

肥皂泡筏中的力律与肥皂泡半径的关系*

郭平波[†] 王少峰 吴小志 张福州 叶金琴 王 锐

(重庆大学结构与功能研究所,重庆 400044)

(2007 年 12 月 6 日收到,2008 年 2 月 26 日收到修改稿)

利用肥皂泡之间的吸引排斥相互作用和 Peierls 切割粘合方案研究了不同半径泡筏边界上的肥皂泡所受的回弹力与位移的关系曲线.计算得到回弹力达到最大值的位置与 Bragg 所获得的结果一致.结合曲线的物理特征,给出一个新的函数形式来描述此力律曲线,从而得到肥皂泡筏中的力律与肥皂泡半径的关系.

关键词:位错方程,力律,肥皂泡筏

PACC:0340D,6170G

1. 引言

自 1947 年 Bragg 和 Nye^[1]用肥皂泡筏来模拟金属中密排面上原子的排列,特别是原子排列时候形成的空位,间隙,位错和晶界等缺陷,肥皂泡筏就被人们广泛应用.如早期做的断裂方面的工作^[2],以及最近的纳米压痕技术^[3],纳米刻度断裂^[4]已经成功用肥皂泡筏模型对实际金属中的复杂现象来提供定量的预测.然而肥皂泡筏中的位错问题仍然具有争议,这主要是因为泡筏之间相互作用力律没有得到澄清. Nicolson, Lomer, Shi 等人^[4-8]先后对泡筏中的相互作用力进行了研究,Foreman 等人^[9]对 Peierls-Nabarro 的处理方法进行了改进,他们引入带有参数的唯象力律代替正弦力律,并研究了直径为 1.3 mm 的肥皂泡筏,但是这些都不能够很好的解释实验上观察到的位错宽度随着泡筏半径的变化而改变.

解决位错宽度随肥皂泡筏半径变化关系的问题关键在于找出肥皂泡筏中的力律与肥皂泡半径的关系.目前寻找力律的方法基本上都是基于 Peierls 切割粘合方案,将无限的晶体平面沿晶体的某一密排面方向分成两半无限,让上半平面的晶体相对下半平面整体滑移,认为在滑移方向上的回复力与位移的关系就是力律^[10-12].本文也采用这样的处理方法,但是对于肥皂泡来说,若让其做刚性滑移,得到的力律与真实的力律不符合,差别很大.因此,本文

不是让两个半无限的平面作刚性滑移,而是让它们在滑移的过程中要通过弛豫来保持竖直方向上仍然处于平衡.

本文在 Nicolson, Lomer 等人工作的基础上,计算了边界上的肥皂泡所受的回弹力与位移的关系,计算得到的回复力达到最大值位置的结果与 Bragg 理论上分析得到的结果一致,从获得的曲线关系的物理特征出发,找到了一个力律来代替正弦力律.最终得到了肥皂泡筏中的力律与肥皂泡半径的关系.

2. 理论方法

晶体不受作用力时不发生形变,无形变的晶体的内部粒子排列于其平衡位置上.当发生形变时,粒子间发生了相对的位移,平衡状态被破坏,粒子间也产生相互作用力,这种力驱使粒子恢复到原来的平衡位置,这时粒子间的相互作用力称为回复力.

设将一无限的泡筏沿某一密排方向分成两半无限,让上下两半无限沿该方向相对位移,若把上下两部分各看作是一个弹性体,在未弛豫阶段,这两部分都可以暂时被认为是自由和不受力的.当把两半无限泡筏结合起来时,上下两方的肥皂泡会在其相互作用力的作用下发生位置弛豫和位移.用弹性力学的语言来说,就是上下两半晶体在滑移面上,各自受到一个回复力的作用,最后导致平衡组态.这里的回复力是由上下两半无限肥皂泡筏之间的相互

* 国家自然科学基金(批准号:10774196)资助的课题.

[†] E-mail: guopingbo@yahoo.com.cn

作用力在水平滑移方向的分力提供的。

由于泡筏受力容易发生形变,若让其做刚性移动,即只在水平方向上有位移,这时由于肥皂泡变形厉害,肥皂泡之间的排斥力就会增大,它们在竖直方向上的合力也将变大,就不能够保持竖直方向的平衡.这里设上半平面的泡筏在竖直方向上通过弛豫来维持平衡.只要知道上下两半无限平面在边界上的肥皂泡之间的相互作用力,就可以计算出回复力的大小.

