

*Посвящается памяти Б.Н. Гречушникова*

## ОБ УПРОЧНЕНИИ КРИСТАЛЛОВ ПОСРЕДСТВОМ ИММОБИЛИЗАЦИИ ДИСЛОКАЦИЙ ПОДВИЖНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

© 2011 г. Б. В. Петухов

*Институт кристаллографии РАН, Москва*

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

Поступила в редакцию 31.05.2010 г.

Развита теория, описывающая влияние примесей на закономерности пластической деформации кристаллов с позиции эффекта динамического старения дислокаций. Теория представляет собой синтез двух моделей, одна из которых описывает кинетику иммобилизации индивидуальных дислокаций за счет увлечения примесей, вторая описывает коллективную динамику дислокационного ансамбля. Предлагаемая объединенная модель позволяет рассчитывать концентрационную и температурную зависимости вклада примесных атомов в деформирующее напряжение. Теория объясняет аномальную температурную зависимость предела текучести, экспериментально наблюдаемую в ряде материалов.

### ВВЕДЕНИЕ

Характерным свойством многих кристаллических материалов является сильное изменение их пределов текучести при добавлении легирующего компонента. Качественное объяснение заключается в том, что подвижные примеси захватываются дислокациями и образуют вокруг них обогащенные атмосферы, модифицирующие динамические характеристики дислокаций. На макроскопическом уровне это вызывает так называемое “динамическое деформационное старение” материала в целом [1]. Динамическое старение дислокаций также рассматривается как одна из возможных причин температурных аномалий пределов текучести материалов [2]. Закрепление примесными центрами ограничивает движение и размножение дислокаций. Это, в частности, имеет важные следствия для технологии производства и эксплуатации полупроводниковых изделий микроэлектроники и конструкционных материалов [3, 4].

Эволюция дислокационных ансамблей во многих чистых кристаллических материалах, для которых характерна сильная температурная зависимость предела текучести (полупроводники, щелочно-галогенидные кристаллы и другие), удовлетворительно описывается хорошо известными синергетическими моделями Джонстона–Гилмана [5] и Александера–Хаазена [6] с их последующим развитием [7, 8] и др. Соответствующая теория для примесных материалов и твердых растворов мало разработана. В то же время имеются экспериментальные указания на существование в примесных материалах новых режимов деформации

и движения дислокаций, качественно отличающихся по сравнению с характерными для чистых кристаллов [9, 10]. В частности, состаренные дислокации, набравшие много примесей, теряют свою подвижность и выбывают из участия в пластическом течении материала. Их место занимают вновь рождающиеся дислокации. Перемещение дислокаций с избыточным примесным содержанием требует увеличения движущей силы, что и является непосредственной причиной повышения деформирующего напряжения. Цель настоящей работы заключается в количественном описании механизма упрочнения материалов посредством инкорпорирования модели динамического старения дислокаций в описание пластического течения с помощью модели эволюции дислокационных популяций.

### СИНЕРГЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЛАСТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ

Будет изучаться деформация за пределом текучести, когда она является в основном пластической. Скорость пластической деформации  $\dot{\epsilon}$  чистых кристаллов дается соотношением Орована  $\dot{\epsilon} = NbV(\sigma)$ , где  $b$  – величина вектора Бюргера дислокаций,  $N$  – их плотность,  $V(\sigma)$  – скорость дислокаций, зависящая от приложенного напряжения  $\sigma$  и температуры  $T$ . В частности, в чистых полупроводниковых кристаллах типа кремния, германия и им подобных скорость дислокаций описывается эмпирическим уравнением

$$V = B\sigma^m, \quad (1)$$

где показатель степени  $m$  порядка единицы и практически не зависит от температуры. Основная температурная зависимость (обычно аррениусовского типа с некоторой энергией активации  $E_d$ ) содержится в этом случае в коэффициенте  $B$  [11–13].

Кинетическое уравнение, описывающее эволюцию ансамбля дислокаций в чистом материале, принимается в виде

$$\frac{dN}{dt} = wN\sigma^n V(\sigma). \quad (2)$$

Здесь  $w$  – коэффициент саморазмножения дислокаций. Показатель степени  $n$  различается в различных моделях. Так, например, в модели Джонстона–Гилмана  $n = 0$ , в модели Александра–Хазена  $n = 1$ . Рассмотрим общий случай с произвольным  $n$ .

