

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В МЕТАЛЛЕ ПРИ ЕГО НАГРЕВАНИИ И ДЕФОРМАЦИИ

Дубский Г.А., Егорова Л.Г.

Аннотация. Исследования посвящены постановке физико-математической задачи для описания явления переноса заряда и разработке алгоритма для определения потоков заряда и энергии в кристаллических металлах при действии на них тепловых и механических возмущений. В работе предложена физико-математическая модель для расчета изменения удельного электрического сопротивления металла при его нагревании и пластической деформации. В работе описан алгоритм расчета изменения удельного электрического сопротивления металла, рассмотрены и описаны основные механизмы рассеяния электронов проводимости, участвующих в процессе переноса заряда с учетом того, что валентные электроны распределены согласно функции Ферми-Дирака и подчиняются принципу Паули. В основу математической модели заложено кинетическое уравнение Больцмана в τ – приближении. В работе теоретически рассчитаны времена релаксации – τ для рассмотренных механизмов рассеяния. На основе расчетов получены теоретические формулы для расчета удельных сопротивлений нормального металла в зависимости от его температуры, числа дислокаций и вакансий.

Ключевые слова: математическая модель, физическая модель, термодинамическая система, электрическое сопротивление, дислокации, вакансии.

Введение

Для реализации проблемы, связанной с разработкой высокоинформативного электрического контроля качества металлопродукции, необходимо решить несколько задач. Решение этих задач позволит установить механизмы изменения электрического сопротивления при отклонении равновесной структуры кристалла при действии на него внешних физических полей – температурных, электрических, магнитных, механических и др. Прежде чем формулировать физико-математическую задачу явлений переноса заряда в поликристаллическом металле, представим его физическую модель.

Модель кристаллического металла

Кристаллический металл представляем моделью, близкой к модели Друде-Лоренца, суть которой состоит в том, что жесткий ионный остов, погруженный в газ слабо взаимодействующих между собой квазисвободных электронов, подчиняющихся принципу Паули.

Для описания свойств металла в данной модели будем считать ее двухкомпонентной термодинамической системой, состоящей из двух подсистем, находящихся в непрерывном взаимодействии между собой. Схема модели представлена на рис. 1.

Для того чтобы перевести физическую модель на язык математики, используемый квантовой статистической физикой, ионный кристаллический остов сопоставим с газом квазичастиц – фононов. Фонон – это квант моды упругих колебаний ионов кристаллического остова.



Рис. 1. Схема модели кристаллического металла

Согласно [1] импульс фонона определяется как

$$\vec{p}_\phi = \hbar \vec{k}_\phi, |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda_\phi},$$

где λ_ϕ – длина волны фонона; $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с – постоянная Планка; \vec{k}_ϕ – волновой вектор; λ_ϕ – длина волны фонона.

А энергия

$$E_{\phi} = \hbar\omega_{\phi} = \frac{\hbar^2 |\vec{k}_{\phi}|^2}{2m_{\phi}} = \frac{2\pi\hbar V_{\phi}}{\lambda_{\phi}},$$

где $\omega_{\phi} = 2\pi\nu_{\phi}$ – циклическая частота фонона; V_{ϕ} – скорость фонона (в изотропном твердом теле равна скорости звука).

Число мод колебаний ионов кристаллического остова равно $3N$, где N – число атомов в кристалле.

Состояние фононного газа и его свойства описываются равновесной функцией распределения Бозе-Эйнштейна:

$$f_0(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}\right) - 1}, \quad (1)$$

где ε – энергия фонона в заданном состоянии; ε_F – энергия Ферми; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Любое изменение в кристаллической структуре приводит к изменению равновесной функции распределения (1).

Электронная подсистема, включающая в себя газ квазисвободных электронов проводимости, подчиняющихся принципу Паули, описывается равновесной функцией распределения Ферми-Дирака:

$$f_0(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}\right) + 1}. \quad (2)$$

Действие на эту подсистему любого физического поля приводит к нарушению равновесности функции (2), а значит, и к изменению состояния подсистемы 2, порождающее перенос заряда и энергии по кристаллическому металлу.

Цель исследования определена как постановка физико-математической задачи для описания явления переноса заряда, разработка алгоритма для определения потоков заряда и энергии в кристаллических металлах при действии на них тепловых и механических возмущений.

Физико-математическая задача явления переноса заряда

В основу условия задачи положены: кинетическое уравнение Больцмана; виды воздействия на объект контроля; виды рассеяния электронов проводимости: электрон-фононный; электронов на точечных дефектах; рассеяния электронов на дислокациях.

