

07,03

Роль статического и динамического старения дислокаций в кинетике деформации легированных кристаллов

© Б.В. Петухов

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН,
Москва, Россия

E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

(Поступила в Редакцию 23 декабря 2013 г.)

Разработан метод расчета пределов текучести в легированных кристаллах и твердых растворах с учетом статического и динамического старения дислокаций. Предложено аналитическое описание кинетики деформирования этих материалов в окрестности верхнего предела текучести. Продемонстрирован стадийный характер деформационных кривых, обусловленный иммобилизацией дислокаций образующимися на них примесными атмосферами. Теория применима для расчета примесного и твердорастворного упрочнения полупроводников, металлов с объемноцентрированной кубической (ОЦК)-структурой, интерметаллидов и других материалов.

1. Введение

Характерным свойством многих кристаллических материалов является так называемое примесное или твердорастворимое упрочнение, то есть существенное повышение деформирующего напряжения при добавлении легирующего компонента [1,2]. Влияние примесей на пластическое течение материалов различно для материалов с различной структурой кристаллической решетки, имеющих разные механизмы движения дислокаций. В разбавленных растворах металлов с гранцентрированной кубической структурой имеют место развитые неустойчивости пластической деформации [1,3]. В настоящей работе изучается влияние примесей на деформацию другого типа материалов: полупроводников, металлов с ОЦК-структурой и других, характеризующихся кинковым механизмом движения дислокаций. Ответственным за вызываемое примесями повышение деформирующего напряжения будет предполагаться так называемое „старение“ дислокаций, то есть обрастание их примесными атмосферами (см. обзор в [4]).

Из экспериментов известно, что дислокация, движущаяся через кристалл, может собирать в свое ядро и вовлекать в движение даже малоподвижные примеси. Особенно наглядно это проявляется при электронномикроскопических наблюдениях примесных „хвостов“, образующихся при пересечении дислокацией частиц выделений [5]. В работе [6] с помощью релаксационной спектроскопии глубоких уровней (DLTS) было обнаружено, что медленно движущиеся дислокации в Si аккумулируют дефекты ядра и примеси. Из-за наличия примесных атмосфер динамические свойства самих дислокаций радикально изменяются вплоть до полной их иммобилизации. Закрепление примесными центрами ограничивает движение и размножение дислокаций. Это, в частности, имеет важные следствия для технологии производства и эксплуатации полупроводниковых

изделий микроэлектроники [7,8] и конструкционных материалов [1,2].

Для описания эволюции дислокационных ансамблей во многих чистых кристаллических материалах разработаны многочисленные модели [9–11] и др. Соответствующая теория для примесных материалов и твердых растворов мало разработана ввиду необходимости принимать во внимание динамическое взаимодействие дислокационной и примесной подсистем кристалла. Отметим работы [12,13], в которых модель Александра–Хаазена [10] дополнена численным решением уравнения диффузии атомов кислорода к движущимся дислокациям в кремнии. Однако полностью отсутствуют достаточно наглядные аналитические описания основных закономерностей даже в рамках наиболее простых моделей динамики дислокационных ансамблей, взаимодействующих с подсистемой подвижных примесей. В настоящей работе будет предложена и изучена такая модель, допускающая, в принципе, аналитическое описание динамики дислокационно-примесного ансамбля.

Опишем вкратце исходную модель пластической деформации чистых материалов, а затем произведем ее обобщение с учетом эффекта динамического старения дислокаций.

2. Деформация чистых кристаллов

Как известно, при активной деформации материалов с повышением напряжения имеет место переход от упругой деформации к пластическому течению. Начальный упругий участок деформационной кривой с большим наклоном, определяемым упругими модулями материала, сменяется в окрестности некоторого напряжения σ_0 , называемого пределом текучести, участком с относительно небольшим наклоном, описывающим стадию „легкого скольжения“. Возможно также и более сложное поведение, сопровождающееся дополнительным пиком

деформирующего напряжения в переходной области, называемым „зубом текучести“. В этом случае говорят также о верхнем σ_u и нижнем σ_l пределах текучести.

