1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 10
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 10

УДК 539.214 : 548.4

О КВАЗИЛОКАЛИЗАЦИОННОМ ПЕРЕХОДЕ ПРИ ДВИЖЕНИИ ДИСЛОКАЦИЙ В РЕЛЬЕФЕ ПАЙЕРЛСА

Б. В. Петухов

Распределение времен задержки перегиба на барьерах, образованных флуктуациями плотности точечных дефектов, приводит к тому, что в определенных условиях среднее время задержки расходится и соответственно средняя скорость движения перегиба обращается в нуль (квазилокализация). Проведенный расчет поведения функции распределения на больших временах задержки позволяет получить условие осуществления квазилокализационного перехода и найти количественные закономерности движения дислокации в режиме квазилокализации. Построенная теория применяется для описания особенностей движения дислокаций в монокристаллах германия.

Известно, что примеси и другие точечные дефекты кристалла оказывают сильное влияние на подвижность дислокаций и, следовательно, на пластичность материалов с высоким кристаллическим рельефом (полупроводники, металлы с ОЦК структурой и т. п.). Даже в рекордно чистых материалах собирающееся вблизи ядра дислокации избыточное содержание точечных дефектов зачастую приводит к радикальному отличию наблюдаемых закономерностей движения дислокаций от предсказываемых теорией для идеального кристалла [1].

Для описания влияния точечных дефектов на подвижность дислокаций предложен ряд теорий [2-6] и др. В частности, в работе [4] принималась простая модель, в которой учитывалось короткодействующее взаимодействие дислокации с точечным дефектом, описываемое всего лишь одним параметром — изменением энергии ядра дислокации, проходящей через дефектный узел кристалла, на некоторую величину U. При перемещении перегиба через дефектный узел энергия системы дислокация с перегибом изменяется либо на величину U, либо на величину $-U$ в зависимости от того, приобретает дислокация точечный дефект или освобождается от него. Таким образом, барьер в этой модели представляет собой ступеньку и существует своеобразная «память» перегиба о взаимодействиях с точечными дефектами. Это качественно отличает ситуацию от обычного взаимодействия частиц с локальными потенциалами, так как может приводить к наложению барьеров от разных, даже удаленных друг от друга, точечных дефектов. Такой коллективный вклад точечных дефектов может радикально изменять подвижность перегиба, приводя при некоторых условиях к обращению в нуль средней скорости движения перегибов. Как было установлено в [4], это обстоятельство связано с медленным убыванием функции распределения $P(\tau)$ времен задержки на барьерах, образованных флуктуациями плотности точечных дефектов $P(\tau) \sim \tau^{-(1+\delta)}$, так что среднее время задержки на барьере расходится при $\delta \leqslant 1$. Подобное явление впоследствии получило название «квазилокализации» и интерпретировалось аналогичным образом для прыжковой подвижности частиц в работе [7] и др.

Обращение в нуль средней скорости движения перегибов приводит к радикальному изменению характера их движения и в итоге к сильному торможению дислокаций. Макроскопическим следствием этого квазилокализационного перехода должно быть уменьшение пластичности кристалла, т. е. его упрочнение.

В работе [4] установлено, что при $\delta < 1$ главный вклад во время прохождения перегибом некоторого отрезка длины L вносят не типичные барьеры в своей массе, а единственный барьер с самым большим временем задержки, который можно встретить на рассматриваемой длине с вероятностью, близкой к единице. Отсюда следует нелинейный закон изменения длины пробега перегиба со временем

$$L \sim t^{\delta}, \tag{1}$$

а для скорости дислокации получается выражение

$$V = V_0 \exp\{-E/(1+\delta)\, kT\}. \tag{2}$$

Здесь E — энергия образования парного перегиба, T — температура, k — постоянная Больцмана, V_0 — предэкспоненциальный множитель.

При $\delta \geqslant 1$ формула (2) переходит в обычное выражение, отвечающее чистому кристаллу, с энергией активации, равной $E/2$; влияние точечных дефектов при этом становится малосущественным.

Аналогичные закономерности были получены также для модели гауссовского случайного поля в [6]. В том предельном случае, когда рассмотренная в [4] модель сводится к гауссовской, полученные результаты оказываются эквивалентными.

В настоящей работе будет произведено более подробное исследование закономерностей и следствий квазилокализационного перехода в несколько более общей, чем в [4], модели, учитывающей собирание точечных дефектов дислокацией, и будет сделана попытка сопоставить это явление с наблюдаемыми на эксперименте особенностями движения дислокаций в Ge [8].