Для наглядного представления физико-математической задачи явления переноса и ее логической последовательности разработана схема реализации задачи, которая представлена на рис. 2. Все шаги, указанные в схеме, представляют собой последовательность расчета потоков электричества и тепла в кристаллических металлах при тепловом и механическом воздействии на них.

Математическая модель расчета

Кинетическое уравнение Больцмана при удачном его решении позволяет найти неравновесную функцию распределения, а значит, рассчитать плотности переноса потоков электричества и энергии в кристаллическом металле, а введение видов рассеяния электронов устанавливает характер изменения и величину электрического сопротивления.

Математическая задача включает уравнения:

1) уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial r_i} + \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial V_i} = \frac{1}{\varepsilon} I(f_0, f), \quad (3)$$

где $f(\varepsilon, r, t)$ – неравновесная функция распределения; F_i – сила, действующая на электрон со стороны физического поля; V_i – скорость электрона; m – масса электрона; r_i – координата -го электрона; ε – энергия электрона; $I(f_0, f)$ – интеграл столкновения; $v_i = V_i$ – скорость электрона;

2) уравнение для τ – приближения

$$\frac{1}{\varepsilon} I(f_0, f) = -\frac{f_0 - f}{\tau}, \quad (4)$$

где τ – время релаксации неравновесной функции распределения f к равновесной – f_0 .