С целью учета деформационного упрочнения кристалла внешнее напряжение  $\sigma$  в (1), (2) принято заменять на эффективное напряжение  $\sigma_{ef} = \sigma - \sigma_i$ . Здесь  $\sigma_i$  – так называемые внутренние напряжения, например, связанные с дальнедействующими упругими полями дислокаций. При описании чистых кристаллов внутренние напряжения принимаются одинаковыми для всех дислокаций независимо от времени их рождения. В примесных кристаллах из-за эффекта старения движущая дислокации сила может зависеть от их индивидуального возраста, что требует существенной детализации и модификации подхода. В наиболее упрощенном виде влияние старения на подвижность дислокации принято учитывать посредством пропорционального избыточной концентрации примесей в ядре  $c - c_0$  дополнительного вклада в эффективное напряжение, действующее на данную дислокацию  $\sigma_{ef} = \sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0)$ . Здесь  $c_0$  – средняя по кристаллу концентрация примесей,  $\beta$  – феноменологический коэффициент. Ближайшей целью будет описание эволюции примесного содержания на движущейся дислокации от момента ее рождения.

В случае малоподвижных примесей с малым коэффициентом диффузии радиус захвата примесей уменьшается до своего минимального значения порядка периода кристаллической решетки  $\sim a$ . При такой протяженности примесной атмосферы следует говорить скорее не о диффузии примесей вслед за дислокациями, а о нелинейном дрейфе или попросту о силовом увлечении примесей. Взаимодействие примесей с движущейся дислокацией рассматривалось в работах [14–17] и многих других. Ключевым вопросом теории динамического деформационного старения материалов является вариация содержания примесей на дислокационных линиях [18, 19]. В [20], результаты которой в несколько упрощенном виде будут кратко воспроизведены и использованы ниже, модифицированный кинетический закон был

выведен из физических механизмов, лежащих в основе пластического течения рассматриваемых материалов.

## КИНЕТИКА УВЛЕЧЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ

Интересен случай достаточно быстрого движения дислокации, когда оказываются существенны малые масштабы порядка нескольких периодов кристаллической решетки вокруг дислокационного ядра. При этом проявляется дискретность движения дислокаций на атомной шкале – между долинами периодической кристаллической решетки – происходящего, как известно, термически активируемыми скачками [21]. Скачкообразное изменение положения дислокации в плоскости скольжения приводит к перераспределению примесной атмосферы на каждом шаге, кинетика которого зависит от устройства потенциального рельефа для миграции примесей в окрестности дислокационного ядра. Вдали от дислокации миграционный рельеф периодичен и время  $\tau_0$  смещения примеси на период решетки имеет невозмущенное значение. В окрестности ядра потенциальный рельеф искажен взаимодействием, так что имеется глубокий минимум, отвечающий наиболее энергетически выгодному расположению примеси относительно дислокации. Притяжение к этому положению понижает барьер  $E$  для перехода примеси в него и уменьшает время соответствующего термоактивируемого скачка примеси  $\tau = \tau_* \exp(E/kT)$  по сравнению со временем обратного перехода  $\tau_1 = \tau_{*1} \exp(E_1/kT)$  или временем миграции вдали от ядра  $\tau_0 = \tau_{*0} \exp(E_0/kT)$ , так что  $\tau \ll \tau_0, \tau_1$ . Здесь  $\tau_*$ ,  $\tau_{*1}$ ,  $\tau_{*0}$  – предэкспоненциальные множители, принимаемые постоянными.

Так как считается, что дислокации движутся с достаточно большой скоростью  $V$ , время  $t_d = a/V$ , проводимое в одной долине кристаллического рельефа, в рассматриваемой упрощенной модели предполагается недостаточным для включения в игру примесей из более удаленных узлов кристаллической решетки. Опишем эволюцию примесного содержания в ядре дислокации, характеризуемого концентрацией  $c_d$  в расчете на один период решетки вдоль дислокационной линии. Введем также обозначения  $c_+$  и  $c_-$  для концентраций примесей в состояниях, в которое (+) и из которого (–) дислокация переходит. Запишем уравнения для перераспределения примесных концентраций между этими состояниями в течение времени  $t_d$ , когда дислокация покоится в одной из долин кристаллического рельефа в ожидании скачка в следующую долину

$$\frac{dc_d}{dt} = (c_+ + c_-)/\tau - c_d(2 - c_+ - c_-)/\tau_1, \quad (3)$$

$$\frac{dc_{\pm}}{dt} = -c_{\pm}/\tau + c_d(1 - c_{\pm})/\tau_1. \quad (4)$$

Первые слагаемые в правых частях уравнений описывают поток примесей из смежных состояний (+), (-) в ядро ( $d$ ) в единицу времени, вторые слагаемые описывают обратный поток. Уравнения (3), (4) представляют собой упрощенный вариант кинетики, в котором принимается, что главный вклад дается непосредственным заметанием примесей движущимися дислокациями, а длиннопробежная диффузия примесей менее существенна.