Во многих часто используемых моделях переход к пластическому течению материала связывается с массовым размножением дислокаций. Соответствующие экспериментальные данные обобщаются следующим феноменологическим уравнением [9,10]

$$dN/dt = wN\sigma_e^n V(\sigma_e). \quad (1)$$

Здесь N — плотность дислокаций, имеющая начальное значение N_0 , $V(\sigma_e)$ — скорость движения дислокаций, w — константа саморазмножения, σ_e — эффективное напряжение. Показатель степени n различен в разных моделях. Будут изучаться исходно малодислокационные кристаллы и будет рассматриваться, главным образом, ближайшая окрестность предела текучести, в которой плотность дислокаций еще не слишком выросла, что позволяет на этой стадии не принимать во внимание деформационное упрочнение и реакции между дислокациями, их взаимную аннигиляцию и т.п.

Зависимость скорости дислокаций от напряжения и температуры, в согласии с измерениями подвижности дислокаций (см., например, [14,15]), дается выражением

$$V = B(T)\sigma_e^m, \quad (2)$$

где $B(T)$ — температурно-зависимая часть. Применительно к полупроводниковым материалам с кинковым механизмом движения дислокаций часто рассматривается случай $m = 1$, которого мы и будем придерживаться. Кинетика деформации описывается выражением

$$(1/S)d\sigma/dt = \dot{\epsilon} - NbV. \quad (3)$$

Здесь S — комбинированный упругий модуль, $\dot{\epsilon}$ — скорость деформации, b — величина вектора Бюргерса.

При описании чистых кристаллов внутренние напряжения принимаются одинаковыми для всех дислокаций. В примесных кристаллах из-за эффекта старения движущая дислокация сила может зависеть от их индивидуального возраста, что требует существенной модификации подхода.

3. Примесные кристаллы. Статическое и динамическое старение дислокаций

Будет рассматриваться ситуация, когда исходно существующие до начала деформации дислокации вследствие диффузии к ним примесных атомов обрастают атмосферами из примесей с содержанием c_{s0} , отличным от среднего по объему c_0 . Это приводит к так называемому „статическому старению“ дислокаций. В теориях старения дислокаций с избытком атомов примесей в

ядре дислокаций принято связывать тормозящее напряжение типа сухого трения $\beta(c - c_0)$, где коэффициент β определяется короткодействующим контактным взаимодействием примеси с дислокацией. Этот вклад уменьшает эффективное напряжение σ_e , движущее дислокацию, так что $\sigma_e = \sigma - \beta(c - c_0)$ при $\sigma > \beta(c - c_0)$ и $\sigma_e = 0$ при $\sigma < \beta(c - c_0)$. Первичные „состаренные“ дислокации могут начать двигаться при превышении внешним напряжением некоторой стартовой величины $\sigma_{st} = \beta(c_{s0} - c_0)$. Таким образом, при заданной скорости деформации $\dot{\epsilon}$ в интервале времени от начала нагружения при $t = 0$ до момента $t_{st} = \sigma_{st}/(\dot{\epsilon}S)$ будет иметь место чисто упругая деформация материала и лишь при $t > t_{st}$ начнется движение и саморазмножение дислокаций и возникнет пластическое течение. Затем в процессе деформации как первичные, так и рождающиеся дислокации вовлекают в свое движение встречающиеся на пути примеси с образованием избыточной их концентрации в непосредственной окрестности дислокационного ядра. Имеющую место модификацию подвижности дислокаций принято называть их „динамическим старением“. Перемещение дислокаций с избыточным примесным содержанием требует увеличения движущей силы, что и является непосредственной причиной повышения деформирующего напряжения.

В единицу времени увлекаются примеси в слое площадью rV (r — радиус захвата). В пренебрежении отрывами захваченных примесей от дислокации увлечение примесей описывается уравнением

$$\frac{dc}{dt} = \frac{rc_0}{a^2} V(\sigma_e). \quad (4)$$

Здесь c_0 — концентрация примесей в объеме кристалла, рассчитанная на один узел решетки, c — концентрация захваченных примесей на дислокации, a — период кристаллической решетки.

В работах [16,17] был рассчитан уровень эффективных напряжений, устанавливающийся за переходной областью резкого изменения деформационной кривой. Для изучаемой далее модели Джонстона-Гилмана [9] при $n = 0$ примесный вклад в деформирующее напряжение, как было установлено, имеет вид

$$\sigma_{im} = \frac{r\beta c_0}{wa^2}. \quad (5)$$

В настоящей работе получено аналитическое описание вида деформационной кривой примесного кристалла в непосредственной окрестности верхнего предела текучести. Для примыкающей области за верхним пределом текучести было получено новое более удобное представление уравнений модели, позволяющее лучше охарактеризовать специфику различных стадий деформации в переходной области изменения режимов эволюции дислокационных ансамблей в примесном материале.

