

二相介质中的运动位错*

杨 顺 华

北京科技大学材料物理系, 北京, 100083

李 国 旺 黄 军 平

北京科技大学物理系, 北京, 100083

1990 年 7 月 9 日收到

本文考虑二相介质中与平面相界平行的匀速运动直线位错。采用了与位错相对静止的运动坐标系,在此坐标系中推广位错各向异性弹性理论的普遍方法,并利用弹性力学中的格林函数方法处理相界面,计算得到此位错在介质中所产生的总弹性场,以及其所受到的“像力”。本文所提出的理论方法有一般的适用性,结果可以用于考虑此位错与其它缺陷的相互作用,以及二相介质的力学性质。

PACC: 6170G; 6848

一、引 言

材料的力学性质在相当大程度上依赖于其中位错的运动。在复相系统中,相界必然对位错的运动有影响。研究含相界的二相系统中运动位错的弹性性质是定量研究这种相互作用的第一步,从而也是从理论上考虑复相介质力学性质的出发点。运动位错对于无扩散相变也有重要影响。

一个二相介质的简单弹性模型是两个半无限的各向异性弹性介质,通过一个平面界面相连结。它们之间有一定的取向关系,界面即相界,也有一定的取向。这样才能反映两相的晶体结构和各种取向关系。

无限各向异性弹性介质中任意静止位错的弹性场已有一定的较成熟的理论方法进行计算^[1,2]。无限介质中运动位错的场也有计算结果,不过工作多限于各向同性情况^[3,4]。关于二相介质中位错的研究较少。我们曾对于二相介质中与相界斜交静止位错的情况进行过理论计算^[5]。我们也曾对二相系统中相界上匀速运动的位错作过计算^[6],这一工作可以直接用于处理相变位错,从而定量讨论位错在无扩散相变过程中所起作用。

本文考虑二相介质中与平面相界平行的匀速运动位错。取一个与位错相对静止的运动坐标系,在此坐标系中推广位错各向异性弹性理论的普遍方法,并利用弹性力学中的格林函数方法处理相界面,计算得到此位错在介质中所产生的总弹性场,以及其所受到的“像力”。本文所提出的理论方法有一般的适用性,结果可用于考虑此位错与其它点阵缺

* 国家自然科学基金资助的课题。

陷的相互作用,以及二相介质的力学性质.

二、二相介质的模型与运动位错

设想坐标平面 $x_2 = 0$ 将空间分为上、下两个半无限空间, $x_2 > 0$ 的区域记作 (I), $x_2 < 0$ 的区域记作 (II). 区域(I)和(II)分别为结构不同的两种晶态固体所充满, 这就是共存的两个物相. 其间相界为 x_2 平面.

考虑一个无限直线位错, 它与 x_3 轴平行, 处在相区 (I) 中, 整体以速度 $v = v\delta_1$ 向 x_1 方向作匀速运动. 取一个运动坐标系 (x'_1, x'_2, x'_3) , 与实验室坐标系 (x_1, x_2, x_3) 平行, 令位错始终处在 x'_3 轴上. 于是此自然(位错)坐标系相对于实验室坐标系也是以速度 $v = v\delta_1$ 作匀速运动, 其间的变换关系是简单的,

$$x'_1 = x_1 - vt, \quad x'_2 = x_2 - ct, \quad x'_3 = x_3. \quad (1)$$

见图 1.

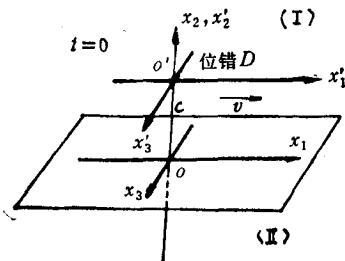


图 1 两个坐标系与运动位错

直线位错平行于相界作匀速运动是一个恒稳的状态, 在上述运动坐标系 (x'_1, x'_2, x'_3) 中可以用类似于研究静止位错的方法加以处理. 在此运动坐标系中一切场量均不随时间而变. 首先要求出这个位错在两个相区中产生的弹性应力场以及它所受的广义“像力”. 由于第二相和相界的存在以及介质的各向异性, 这个问题

仍然没有一般的解析解. 可以借助于一个理想的构造操作, 并应用关于弹性体界面的 Gebbia 定理和 Green 函数方法, 求出此问题的数值解.

