4\pi} \left(\frac{\omega}{q}\right) \Delta P \frac{\tau_L}{\tau_\sigma} = q\kappa \Delta P \tau_L$$

максимум поляризации пропорционален времени прохождения ударной волны через образец.

В заключение отметим, что поляризацию, обусловленную распространением нескольких ударных волн (в том числе и волн разряжения), в линейном приближении можно описать при помощи суперпозиции элементарных откликов (18).

Список литературы

- [1] Минеев В. Н., Иванов А. Г. // УФН. 1976. Т. 119. № 1. С. 75—109.
- [2] Еникеев Ф. У., Кубарев С. И., Пономарев О. А. // ФГВ. 1987. Т. 23. № 4. С. 68—75.
- [3] Зельдович Я. Б. // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. № 1. С. 237—243.
- [4] Иванов А. Г., Лисицин Ю. В., Новицкий Е. З. // ЖЭТФ. 1968. Т. 54. № 1. С. 285—291.
- [5] Зайдель Р. М. // ЖЭТФ. 1968. Т. 54. № 4. С. 1254—1258.
- [6] Алексеев Д. В. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 10. С. 2828—2834.
- [7] Дювал Дж. // Физика высоких плотностей энергии. М.: Мир, 1974. С. 14—59.
- [8] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1988. 733 с.
- [9] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1978. 831 с.

Кузбасский политехнический институт
Кемерово

Поступило в Редакцию
10 апреля 1991 г.