После смещения дислокации на несколько периодов решетки концентрация примесей в ее ядре начинает

заметно превосходить объемную концентрацию c_0 . Количество примесей, собранное дислокацией, определяется длиной ее пробега, которая зависит от времени рождения данной дислокации. Соответственно, как было отмечено в работах [16,17], эффективные напряжения, ощущаемые дислокациями, рожденными в различные моменты времени, будут различными. По этой причине производство новых дислокаций будет различным на дислокациях с различной предысторией. Чтобы учесть это обстоятельство, необходимо в расчетах в явном виде принимать во внимание такую соответствующую понятию старения характеристику, как возраст дислокаций. С этой целью вводится величина $\rho(t)$ — скорость генерации дислокаций в интервале времени между t и $t + dt$. Тогда прирост полной плотности дислокаций ΔN за время dt будет даваться величиной $\Delta N = \rho(t)dt$. Полная плотность представляет собой сумму вкладов, производимых всеми дислокациями, рожденными в различные моменты времени. В результате при $t > t_{st}$ имеем модифицированное соотношение

$$\rho(t) = wN_0V(\sigma(t) - \beta[c_0(t) - c_0]) + w \int_{t_{st}}^t dt_1 \rho(t_1)V(\sigma - \beta[c(t, t_1) - c_0]), \quad (6)$$

заменяющее уравнение (1). Здесь $c_0(t)$ — содержание примесей на первичных дислокациях, t_1 — время рождения вторичной дислокации. Аналогичным образом изменяется уравнение для деформирующего напряжения (3)

$$(1/S)d\sigma/dt = \dot{\epsilon} - bN_0V(\sigma(t) - \beta[c_0(t) - c_0]) - b \int_{t_{st}}^t dt_1 \rho(t_1)V(\sigma(t) - \beta[c(t, t_1) - c_0]). \quad (7)$$

Замена локальных во времени уравнений (1), (3) нелокальными (6), (7) обусловлена возникновением в примесных кристаллах своеобразного эффекта памяти дислокаций об эволюции на них примесного содержания в предыдущие моменты времени.

Подставляя интеграл из уравнения для ρ в уравнение для σ , получаем

$$\frac{1}{S} \frac{d\sigma(t)}{dt} + \frac{b}{w} \rho = \dot{\epsilon}$$

или после интегрирования по времени приходим к соотношению между напряжением и плотностью дислокаций

$$\sigma/S + \frac{b}{w} [N(t) - N_0] = \dot{\epsilon}t. \quad (8)$$

Изменение со временем содержания примесей на дислокации, рожденной в момент времени t_1 , подчиняется

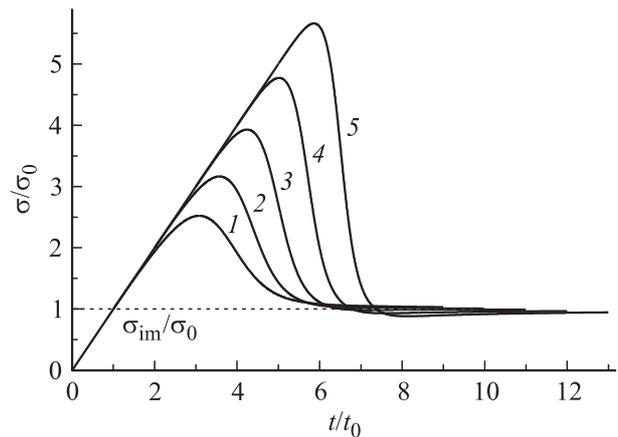


Рис. 1. Кинетика деформации при различных величинах стартовых напряжений σ_{st}/σ_0 , указанных у кривых. Плотность первичных дислокаций равна $N_0 = 0.1N_*$, $\beta = \sigma_0/c_0$.

уравнению

$$\frac{dc(t, t_1)}{dt} = \frac{rBc_0}{a^2} \{ \sigma(t) - \beta[c(t, t_1) - c_0] \} \quad \text{при } \sigma(t) > \beta[c(t, t_1) - c_0], \quad (9a)$$

$$\frac{dc(t, t_1)}{dt} = 0 \quad \text{при } \sigma(t) < \beta[c(t, t_1) - c_0]. \quad (9b)$$

Начальное значение концентрации примесей на вторичной дислокации принимается равным среднему по объему: $c(t_1, t_1) = c_0$. Рис. 1 иллюстрирует следующее из уравнений (6)–(9) поведение деформационных кривых для набора значений стартовых напряжений. Стоит отметить, что амплитуда зуба текучести заметно растет с увеличением степени состаренности первичных дислокаций, но с дальнейшим ходом процесса память о начальном состоянии исчезает и все кривые выходят на один уровень в соответствии с результатом (5).