Для системы уравнений (3), (4) существует закон сохранения: суммарное число примесей в рассматриваемых состояниях  $c = c_d + c_+ + c_-$  постоянно и равно своему начальному значению  $N_0 = c_{d0} + c_{+0} + c_{-0}$ . Благодаря этому обстоятельству содержание примесей вокруг дислокационного ядра легко вычисляется:

$$c_d(t) = \frac{N_0\tau_1}{\tau_1 + 2\tau} \left[ c_0 + c_{-0} - \frac{2N_0\tau}{\tau_1 + 2\tau} \right] \exp\left(-t \frac{\tau_1 + 2\tau}{\tau_1\tau}\right), \quad (5)$$

$$c_+(t) = \frac{1}{2}(c_0 - c_{-0}) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + \frac{N_0\tau}{\tau_1 + 2\tau} + \left[ \frac{1}{2}(c_0 + c_{-0}) - \frac{N_0\tau}{\tau_1 + 2\tau} \right] \exp\left(-t \frac{\tau_1 + 2\tau}{\tau_1\tau}\right), \quad (6)$$

$$c_-(t) = -\frac{1}{2}(c_0 - c_{-0}) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + \frac{N_0\tau}{\tau_1 + 2\tau} + \left[ \frac{1}{2}(c_0 + c_{-0}) - \frac{N_0\tau}{\tau_1 + 2\tau} \right] \exp\left(-t \frac{\tau_1 + 2\tau}{\tau_1\tau}\right). \quad (7)$$

Уравнения (3), (4) и их решение (5)–(7) сами по себе описывают статическое старение дислокации во время ее покоя в очередной долине кристаллического рельефа. Кинетика заметания примесей привносится посредством изменения начальных условий при перескоке дислокации в новое положение.

Стационарное с макроскопической точки зрения движение дислокации по периодическому рельефу кристаллической решетки осуществляется последовательными термоактивируемыми скачками на один период решетки с временем ожидания одного скачка  $t_a$ , так что средняя скорость дислокации есть  $V = a/t_a$ . Примеси, оставленные в покинутой дислокацией долине кристаллического рельефа, стремятся релаксировать к новому положению дислокации. Так как энергетический рельеф в рассматриваемой модели привязан к дислокации и перемещается вместе с ней, на следующем шаге следует приписать обозначения  $d, \pm$  новым узлам кристаллической решетки. При этом величины примесного содержания, достигнутые на предыдущем шаге к моменту скачка дислокации  $t_a$ , будут играть роль начальных условий для релаксации концентраций на

новом этапе  $c_{d0}^{(2)} = c_+^{(1)}(t_a)$ ,  $c_{-0}^{(2)} = c_-^{(1)}(t_a)$ . Новое состояние  $c_+$  возникает из резервуара и ему приписывается начальное содержание примесей  $c_{+0}^{(2)} = c_0$ . Следовательно, изменение суммарного числа примесей в рассматриваемой окрестности ядра дислокации при одном шаге  $\Delta c$  равно разности между их количеством  $c_0$ , встреченным в новой долине, и количеством  $c_-(t_a)$ , оставленным в покинутой долине:  $\Delta c = c_0 - c_-(t_a)$ . Считая это изменение относительно малым, начальные условия можно превратить в дифференциальные уравнения по числу  $k$  переходов дислокации на период решетки путем замены  $\Delta c \approx dc/dk$ :

$$c_{d0}^{(2)} = c_{d0}^{(1)} + \Delta c_{d0} \approx c_{d0}^{(1)} + \frac{dc_{d0}}{dk} = c_+^{(1)}(t_a), \quad (8)$$

$$c_{-0}^{(2)} = c_{-0}^{(1)} + \Delta c_{-0} \approx c_{-0}^{(1)} + \frac{dc_{-0}}{dk} = c_-^{(1)}(t_a). \quad (9)$$