我们提出的构造方式如下: 先假定整个空间充满介质(I), 即晶体(I)或相(I), 其中有位错 D 在作匀速运动. 求出此位错在运动坐标系 (x'_1, x'_2, x'_3) 中恒稳的弹性场, 以“ $I\infty$ ”记之. 然后设想沿平面 $x_2 = 0$ 切开, 将下半空间用介质(II)代换, 通过 x_2 平面与上半空间中的介质(I)相连接. 此时应力通过界面传递, 所以在 x_2 面上自动连续. 但因为界面的两侧是不同的介质, 所以弹性位移场不连续, 存在 $\delta u_i = u_i|_{x_2 \rightarrow 0^-} - u_i|_{x_2 \rightarrow 0^+}$. 为了满足边界上位移连续, 即 $\Delta u_i = 0$ 的条件, 需要在上半空间的下岸与下半空间的上岸分别施加一个虚拟的补充位移 $\pm \delta u_i$. 这个附加的表面位移在区域(I)和区域(II)的内点上引起附加的弹性场“ E_I ”和“ E_{II} ”, 于是总场即为原来的场与此附加场之和; 例如在相区(I)内 $E_{IT} = I\infty + E_I$, 这就是所要求的最后的场.

在运动坐标系 (x'_1, x'_2, x'_3) 中, “ $I\infty$ ”场和“ E_I ”场都是恒稳的, 由于“ E_I ”场而作用在运动位错上的力也是恒稳的, 后者借助 Peach-Koehler 公式计算.

为了求得数值结果, 必须具体取定两相的晶体结构和几何关系, 以及位错的参数. 这些将在下节之末给出.

三、理论公式与算法

按照上节中所述模型, 首先计算此运动位错的“ $I\infty$ ”场. 从普遍的运动方程出发, 在

实验室坐标系中它的形式为

$$c_{ijkl}u_{k,li} = \rho\ddot{u}_k \quad (2)$$

匀速运动下解的形式为

$$u(x, t) = u(x - vt) \quad (3)$$

如果作变换

$$R = x - vt, \quad (4)$$

则有

$$\frac{\partial}{\partial x_m} = \frac{\partial}{\partial R_m}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = -v_i \frac{\partial}{\partial R_i} \quad (5)$$

这相当于变换到以匀速 v 运动, 相对于位错为静止的坐标系. 这样, 运动方程(2)可以写为

$$c'_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial R_i \partial R_j} = 0. \quad (6)$$

此方程与弹性静力学 Navier 方程

$$c_{ijkl}u_{k,li} = 0 \quad (7)$$

形式完全一致, 只是在方程(6)中

$$c'_{ijkl} = c_{ijkl} - \rho v_i v_j \delta_{ik} \quad (8)$$

是有效弹性常数张量, 运动的效应含于其中. 这样, 在运动坐标系 $(R_1, R_2, R_3) \equiv (x'_1, x'_2, x'_3)$ 中, 方程(6)的解法和解与静止坐标系中 Navier 方程的解法和解一致.

无限各向异性介质中静止位错弹性场的计算是由 Navier 方程出发, 对于直线位错已有比较成熟的直接方法, 即 Eshelby 方法, Willis 方法及积分表示法^[1,2]. Eshelby 方法的主要优点是在解出一个六次代数方程以后, 即可用线性代数方法得到无限介质中位错的位移场及应力场^[2]. 具体地讲, 设位错处于 x'_3 轴上, 并将方程(6)[或(7)]的解的形式试设为

$$u_k(x') = A_k f(\zeta'), \quad (9)$$

$$\zeta' = x'_1 + px'_2, \quad (10)$$

代入方程(6)[或(7)]中, 得到

$$a_{ik} A_k \frac{d^2 f}{d\zeta'^2} = 0, \quad (11)$$

$$a_{ik} = c'_{i1k1} + p(c'_{i1k2} + c'_{i2k1}) + p^2 c'_{i2k2}. \quad (12)$$

方程组(11)中消去公因数 $\frac{\partial^2 f}{\partial \zeta'^2}$, 即成为代数方程组

$$a_{ik} A_k = 0 \quad (13)$$

确定诸 A_k . 此方程在行列式

$$\det |a_{ik}| = 0 \quad (14)$$

时有解. 方程(14)是关于 p 的六次代数方程, 不难用数值法求解, 其解记为 $p(l)$, $l = 1, \dots, 6$. 从而可解方程(13)得到诸系数 $A_k(l)$.