Будем в дальнейшем для упрощения формул измерять σ в $\sigma_0 = \left(\frac{\dot{\epsilon}S}{wB}\right)^{1/2}$, t в $t_0 = \frac{1}{(wB\dot{\epsilon}S)^{1/2}}$, N в $\frac{1}{b} \left(\frac{w\dot{\epsilon}}{BS}\right)^{1/2}$, c в c_0 . Уравнения в области положительных эффективных напряжений примут вид

$$\rho(t) = N_0 \{ \sigma(t) - (\beta c_0/\sigma_0)[c_0(t) - 1] \} - \int_{t_{st}}^t dt_1 \rho(t_1) \{ \sigma(t) - (\beta c_0/\sigma_0)[c_0(t, t_1) - 1] \}. \quad (10)$$

$$\dot{\sigma} = 1 - \rho(t). \quad (11)$$

$$\dot{c} = \frac{r}{wa^2} \sigma(t) - \frac{c_0}{c_*} [c(t, t_1) - 1], \quad c(t, t_1) = 1. \quad (12)$$

$$\sigma^+ [N(t) - N_0] = t. \quad (13)$$

Здесь $c_* = \frac{a^2}{r\beta} \left(\frac{w\dot{\epsilon}S}{B}\right)^{1/2}$, $\sigma_{s0} = t_{st} = \frac{\beta(c_{s0}-c_0)}{\sigma_0}$.

4. Подвижные дислокации

В области положительности эффективного напряжения концентрация примесей на вторичных дислокациях выражается через напряжение путем решения уравнения (12)

$$c(t, t_1) = 1 + \frac{r}{wa^2} \int_{t_1}^t dt' \exp[(c_0/c_*)(t' - t)] \sigma(t'). \quad (14)$$

Уравнения (12) и (13) позволяют исключить плотность дислокаций и концентрацию примесей из (11), перейдя в итоге к значительно более простому замкнутому дифференциальному уравнению для напряжения. С этой целью введем обозначение для фигурирующего в (10) интеграла

$$J = \int_{t_{st}}^t dt_1 \rho(t_1) \left\{ \sigma(t) - (\beta c_0/\sigma_0) [c(t, t_1) - 1] \right\}$$

и посредством дифференцирования убедимся, что он представляет собой полную производную

$$\begin{aligned} \dot{J} &= \frac{d}{dt} (N_f \sigma) - (\beta c_0/\sigma_0) \int_{t_{st}}^t dt_1 \rho(t_1) \dot{c}(t, t_1) \\ &= \frac{d}{dt} (N_f \sigma) - \frac{c_0}{c_*} J. \end{aligned}$$

Здесь $N_f(t) = \int_{t_{st}}^t dt_1 \rho(t_1) = t - \sigma(t)$ есть плотность вторичных дислокаций. Из полученных соотношений следует

$$J = (c_*/c_0) \left[\frac{d}{dt} (N_f \sigma) - \dot{J} \right].$$

Подставляя это выражение в уравнение (11) и интегрируя почленно, получаем

$$\begin{aligned} \sigma &= t - (wa^2/r) N_0 [c_0(t) - 1 - \sigma_{st}(\sigma_0/\beta c_0)] \\ &\quad - (c_*/c_0) [N_f \sigma - J]. \end{aligned}$$

Исключая J из уравнения для σ , получаем замкнутое уравнение

$$\dot{\sigma} = 1 - (c_0/c_* + N_0 + t)\sigma + \sigma^2 + (c_0/c_*)t + N_0\sigma_{st}. \quad (15)$$

Уравнение (15) допускает, в принципе, точное решение. Оно стандартным способом приводится к линейному уравнению второго порядка для функций параболического цилиндра [18]. Этот довольно громоздкий ответ не будет здесь приводиться, и мы ограничимся более наглядным результатом.