Nicolson 和 Lomer 等人已经计算了泡筏中两肥皂泡之间的吸引力和排斥力,并给出了考虑多体相互作用后的两肥皂泡之间排斥力的计算公式^[4,7]

$$f_i = f(\Delta_i) = f(\delta_i + \gamma\delta_j + \gamma\delta_k), \quad (1)$$

其中 i, j, k 表示肥皂泡筏的三个密排面的方向, δ_i 表示的是肥皂泡体积变化后轴向的压缩率, Δ_i 表示考虑了多体相互作用后的两肥皂泡在 i 方向的压缩率.当已知 $\delta_i, \delta_j, \delta_k$ 时,就可计算出相应的 f_i ,由于计算过程繁琐,这里不再细述.由几何关系,可得到回复力的计算公式

$$f = f_2 \cos \left[\arctan \left(\frac{\frac{\sqrt{3}}{2}a + x}{\frac{a}{2} - x} \right) \right] - f_1 \cos \left[\arctan \left(\frac{\frac{\sqrt{3}}{2}a + x}{\frac{a}{2} + x} \right) \right], \quad (2)$$

其中, a 是泡筏处于平衡时两肥皂泡球心之间的距离,相当于晶格常数, x 是上半平面的泡筏在滑移过程中在竖直方向上的弛豫量.我们每给定一个位移,通过调整竖直方向上的弛豫量 x 来保持竖直方向上的平衡,再通过(2)式就可求解出与位移 u 对应的回复力 f .

3. 计算结果及讨论

图 1 是计算得到的不同半径的肥皂泡筏的回复力 f 与位移 u 的关系曲线.从图中可看出,随着肥皂泡半径的增大,曲线的最大值逐渐增大,即回复力的最大值是逐渐增大的.此外还可以看出,力达到最大值时需要的位移也是随着泡筏半径的增大而逐渐增大的,泡筏半径越大,所需位移越靠近 $1/4$ 周期(这里位移的周期是以晶格常数 a 为单位测量的).计算中力达到最大值就是在上半平面的肥皂泡和下半

平面左下侧的肥皂泡分离的地方,这与 Bragg 理论分析得到结果是一致的^[5].也就意味着随着泡筏半径的增大,上半平面的肥皂泡和下半平面左下侧的肥皂泡分离的越慢,这说明半径越大,形变越大,半径小的肥皂泡不容易发生形变.理论上来说,回复力与位移的关系曲线应该是一条很光滑的曲线,可我们得到的曲线在临界的地方并不是很光滑,这可能是由于临界点附近的泡筏之间的多体相互作用力太复杂,而我们采用的处理方法过于理想化而造成的.

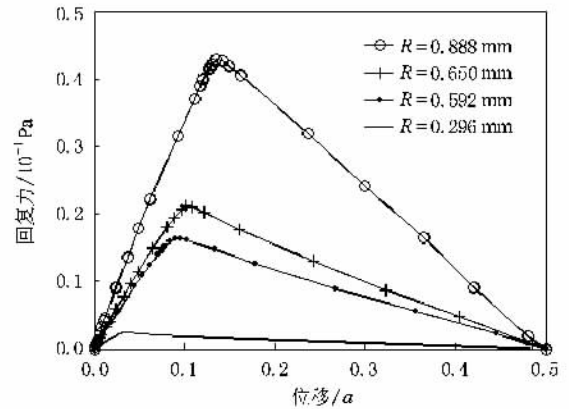


图 1 不同半径泡筏回复力与位移关系理论计算曲线

图 2 中给出了与理论曲线斜率相同,周期相同的正弦曲线,可以看出,在平衡位置附近,其与正弦力律是符合的很好的,但是回复力达到最大值所需要的位移远远小于正弦力律时的 $1/4$ 周期,而且力的最大值也相差很大,可见真实的力律与正弦力律是有一定的差别的,因此,我们需要找到一个更好的力律.

通过分析,这个力律的函数形式要满足以下三个条件:1)在平衡位置附近满足 Hooke 定律,即要保证找到的函数关系曲线能够在平衡位置附近的斜率和理论曲线的斜率一致.2)函数要满足周期性,而且力取最大值所需位移的位置与理论上的最大值位置一致,当回复力取最大值所需位移达到 $1/4$ 周期时,函数要近似为正弦形式.3)力的最大值与理论曲线上的最大值一致.