将未知函数 $f(\zeta')$ 展为 Laurent 级数, 并根据位错条件, 可定出

$$f(\zeta_{(l)}) = \frac{D(l)}{\pm 2\pi i} \ln \zeta_{(l)}. \quad (15)$$

引入记号

$$B_{ij}(l) = [c_{ijk1} + p(l)c_{ijk2}]A_k(l), \quad (16)$$

则根据 Burgers 矢量定义及位错芯壁上合力为零的要求有

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 A_k(l)D(l) \right] = b_k, \quad (17)$$

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 B_{iz}(l)D(l) \right] = 0. \quad (18)$$

由此定出诸 $D(l)$ 。最后得到“ $I\infty$ ”场的位移和应力的表示式¹⁾

$$u_k^{I\infty}(\mathbf{x}') = \operatorname{Re} \left\{ \sum_{l=1}^6 \frac{A_k(l)D(l)}{\pm 2\pi i} \ln \zeta_{(l)} \right\}, \quad (19)$$

$$\sigma_{ij}^{I\infty}(\mathbf{x}') = \operatorname{Re} \left\{ \sum_{l=1}^6 \frac{B_{ij}(l)D(l)}{\pm 2\pi i} \frac{1}{\zeta_{(l)}} \right\}, \quad (20)$$

式中 $\zeta_{(l)} = x'_1 + p_{(l)}x'_2$ 。

其次要计算由于第 (II) 相和相界的存在所引起的对“ $I\infty$ ”场的修正,或附加的弹性场,或广义的“像场”。由于相区 (II) 内没有内应力源,故其中应力系由相区 (I) 通过界面传递过去,因此在相界 x_2 平面上、下两岸的应力自动连续,由“ $I\infty$ ”场在 x_2 面上之值确定。但由于下岸以下与上岸以上是不同的弹性介质,所以在界面上位移不连续,下半空间的位移应通过下式由 $\sigma_{ij}^{I\infty}(x_2 = 0)$ 确定:

$$u_k^{\text{II}}(\mathbf{x}') = \int_{S(x_2=0)} \sigma_{ij}^{I\infty}(\mathbf{x}'') G_{ik}^{\text{II}}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') dS'_i, \quad (21)$$

式中 $G_{ik}^{\text{II}}(\mathbf{r})$ 为第 (II) 相的弹性 Green 函数。这样就可以算出位移不连续量

$$\Delta u_k = u_k^{\text{II}}(S) - u_k^{I\infty}(S). \quad (22)$$

于是,如在 S 的上下两岸分别加上位移 $\delta u_k^{\pm} = \pm \Delta u_k$, 即可致使位移连续的条件满足。

此 δu_k^{\pm} 在相区 (I) 中引起附加位移场

$$u_k^I(\mathbf{x}') = \int_{S(x_2=0)} \delta u_k^{\pm} c_{kilm}^I G_{il,m}^+(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') dS'_i, \quad (23)$$

相应的附加应力场为

$$\sigma_{ij}^I(\mathbf{x}') = c_{ijmn}^I u_{m,n}^I(\mathbf{x}'). \quad (24)$$

相区 (I) 中的总应力场便为

$$\sigma_{ij}^I(\mathbf{x}') = \sigma_{ij}^{I\infty}(\mathbf{x}') + \sigma_{ij}^I(\mathbf{x}'). \quad (25)$$

由于第 (II) 相和相界之存在而作用在运动位错单位长度上的力(广义像力)由 Peach-Koehler 公式

$$F_k = \epsilon_{kij} b_i \sigma_{ij}^I t_l \quad (26)$$

计算。

在完成(21)和(23)式的计算中,必须先另行确定 Green 张量函数 G_{mn}^{\pm} 。弹性 Green

1) 此二式中因数 $2\pi i$ 中的 $i = \sqrt{-1}$, 勿与下标 $i (=1, 2, 3)$ 相混。

函数的求法有若干种, 这里采用积分表示^[3,2]

$$G_{mn}(\mathbf{r}) = -\frac{Q_{mn}}{4\pi|\mathbf{r}|}, \quad (27)$$

式中

$$Q_{mn} = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (\mathbf{nn})_{mn}^{-1} d\omega, \quad (28)$$

$$(\mathbf{nn})_{mn} = n_i c_{imni} n_l. \quad (29)$$

而

$$G_{mn,k} = -\frac{1}{8\pi^2|\mathbf{r}|^2} \int_0^{2\pi} [T_k(\mathbf{nn})_{mn}^{-1} - n_k F_{mn}] d\omega, \quad (30)$$

