нератора с учетом переноса энергии излучения и испарения стенок.— ИФЖ, 1982, т. 43, № 6.
11. **Урбан В. В.** Теоретическая модель взрывного плазменного генератора. Автореф. канд. дис.— Минск: НИИ ПФП, 1981.
12. **Куропатенко В. Ф.** Уравнение состояния продуктов детонации конденсированных ВВ.— ЧММСС, 1977, т. 8, № 6.
13. **Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В.** Таблицы квантово-статистического уравнения состояния одиннадцати элементов.— М., 1975. Деп. ВИНИТИ, № 2192—75.
14. **Кузнецов Н. М.** Термодинамические функции и ударные адиабаты воздуха при высоких температурах.— М.: Машиностроение, 1965.

Поступила 21/VI 1985 г.

УДК 534.222.2

МЕХАНИЗМ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ОБЪЕМНОГО ЗАРЯДА ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ ИОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

В. К. Сироткин, В. В. Сурков

(*Москва*)

При ударном нагружении твердых тел (диэлектриков, полупроводников, металлов [1—3]) наблюдаются электромагнитные явления, такие как электромагнитное излучение и эмиссия, возникновение тока в цепи короткозамкнутого конденсатора при сжатии его пластин и т. п. При феноменологическом описании этих процессов ударный фронт (УФ) рассматривается как скачок, на котором задаются поляризация, диэлектрическая проницаемость и проводимость вещества, при этом механизм разделения зарядов в УФ не конкретизируется [1]. В данной работе используется иной подход, основанный на изучении кинетики точечных дефектов и дислокаций в ударной волне (УВ), что позволяет исследовать механизмы разделения зарядов в УФ, рассчитать зависимость скачка потенциала (или поляризации) на ширине фронта от амплитуды ударного сжатия, а также объяснить ряд экспериментальных зависимостей.

Наиболее изучены к настоящему моменту ионные кристаллы, имеющие структуру типа NaCl, в которых носители тока в обычных условиях — вакансии положительных ионов. Электризация кристаллов при квазистатической нагрузке (эффект Степанова) связана с перемещением заряженных дислокаций. В экспериментах по ударному сжатию скорость и заряд дислокаций имеют другие значения, поэтому роль дислокаций в образовании заряда на УФ не известна [1]. Объяснение эффекта за счет диффузии вакансий Na^+ через УФ не дает количественного согласия с экспериментом [1]. В данной работе рассматривается как диффузионный, так и надбарьерный механизм перемещения точечных дефектов и дислокаций с учетом их размножения в УФ.

В УФ происходит размножение дефектов по Френкелю ($\sim 10^{17}$ см$^{-3}$ на каждый процент пластической деформации), поэтому заметную роль приобретают также межузельные ионы (МИ). Сжатие решетки в УФ приводит к искажению равновесной конфигурации атомов в окрестности дефекта, в результате чего последний может перемещаться. При термофлуктуационном механизме вероятность того, что дефект k-го сорта перейдет из одного равновесного положения в другое, определяется выражением

$$\nu_k^{\pm} = \nu_{0k} \exp\left(-u_k^{\pm}/kT\right), \qquad (1)$$

где $\nu_k^{\pm}$ — частота перескоков; индексы $+$ и $-$ отвечают перемещению вдоль направления распространения волны и против [4]; T — абсолютная температура; $\nu_{0k} = 10^{12}$—10^{14} с$^{-1}$; $u_k^{\pm}$ — энергия активации, характеризующая соответствующий потенциальный барьер и зависящая от координат x, t данного дефекта. Если точечный дефект захвачен движущейся дислокацией, то его скорость равна скорости дислокации c_d, а частота перескоков $\nu = c_d/a$. В этом случае перенос заряда в УВ осуществляется дислокациями, причем знак заряда дислокации определяется разностью энергий связи с дислокацией дефектов различного типа [5]. Вначале рассмотрим перенос заряда точечными дефектами. Обозначим количество частиц в единице объема в сечениях $(x - a/2)$ и $(x + a/2)$ (a — постоянная решетки) через n_{k1} и n_{k2}. Тогда плотность потока частиц через сечение x имеет вид $j_k = \left(\nu_{k1}^{+} n_{k1} - \nu_{k2}^{-} n_{k2}\right) a$. Разлагая это выражение по параметру a и учитывая перенос дефектов вместе с веществом и под действием электрического поля, получим окончательно

$$(2)\quad j_k = an_k\left[\nu_k^+ - \nu_k^- - \frac{a}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\nu_k^+ + \nu_k^-\right)\right] - \frac{a^2}{2}\left(\nu_k^+ + \nu_k^-\right)\frac{\partial n_k}{\partial x} + n_k v + \frac{\sigma_k E}{q_k}.$$

