

01; 05

О ДВУХ ТИПАХ ДИНАМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ С ВЫСОКИМ РЕЛЬЕФОМ ПАЙЕРЛСА

Б. В. Петухов

Развивается модель, описывающая движение дислокаций в легированных кристаллах с высоким рельефом Пайерлса (полупроводники, металлы с ОЦК структурой и т. д.) при учете увлечения примесей дислокациями. С помощью фазового портрета для системы дифференциальных уравнений, описывающих динамику дислокационных сегментов под действием постоянной внешней нагрузки, изучены общие качественные закономерности этой динамики. Основным выводом является наличие двух типов динамического поведения дислокаций: стационарного в среднем движения и затухающего движения.

Как хорошо известно, на пластичность широкого круга материалов, определяемую подвижностью дислокаций в рельефе Пайерлса (полупроводники, металлы с ОЦК структурой и т. п.), существенное влияние оказывает легирование (см., например, [1-4]). Помимо количественной модификации скорости движения дислокаций, обуславливающей конкуренцию упрочнения и разупрочнения материалов [3], примеси и другие точечные дефекты кристалла приводят и к ряду качественно новых эффектов. Одним из таких эффектов является пороговый характер движения дислокаций в примесных кристаллах, когда стационарная подвижность имеет место лишь при превышении некоторого так называемого стартового напряжения [1, 2, 4]. Изучение этого явления представляет интерес, в частности, в связи с проблемой «иммобилизации» дислокаций в полупроводниковых устройствах микроэлектроники.

В работе [5] была предложена модель, описывающая приводящее к наличию стартовых напряжений влияние на движение дислокаций относительно слабых примесей. В настоящей работе будет указан другой механизм, относящийся к более мощным примесям, сопоставимым по силе с собственным кристаллическим рельефом материала, создающим барьеры Пайерлса. Этот механизм обусловлен наличием у примесей диффузионной подвижности, приводящей к их частичному увлечению движущейся дислокацией, что при определенных условиях вызывает качественное изменение характера движения дислокаций, приводя к затуханию со временем их скорости.

Формулировка модели

Рассмотрим торможение дислокаций, обусловленное совместным действием кристаллического рельефа (барьеров Пайерлса) и точечных дефектов кристаллической решетки. Модель, описывающая влияние статичных точечных дефектов, конкурирующих с рельефом Пайерлса, была развита в работах [6, 7] и состоит в следующем. На свободном от точечных дефектов пространстве дислокационные сегменты движутся, преодолевая рельеф Пайерлса за счет образования пар перегибов. Встречая точечный дефект (стопор), дислокация зависает на нем, образуя по обе стороны от точечного дефекта непрерывно увеличивающиеся скопления перегибов (рис. 1). С ростом прогиба дислокации сила давления на стопор возрастает, в конце концов дислокация срывается либо безакти-

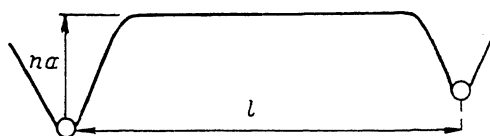
вационным механическим образом, достигнув критической величины прогиба n_c [6], либо за счет термической активации [7]. В настоящей работе выясняются новые качественные эффекты, вносимые в эту модель учетом диффузионной подвижности стопоров и возможности их увлечения движущейся дислокацией.

Запишем уравнение для изменения со временем плотности стопоров ρ , на которые опирается движущаяся дислокация,

$$\dot{\rho} = \frac{cJ}{a} \frac{1}{\rho} - \frac{\rho}{\tau_1(n)}. \quad (1)$$

Здесь c — концентрация точечных дефектов в объеме кристалла; J — вероятность рождения пары дислокационных перегибов в единицу времени на единице длины дислокации; a — период кристаллической решетки; $\tau_1(n)$ — время термоактивационного срыва дислокации со стопора; n — величина прогиба дислокации у стопора, измеряемая в периодах решетки. Первое слагаемое в правой части (1) описывает увеличение ρ в единицу времени за счет точечных дефектов на заматаемой при движении дислокационного сегмента со скоростью $V = aJl$ площади, $l = 1/\rho$ — характерная длина прямолинейного дислокационного сегмента. Обобщение на случай собирания дислокацией примесей не только

Рис. 1. Схема торможения дислокационного сегмента локальными препятствиями (без отражения тонкой перегибной структуры прогиба сегмента).