式中

$$F_{mn} = F_{nm} = (\mathbf{nn})_{mn}^{-1} \{ (\mathbf{nT})_{,p} + (\mathbf{Tn})_{,p} \} (\mathbf{nn})_{pn}^{-1}. \quad (31)$$

在以上公式中 \mathbf{r} 为由源点至场点的矢量, \mathbf{T} 为 \mathbf{r} 方向上的单位矢量, \mathbf{n} 为垂直于 \mathbf{T} 的一个单位矢量, 因而 Q_{mn} 依赖于弹性常数张量和矢量 \mathbf{T} . 这几个矢量和积分变量 ω 示于图 2 和图 3 中.

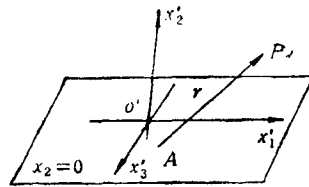


图 2 源点 A 和场点 P \mathbf{T}/\mathbf{r}

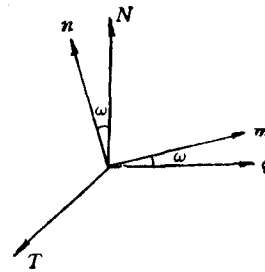


图 3 矢量 \mathbf{n} 和角 ω

G_{mn} 的这种表示法是根据 G_{mn} 的基本定义方程

$$c_{ijml} G_{mn,li}(\mathbf{r}) + \delta_{in} \delta(\mathbf{r}) = 0 \quad (32)$$

以及 Radon 变换

$$f = f(\mathbf{n}, \alpha) = \iint_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{x} = \alpha} f(\mathbf{x}) dS, \quad (33)$$

$$f(\mathbf{x}) = -\frac{1}{8\pi^2} \iint_{|\mathbf{n}|=1} \left[\frac{\partial^2 f(\mathbf{n}, \alpha)}{\partial \alpha^2} \right]_{\mathbf{n} \cdot \mathbf{x} = \alpha} dS$$

推得^[4].

在实际计算中主要繁复之处在于求逆矩阵 $(\mathbf{nn})_{ij}^{-1}$. 对于立方晶系虽然公式稍简, 但计算的全过程仍甚为繁冗.

取 $\alpha/\gamma\text{Fe}$ 二相系统为例作数值计算. 约定 $\gamma(\text{fcc})$ 相为第 (I) 相, $\alpha(\text{bcc})$ 相为第 (II) 相. 在实验室坐标系中此二相的取向关系为

$$[11\bar{2}]_{\gamma} // [1\bar{1}0]_{\alpha} // \hat{x}_1, [111]_{\gamma} // [11\bar{2}]_{\alpha} // \hat{x}_2, [\bar{1}10]_{\gamma} // [111]_{\alpha} // \hat{x}_3. \quad (34)$$

这两个相的有关物理常数于表 1 中给出. 运动坐标系 (x'_1, x'_2, x'_3) 与实验室坐标系平行, 原点 o' 在后一坐标系中的坐标为 $(vt, c, 0)$, 取 $c = 10\text{\AA}$. 位错处在相区 (I) 内, x'_3 轴

上;取 $b = \frac{a}{2} [0\bar{1}1]$, $v = 1500\text{m/s}$. 取定这个位错速度是为了适当显示运动的效果,并未将它作为一个特殊速度看待.

表 1

	弹性常数 (10^{11}N/m^2)			点阵常数 ^[7] (\AA)	密度	波速 (m/s)		
	c_{11}	c_{12}	c_{44}			v_l (纵)	v_s (切)	v_e (切)
$\alpha\text{-Fe}(\text{bcc})$	2.338	1.378	1.184	2.866	7.870	6217	2470	3879
$\gamma\text{-Fe}(\text{fcc})$	2.737	1.618	1.355	3.656	7.583	6825	2716	4227

注: 表中除点阵常数外,其它数据引自文献[8].