Здесь v — массовая скорость вещества в УВ; q_k — заряд частиц данного сорта; $\sigma_k = a^2 q_k^2 n_k\left(\nu_k^+ + \nu_k^-\right)/2kT$ — ионная проводимость; $\nu_k^\pm$ — функции только температуры и напряжений, влияющих на высоту потенциального барьера, поскольку зависимость от напряженности E — внешнего электрического поля и поля, создаваемого заряженными дефектами,— учтена в (2) в линейном приближении последним слагаемым.

Уравнение непрерывности и уравнение Максвелла запишем как

$$(3)\quad \frac{\partial n_k}{\partial t} + \frac{\partial j_k}{\partial x} = f_k - \mu_{km} n_k n_m,\ f_k = M_k\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|,$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial \varepsilon E}{\partial x} = \sum_k q_k (n_k - n_{k0}),$$

где f_k — функция источника дефектов, образующихся в УВ; M_k — коэффициент размножения; $d\gamma/dt$ — скорость пластической деформации; коэффициент μ_{km} пропорционален вероятности рекомбинации вакансий и МИ, причем из закона сохранения заряда следует, что $M_k = M_m$ и $\mu_{km} = \mu_{mk}$; ε — диэлектрическая проницаемость; n_{k0} — начальная плотность дефектов. Коэффициент μ_{km} пропорционален сечению рассеяния частиц $\sim 4a^2$ и их скорости $\sim \nu a$, т. е. $\mu_{km} \sim \nu a^3$. Оценки при $a = 3\cdot 10^{-10}$ м и $n = 10^{18}$ см$^{-3}$ показывают, что рекомбинационный член мал по сравнению с первым слагаемым в (3) вплоть до частот $\nu \sim 10^{14}$ с$^{-1}$ и поэтому в дальнейшем не учитывается. Отношение последнего слагаемого в (2) к первым членам $\sim qE\lambda/kT$, где λ — характерный масштаб УФ. При напряженности поля $E \sim 10^8$ В/м (напряженность пробоя диэлектрика) это отношение $\sim 0{,}4$, т. е. последним слагаемым также можно пренебречь.

При сделанных выше предположениях поведение частиц определяется независимыми уравнениями. Подставляя (2) в (3), найдем для плотностей частиц уравнение типа Фоккера — Планка с источником (индекс k опущен)

$$(4)\quad \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\left\{v + a\left(\nu^+ - \nu^- - \frac{a}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[\nu^+ + \nu^-\right]\right)\right\}n - \frac{a^2}{2}\left(\nu^+ + \nu^-\right)\frac{\partial n}{\partial x}\right] = M\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|.$$

Под воздействием внешних напряжений направления вдоль и против оси x становятся неравноправными. Это приводит к тому, что ν^+ и ν^-, вычисленные в одной точке, будут отличаться. Однако, как показывает анализ, учет этого эффекта качественно не изменяет результата. Поэтому в дальнейшем будем считать, что $\nu^+(x) = \nu^-(x) = \nu(x)$. Слагаемое в круглых скобках обусловлено движением дефектов в силовом поле УВ. При $\nu = \mathrm{const}$ из (4) получается диффузионное уравнение. Если учесть в первом приближении по a различие ν^+ и ν^- в виде $\nu^- - \nu^+ \sim a\,\partial\nu/\partial x$, то общий характер приводимых ниже решений при этом не изменяется, основные же формулы совпадают с точностью до числового множителя.

В случае переноса заряда дислокациями под n следует понимать число дислокаций на единицу площади. Соответственно формула (2) дает поток дислокаций на единицу длины. Заряд дислокаций не зависит от величины приложенной нагрузки [5], а скорость их размножения пропорциональна $d\gamma/dt$ так же, как для точечных дефектов. В итоге вновь приходим к уравнению (4) с другими параметрами: $\nu = c_d/a$, $M = M_d \sim 10^{16}$ м$^{-2}$ [6] — коэффициент размножения дислокаций.