1. Расчет функции распределения времен задержки

Барьеры для движения перегиба создаются неоднородными флуктуациями разности числа точечных дефектов $N(l)$ в долинах рельефа Пайерлса, связанных рассматриваемым дислокационным перегибом. Рассчитаем, следуя [4], функцию распределения $P(\tau)$ времен задержек перегибов

$$\tau \sim \int_0^\infty \exp\left\{\frac{U}{kT} N(l) - \frac{\sigma ab}{kT} l\right\} dl \tag{3}$$

для хаотического распределения точечных дефектов вдоль долин рельефа. Здесь σ — внешнее напряжение, a — постоянная решетки, b — величина вектора Бюргерса.

Развитый в [4] метод допускает простое обобщение на случай различных концентраций точечных дефектов в различных долинах рельефа, что дает возможность принять во внимание возможный избыток точечных дефектов за счет их собирания в ядре дислокации. Производя это простое обобщение, для функции $\varphi(s)$, являющейся лапласовским образом $P(\tau)$

$$\varphi(s) = \int_0^\infty e^{-s\tau} P(\tau)\, d\tau = \left\langle \exp\left\{-s \int_0^L \exp\left[\frac{U}{kT} N(l) - \frac{\sigma ab}{kT} l\right] dl\right\}\right\rangle, \tag{4}$$

получаем уравнение

$$\rho_1 \varphi\left(s e^{U/kT}\right) + \rho_2 \varphi\left(s e^{-U/kT}\right) - (\rho_1 + \rho_2)\, \varphi(s) - s\, \frac{\sigma ab}{kT} \frac{d\varphi}{ds} - s\varphi(s) = 0. \tag{5}$$

Здесь ρ_1, ρ_2 — линейные плотности точечных дефектов в первой и второй долинах рельефа, между которыми смещается дислокация; угловые скобки означают усреднение по расположению точечных дефектов. (Уравнение (5) выводится путем вариации (4) по L и перехода к пределу $L \to \infty$).

Нас будет интересовать распределение больших времен задержки, которое определяется асимптотикой $\varphi(s)$ при малых s. Будем искать решение уравнения (5) для малых s в виде $\varphi(s) \sim s^{\delta}$. Подставляя это выражение в (5), убеждаемся, что такое решение действительно существует, и получаем для δ уравнение

$$\rho_1\left(e^{\delta U/kT}-1\right)+\rho_2\left(e^{-\delta U/kT}-1\right)=\delta\frac{\sigma ab}{kT}. \tag{6}$$

Обращая $\varphi(s)$, находим, что функция распределения времен задержки перегиба $P(\tau)$ при больших τ ведет себя как

$$P(\tau)\simeq \mathrm{const}/\tau^{1+\delta}. \tag{7}$$

Для границы резкого торможения дислокаций точечными дефектами, отвечающей $\delta=1$, получаем из (6) условие

$$\sigma=\frac{kT}{ab}\left[\rho_1\left(e^{U/kT}-1\right)+\rho_2\left(e^{-U/kT}-1\right)\right]. \tag{8}$$

При напряжениях, меньших этого значения, скорость дислокации дается выражением (2).

Отметим, что развиваемая теория может быть легко обобщена на тот случай, когда имеется не единственный тип точечных дефектов, а целый спектр их, характеризуемый набором величин U_i и соответствующих плотностей $\rho_{1,2}(i)$. Для такого обобщения достаточно просуммировать полученные выражения по спектру, например условие квазилокализационного перехода (8) заменить на

$$\sigma=\frac{kT}{ab}\sum_i\left[\rho_1(i)\left(e^{U_i/kT}-1\right)+\rho_2(i)\left(e^{-U_i/kT}-1\right)\right].$$

Однако в настоящей работе мы ограничимся наиболее интересным предельным случаем, когда определяющий вклад в сумму по спектру дает один тип точечных дефектов.

Величина δ, определяемая уравнением (6), линейно зависит от температуры $\delta=\frac{kT}{U}\varphi\left(\frac{\sigma ab}{\rho_1 U},\ \frac{\rho_2}{\rho_1}\right)$, где φ находится из уравнения

$$\frac{1}{\varphi}\left[e^{\varphi}-1+\frac{\rho_2}{\rho_1}\left(e^{-\varphi}-1\right)\right]=\frac{\sigma ab}{\rho_1 U}. \tag{9}$$

Явные выражения для δ могут быть получены в предельных случаях высоких и низких напряжений

$$\delta=\begin{cases}\dfrac{kT}{U}\ln\left(\dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\ln\dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\right), & \dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\gg 1,\\[2ex] \dfrac{kT}{U}\dfrac{2ab}{(\rho_1+\rho_2)U}(\sigma-\sigma_{\text{ст}}), & \dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\ll 1.\end{cases} \tag{10}$$

Здесь $\sigma_{\text{ст}}\equiv(U/ab)(\rho_1-\rho_2)$ — величина, интерпретированная в работе [9] как стартовое напряжение для движения дислокаций.