采用 BASIC 语言设计程序.

包括弹性常数的坐标变换共编子程序 10 个. 主要的子程序是求解六次代数方程的程序及求逆矩阵 $(nn)^{-1}$ 与 Green 函数的程序.

面积分(21)和(23)式在 $x_2 = 0$ 面上原点 o 附近 $20\text{\AA} \times 20\text{\AA}$ 的正方形区域上进行.

四、计算结果

1. 相区 (I) 中的总应力场

主要计算运动位错所在的相区 (I) 中的应力场,此应力场由两部分组成,即“ 100 ”场

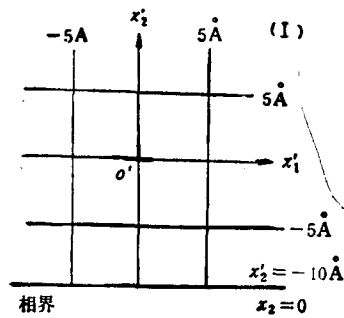
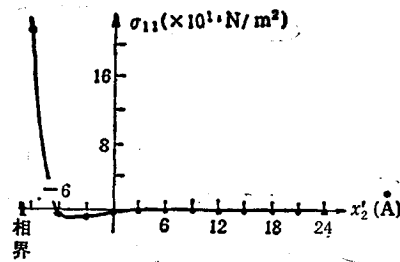
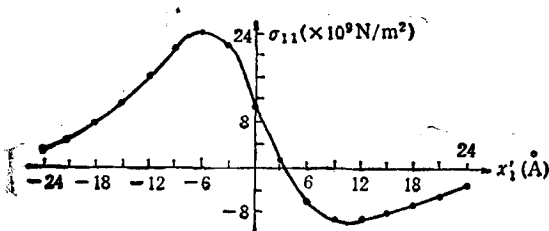
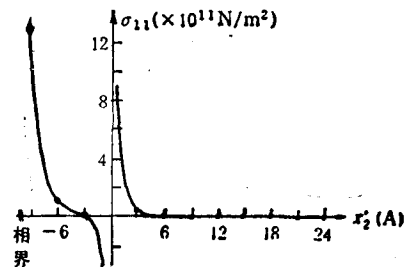


图 4

图 5 在 $x_2 = 0, x_1 = 5\text{\AA}$ 处 x_2 与 σ_{11} 的关系曲线图 6 在 $x_2 = 5\text{\AA}, x_1 = 0$ 处 x_1 与 σ_{11} 的关系曲线图 7 在 $x_1 = 0, x_2 = 0$ 处 x_2 与 σ_{11} 的关系曲线