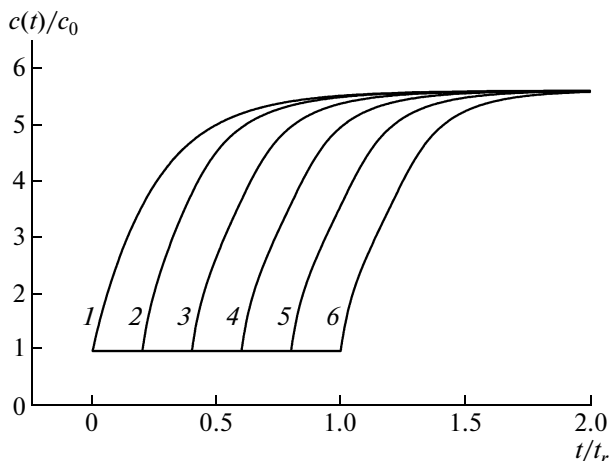
Выражая правые части этих уравнений, т.е. конечные значения концентраций для первого этапа, с помощью решений (5)–(7) через начальные значения концентраций для этого этапа, получаем замкнутые уравнения для изменения этих начальных значений при перемещении дислокации. Пропуская несложные преобразования, в конечном итоге после упрощений в пределе  $\tau/\tau_1 \ll 1$ ,  $\exp(-t_a/\tau) \ll 1$  приходим к уравнению для изменения суммарной концентрации примесей  $c$  в окрестности ядра дислокации при ее перемещении по долинам кристаллического рельефа:

$$\frac{dc}{dk} = c_0 - c \left[ \exp\left(-\frac{t_a}{\tau}\right) + \frac{\tau}{\tau_1} \right]. \quad (10)$$

Заменяя  $dk$  на  $dt/t_a$ ,  $t_a = a/V$  и учитывая в свою очередь зависимость скорости дислокации от собранной ею концентрации примесей, получаем самосогласованное уравнение для описания кинетики старения:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{B}{a} [\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0)]^m \times \left\{ c_0 - c \left[ \exp\left(-\frac{a}{\tau B(\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0))^m}\right) + \frac{\tau}{\tau_1} \right] \right\}. \quad (11)$$

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 [17, 22], эффективные напряжения, ощущаемые дислокациями, рожденными в различные моменты времени, будут различными. Чтобы учесть это обстоятельство при описании динамики дислокационных ансамблей, необходимо в расчетах в явном виде принимать во внимание возраст дислокаций. Таким образом, модели типа Джонстона–



**Рис. 1.** Кинетика роста содержания примесей на дислокациях, рожденных в различные моменты времени:  $t_1 = 0$  (1),  $t_1 = 0.2t_r$  (2),  $t_1 = 0.4t_r$  (3),  $t_1 = 0.6t_r$  (4),  $t_1 = 0.8t_r$  (5),  $t_1 = t_r$  (6) ( $t_r = 1/wB\beta c_0$ ).

Гилмана или Александра–Хаазена должны быть заменены на более детальное описание с учетом предыстории рождения и движения всех дислокаций.

Это несложно сделать, оперируя не полной плотностью дислокаций  $N$ , как в оригинальных моделях Джонстона–Гилмана и Александра–Хаазена, а следуя [17, 22], плотностью дислокаций  $\rho(t)$ , рожденных в интервале времени между  $t$  и  $t + dt$ . Тогда прирост полной плотности дислокаций  $\Delta N$  за время  $dt$  будет даваться величиной  $\Delta N_d = \rho(t)dt$ . Полная плотность представляет собой сумму вкладов, производимых всеми дислокациями, рожденными в различные моменты времени. В результате имеем соотношение

$$\frac{dN}{dt} = \rho(t) = wV(\sigma(t) - \sigma_i - \beta(c_0(t) - c_0)) \times$$

$$\times [\sigma(t) - \sigma_i - \beta(c_0(t) - c_0)]^n N_{d0} + w \int_0^t dt_1 \rho(t_1) \times$$

$$\times V(\sigma - \sigma_i - \beta(c(t, t_1) - c_0)) [\sigma(t) - \sigma_i - \beta(c(t, t_1) - c_0)]^n,$$

заменяющее уравнение (2). Здесь  $N_{d0}$  – начальное значение плотности дислокаций,  $c_0(t)$  – концентрации примесей на них к моменту времени  $t$ ,  $c(t, t_1)$  – концентрации примесей к мо-

менту времени  $t$  на дислокациях, рожденных в момент времени  $t_1$ .