Проанализируем стационарный УФ, когда все параметры среды зависят от одной переменной $\xi = (x - Dt)/\lambda$, где $D = \mathrm{const}$ — скорость УВ. Преобразуя переменные, проинтегрируем (4) по ξ. Пренебрегая в окончательном выражении v по сравнению с D, имеем

$$(5)\qquad h - m = \alpha d\mu m/d\xi,\ m = n/n_0,\ \mu = \nu/\nu_1,$$
$$\alpha = a^2\nu_1/(D\lambda),\ h = 1 + M\gamma(\xi)/n_0.$$

Здесь использовано условие $\mu = m = 1$ при $\xi \to +\infty$, а также учтено, что все производные обращаются в нуль в бесконечности.

Интегрирование (5) дает

$$(6)\qquad m(\xi) = \frac{1}{\alpha\mu(\xi)}\int\limits_{-\infty}^{\xi} h(\xi')\exp\left[\frac{1}{\alpha}\int\limits_{\xi}^{\xi'}\frac{d\xi''}{\mu(\xi'')}\right]d\xi'.$$

Для слабых УВ удобнее воспользоваться асимптотическим разложением решения по малому параметру α. Например, при $\nu_1 = 10^5$ с$^{-1}$, $a = 3\cdot10^{-10}$ м, $D = 2{,}5$ км/с, $\lambda = 10^{-4}$ м находим, что $\alpha = 3\cdot10^{-14}$. Уравнение (5) относится к типу сингулярно-возмущенных уравнений [7]. Тем не менее в асимптотическом разложении его решения пограничный ряд отсутствует, поскольку нулевое приближение удовлетворяет начальным условиям. Так, интегрируя точное решение (6) k раз по частям, запишем выражения

$$m = h - \alpha\frac{d}{d\xi}\mu h + \alpha^2\frac{d}{d\xi}\mu\frac{d}{d\xi}\mu h - \ldots + \frac{(-1)^k\alpha^k}{\mu}\left(\mu\frac{d}{d\xi}\right)^k\mu h + \frac{(-1)^k\alpha}{\mu}I,$$
$$I = \int\limits_{-\infty}^{\xi}\exp\left[\frac{1}{\alpha}\int\limits_{\xi}^{\xi'}\frac{d\xi''}{\mu(\xi'')}\right]\frac{1}{\mu(\xi')}\left(\mu(\xi')\frac{d}{d\xi'}\right)^{k+1}\mu(\xi')h(\xi')\,d\xi',$$

откуда в первом приближении

$$(7)\qquad m = h - \alpha\frac{d}{d\xi}\mu h.$$

В слабых УВ ($p \ll K$, p — давление, K — модуль объемного сжатия), когда эффекты ангармонизма колебаний решетки несущественны, в выражении (1) можно принять зависимость $u = u_0 - \beta\gamma$, где $\gamma = p/K$. Тогда, используя (7), получим распределение плотности заряда ρ по ширине УФ при термофлуктуационном механизме перемещения точечных дефектов или дислокаций. Пренебрегая на этой стадии размножением дефектов и учитывая, что они рождаются парами (условие электронейтральности), найдем

$$(8)\qquad \rho = -\frac{qa\beta n_0}{D\lambda kT}v(\gamma)\frac{d\gamma}{d\xi},\quad E_x = -\frac{qan_0}{\varepsilon\varepsilon_0 D}[v(\gamma) - v(0)],$$
$$v(\gamma) = a\nu_0\exp[-(u_0 - \beta\gamma)/(kT)]$$

($v(\gamma)$ — скорость дефектов). Для дислокаций q означает линейную плотность заряда дислокации. В случае точечных дефектов выражения (8) нужно просуммировать по всем типам дефектов.

При надбарьерном перемещении зарядов следует положить в (7) $\mu = \mathrm{const}$. Учитывая размножение дефектов и дислокаций, вместо (8) имеем

$$(9)\qquad \rho = -\frac{qav_0M}{D\lambda}\frac{d\gamma}{d\xi},\quad E_x = -\frac{qav_0M}{\varepsilon\varepsilon_0 D}[\gamma(\xi) - \gamma_0] + E_0,$$

где $v_0 = a\nu_0$ — предельная скорость дефектов (для дислокаций v_0 порядка скорости поперечной волны). Константу E_0 можно определить из (8) при $\gamma = \gamma_0 = u_0/\beta$, γ_0 — критическая деформация, при которой потенциальный барьер обращается в нуль. Для дислокаций линейная плотность заряда q, вообще говоря, различна на динамической стадии (8) и при термофлуктуационном механизме смещения (9).