Отметим в качестве первого следствия из уравнения (15) простую связь между скоростью генерации дислокаций и напряжением

$$\rho(t) = (c_0/c_* + N_0 + t)\sigma - \sigma^2 - (c_0/c_*)t - N_0\sigma_{st}. \quad (16)$$

Напомним, что при выводе уравнения (15) предполагалось, что эффективные напряжения неотрицательны, так что все дислокации, как первичные, так и вновь рожденные, подвижны. Это предположение оправдано, пока внешнее напряжение увеличивается (и даже несколько далее), что позволяет рассчитывать с помощью полученных соотношений величину предела текучести, верхнего при наличии зуба текучести.

5. Условие существования зуба текучести

Вид деформационной кривой может быть различен при различных соотношениях материальных параметров и условиях эксперимента. В частности, он может трансформироваться при увеличении концентрации примесей в кристалле от кривой с наличием зуба текучести к монотонной кривой. Уравнение (15) позволяет найти условие возникновения зуба текучести. Будем искать поведение напряжения при больших временах в виде добавки к известной величине (5) (в безразмерных переменных равной σ_{im}/σ_0) ряда по обратным степеням времени $\sigma = \sigma_{im}/\sigma_0 + A/t + \dots$ и подставим это в (15). Сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях t , получаем

$$A = 1 - N_0(\sigma_{im}/\sigma_0 - \sigma_{st}). \quad (17)$$

При $A < 0$ напряжение приближается с ходом времени к предельному значению снизу, при $A > 0$ сверху. Эта вторая ситуация отвечает немонотонному поведению деформационной кривой, то есть наличию зуба текучести. При $A = 0$ происходит переход между монотонным и немонотонным поведением, таким образом, условием наличия зуба текучести является $\sigma_{im}/\sigma_0 < 1/N_0 + \sigma_{st}$ или, возвращаясь к первоначальным размерным величинам,

$$\sigma_{im} < \sigma_{st} + \frac{\dot{\epsilon}}{bN_0B}. \quad (18)$$

6. Верхний предел текучести

Займемся изучением окрестности верхнего предела текучести. Будем решать уравнение (15) при малом отклонении от упругого поведения $\sigma = t - N_f$, $N_f \ll t$. На начальном этапе плотность рожденных дислокаций достаточно мала, так что можно пренебречь квадратичным слагаемым и решить получающееся линейное уравнение

$$\begin{aligned} N_f &\approx N_0 \exp[t^2/2 - (c_0/c_* + N_0)t] \\ &\times \int_{t_{st}}^t dt' (t' - \sigma_{st}) \exp[-t'^2/2 + (c_0/c_* + N_0)t']. \quad (19) \end{aligned}$$

Этого результата достаточно, чтобы найти верхний предел текучести из уравнения $\dot{\sigma} = 1 - \dot{N}_f = 0$.

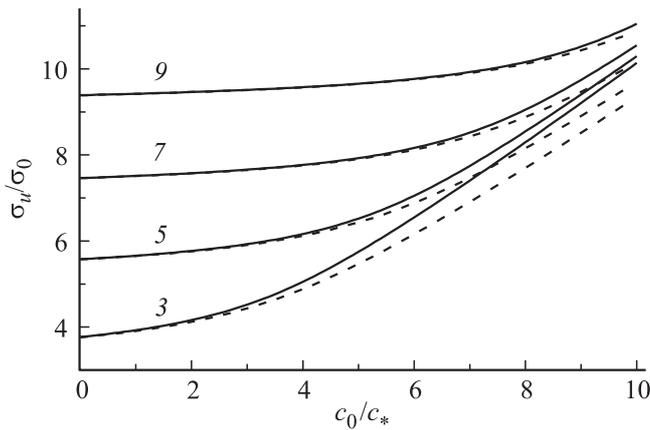


Рис. 2. Зависимость верхнего предела текучести от концентрации примесей в объеме кристалла при различных значениях стартовых напряжений (указаны цифрами у кривых) для первичных дислокаций. Штриховыми линиями показан результат приближенного вычисления с помощью уравнения (19).

Рис. 2 иллюстрирует рассчитываемую с помощью выражения (19) зависимость верхнего предела текучести σ_u от концентрации примесей и других параметров. При заметно выраженном зубе текучести, что имеет место для достаточно больших значений стартовых напряжений и вдали от выполнения условия (18), приближенное решение удовлетворительно воспроизводит точные результаты.