Из-за разницы в примесном содержании дислокации, рожденные в различные моменты времени  $t_1$ , движутся в рассматриваемый момент времени  $t$  с различными скоростями  $V(t, t_1)$  и дают, следовательно, различный вклад в скорость пластического течения образца  $\dot{\epsilon}$ . Суммируя все вклады, получаем обобщенное соотношение Орована

$$\dot{\epsilon} = bV(\sigma(t) - \sigma_i - \beta(c_0(t) - c_0))N_{d0} +$$

$$+ b \int_0^t dt_1 \rho(t_1) V(\sigma(t) - \sigma_i - \beta(c(t, t_1) - c_0)). \quad (13)$$

### ИММОБИЛИЗАЦИЯ ДИСЛОКАЦИЙ

Как показывает исследование системы уравнений (11)–(13), она описывает различные режимы деформации и движения дислокаций в зависимости от степени взаимодействия дислокаций с примесной подсистемой – от слабо возмущенного режима, свойственного чистым материалам, до такого, при котором происходит полное обездвиживание или, иначе, иммобилизация дислокаций. Первый режим имеет место при достаточно высокой нагрузке и быстром движении дислокаций по сравнению с движением примесей, второй при сопоставимых скоростях дислокаций и примесей. Этот радикально новый режим и будет изучаться в настоящей работе.

Опишем деформационную кривую за пределом текучести (на стадии легкого скольжения). Проиллюстрируем кинетику старения дислокаций ансамбля при стартовой плотности дислокаций  $N_{d0} = 2\dot{\epsilon}/bB\beta c_0$  численным решением системы уравнений (11)–(13) (рис. 1). Значения параметров:  $m = 1$ ,  $n = 0$ ,  $\alpha_1 = a/(\tau B\beta c_0) = 5$ ,  $\tau/\tau_1 = 0.1$ ,  $wa = 1/12$ . Эволюция вида кривых свидетельствует об установлении с течением времени стационарной формы кинетических зависимостей, отличающихся друг от друга лишь сдвигом по оси времени  $c(t, t_1) = c(t - t_1)$ . При этом зависимость напряжения  $\sigma$  от времени выходит на некоторое стационарное значение. Это позволяет для данной стадии процесса значительно упростить систему (11)–(13). Переменные в уравнении (11) при постоянном напряжении разделяются

$$\frac{adc}{V(\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0))\{c_0 - c[\exp(-a/\tau V(\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0)))]\}} = dt. \quad (14)$$

Интегрирование этого выражения при начальном условии  $c = c_0$  позволяет вычислить концентрацию примесей в ядре дисло-

кации и найти изменение во времени эффективного напряжения  $\sigma_{ef}$ , движущего дислокацию.

В зависимости от величин входящих в уравнение (14) параметров возможно несколько видов решений. Среди этих решений есть и такое, когда в конце эволюции примеси полностью останавливают дислокацию, т.е.  $c = c_0 + (\sigma - \sigma_i)/\beta$  и  $V = 0$  при  $t \rightarrow \infty$ . Другим устанавливающимся решением отвечает обращение в нуль множителя  $c_0 - c\{\exp[-a/\tau V(\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0))] + \tau/\tau_1\}$ . Найдем условия реализации того или иного типа решения. Равенство указанного множителя нулю можно представить в виде соотношения

$$(\sigma - \sigma_i)/\beta c_0 = 1 + \left(\frac{\alpha}{y}\right)^{1/m} + \frac{1}{\exp(-y) + \tau/\tau_1}, \quad (15)$$

где введены обозначения

$$y = \frac{a}{\tau B[\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0)]^m}, \quad \alpha = \frac{a}{\tau B(\beta c_0)^m}.$$

При изменении  $c$  от  $c_0$  до  $c_0 + (\sigma - \sigma_i)/\beta$   $y$  изменяется от  $\alpha(\beta c_0/(\sigma - \sigma_i))^m$  до  $\infty$ . Наличие решения уравнения (15) при конечном  $y$  означает, что эволюция содержания примесей на дислокации от начального значения заканчивается, не достигая предельного значения  $c = c_0 + (\sigma - \sigma_i)/\beta$ , т.е. полной иммобилизации дислокации не происходит. Нетрудно найти соответствующее условие.