Если аппроксимировать УФ зависимостью вида $\gamma = (\gamma_*/2)(1 - \mathrm{th}\,\xi)$ (γ_* — амплитуда ударного сжатия), то из (8), (9) вытекает, что $\rho \sim \sim \mathrm{ch}^{-2}\xi$. Следовательно, заряд сосредоточен в основном на ширине УФ, и распределение его представляет собой солитон (несимметричный в случае (8)).

Оценим параметры, описывающие точечные дефекты. Поскольку радиус ионов Cl^- больше, чем у ионов Na^+, ограничимся изучением последних, используя индекс i для МИ и v для вакансий Na^+. Рассмотрим бесконечную решетку, содержащую одиночный МИ. Пусть решетка сжата по направлению [1, 0, 0]. Воспользуемся энергией взаимодействия ионов в виде [8]

$$u_{ij} = \chi \exp(-r_{ij}/b) \pm q^2/r_{ij}.$$

Здесь r_{ij} — расстояние между i-м и j-м ионами; χ и b — эмпирические параметры (для NaCl $b = 0{,}321 \cdot 10^{-10}$ м, $\chi = 1{,}09 \cdot 10^3$ эВ). Если не учитывать искажений решетки вблизи дефекта, то в качестве оценки u_i можно взять разность потенциальных энергий МИ при положении в центре ячейки и при смещении его в направлении сжатия на середину грани ячейки. При таком перемещении кулоновский потенциал МИ не меняется, а учет отталкивания ближайших соседей (соответственно восьми и четырех) дает формулу

$$u_i = 4\chi[\exp(-a/b\sqrt{2}) - 2\exp(-\sqrt{a^2 + s^2}/2b)], \tag{10}$$

где s и a — параметры решетки вдоль и поперек направления сжатия. Для решетки с вакансией Na^+ максимум потенциала достигается при смещении ближайшего иона Na^+ до середины расстояния, отделяющего его от вакансии. При аналогичных предположениях находим

$$u_v = 2\chi[\exp(-\sqrt{a^2 + s^2}/2b) + 4\exp(-\sqrt{5a^2 + s^2}/2b) - \exp(-s/b) - 2\exp(-a/b)] + V, \tag{11}$$

$$V = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\sum_{i,j,k}^{+\infty\,\prime} (-1)^{i+j+k} \left\{ \frac{1}{\sqrt{s^2 (i-1/2)^2 + a^2 [k^2 + (j-1/2)^2]}} - \frac{1}{\sqrt{s^2 i^2 + a^2 (j^2 + k^2)}} \right\} - \frac{1}{\sqrt{s^2 + a^2}}\right]$$

(при суммировании исключается точка $i = j = k = 0$).

Связь объема и давления в УВ определяется адиабатическим уравнением состояния вплоть до $p \sim K$ [9], откуда получаем зависимость между s и γ применительно к одноосному сжатию

$$s = a(\gamma\Gamma + 1)^{-1/\Gamma}, \tag{12}$$

где Γ — показатель адиабаты. Формулы (10)—(12) определяют зависимость $u_k(\gamma)$, причем в области $a\gamma/b \ll 1$ эти соотношения линеаризуются. Соответствующий расчет для МИ Na^+ дает $u_{i0} = 4{,}5$ эВ, $\beta_i = 11$ эВ. Величина u_{i0}, по-видимому, завышена, так как ее значение превышает энергию образования дефектов по Френкелю ($\sim$3,5 эВ). Для оценки u_v проще рассмотреть всестороннее сжатие, тогда решеточная сумма в (11) оказывается не зависящей от s и ее можно исключить, если в линейном разложении использовать экспериментальное значение $u_{v0} = 0{,}86$ эВ. В этом случае $\beta_v = -5{,}7$ эВ (экспериментальное значение $\beta_v = -1{,}5$ эВ [10]).

Плотность заряда (8) оказывается положительной как для вакансий, так и для МИ. Это означает, что в УФ содержится избыточное количество МИ и недостаточное вакансий (В) Na^+ (рис. 1). Потенциальный барьер для вакансий увеличивается, и их роль с ростом давления уменьшается. Для МИ Na^+ пороговое значение $\gamma_0 \approx 0{,}4$. Однако учет раздвижения ближайших соседей МИ и ангармонизма колебаний решетки может уменьшить γ_0.