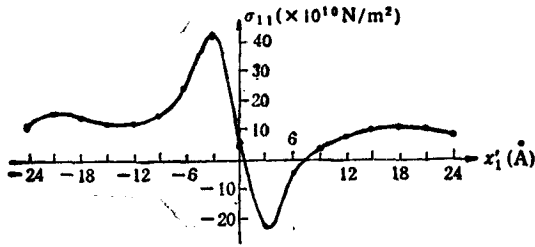


图 8 在 $x'_2 = 0, x'_3 = -5 \text{ \AA}$ 处 x'_1 与 σ_{11} 的关系曲线

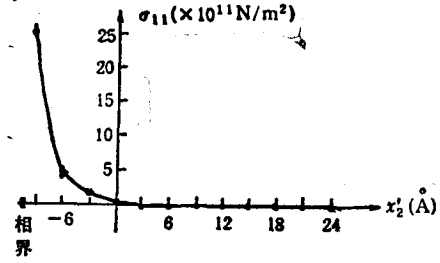


图 9 在 $x'_1 = -5 \text{ \AA}, x'_3 = 0$ 处的 x'_2 与 σ_{11} 的关系曲线

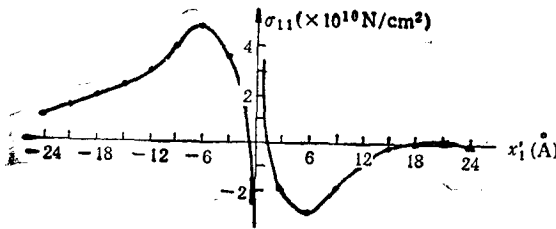


图 10 在 $x'_2 = 0, x'_3 = 0$ 处 x'_1 与 σ_{11} 的关系曲线

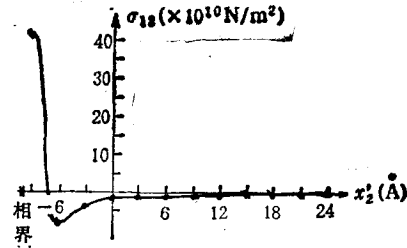


图 11 在 $x'_1 = -5 \text{ \AA}, x'_3 = 0$ 处 x'_2 与 σ_{12} 的关系曲线

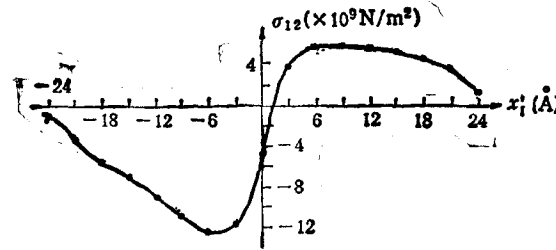


图 12 在 $x'_2 = 5 \text{ \AA}, x'_3 = 0$ 处 x'_1 与 σ_{12} 的关系曲线

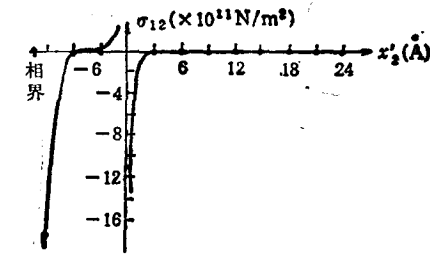


图 13 在 $x'_1 = 0, x'_3 = 0$ 处 x'_2 与 σ_{12} 的关系曲线

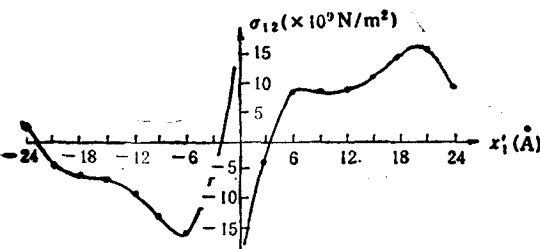


图 14 $x'_2 = 0, x'_3 = 0$ 处 x'_1 与 σ_{12} 的关系曲线

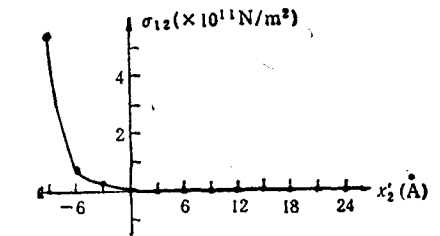


图 15 在 $x'_2 = 0, x'_3 = 5 \text{ \AA}$ 处 x'_2 与 σ_{12} 的关系曲线

和“像场 EI”。作为示例，给出 6 条有代表性的直线上的 σ_{11} 和 σ_{12} ，这 6 条线分别为 ($x'_2 = 0, x'_2 = \pm 5 \text{ \AA}; x'_3 = 0$) 和 ($x'_1 = 0, x'_1 = \pm 5 \text{ \AA}; x'_3 = 0$)；它们的位置示于图 4 中。注

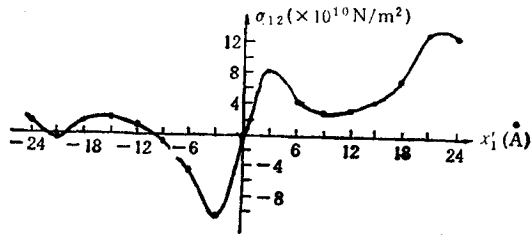


图 16 在 $x'_2 = -5 \text{\AA}$, $x'_3 = 0$ 处 x'_1 与 σ_{12} 的关系曲线

意所绘出的是运动坐标系,相界在 $x'_2 = -10 \text{\AA}$ 处,即 $x_2 = 0$ 平面。

计算结果示于图 5 至图 16 中。

2. 运动位错在“EI”场存在时单位长度上所受的力也是恒稳的,算出数值如下:

$$F_1 = 6.107\text{N}, F_2 = -2.047\text{N}, F_3 = 0.$$

此力的物理意义参照于“EI”场的意义是很明显的,界面对于运动位错有一个吸引作用。

五、结 论

1. 本文推广了无限各向异性介质中静止位错的普遍弹性理论,以及处理有限介质中弹性场的普遍 Green 函数方法,计算了在一个相区中平行于相界平面作匀速运动的直线位错所产生的总弹性场。以 α/γ Fe 二相系统为例,具体给出一个相区中 6 条代表性直线上的应力场数值。二相区域中任一点上的弹性位移和应力场量均可以用本工作中所设计的方法和程序算出。