7. Иммобилизация дислокаций

С ростом числа собранных дислокаций примесей действующее на нее эффективное напряжение уменьшается до нуля, и дислокация останавливается (иммобилизуется). Первыми иммобилизуются первичные дислокации. Это происходит при $t = t_{s0}$, определяемом уравнением

$$c_0(t_{s0}) = 1 + \sigma(t_{s0})\sigma_0/(\beta c_0)$$

или

$$\sigma(t_{s0}) = (\beta c_0/\sigma_0)(c_{st} - 1) + (c_0/c_*) \times \int_{t_{st}}^{t_{s0}} dt' \exp[(c_0/c_*)(t' - t_{st})]\sigma(t'). \quad (20)$$

При $t > t_{s0}$ первичные дислокации выбывают из игры, а вновь рожденные дислокации подвижны до момента $t = t_{sf}$, в который обездвиживаются первые вторичные дислокации, рожденные в момент $t = t_{st}$. Момент t_{sf} определяется соотношением

$$\sigma(t_{sf}) = (c_0/c_*) \int_{t_{st}}^{t_{sf}} dt' \exp[(c_0/c_*)(t' - t_{st})]\sigma(t'). \quad (21)$$

Повторяя процедуру вывода уравнения для напряжения (15) в ситуации, когда первичные дислокации выбывают из игры, получаем

$$\dot{\sigma} = 1 - (t + c_0/c_* - \sigma)\sigma + (c_0/c_*)t + N_0[\sigma_{st} - \sigma(t_{sf})]. \quad (22)$$

Уравнение (22) позволяет несколько расширить интервал описания деформационной кривой с помощью простого подхода. Однако и оно теряет применимость при временах, когда начинает происходить иммобилизация вторичных дислокаций.

8. Стадийность деформационной кривой

При достаточно больших временах t сохраняют подвижность не все рожденные дислокации, а лишь те, которые родились после некоторого момента времени $t_g(t)$. Функция $t_g(t)$ определяется условием достижения к моменту t запирающей концентрации примесей

$$\sigma(t) = (c_0/c_*) \int_{t_g}^t dt' \exp[(c_0/c_*)(t' - t)]\sigma(t'). \quad (23)$$

Дальнейшее описание включает в число существенных функций также $t_g(t)$ и несколько усложняется. Кинетика размножения дислокаций определяется в этом случае интегральным уравнением

$$\rho(t) = \int_{t_{st}}^t dt_1 \rho(t_1) \{ \sigma(t) - (\beta c_0/\sigma_0)[c(t, t_1) - 1] \}. \quad (24)$$

Превратим его в дифференциальное уравнение, для чего продифференцируем интеграл в (24)

$$\dot{\rho}(t) = \rho(t)[2\sigma(t) - t + t_g - s(t) - (c_0/c_*) + t - t_g - \sigma(t) + s(t)]. \quad (25)$$

Здесь $s(t) \equiv \sigma(t_g(t))$.

Выведем уравнение для $t_g(t)$, для чего продифференцируем соотношение (23) $\dot{\sigma}(t) = -(c_0/c_*) \times \exp[(c_0/c_*)(t_g - t)]\sigma(t_g)t_g(t)$, или

$$\dot{t}_g(t) = -\dot{\sigma}(t) \exp[(c_0/c_*)(t_g - t)] / [(c_*/c_0)\sigma(t_g)] = -(c_*/c_0)[1 - \rho(t)] \exp[(c_0/c_*)(t_g - t)] / s(t) = F_g. \quad (26)$$

Уравнение для $s(t)$ имеет вид (пока $t_g < t_{s0}$)

$$\dot{s}(t) = \frac{d\sigma(t_g)}{dt_g} \dot{t}_g(t) = [1 - (c_0/c_* + t_g + N_0)s + s^2 + (c_0/c_*)t_g + N_0\sigma_{st}]F_g(\sigma, \rho, t_g, s). \quad (27)$$

Имеем 3 уравнения (25)–(27) для 3 неизвестных функций: ρ, t_g, s . Начальные условия накладываются при