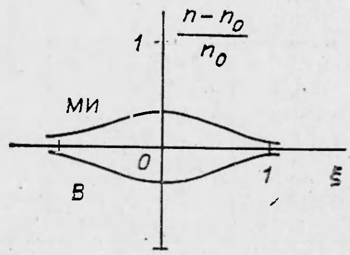

Рис. 1

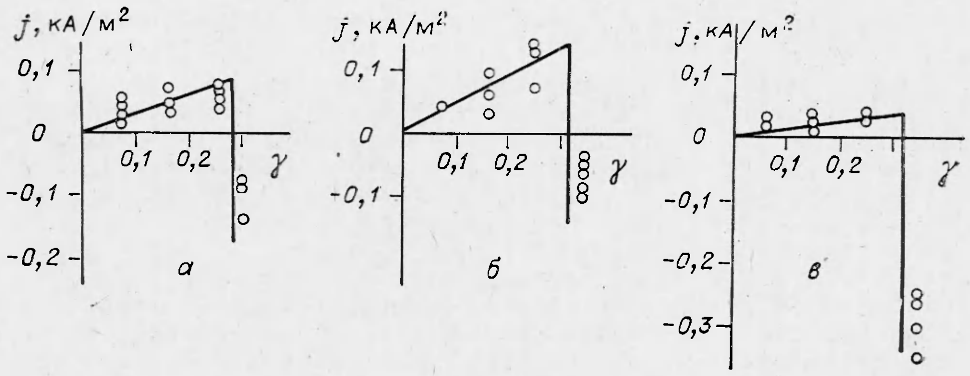

Рис. 2

Для дислокаций пороговое значение γ_0 определяется напряжениями порядка предела текучести Y (для NaCl $Y \sim 0{,}05$ ГПа, т. е. $\gamma_0 \sim 2\cdot10^{-3}$), что существенно меньше γ_0 для МИ Na^+. Поэтому в слабой УВ перенос заряда, по-видимому, обусловлен дефектами, связанными с дислокациями.

Для сопоставления с экспериментом [1] по ударному сжатию короткозамкнутого конденсатора воспользуемся выражением для приращения потенциала в УВ, которое следует из (9). Пренебрегая γ_0, $E_0(\xi < 0)$, имеем

$$\Delta\varphi = \frac{E_*\lambda}{2}\left[\xi - \ln(2\,\mathrm{ch}\,\xi)\right],\quad E_* = \frac{qav_0M\gamma_*}{\varepsilon\varepsilon_0 D}. \tag{13}$$

За время установления электрического сигнала в измерительной цепи $\tau \approx \approx 10^{-9}$ с на концах цепи образуется разность потенциалов $\Delta\varphi \sim E_* D\tau$, которая пропорциональна амплитуде плотности тока j_*, регистрируемой на выходе. Формула (13) подтверждается наблюдаемой на эксперименте линейной зависимостью $j_*(\gamma_*)$. Объяснение данного эффекта состоит в том, что с ростом степени сжатия вещества пропорционально увеличивается количество дислокаций и точечных дефектов.

На рис. 2 приведены расчетные зависимости для NaCl, которые сравниваются с экспериментальными результатами [1] для различных кристаллографических осей (*а* — [1, 0, 0], *б* — [1, 1, 0], *в* — [1, 1, 1]). Использовались следующие значения параметров: $q = 1{,}7\cdot10^{-11}$ Кл/м [5], $\nu_0 = = 5\cdot10^{12}$ с$^{-1}$, $D = 3$ км/с, $\varepsilon = 6$. Согласование данных осуществлялось подбором параметра M. В случае дислокационного механизма переноса заряда коэффициент размножения M_d, приведенный в таблице, находится в хорошем согласии с результатами [6]. В случае движения точечных дефектов, коэффициент $M_т$ также согласуется с экспериментальным значением $M_т$ [10]. Тем не менее следует предпочесть дислокации, для которых, как указывалось выше, γ_0 на 1—2 порядка меньше. Учитывая, что экспериментальные параметры M_d и $M_т$ находятся в отношении $M_d q_d/e \sim M_т$ (e — элементарный заряд), можно предположить, что все дефекты данного типа переносятся дислокациями, чем и определяется заряд последних. Измерение пороговых значений j_* и γ_0 способствовало бы уточнению теоретических параметров.