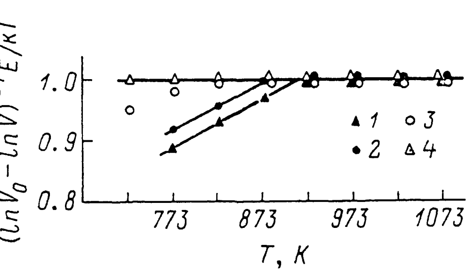
С понижением температуры или напряжения величина δ уменьшается, и при $\delta\ll 1$ выражение для скорости дислокации принимает вид

$$V\simeq\begin{cases}V_0\exp\left\{-\dfrac{E}{kT}\right\}\left(\dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\ln\dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\right)^{E/U}, & \dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\gg 1,\\[2ex] V_0\exp\left\{-\dfrac{E}{kT}+\dfrac{E}{U}\dfrac{2ab}{(\rho_1+\rho_2)U}(\sigma-\sigma_{\text{ст}})\right\}, & \dfrac{\sigma ab}{\rho_1 U}\ll 1.\end{cases} \tag{11}$$

Таким образом, при достаточно высоких напряжениях, когда применима верхняя формула в (11), скорость дислокации, помимо экспоненциальной аррениусовской зависимости, содержит еще зависимость от напряжения, близкую к степенной $V \sim (\sigma \ln \sigma)^m$, где $m=E/U$. При $\sigma \to \sigma_{ст}$ практически останавливается направленное движение перегибов. Это, в частности, проявляется в том обстоятельстве, что энергия активации движения дислокации, согласно нижней формуле (11), при $\sigma \to \sigma_{ст}$ составляет полную энергию образования парного перегиба и движение перегибов не вносит сколько-нибудь заметного вклада в перемещение дислокации.

2. Сопоставление с экспериментом

Как уже отмечалось, следствием квазилокализационного перехода должно являться заметное упрочнение материала при легировании. Кроме того, развитая теория приводит еще к ряду предсказаний, которые могут быть проверены на эксперименте. Это, во-первых, нарушение аррениусовского закона, связанное с заменой энергии активации $E/2 \to E/[1+ +(k/U)\ T\varphi]$; затем скачок измеряемого активационного объема с увеличением его при понижении температуры ниже температуры перехода на величину $(1/4)\ (kT/U)\ (E/\sigma)$. Такого типа аномалии нередко наблюдаются при макроскопических механических испытаниях материалов, однако одно-



Температурная зависимость величины $(\ln V_0-\ln V)^{-1}\ (E/kT)$, по данным [9], для напряжений $\sigma=1$ (*1*), 2 (*2*), 5 (*3*), 10 Н/мм² (*4*).

значно интерпретировать их природу затруднительно. Более детальную проверку теории можно было бы осуществить в экспериментах по измерению подвижности индивидуальных дислокаций. Одним из возможных объектов приложения развитой теории являются, по-видимому, монокристаллы германия, на которых подвижность дислокаций измерена в широком диапазоне температур и напряжений [2, 8, 10, 11] и др. В работе [8] было обнаружено наличие резкого изменения характера движения дислокаций в районе температур ~600 °C, так что скорость дислокаций не может быть описана аррениусовским законом в полном интервале температур. Наиболее заметным является переход в области низких напряжений $\sigma \leqslant 5$ Н/мм², в которой зависимость скорости дислокаций от напряжения усиливается и может быть аппроксимирована степенной зависимостью $V \sim \sigma^m$ с $m \geqslant 3$.

Отметим, что аналогичные особенности подвижности дислокаций наблюдались также недавно в кремнии [12], причем изменение дефектной структуры кристалла посредством термообработки приводит к существенному усилению этих особенностей.

Для объяснения закономерностей движения дислокаций в Ge в области низких температур и напряжений неоднократно использовалось предположение о влиянии точечных дефектов [2, 3, 13]. Однако попытки описать подвижность дислокаций во всем интервале температур, для которого в настоящее время имеются экспериментальные данные, в рамках единой теории не делалось. С целью сравнения с закономерностями, предсказываемыми теорией, изложенной в разделе 1, экспериментальные данные [8] были перестроены (см. рисунок) в виде зависимости от температуры при различных напряжениях величины $(\ln V_0-\ln V)^{-1}\ E/kT$, где E и $\ln V_0$ определены по высокотемпературной области, в которой аррениусовская зависимость хорошо выполняется. В сконструированной таким образом величине скомпенсированы обычная активационная зависимость от температуры, а также возможные зависимости от напряжения энергии активации и предэкспоненты. Согласно теории, эта величина должна равняться