Правая часть уравнения (15) имеет при  $y \rightarrow \infty$  асимптотику  $1 + \tau_1/\tau$  и в зависимости от величины  $\alpha$  может быть монотонной функцией  $y$  или иметь максимум и минимум. Условием наличия экстремумов является равенство нулю производной по  $y$

$$\alpha = \frac{[my^{1+1/m} \exp(-y)]^m}{(\exp(-y) + \tau/\tau_1)^{2m}}. \quad (16)$$

Правая часть уравнения (16) имеет максимум  $\alpha_M$  при  $y_M$ , определяемом из уравнения

$$e^{-y_M} \frac{y_M + 1 + 1/m}{y_M - 1 - 1/m} = \frac{\tau}{\tau_1}. \quad (17)$$

При  $\alpha > \alpha_M$  условие (16) наличия экстремумов не может выполняться, и следовательно, правая часть уравнения (15) монотонно убывает с увеличением  $y$  до предельного значения  $1 + \tau_1/\tau$ . Поэтому конечное решение этого уравнения существует при  $\sigma > \sigma_i + \beta c_0(1 + \tau_1/\tau)$  и отсутствует при  $\sigma \leq \sigma_i + \beta c_0(1 + \tau_1/\tau)$ . Таким образом, в этой области значений  $\alpha$  интересующее нас иммобилизационное решение реализуется в интервале напряжений  $\sigma \leq \sigma_i + \beta c_0(1 + \tau_1/\tau)$ .

При  $\alpha < \alpha_M$  правая часть уравнения (15) имеет минимум  $\sigma_{\min}$  (и максимум) и возможны два варианта в зависимости от соотношения высоты

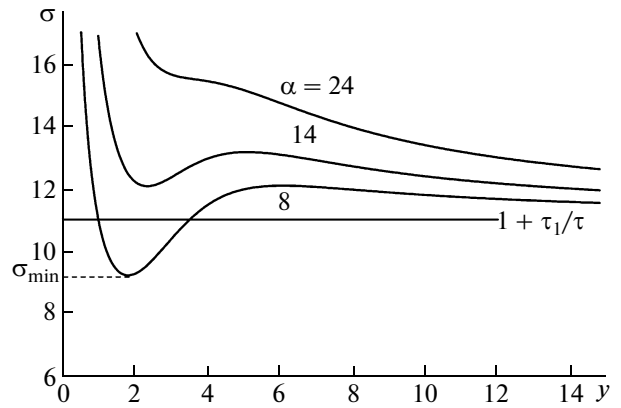


Рис. 2. Иллюстрация решения уравнения (15) при  $\tau/\tau_1 = 0.1$  и различных значениях  $\alpha$ , указанных у кривых (напряжение вдоль вертикальной оси отсчитывается от  $\sigma_i$  и измеряется в  $\beta c_0$ ).

минимума  $\sigma_{\min}$  и предельного значения  $\sigma_i + \beta c_0(1 + \tau_1/\tau)$ , как это изображено на рис. 2. Если  $\sigma_{\min} > \sigma_i + \beta c_0(1 + \tau_1/\tau)$ , иммобилизационное решение реализуется по-прежнему в области напряжений  $\sigma \leq \sigma_i + \beta c_0(1 + \tau_1/\tau)$ . Если  $\sigma_{\min} < \sigma_i + \beta c_0(1 + \tau_1/\tau)$ , то область существования иммобилизационного решения является интервал  $\sigma < \sigma_{\min}$ . Различная зависимость границ существования иммобилизационного режима от параметров для двух указанных вариантов может приводить к изменению характера температурного поведения деформирующего напряжения.

### ДЕФОРМИРУЮЩЕЕ НАПРЯЖЕНИЕ И ЕГО ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ

При постоянной иммобилизации состаренных дислокаций для поддержания процесса пластического течения необходима замена их вновь рожденными. Это требует повышенной по сравнению со случаем чистого кристалла скорости производства дислокаций и более высокого уровня внешнего напряжения, тем большего, чем больше концентрация примесей. Определим величину необходимого уровня напряжения. При достаточно большом времени вклад начальной плотности дислокаций  $N_{d0}$  в уравнение (12) сходит на нет. Считая  $\rho(t)$  при  $t \rightarrow \infty$  постоянной  $\rho_\infty$ , которая оказывается общим множителем в левой и правой частях уравнения (12), сократим ее. В результате получаем уравнение для определения деформирующего напряжения в зависимости от концентрации примесей, температуры и других параметров:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} dt V(\sigma - \sigma_i - \beta(c(t) - c_0)) [\sigma - \sigma_i - \beta(c(t) - c_0)]^n = \\ & = wa \int_{c_0}^{c_M} dc \frac{[\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0)]^n}{c_0 - c \{ \exp[-\alpha(\beta c_0 / (\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0)))^m] + \tau / \tau_1 \}} = 1. \end{aligned} \quad (18)$$