из плоскости скольжения, но из более широкого слоя может быть легко произведено с помощью выражения для дрейфового потока примесей на дислокацию, полученного в работе [8]. Это обобщение не изменяет качественной картины рассматриваемого явления. Второе слагаемое в (1) описывает уменьшение ρ в единицу времени за счет отрывов дислокации от стопоров.

Имея в виду упрощенное полукачественное описание характерных величин l и n , мы не будем учитывать их флуктуации, рассматривая эволюцию некоторого «типичного» дислокационного сегмента. Запишем уравнение для изменения со временем величины характерного прогиба n в виде

$$\dot{n} = \frac{J}{\rho} - \frac{1}{\tau_2(n)}. \quad (2)$$

Здесь первое слагаемое описывает темп увеличения прогиба дислокации у стопора за счет рождения перегибов на длине сегмента $1/\rho$, второе слагаемое учитывает уменьшение прогиба за счет дрейфа стопора, $\tau_2(n)$ — время перемещения стопора на один период решетки под действием приложенной со стороны дислокации силы.

Качественное исследование динамики дислокации

Решение системы нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2) требует знания явного вида функций $\tau_1(n)$ и $\tau_2(n)$ и может быть в принципе получено полностью для различных модельных случаев. Однако интересующий нас в первую очередь качественный характер описываемой ими динамики можно исследовать в общем виде, зная лишь общие качественные черты этих зависимостей, с помощью фазового портрета системы (1), (2) (рис. 2).

Кривая 1 на этом рисунке отвечает условию $\dot{\rho} = 0$, т. е., согласно (1), зависимости

$$\rho^2 = \frac{cJ}{a} \tau_1(n). \quad (3)$$

Кривая 2 отвечает $\dot{n} = 0$ и изображает, согласно (2), зависимость

$$\rho = J\tau_2(n). \quad (4)$$

Пересечение кривых 1 и 2 определяет стационарное решение системы уравнений (1) и (2) ρ_* , n_* , являющееся, однако, неустойчивым (точка покоя типа «седло»). Интересующие нас траектории системы (1) и (2), начинающиеся при относительно небольших значениях ρ , делятся сепаратрисой \mathcal{Z} на два типа. На траекториях, лежащих под сепаратрисой, величина прогиба дислокации у стопора n монотонно увеличивается до тех пор, пока с неизбежностью не произойдет срыв с препятствия. Этот процесс затем повторяется и приводит к конечной подвижности дислокаций, имеющих ненулевую среднюю скорость движения. Эволюция вдоль этих траекторий имеет лишь количественные отличия от режима движения дислокаций, изученного в [6, 7] без учета подвижности стопоров.

Качественно иное поведение описывают траектории, лежащие над сепаратрисой \mathcal{Z} . В этом случае величина прогиба дислокации увеличивается до некото-

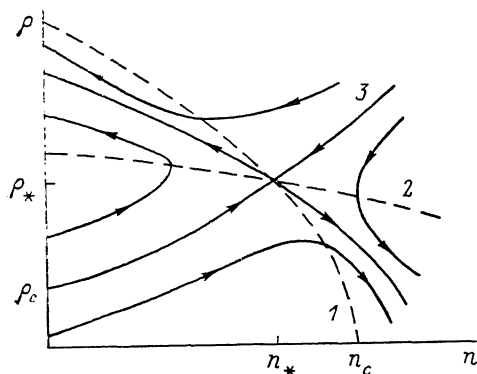


Рис. 2. Фазовый портрет системы уравнений (1), (2). Линии со стрелками — траектории, решений, отвечающих различным начальным условиям.