要找出完全符合以上三个条件的函数关系来描述回复力与位移的关系有一定的难度,但是,可以找到一个函数能够近似的满足上述条件,形式为

$$f(u) = A \frac{\left(1 - \cos \frac{2\pi\zeta}{a}\right) \left(1 + \eta \left| \sin \frac{2\pi u}{a} \right| \right) \sin \frac{2\pi u}{a}}{1 - \cos \frac{2\pi\zeta}{a} \cos \frac{2\pi u}{a}}, \quad (3)$$

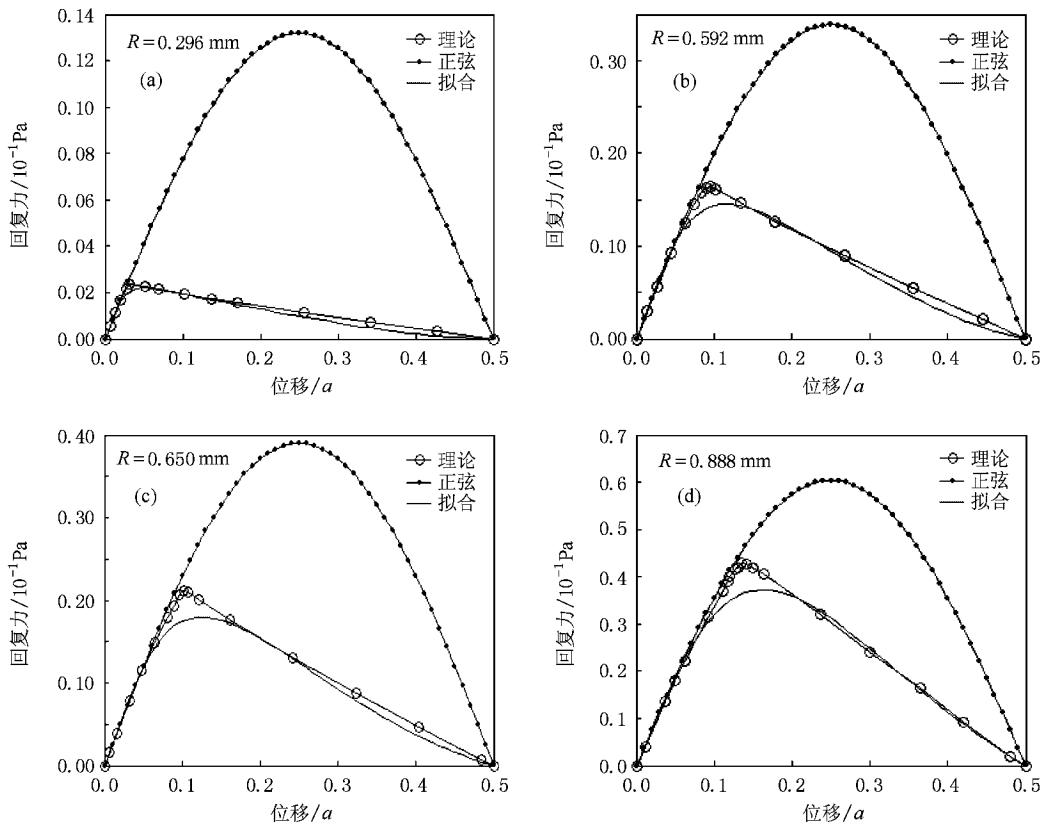


图 2 不同半径泡筏的理论曲线与拟合曲线的对比

(3) 式中 u 是上半平面肥皂泡相对下半平面的位移 (以晶格常数 a 为单位测量) 这里晶格常数 a 是整个泡筏处于平衡的时候两肥皂泡球心之间的距离, ζ 和 η 是两个与肥皂泡半径有关的参数, ζ 是表示回弹力取最大值时泡筏所滑移的位移, η 用来调节回弹力最大值的值. A 是一个常数, 它由理论计算曲线的斜率来确定. 表 1 给出了几种不同半径泡筏的 η 和 ζ 的计算值.

拟合得到的回弹力与位移的关系曲线如图 2 所示, 与正弦关系曲线相比, 它们在平衡位置附近的斜率是相等的, 力的最大值不到正弦力律最大值的 $1/2$, 而且回弹力达到最大值的位置远小于正弦曲线 $\sqrt{2}$ 分之一周期. 与理论计算曲线相比, 力的最大值

位置比理论计算的略小, 而力达到最大值的位置却大致相同. 并且随着半径的增大, 力达到最大值的位置与理论计算曲线的最大值越来越接近.