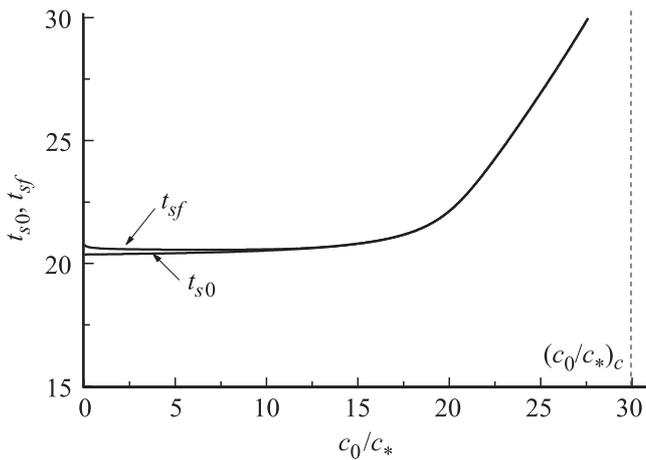


Рис. 3. Границы различных стадий деформационной кривой. Область под кривой t_{s0} отвечает подвижным дислокациям, в области между кривыми t_{s0} и t_{sf} теряют подвижность первичные дислокации, в области над кривой t_{sf} часть вторичных дислокаций также иммобилизуется. Область $c_0/c_* > (c_0/c_*)_c$ отвечает отсутствию зуба текучести. Значения параметров: $N_0 = 0.1N_*$, $c_{s0} = 20c_0$, $\beta = \sigma_0/c_0$.

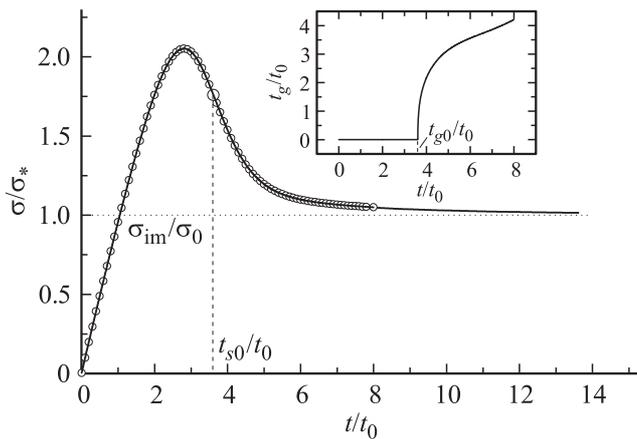


Рис. 4. Иллюстрация стадийного характера деформационной кривой вследствие иммобилизации дислокаций примесями. В интервале $0 < t < t_{s0}$ все дислокации подвижны; в интервале $t > t_{s0}$ подвижны лишь дислокации, родившиеся после момента времени $t_g(t)$ (на вставке). Сплошные линии — результат решения дифференциальных уравнений, кружки — решение интегральных уравнений. Параметры: $N_0 = 0.1$, $c_0/c_* = 1$, $\beta = \sigma_0/c_0$.

$t = t_{sf} : t_g = s = 0$, а значение $\rho(t_{sf})$ находится из решения уравнений для начального этапа. Границы реализации различных этапов деформации проиллюстрированы на рис. 3.

Когда t_g превышает значение t_{sf} , уравнения, определяющие зависимость $t_g(t)$ меняются и наступает следующая стадия процесса деформации. Рис. 4 иллюстрирует стадийный характер деформационной кривой. Чтобы не загромождать картину малосущественными деталями,

изображена ситуация, когда запирающее первичные дислокации напряжение отсутствует, так что $t_{s0} = t_{sf}$.

9. Заключение

Так как процесс деформации легированных кристаллов или твердых растворов сложен и включает много малоизученных факторов, представляют интерес упрощенные модели, позволяющие пролить свет на его некоторые качественные закономерности. В настоящей работе развит новый подход к расчету динамического поведения ансамбля разновозрастных дислокаций в рамках модели, предложенной ранее в работах [16,17]. Модель включала в описание эффект памяти, обусловленный необходимостью учитывать индивидуальную историю дислокаций, связанную с накоплением примесных атмосфер, что требовало использования интегральных уравнений. С их помощью был рассчитан примесный вклад в нижний предел текучести, удовлетворительно согласующийся с экспериментальными данными для твердого раствора $Ge_{1-c}Si_c$ [19]. Описание резко изменяющегося деформирующегося напряжения в окрестности верхнего предела текучести более сложно и требует усовершенствования теории. Подход настоящей работы заключается в преобразовании интегральных уравнений модели в окрестности верхнего предела текучести в более простые дифференциальные, что обладает преимуществом большей наглядности и позволяет получить ряд дополнительных результатов, в том числе обоснованные приближенные. Ввиду высокой чувствительности верхнего предела текучести к плохо известным в экспериментах характеристикам исходного кристалла, таким как плотность первичных дислокаций и степень их состаренности, ценность до получения данных в контролируемых условиях представляют результаты преимущественно качественного характера.