рого конечного значения (на линии 2), недостаточного для срыва со стопора, а затем начинает уменьшаться. В то же время плотность контактирующих с дислокацией стопоров ρ монотонно увеличивается, что приводит к затуханию скорости дислокации. Наличие сепаратрисы свидетельствует о неустойчивости стационарного движения дислокаций и о пороговом характере изменения режима движения при изменении параметров.

Для динамики дислокации, стартующей под действием приложенного внешнего напряжения из положения равновесия ($n=0$), существенно соотношение начальной плотности стопоров ρ_0 с величиной ρ_c , отвечающей сепаратрисе \mathcal{Z} при $n=0$. При малой начальной плотности стопоров $\rho_0 < \rho_c$ дислокация будет двигаться с конечной скоростью, при большой начальной плотности стопоров $\rho_0 > \rho_c$ скорость дислокации будет затухать со временем. Таким образом, условие $\rho_0 = \rho_c$ с ρ_c , зависящим от напряжения, температуры, концентрации примесей и т. п., определяет порог стационарной подвижности дислокаций или, другими словами, зависимость стартовых напряжений от начальной плотности стопоров на дислокации и других параметров.

Аналитические оценки

Существование траекторий с затухающей скоростью дислокаций обусловлено увеличением стопоров и имеет место при не слишком малой их подвижности. Нетрудно написать соответствующее количественное условие, выражающее наглядный факт наличия пересечения кривых 1 и 2 на рис. 2: $n_* > 0$ или эквивалентно $(Ja/c)(\tau_2^2/\tau_1)|_{n \rightarrow 0} < 1$. Это условие наряду с условием $\rho_c = 0$ определяет границы области сосуществования двух типов динамического поведения дислокаций.

Сделаем некоторые аналитические оценки для представляющего, по-видимому, наибольший интерес случая, когда наиболее резкая зависимость от n содержится в $\tau_1(n)$. Физически это связано с тем, что потенциальный рельеф, определяющий миграцию стопора в рассматриваемом случае, имеет характеристики атомного масштаба (в частности, активационную длину $\sim a$), в то время как активационная длина для преодоления дислокацией локального препятствия обычно достаточно велика по сравнению с атомным размером. По этой причине будем при небольших n в первом приближении пренебрегать зависимостью τ_2 от n , а зависимость τ_1 от n , напротив, будем считать достаточно резкой. В этом приближении при исследовании траекторий над сепаратрисой \mathcal{Z} наличие

срывов дислокации со стопоров (член с $1/\tau_1(n)$ в (1)) следует учитывать лишь в узкой окрестности кривой I . Вне этой области система (1) и (2) определяет следующую кинетику: для плотности стопоров

$$\rho \simeq \sqrt{\rho_0^2 + \frac{2cJ}{a} t}, \quad (5)$$

для скорости дислокации

$$V \simeq \frac{Ja}{\sqrt{\rho_0^2 + \frac{2cJ}{a} t}}. \quad (6)$$

Оценка характерной величины ρ_c имеет вид

$$\rho_c \simeq J\tau_2 \left(1 - \sqrt{\frac{2cn_*}{Ja\tau_2}}\right). \quad (7)$$