2. 图 5 至图 16 中所示的应力场沿平行于 x'_1 轴方向或平行于 x'_2 轴方向上的分布,在实验室坐标系中观察如同一个随位错运动的“波包”一样。介质各向异性与位错运动的效果表现在此“波包”相对于 $x'_1 = 0$, $x'_2 = 0$ 的不对称性中。

3. 除 $(x'_1, x'_2) = 0$ 的位错线上的点以外,所有场点上的应力场均不发散。图 5 至图 16 中所示应力场在位错线上发散的方式与普通各向同性介质中静止位错的习性类同。

4. 从图 5 至图 16 中可以看到,界面效应随与界面距离之增大而减小的趋势。图中表明“像场”随接近界面而增大,但并不是无限增大或发散。在界面上应力场会达到某一极大值,越过界面之后即当随距离之增大而减小。

5. 作用在运动位错上的广义“像力”方向指向界面,显示了常见的界面或表面对位错的吸引作用。

6. 本文只计算了一个位错速度,即 $v = 1500\text{m/s}$ 的情况,如此可以显示位错运动的效应。若改变 v 的值重复计算即可以看出速度变化的效果。从理论中引入速度的方式,即(8)式可见,当 $v \rightarrow 0$ 时必然得到相应的静止位错的场。但当 v 增大时这个理论并未给出位错速度的上限;这是由于所采用的简单伽利略型变换(4)式所致,它使得方程(6)与方程(7)形式上完全一致,因而使得以下的解法成为可能。但对于位错的变速运动此法失效;此时需要对于各向异性介质中弹性波传播的更细致的分析。这个分析可能揭示本文中的简单理论的合理适用范围,在我们工作的现阶段尚未做这种分析。

7. 本文的理论和方法对于这类中速运动的位错普遍适用。只要给出了两个相的晶系, 弹性常数, 两个点阵的相对取向及界面取向; 位错的取向、Burgers 矢量及位错速度, 位错产生的弹性场及广义像力均可以照此算出。因此本文的理论和方法具有相当普遍的实际可用性。可以直接用于研究此类运动位错与其它点阵缺陷或位错的相互作用, 对于研究复相介质的力学性质也是一个实际的出发点。

工作过程中曾得到马如璋教授的有益讨论, 特此致谢。

- [1] J. D. Bacon *et al.*, *Prog. in Mat. Sci.*, **23**(1979), 61.
- [2] 杨顺华, 晶体位错理论基础, 第一卷, 科学出版社, (1988), 第五章.
- [3] 同[2], 第六章.
- [4] J. Weertman and J.R. Weertman, in "Dislocations in Solids", vol. **3**(1980), chap.8.
- [5] 杨顺华、胡小锋、马如璋, 物理学报, **38**(1989), 1483.
- [6] 杨顺华、王朝阳, 物理学报, **39**(1990), 1251.
- [7] *Material Science*, vol. **3**(1985), 143.
- [8] *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. **3**(1973), Fig.4, Fig. 15; Tab.4, Tab7, Tab.8.

MOVING DISLOCATION IN TWO PHASE MEDIUM

Yang Shun-hua Li Guo-wang

Huang Jun-ping

Beijing University of Science and Technology, Beijing, 100083

(Received 9 July 1990)

ABSTRACT

We consider in this paper a straight dislocation moving uniformly parallel to the planar phase boundary in a two phase medium. We take a moving coordinate system, in which the dislocation is relatively at rest, and extend the general anisotropic elastic theory of dislocation to this coordinate system. We employ the Green function method in elastic theory to treat the phase boundary, thus obtain the total elastic field produced by this moving dislocation and the "image force" acting on it. Our theoretical method is applicable in general, it can be used to consider the interaction between this dislocation and other lattice defects, and mechanical properties of the two phase medium.

PACC: 6170G; 6848