Среди таких результатов отметим:

1. Установление коллективного характера влияния примесей, собираемых дислокациями со значительной длины пробега, что приводит к радикальному изменению динамических свойств дислокаций вплоть до полной их иммобилизации.
2. Установление относительной роли различных материальных параметров, иллюстрируемой приведенными рисунками.
3. Выяснение характера комбинированного влияния статического и динамического старения дислокаций.
4. Возможность перехода от деформационной кривой с наличием зуба текучести к монотонной кривой при повышении концентрации примесей в материале (с установлением критерия такой трансформации).
5. Стадийность деформационной кривой вследствие иммобилизации дислокаций примесными атмосферами.

Стоит иметь в виду, что помимо примесей или атомов раствора дополнительное торможение дислокаций, приводящее к аналогичным эффектам, может создаваться

также собственными точечными дефектами [20]. В этой работе отмечалось также наблюдаемое в экспериментах *in situ* на γ -TiAl сосуществование дислокаций, движущихся с различными скоростями, как это предписывается настоящей моделью. С другой стороны, эксперимент указывает на ограничения применимости предлагаемой модели, связанные с возможными отрывами примесей от дислокаций на поздней стадии их накопления. Этот эффект становится существенным при преобладании подвижности дислокаций над подвижностью примесей [21]. В частности, коллективные отрывы примесей могут приводить к неустойчивостям пластического течения типа эффекта Портвена–Ле Шателье [1,3], описание которых выходит за рамки настоящей работы.

Список литературы

- [1] U. Messerschmidt. Dislocation Dynamics During Plastic Deformation. Springer / Eds R. Hull, C. Jagadish, R.M. Osgood, jr. J. Parisi Z. Wang H. Warlimont. Heidelberg, Dordrecht, London–N. Y. 2010.
- [2] Н.И. Носкова. Дефекты и деформация монокристаллов. УрО РАН, Екатеринбург (1995). 183 с.
- [3] M.A. Lebyodkin, T.A. Lebedkina, F. Chmelik, T.T. Lamark, Y. Estrin, C. Fressengeas, J. Weiss. Phys. Rev. B **79**, 174 114 (2009).
- [4] H. Neuhauser. In: Multiscale Phenomena in Plasticity / Eds J. Lepinoux, D. Maziere, V. Pontikis, G. Saada. Ser. E: Appl. Sci. Kluwer (2000). V. 367. P. 99.
- [5] H. Gleiter, E. Hornbogen. Phys. Status Soidi A **12**, 235 (1965).
- [6] V. Kveder, V. Orlov, M. Khorosheva, M. Seibt. Solid State Phenomena, **131–133**, 175 (2008).
- [7] K. Sumino. In: Defects and Properties of Semiconductors: Defect Engineering / Eds Chikawa J., Sumino K., K. Wada. KTK Scientific Publishers, Tokyo (1987). P. 227.
- [8] М.Г. Мильвидский, В.В. Освенский. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. Металлургия, М. (1984). 256 с.
- [9] G. Johnston, J.J. Gilman. J. Appl. Phys. **30**, 129 (1959).
- [10] H. Alexander. In: Dislocations in solids /Ed. F.R.N. Nabarro. Amsterdam–Oxford–N.Y.–Tokyo, North-Holland (1986). V. 7. Ch. 35. P. 113.
- [11] Г.А. Малыгин. УФН **169**, 979 (1999).
- [12] D. Maroudas, R.A. Brown. J. Matter. Res. **6**, 2337 (1991).
- [13] J. Cochard, I. Yonenaga, S. Gouttebroze, M.M. Hamdi, Z.L. Zhang. J. Appl. Phys. **108**, 103 524 (2010).
- [14] K. Sumino, M. Imai. Philos. Mag. A **47**, 753 (1983).
- [15] A. George, J. Rabier. Rev. Phys. Appl. **22**, 941 (1987).
- [16] Б.В. Петухов. Кристаллография **48**, 886 (2003).
- [17] В.В. Петухов. Solid State Phenomena. **95–96**, 459 (2004).
- [18] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган. Наука. М. (1979). 832 с.
- [19] I. Yonenaga. Physica B **273–274**, 612 (1999).
- [20] D. Haussler, M. Bartsch, M. Aindow, I.P. Jones, U. Meserschmidt. Philos. Mag. A **79**, 1045 (1999).
- [21] Б.В. Петухов. Кристаллография **56**, 65 (2011).