从表 1 中的数据可以看出, ζ 和 η 的值与肥皂泡的半径之间存在着如下的近似关系:

$$\frac{\zeta}{a} \approx 0.96\alpha^2 - 0.78\alpha^3, \eta \approx 16e^{-7\alpha}, \quad (4)$$

其中 $\alpha = R/a_0$, 是表征肥皂泡半径大小的物理量, a_0 是拉普拉斯常数, 其值为 $a_0 = 1.48 \text{ mm}$.

根据文献 [5] 中的分析, 当 α 的取值很小时, 即肥皂泡的半径很小时, 肥皂泡可近似的看做刚性小球, 可近似的认为两半无限的平面之间的滑移只在水平方向上有位移, 根据此计算得到的上下两半无

表 1 不同半径的计算值

R/mm	a/mm	ζ/mm	$A/10^{-1}\text{Pa}$	η	ζ/a	δ_0
0.222	0.4394	0.0084	0.0904	2.2	0.0192	0.01
0.296	0.5820	0.018	0.1318	3	0.0308	0.017
0.592	1.123	0.101	0.3387	0.8	0.0899	0.051
0.65	1.223	0.126	0.3901	0.6	0.102	0.059
0.888	1.618	0.25	0.6040	0.25	0.15	0.089

限平面分离所需的位移与晶格常数之间近似有如下关系：

$$\frac{\xi}{a} \approx 2\delta_0. \quad (5)$$

图 3 是将 (4) 式代入 (3) 式后得到的不同半径的回复力与位移的关系曲线与三种金属根据滑移面上的原子沿 $\langle 110 \rangle$ 方向滑移时的广义层错能曲线得

到的它们在滑移面中的回复力与位移的关系曲线的对比^[13,14]，同时，我们给出了 Ag 和 Al 的回复力与位移的关系曲线与肥皂泡的对比。从图中可以看出，直径在 1.08—1.38 mm 范围的肥皂泡所得到的回复力与位移的关系曲线与 Cu 的曲线符合的较好，这与 Shi 等人^[8]得到的结果一致，如图 4 所示。