1 при $T > T^*$, где T^* — температура перехода, и должна равняться $(1+kT\varphi/U)/2$ при $T < T^*$. Как видно из рисунка, экспериментальные данные действительно описываются ломаной линией, составленной из отрезка, отвечающего постоянному значению, равному единице, и отрезка, отвечающего линейной зависимости от температуры. Так как значение $\delta = kT\varphi/U$ в точке излома $T = T^*$ должно равняться единице, это дает возможность по известной величине $T^* \simeq 900$ K предсказать наклон температурно-зависящего участка $k\varphi/2U \approx 0.6 \cdot 10^{-3}$ K^{-1}. Непосредственное измерение наклона на графике дает величину $\approx 0.8 \cdot 10^{-3}$ K^{-1}, что ввиду грубости модели и большого разброса данных следует считать удовлетворительным согласием. Слабая зависимость наклона от напряжения свидетельствует, по-видимому, о логарифмической зависимости от напряжения, согласно верхней формуле (10). Использование этой формулы позволяет по разности температур перехода для напряжений $\sigma = 1$ и 2 Н/мм^2, составляющих соответственно 910 и 873 K, оценить величину U при помощи соотношения $U = k \ln (\sigma_2/\sigma_1)/2\, (1/T_2 - 1/T_1)$. Ввиду малой разницы температур перехода эта оценка не очень точна, но дает разумный порядок величины $U \sim 0.6$ эВ.

Таким образом, развитая теория позволяет непротиворечиво описать экспериментально наблюдаемые особенности подвижности дислокаций в Ge в широком интервале температур и напряжений на основе представлений о приводящем к квазилокализационному переходу влиянии точечных дефектов кристалла.

Отметим в заключение еще одну интересную возможность экспериментального наблюдения квазилокализационного режима движения перегибов. В работе [14], посвященной изучению подвижности дислокаций в Si импульсной методикой, было высказано предположение, что движущей силой, приводящей к обратному движению перегибов при снятии внешнего напряжения, могут быть стартовые напряжения. В этом случае, согласно нижней формуле (10), $\delta = (2kT/U)\ (\rho_1 - \rho_2)/(\rho_1 + \rho_2)$ и в типичных случаях $\delta \ll 1$. В то время как при прямом движении перегиба длина пробега пропорциональна длительности импульса напряжения t_i, длина пробега при обратном движении изменяется с длительностью паузы $t_п$ по нелинейному закону $\sim t_п^{\delta}$. Таким образом, для того чтобы релаксация перегибов во время паузы была возможна, необходимо, чтобы длительность паузы очень резко возрастала с увеличением длительности импульса $t_п \sim t_i^{1/\delta}$. В работе [14] подобная резкая зависимость действительно наблюдалась, хотя интерпретировалась другим образом, но, на наш взгляд, не исключена также возможность того, что в этом эксперименте непосредственно измерялась подвижность перегибов в режиме квазилокализации.

Литература

[1] *Бондаренко И. Е., Никитенко В. И.* В кн.: Проблемы прочности и пластичности твердых тел. Л.: Наука, 1979, с. 244—256.
[2] *Celly V., Kabler M., Ninomiya T., Thomson R.* Phys. Rev., 1963, vol. 131, N 1.
[3] *Рыбин В. В., Орлов А. Н.* ФТТ, 1969, т. 11, № 11, с. 3251—3259, 3603—3608.
[4] *Петухов Б. В.* ФТТ, 1971, т. 13, № 5, с. 1445—1449.
[5] *Suzuki H.* In: Dislocation in Solids, vol. 4. Dislocation in Metallurgy. Amsterdam: North Holland Publ. Co., 1979, p. 191—217.
[6] *Винокур В. М., Иоффе Л. Б., Сагдеев И. Р.* Изв. АН СССР. Сер. физ., 1987, т. 51, № 4, с. 763—767.
[7] *Bernasconi J., Schneider W. R.* Phys. Rev. Lett., 1981, vol. 47, N 23, p. 1643.
[8] *Фарбер Б. Я., Бондаренко И. Е., Никитенко В. И.* ФТТ, 1981, т. 23, № 7, с. 2192—2194.
[9] *Петухов Б. В.* ФТТ, 1982, т. 24, № 2, с. 439—442.
[10] *Schaumburg H.* Phil. Mag., 1972, vol. 25, N 6, p. 1429—1458.
[11] *Казо И. Ф., Макара В. А., Новиков Н. Н.* Металлофизика, 1980, т. 2, № 5.
[12] *Макара В. А.* Препринт ИПМ-86-2. Киев, 1986. 53 с.
[13] *Möller H.-J.* Acta Metall., 1978, vol. 26, N 6, p. 963—973.
[14] *Никитенко В. И., Фарбер Б. Я., Иунин Ю. Л.* ЖЭТФ, 1987, т. 93, № 4 (10).

Институт кристаллографии АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
14 января 1988 г.