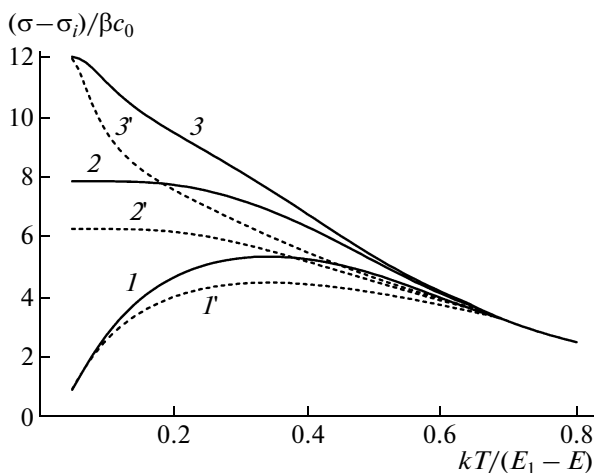
Здесь  $c_M = c_0 + (\sigma - \sigma_i) / \beta$ , переход к квадратурному выражению в (18) осуществлен с помощью (14).

Устанавливающаяся скорость производства дислокаций  $\rho_{\infty}$  находится затем из обобщенного соотношения Орована (13):

$$\rho_{\infty} = \frac{\dot{\epsilon}}{ba} \int_{c_0}^{c_M} \frac{dc}{c_0 - c \{ \exp[-\alpha(\beta c_0 / (\sigma - \sigma_i - \beta(c - c_0)))^m] + \tau / \tau_1 \}}. \quad (19)$$

Уравнение (18) позволяет рассчитать вклад увлекаемых ансамблем дислокаций примесных атомов, повышающий внутренние напряжения, т.е. приводящий к упрочнению кристалла. Концентрационная и температурная зависимости этого вклада могут быть разными в различных условиях. На рис. 3 проиллюстрированы возможные типы температурной зависимости  $\sigma(T)$  для моделей Джонстона–Гилмана ( $n = 0, m = 1$ ) и Александра–Хаазена ( $n = 1, m = 1$ ) при различных значениях параметров задачи, полученные численным решением уравнения (18).

Причиной различного температурного поведения деформирующего напряжения является конку-



**Рис. 3.** Нормальная и аномальная температурные зависимости деформирующего напряжения, найденные из уравнения (18) (сплошные кривые — по модели Джонстона–Гилмана, штриховые — по модели Александра–Хаазена). Параметры:  $\tau / \tau_1 = \exp[-(E_1 - E) / kT]$ ,  $\alpha = 10 \exp[-(E_i - E_d) / kT]$ : 1 и 1' отвечают соотношению параметров  $(E_i - E_d) / (E_1 - E) = 0.2$ ; 2 и 2' — соотношению параметров  $E_i = E_d$ , кривые 3 и 3' — соотношению параметров  $(E_i - E_d) / (E_1 - E) = -0.1$ .

ренция аррениусовских зависимостей от  $T$  подвижностей дислокаций  $B \sim \exp(-E_d/kT)$  и примесей  $1/\tau \sim \exp(-E_i/kT)$ , определяющая температурную зависимость параметра  $\alpha = a / (\tau B (\beta c_0)^m) \sim \exp[(E_d - E_i) / kT]$ . В свою очередь значение  $\alpha$  определяет  $\sigma_{\min}$  — интервал изменения напряжения в иммобилизационном режиме (рис. 2). Если подвижность примесей ниже подвижности дислокаций ( $E_i > E_d$ ), при  $T \rightarrow 0$   $\alpha$  и  $\sigma_{\min}$  растут и имеют место нормальное убывание деформирующего напряжения с температурой. Если, напротив, подвижность примесей выше ( $E_i < E_d$ ),  $\alpha$  и  $\sigma_{\min}$  убывают при  $T \rightarrow 0$  и имеется “аномальная” ветвь растущего с температурой деформирующего напряжения. При более высоких температурах — больших  $\alpha$  — интервал изменения напряжения определяется, как отмечалось при обсуждении рис. 2, величиной  $\tau_1 / \tau \sim \exp[(E - E_i) / kT]$  и в обоих случаях деформирующее напряжение убывает с ростом температуры. Подобные особенности неоднократно наблюдались в экспериментальных работах с различными материалами: в металлах с ОЦК-структурой, в разупорядоченных твердых растворах, при призматическом скольжении в металлах с ГПУ-структурой Ti, Zr, Be и интерметаллидах [2]. Отметим также, что быстрый рост числа иммобилизованных дислокаций за пределом текучести, приводящий к сильному деформационному упрочнению, был обнаружен для Si в [23] и других.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проведен синтез моделей эволюции дислокационных ансамблей и динамического взаимодействия дислокаций с примесной подсистемой кристалла. Это потребовало перехода на более высокий уровень детализации описания кинетики размножения и старения дислокаций. Развитая теория дает возможность вычислять средний по ансамблю разновозрастных