Из этого выражения видно, что при $n_* = Ja\tau_2/2c$ ρ_c обращается в нуль. Таким образом, это условие определяет границу области существования стационарного движения дислокаций. Чтобы явно выразить это условие, следует решить трансцендентные уравнения (3) и (4) и найти n_* через параметры задачи. Хотя качественная картина является общей, конкретные количественные выражения несколько разнятся для различных моделей взаимодействия дислокаций с локальными препятствиями. Универсальные закономерности могут быть получены для случая относительно небольших значений n . Эта асимптотика определяется следующими из обычных в активационном анализе соображений. Используем для описания температурной зависимости $\tau_1(n)$ закон Аррениуса $\tau_1 = \tau_{10} \exp\{E(n)/kT\}$, где τ_{10} — предэкспоненциальный множитель, зависимостью которого от n можно пренебречь по сравнению с резкой экспоненциальной зависимостью, определяемой энергией активации $E(n)$. Для $E(n)$ при малых n воспользуемся разложением по n , оставляя только линейный член $E(n) \simeq E_0 - n\gamma_1\sigma$. Зависимость коэффициента при n от σ может быть выделена явно, так как это разложение можно также интерпретировать в обычном смысле как разложение энергии активации по внешнему напряжению σ , причем коэффициент $n\gamma_1$ играет роль активационного объема, состоящего для n -этажного перегиба из n элементарных активационных объемов $\gamma_1 \sim a^2d$, d — ширина одиночного перегиба. С использованием полученной явной зависимости $\tau_1(n) = \tau_{10} \exp\{(E_0 - \gamma_1\sigma n)/kT\}$ решаем уравнения (3) и (4) и находим в рассматриваемом пределе явные выражения для

$$n_* \simeq \frac{1}{\gamma_1\sigma} \left[E_0 - kT \ln \frac{aJ\tau_2^2}{c\tau_{10}} \right]$$

и для границы области существования стационарного движения дислокаций

$$\frac{2c'}{aJ\tau_2\gamma_1\sigma} \left[E_0 - kT \ln \frac{aJ\tau_2^2}{c\tau_{10}} \right] \simeq 1. \quad (8)$$

Заключение

Итак, рассмотренная модель приводит к выводу о наличии двух различных типов динамического поведения дислокаций, находящихся под действием постоянной внешней нагрузки: стационарного движения и затухающего движения. Область существования стационарного движения дислокаций имеет границу, что может качественно объяснить наличие экспериментально наблюдаемых стартовых напряжений. Предсказываемая выражением (8) корреляция стартовых напряжений с температурой, концентрацией примесей и их мощностью отвечает экспериментальным наблюдениям [1, 2, 4, 9].

Отметим, наконец, еще одно качественное следствие предлагаемой модели, согласующееся с экспериментом. Дислокации с различной предысторией выведения на старт (например, «состаренные» в течение некоторого времени или «свежие» дислокации) имеют, вообще говоря, различную начальную плотность

точек закрепления ρ_0 , от соотношения которой с определяемой параметрами материала величиной ρ_c зависит тип динамического поведения дислокаций. В эксперименте это проявляется, в частности, как зависимость стартовых напряжений от условий выведения дислокаций на старт [2, 9]. Интересным для дальнейшего экспериментального изучения является вопрос о проявлении особенностей, связанных с обсуждаемым изменением характера подвижности дислокаций в макроскопическом деформационном старении материалов.

Список литературы

- [1] Ерофеев В. Н., Никитенко В. И. // ФТТ. 1971. Т. 13. Вып. 1. С. 300—302.
- [2] Бондаренко И. Е., Никитенко В. И. // Проблемы прочности и пластичности твердых тел. Л.: Наука, 1979. С. 244—256.
- [3] Pink E., Arsenault R. J. // Progress in Material Sci. 1979. Vol. 24. N 1. P. 1—50.
- [4] Imai M., Sumino K. // Phil. Mag. 1983. Vol. A47. N 4. P. 599—621.
- [5] Петузов Б. В. // ФТТ. 1982. Т. 24. Вып. 2. С. 439—442.
- [6] Kubin L. P., Louchet F., Vesely D. // Phil. Mag. 1979. Vol. A39. N 4. P. 433—454.
- [7] Петузов Б. В. // ФММ. 1983. Т. 56. Вып. 6. С. 1177—1185.
- [8] Петузов Б. В. // ФТТ. 1984. Т. 26. Вып. 10. С. 3160—3164.
- [9] Макара В. А. Препринт ИПМ-86-2, Киев, ИЭС им. Е. О. Патона, 1986. 53 с.

Институт кристаллографии АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
1 ноября 1988 г.
В окончательной редакции
12 января 1989 г.