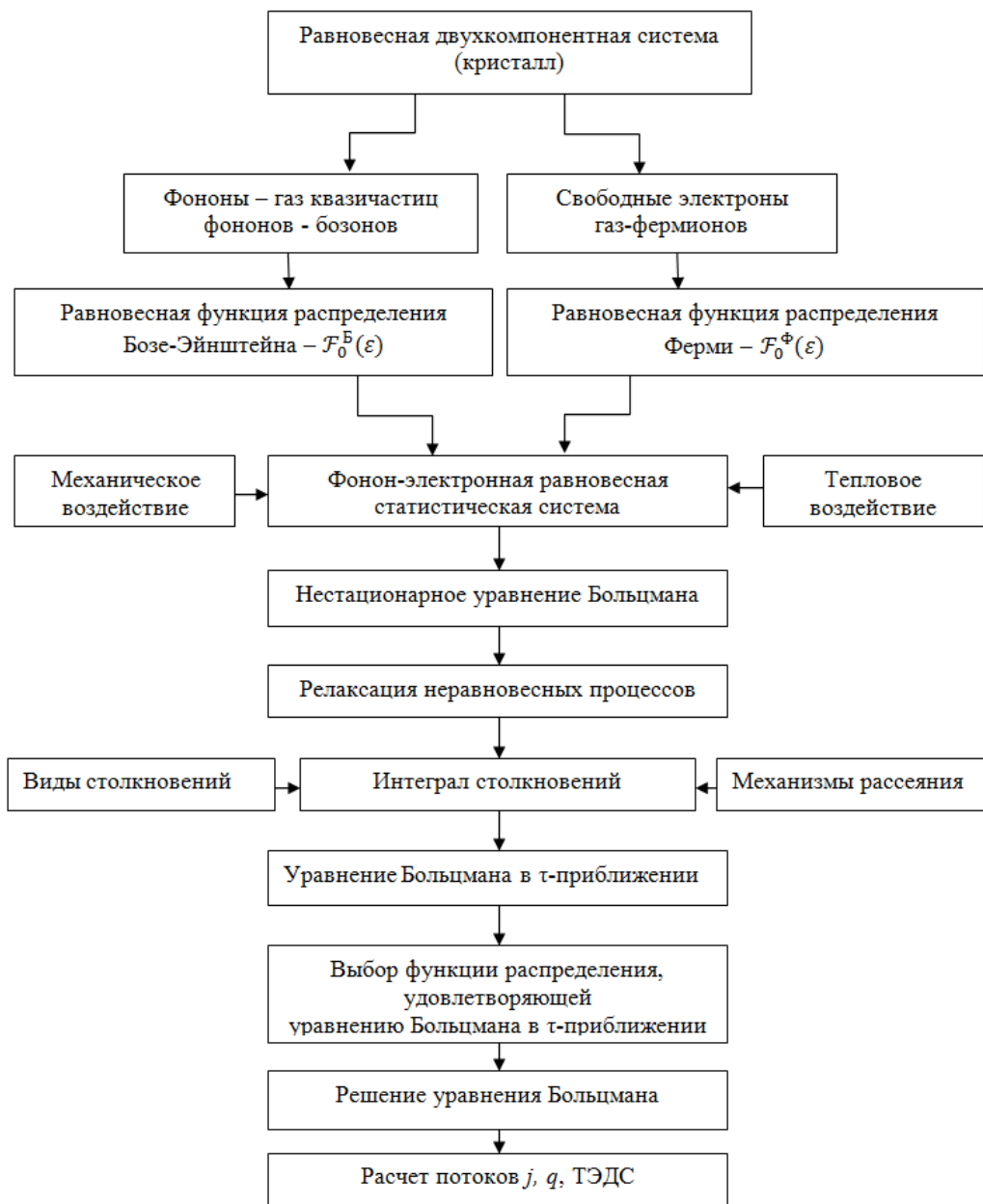


Рис. 2. Схема реализации задачи, связанной с явлениями переноса заряда и энергии

С учетом (3) и (4) получим уравнение Больцмана в τ -приближении

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{F}{m} \frac{\partial f}{\partial V} = -\frac{(f - f_0)}{\tau}. \quad (5)$$

Решение для стационарного случая $\partial f / \partial t = 0$ представим в виде

$$f(v, r) = f_0(v) - v\Psi(v, r) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad (6)$$

где $\Psi(v, r)$ выражается в виде ряда по степеням приложенных полей.

В случае наличия только электрического поля напряженностью \vec{E} и $grad T$ уравнение (5) принимает вид

$$\frac{e}{\hbar} \vec{E} \nabla_v f + v \nabla_r f = -\frac{f - f_0}{\tau} = \frac{v\Psi(v, r)}{\tau} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad (7)$$

где $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд электрона.

Подставив (6) в (7) и сохраняя лишь члены первого порядка по электрическому полю, получим:

$$\Psi(v, r) = \tau \left[e\bar{E} - T\nabla_r \left(\frac{\mu}{T} \right) - \frac{\varepsilon}{T} \nabla_r T \right]. \quad (8)$$

Плотность тока в направлении x определяется выражением

$$j_x = -\frac{4\pi e}{3} \int_0^\infty \Psi(v_x, x) v_x^4 dv. \quad (9)$$

После интегрирования (9) с учетом (8) получим

$$j_x = \frac{eln_e}{\sqrt{2m\varepsilon_f}} \cdot \frac{\mu}{\varepsilon_f} \left[\frac{\partial \mu}{\partial x} + eE_x + \frac{\pi^2 k}{3} \cdot \frac{kT}{\mu} \frac{\partial T}{\partial x} \right], \quad (10)$$

где l – средняя длина свободного пробега электрона проводимости; $n_e = \frac{n}{V}$ – концентрация электронов в единице объема проводника; ε_f – энергия Ферми; μ – химический потенциал металла.

При $grad \mu = 0$ и $grad T = 0$ плотность тока определяется выражением

$$j = \frac{e^2 ln_e}{\sqrt{2m_e \varepsilon_f}} \cdot E = \sigma E,$$

где E – напряженность электрического поля, $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг – масса электрона проводимости; σ – проводимость металла посредством электрического поля, вычисляемая по формуле

$$\sigma = \frac{e^2 ln_e}{\sqrt{2m_e \varepsilon_f}}. \quad (11)$$

Виды столкновений и механизмы рассеяния

Релаксация возмущенных функций распределения Ферми и Бозе происходит за счет непрерывных столкновений электронов с тепловыми колебаниями кристаллической решетки – фононами, точечными дефектами и дислокациями, развивающимися в пластически деформируемых металлах. Будем считать, что эти столкновения могут быть как упругими, так и неупругими, что будет учитываться при описании механизмов рассеяния электронов при расчетах проводимости и теплопроводности.

Рассеяние электронов на тепловых колебаниях кристаллической решетки (фононах)

Тепловые колебания решетки нарушают совершенную периодичность кристалла. Искаженная решетка рассеивает электроны из одного состояния в другое, например, из состояния с волновым вектором \vec{k} в состояние с волновым вектором \vec{k}' . Такое изменение состояния электрона возможно в результате как поглощения, так и испускания фононов при их взаимодействии.