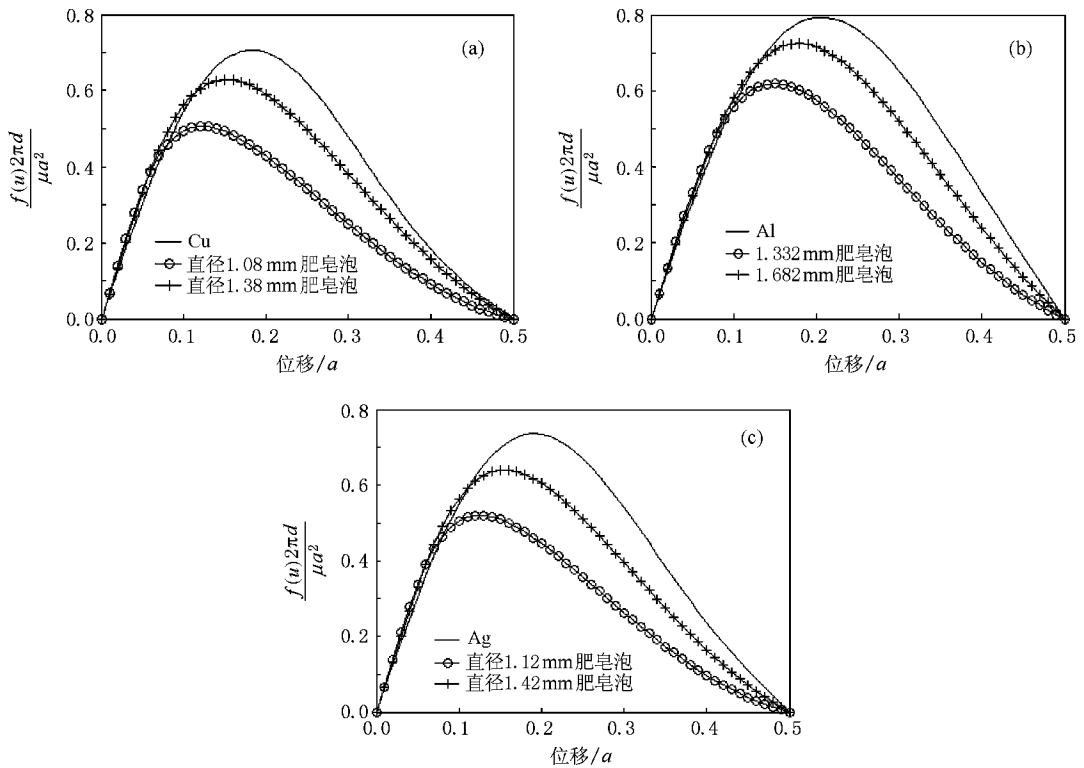


图 3 不同金属与不同半径肥皂泡筏的回复力与位移关系曲线的对比

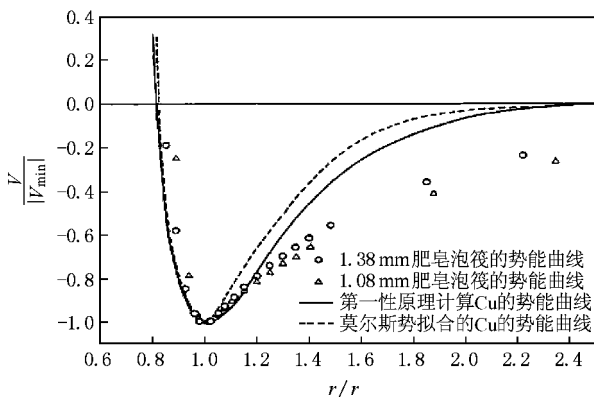


图 4 肥皂泡筏的势能与 Cu 的经验势能和第一性原理得到的势能曲线的比较

4. 结论与展望

本文全面分析了泡筏中肥皂泡之间的相互作用力，通过对不同半径的泡筏计算，得到了边界上的肥皂泡所受的回弹力与位移的关系曲线，计算得到的回弹力达到最大值的地方与 Bragg 从理论上分析得到的结果一致。在此基础上，根据该曲线的物理特征，找到了一个力律来替代正弦力律，并得到了不同半径的肥皂泡筏的回弹力与肥皂泡半径的一个普遍关系。该力律所得到的结果与从金属广义层错能处获得的回弹力的曲线符合程度令人满意。以后的工作中会将该力律代到位错方程^[15-17]中去求解位错芯的宽度，并研究其与泡筏半径的关系。

- [1] Bragg W L , Nye J F 1947 *Proc. Roy. Soc. A* **190** 474 **64** 156
- [2] Gouldstone A , Van Vliet K J , Suresh S 2001 *Nature* **411** 656 [10] Vitek V 1968 *Phys. Stat. Sol.* **18** 687
- [3] Starr M J , Stone D S , Lisensky G C , Drugan W J , Crone W C
http://ecow.engr.wisc.edu/cgi-bin/getbig/ema/601/crone/links/
starr_bubble_education_paper_10_17_02.pdf [11] Vitek V 1968 *Phil. Mag.* **18** 773
- [4] Nicolson M M 1949 *Proc. Camb. Phil. Soc.* **45** 288 [12] Lu G , Kioussis N , Bulatov W , Kaxiras E 2000 *Phys. Rev. B*
62 3099
- [5] Bragg W L , Lomer W M 1949 *Proc. Roy. Soc. A* **196** 171 [13] Joos B , Ren Q , Duesbery M S 1994 *Phys. Rev. B* **50** 5890
- [6] Lomer W M 1949 *Proc. Roy. Soc. A* **196** 182 [14] Wei X M , Zhang J M , Xu K W 2007 *Appl. Sur. Sci.* **254** 1489
- [7] Bragg W L , Lomer W M 1949 *Proc. Camb. Phil. Soc.* **45** 660 [15] Wang S F 2002 *Phys. Rev. B* **65** 094111
- [8] Shi L T , Argon A S 1982 *Phil. Mag.* **46** 255 [16] Wang S F 2005 *Chin. Phys.* **14** 791
- [9] Foreman A J , Jaswon M A , Wood J K 1951 *Proc. Phys. Soc. A* [17] Wang S F 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 143

The relation between force-law and radius in bubble raft^{*}

Guo Ping-Bo[†] Wang Shao-Feng Wu Xiao-Zhi Zhang Fu-Zhou Ye Jin-Qin Wang Rui

(*Institute for Structure and Function , Chongqing University , Chongqing 400044 , China*)

(Received 6 December 2007 ; revised manuscript received 26 February 2008)

Abstract

Based on the interaction acting among the bubbles , the relation between the restoring force and the relative displacement is calculated explicitly for the bubble raft . The results indicate that the force-law of the bubble raft strongly depends on the radius . A new form of force-law is proposed to describe the dependence on the bubble radius .

Keywords : dislocation equation , force law , bubble raft

PACC : 0340D , 6170G

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774196).

[†] E-mail : guopingbo@yahoo.com.cn