дислокаций примесный вклад в макроскопическое деформирующее напряжение, устанавливающееся за пределом текучести на стадии легкого скольжения. Анализ обобщенной модели позволил получить следующие результаты.

В соответствии с экспериментальными наблюдениями, свидетельствующими о появлении в легированных полупроводниках новых по сравнению с чистыми материалами режимов движения дислокаций и пластического течения, установлена возможность появления иммобилизационного режима движения дислокаций.

Выявлен механизм, объясняющий, каким образом и при каких условиях влияние примесей может приводить к аномальной температурной зависимости деформирующего напряжения.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Friedel J.* Dislocations. Oxford: Pergamon, 1964.
2. *Caillard D., Martin J.L.* Thermally Activated Mechanisms in Crystal Plasticity / Amsterdam; Boston; London; New York; Oxford; Paris; San Diego; San Francisco; Singapore; Sidney; Tokyo: Pergamon, 2003. 433 p.
3. *Sumino K.* // Defects and Properties of Semiconductors: Defect Engineering / eds. Chikawa J. et al. Tokyo: KTK Scientific Publishers, 1987. P. 227.
4. *Мильвидский М.Г., Освенский В.Б.* Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. М.: Металлургия, 1984. 256 с.
5. *Johnston W.G., Gilman J.J.* // J. Appl. Phys. 1959. V. 30. P. 129.
6. *Alexander H.* Dislocations in solids / ed. Nabarro F.R.N. Amsterdam; Oxford; New York; Tokyo: North-Holland, 1986. V. 7. Ch. 35. P. 113.
7. *Yonenaga I., Sumino K.* // Phys. Status Solidi. A. 1978. V. 50. P. 685.
8. *Kruml T., Dupas C., Martin J.L.* // Acta Mater. 2006. V. 54. P. 4721.
9. *Gross T.S., Mathews V.K., De Angelis R.J., Okazaki K.* // Mat. Sci. Eng. A. 1989. V. 117. P. 75.
10. *Siethoff H., Brion H.G.* // Philos. Mag. A. 2001. V. 81. P. 145.
11. *Никитенко В.И.* Динамика дислокаций. Киев: Наук. думка, 1975. С. 7.
12. *Sumino K., Imai M.* // Philos. Mag. A. 1983. V. 47. P. 753.
13. *George A., Rabier J.* // Rev. Phys. Appl. 1987. V. 22. P. 941.
14. *Cottrell A.H., Jaswon M.A.* // Proc. Roy. Soc. A. 1949. V. 199. P. 104.
15. *Yoshinaga H., Morozumi S.* // Philos. Mag. 1971. V. 23. P. 1351.
16. *Wang Y., Srolovitz D.J., Rickman J.M., Lesar R.* // Acta Mater. 2000. V. 48. P. 2163.
17. *Петухов Б.В.* // ФТП. 2002. Т. 36. С. 129.
18. *Malygin G.A.* // Phys. Status Solidi. A. 1982. V. 72. P. 493.
19. *Louat N.* // Scr. Metall. 1981. V. 15. P. 1167.
20. *Петухов Б.В.* // Кристаллография. 2009. Т. 54. С. 68.
21. *Хурт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 598 с.
22. *Petukhov B.V.* // Phys. Status Solidi. C. 2005. V. 2. P. 1864.
23. *Yonenaga I., Sumino K.* // J. Appl. Phys. 1984. V. 56. P. 2346.