Оператор или интеграл столкновений (3) можно описать посредством процессов рассеяния, при которых электрон переходит из данного состояния \vec{k} в состояние \vec{k}' [2]. Обозначим через $S(\vec{k}, \vec{k}')$ вероятность того, что электрон в единицу времени из-за столкновений перейдет из состояния \vec{k} в состояние \vec{k}' . Тогда изменение функции распределения Ферми в результате этих процессов запишется как

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ст} = \frac{1}{\varepsilon} I(f_0, f) = \int \{ S(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})] - S(\vec{k}, \vec{k}') \cdot f(\vec{k}) [1 - f(\vec{k}')] \} d\vec{k}'. \quad (12)$$

Первый член дает число электронов, которые приходят в состояние \vec{k} в единицу времени, а второй член – число электронов, которые в процессе столкновений уходят из этого состояния. Произведение $f(\vec{k}_i) [1 - f(\vec{k}_f)]$ есть вероятность того, что начальное состояние \vec{k}_i занято, а конечное состояние \vec{k}_f не занято – условие, которое должно выполняться, если имеет

место рассеяние. Полного решения интегродифференциального уравнения (12) до сих пор получить не удалось.

Однако Дж. Займан, используя множество допущений и предположений, получил следующее решение [2]:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = k_x \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} c(\xi) \frac{2}{D\Delta} \varepsilon^{-\frac{3}{2}} \cdot \frac{T}{\theta}, \quad (13)$$

где $c < 1$ – константа; θ – температура Дебая; η – энергия Ферми.

$$D = \left(\frac{3}{4\pi\Omega_0}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_\phi}; \quad (14)$$

$$\Delta = \left(\frac{m^*}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4\pi\Omega_0}{3}\right)^{-\frac{1}{3}} \cdot \frac{3\pi^2 g^2 \eta^2}{Mk_0\theta}; \quad \xi = \frac{\varepsilon - \eta}{k_0T},$$

где M – масса атома кристаллической решетки.

Из вида оператора столкновений (13) следует, что при $T > \theta$ можно определить время релаксации. Сравнивая (13) с (4), находим:

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{2}{D\Delta} \cdot \varepsilon^{-\frac{3}{2}} \frac{T}{\theta}. \quad (15)$$

Подставив (15) в (11), получим проводимость металла σ для температур $T > \theta$

$$\sigma = \frac{1}{A} \cdot \frac{\theta}{T}, \quad (16)$$

где

$$A = \frac{27\pi^4 \hbar^4 g^2}{64e^2 \eta^4 \Omega_0 m^* M k_0 \theta}, \quad (17)$$

где Ω_0 – объем элементарной ячейки, значения параметра g приведены в таблице.

Значения параметра g для одновалентных металлов

Параметр	Наименование металла							
	<i>Li</i>	<i>Na</i>	<i>K</i>	<i>Rb</i>	<i>Cs</i>	<i>Cu</i>	<i>Ag</i>	<i>Au</i>
<i>g</i>	0,785	0,59	0,605	0,765	0,825	0,94	0,76	1,27

Расчеты значений параметра g проведены по формулам (16) и (17), используя экспериментальные данные по удельной электропроводимости указанных в таблице металлов. Итак, поглощение или испускание фононов при электрон-фононном взаимодействии приводит к линейной зависимости удельного электросопротивления от температуры, что хорошо согласуется с экспериментальными данными для многих металлов [3].

Рассеяние электронов проводимости на дефектах Френкеля и Шотки

При температурах образца выше температуры Дебая (θ_α) наряду с рассеянием электронов на фононах возрастает вероятность рассеяния их на вакансиях и межузельных атомах. Релаксация нестационарной функции распределения Ферми на указанных дефектах кристаллической решетки описывается посредством времени релаксации τ , являющегося следствием интеграла столкновений. В первом приближении это время определяется так:

$$\tau = \frac{\langle l \rangle}{V_F}, \quad (18)$$

где $\langle l \rangle$ – средняя длина пробега электрона при взаимодействии с точечным дефектом; V_F – скорость электрона на поверхности Ферми.

Из квантовой теории проводимости металлов следует, что

$$\sigma = \frac{e^2 n_e}{m_e^*} \cdot \tau = \frac{e^2 n_e}{m_e^*} \cdot \langle l \rangle, \quad (19)$$

где $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд электрона; m_e^* – эффективная масса электрона.

Согласно квантовой статистики электронов в металлах [4]

$$\langle l \rangle = \frac{1}{S_d \cdot n_d}, \quad (20)$$

где S_d – эффективная площадь рассеивающего центра; n_d – концентрация рассеивающих центров.

Концентрация точечных дефектов по Френкелю и Шоттки в равновесном состоянии при заданной температуре образца

$$n_d = n_0 e^{-\frac{E_d}{kT}}, \quad (21)$$

$k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/к; T – абсолютная температура.