Проведенный анализ несправедлив при давлениях, близких к значению K ($\gamma \approx 0{,}3$—$0{,}4$), когда наблюдается изменение полярности электрического сигнала. Этот эффект может быть связан с достижением МИ порогового значения γ_0, при котором скорость их перемещения сопоставима или даже больше скорости дислокаций. Смена механизма пе-

Направление	$M_d\cdot10^{-16}$, м$^{-2}$	$M_т\cdot10^{-24}$, м$^{-3}$	$E_*\cdot10^{-5}$, В/м
[1, 0, 0]	1,9	2,0	2,7
[1, 1, 0]	2,8	3,0	4,7
[1, 1, 1]	0,8	0,8	1,1

реноса заряда в УФ (при $u_0 \gg kT$ для точечных дефектов) будет достаточно резкой. Отметим, что для объяснения столь резкой смены знака нельзя исключать явление электронного пробоя кристалла.

В таблице представлены максимальные значения E_* для точек излома на рис. 2. Они на два порядка меньше критического поля $E_c \approx \approx 1{,}3 \cdot 10^8$ В/м для NaCl. Однако следует учесть, что повышение концентрации дефектов в УВ и существенная деформация решетки ($\gamma_0 \approx 0{,}3$) могут привести к образованию дополнительных локальных уровней в запрещенной зоне, т. е. к снижению E_c.

Таким образом, изучая кинетику дефектов и дислокаций в УФ, можно объяснить ряд экспериментальных закономерностей. Выяснена роль размножения заряженных дефектов и дислокаций, что позволяет описать наблюдаемое на эксперименте линейное увеличение плотности тока в определенном диапазоне давлений как функцию степени сжатия, а также рассчитать начальный скачок потенциала в измерительной цепи. Оценки пороговых деформаций в NaCl показали, что при $\gamma \leqslant 0{,}4$ заряд, распределенный в УФ, обусловлен движением дислокаций. С ростом давления потенциальный барьер для МИ уменьшается, и при $\gamma \geqslant 0{,}4$ они также становятся носителями тока. Расчет электрических полей в УФ показывает, что при таких деформациях возможны пробойные явления. На основе полученных формул при известной геометрии УВ можно рассчитать дипольный момент и излучение ударно-сжатой области в зависимости от амплитуды давления.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Минеев В. Н., Иванов А. Г.** ЭДС, возникающая при ударном сжатии вещества.— УФН, 1976, т. 119, № 1.
2. **Демин В. М., Соболев Г. А. и др.** О природе механоэлектрического излучения рудных тел.— ДАН СССР, 1981, т. 260, № 2.
3. **Бивин Ю. К., Викторов В. В. и др.** Электромагнитное излучение при динамическом деформировании различных материалов.— Изв. АН СССР. МТТ, 1982, № 1.
4. **Малкович Р. Ш.** Обобщенные уравнения диффузии в кристалле.— ФТТ, 1982, т. 24, № 2.
5. **Шевцова И. Н.** Заряжение подвижных дислокаций и электризация ионных кристаллов при пластической деформации.— ФТТ, 1983, т. 25, № 4.
6. **Григорьев В. Г., Немиров А. С., Сироткин В. К.** Структура ударных волн в упругопластических релаксирующих средах.— ПМТФ, 1979, № 1.
7. **Васильева А. Б., Бутузов В. Ф.** Асимптотические разложения решений сингулярно-возмущенных уравнений.— М.: Наука, 1973.
8. **Киттель Ч.** Введение в физику твердого тела.— М.: Наука, 1978.
9. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений.— М.: Физматгиз, 1963.
10. **Pierce C. B.** Effect of pressure on the ionic conductivity in doped single crystals of sodium chloride, potassium chloride and rubidium chloride.— Phys. Rev., 1961, v. 123, N 3.

Поступила 5/VII 1985 г.

УДК 532.582

ДВИЖЕНИЕ ШАРА В ЖИДКОСТИ, ВЫЗЫВАЕМОЕ КОЛЕБАНИЯМИ ДРУГОГО ШАРА

В. Л. Сенницкий

(Новосибирск)

В данной работе рассматривается следующая задача. В идеальной несжимаемой неограниченной извне жидкости находятся два твердых шара. Первоначально жидкость и шары покоятся относительно инерциальной системы прямоугольных координат x, y, z. В последующие моменты времени первый шар совершает заданные периодические колебания. При этом его центр перемещается вдоль оси y. Центр второго шара, совпадающий