Учитывая (19)-(21), получим, что проводимость металла, обусловленная рассеянием на точечных дефектах, имеет вид

$$\frac{1}{\sigma_d} = \rho_d^T = \frac{\sqrt{2m_e^* \varepsilon_f} \cdot S_d n_0}{e^2 \cdot n_e} \cdot \exp\left\{-\frac{E_d}{kT}\right\}. \quad (22)$$

Простой теоретический расчет удельного сопротивления меди по формуле (22) показывает, что добавочное сопротивление, обусловленное рассеянием электронов на точечных дефектах Френкеля и Шоттки, примерно на два порядка меньше, чем сопротивление, обусловленное рассеянием электронов на фононах при одной и той же температуре образца. $T < \theta_d$ и сравнимо с ним при $T > 0,8 T_{пл}$.

Рассеяние электронов на дислокациях

Как показывает практика, все металлы при механической обработке упрочняются за счет роста числа дислокаций в нем, повышая при этом остаточные напряжения [3]. Пластическая деформация должна приводить к росту электросопротивления металла за счет рассеяния электронов проводимости на дислокациях, число которых увеличивается с ростом деформации.

Увеличение электросопротивления за счет дислокационного рассеяния электронов, как показывают эксперименты [5], от предела пластичности до предела прочности, пропорционально величине деформации, т.е.

$$\rho(\varepsilon) = k \cdot \varepsilon, \quad (23)$$

где $k = d\rho(\varepsilon)/d\varepsilon$ – постоянный коэффициент.

Пусть необратимое растяжение образца равно Δl , тогда $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0}$, l_0 – исходная длина образца. Но $\Delta l = b \cdot n_d \cdot S$, где b – длина вектора Бюргерса, n_d – число дислокаций в плоскости скольжения площадью – S .

Таким образом,

$$\varepsilon = \frac{b \cdot n_d \cdot S}{l_0}. \quad (24)$$

Учитывая (26) и (27), получим:

$$\rho(n_d) = k \cdot \frac{b \cdot n_d \cdot S}{l_0}. \quad (25)$$

Объединяя (18), (19), (27) и (28), получим:

$$\rho(n_d) = \frac{m_e^* V_F}{e^2 \cdot n_e} S_d \cdot n_d. \quad (26)$$

Удельное электросопротивление растет пропорционально росту числа дислокаций в пределах $\sigma_T < \sigma < \sigma_b$; где σ_T – проводимость, обусловленная электрон-фононным рассеиванием, σ_b – проводимость, обусловленная рассеянием электронов на вакансиях, что подтверждается экспериментально [5].

Кроме этого, рост числа дислокаций при пластической деформации порождает «шлейф межузельных атомов», возникающих в результате перемещения дислокаций из одной плоскости скольжения в другую. Это дает дополнительный вклад в электросопротивление. Увеличение числа межузельных атомов происходит за счет того, что при росте деформации включаются новые плоскости скольжения до самых трудных, увеличивая при этом вероятность перемещения дислокаций.

Пусть энергия активации перемещения E_v . Тогда

$$\rho_v^\sigma = \frac{\sqrt{2m_e^* \varepsilon_f} \cdot S_d n_d \cdot l_d}{e^2 \cdot n_e \cdot a} \cdot \exp\left\{-\frac{E_v}{kT}\right\}. \quad (27)$$

Заключение

1. Результат решения задачи рассеяния электронов проводимости в простых металлах на фононах при температурах $T > \theta$ приводит к следующей зависимости удельного электросопротивления ρ_ϕ от температуры:

$$\rho_\phi(T) = \frac{64e^2 \eta^4 \Omega_0 m_e^* M k_0}{27\pi^2 \hbar^4 g^2} \cdot T. \quad (28)$$

2. Учет рассеяния электронов проводимости на дефектах Френкеля и Шоттки дает дополнительный вклад, который рассчитывается по следующей формуле:

$$\rho_d(T) = \frac{\sqrt{2m_e^* \varepsilon_f}}{e^2 \cdot n_e} S_d \cdot n_0 \exp\left\{-\frac{E_a}{kT}\right\}. \quad (29)$$

3. Если при заданной температуре металл подвергается пластической деформации, то наряду с $\rho_\phi(T)$ и $\rho_d(T)$ возникают дополнительные вклады, связанные с рассеянием электронов проводимости на дислокациях и межузельных атомах, появляющихся при переползании дислокаций из одной плоскости скольжения в другую. Теоретически полученные расчетные формулы имеют следующий вид:

$$\rho^\varepsilon(n_d) = \frac{m_e^* V_F}{e^2 \cdot n_e} S_d \cdot n_d; \quad (30)$$

$$\rho_d^\sigma = \frac{\sqrt{2m_e^* \varepsilon_f}}{e^2 \cdot n_e} S_d \cdot n_d \frac{l_d}{a} \cdot \exp\left\{-\frac{E_v}{kT}\right\}. \quad (31)$$

Как показывает опыт, n_d изменяется от 10^6 см^{-2} до 10^{12} см^{-2} , а $E_a(\text{Cu}) \approx 0,78 \text{ эВ}$, $E_v = 1,2$.

Список использованных источников

1. Харрисон, У. Теория твердого тела / У. Харрисон. – М.: Мир, 1972. – 436 с.
2. Займан, Дж. Принципы теории твердого тела / Дж. Займан. – М.: Мир, 1974. – 423 с.
3. Блатт, Ф.Дж. Термодвижущая сила металлов / Ф.Дж. Блатт. – М.: Металлургия, 1980. – 436 с.
4. Жерифалько, Л. Статистическая теория металлов / Л. Жерифалько. – М.: Мир, 1975. – 382 с.
5. Электростатическое исследование изменения внутренних механических напряжений в металлах / Г.А. Дубский, Т.Я. Дубская, А.А. Нефедьев, И.М. Мингазов // Актуальные проблемы современной науки, техники и образования. – 2015. – Т. 3. – №1. – С.149-153.

Материал поступил в редакцию: 12.01.2017

Материал принят к публикации: 01.04.2017

INFORMATION ABOUT THE PAPER IN ENGLISH

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SIMULATION OF CHARGE TRANSFER IN METALS BY HEATING AND DEFORMATION

Dubskij G.A., Egorova L.G., Dubskaya T.YA.

Abstract. The investigations are devoted to the formulation of the physical and mathematical problem for describing the charge transport phenomenon and the development of an algorithm for determining the charge and energy fluxes in crystalline metals under the action of thermal and mechanical disturbances on them. The paper presents the physical and mathematical model to calculate a changes in the electrical resistance of the metal while heating and plastic deformation. The paper describes an algorithm for calculating changes in the electrical resistance of the metal. The basic mechanisms of conduction electrons scattering participating in the charge transfer process considering that valence electrons are distributed according to the Fermi-Dirac function and obey the Pauli principle are reviewed in the paper. The mathematical model is based on the Boltzmann kinetic equation in the approximation. The relaxation times are calculated theoretically for the scattering mechanisms. On the basis of calculations, theoretical formulas are obtained for calculating the resistivity of a normal metal as a function of its temperature, the number of dislocations and vacancies.

Keywords: Mathematical model, physical model, thermodynamic system, electrical resistance, dislocations, vacancies.

Referances

1. Harrison U. *Teoriya tverdogo tela*. Moscow: Mir, 1972, 436 p. (In Russ.)
2. Zayman Dzh. *Printsipyi teorii tverdogo tela*. Moscow: Mir, 1974, 423 p. (In Russ.)
3. Blatt F.Dzh. *Termodvizhushchaya sila metallov*. Moscow: Metallurgiya, 1980, 436 p. (In Russ.)
4. Zherifalko L. *Statisticheskaya teoriya metallov*. Moscow: Mir, 1975, 382 p. (In Russ.)
5. Dubskiy G.A. *Aktualnyie problemyi sovremennoy nauki, tehniki i obrazovaniya*, 2015, vol 3, no 1, pp.149-153. (In Russ.)

ОБ АВТОРАХ:

Дубский Геннадий Алексеевич – канд .физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры физики ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова». E-mail: dubski46@ yandex.ru.

Егорова Людмила Геннадьевна – канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры вычислительной техники и программирования ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова». E-mail: egorov-lyudmil@yandex.ru.

ОБРАЗЕЦ ДЛЯ ЦИТИРОВАНИЯ:

Дубский Г.А., Егорова Л.Г.. Физико-математическое моделирование процесса переноса заряда в металле при его нагревании и деформации // Математическое и программное обеспечение систем в промышленной и социальной сферах. – 2017. – Т.5. – №1. – С. 16-23.

Dubskij, G.A. and L.G. Egorova, (2017) Physical and mathematical simulation of charge transfer in metals by heating and deformation. Software of systems in the industrial and social fields, 5 (1): 16-23.