

# 间隙原子非线性应力感生扩散的 简化弹性偶极子模型\*

孙宗琦 蒋方忻

中国科学院金属研究所 北京科技大学物理系

1988 年 12 月 24 日收到

为了阐明体心立方晶体中外应力、位错应力和八面体间隙原子相互作用的本质,从理论上解释 S-K 弛豫和位错对 Snoek 弛豫的影响,提出一个简化的含有可动位错的一维弹性偶极子格点模型,讨论位错应力场中间隙原子的非线性应力感生扩散,为进一步对实际晶体的从头数值计算奠定基础.对一维模型的计算机模拟计算,表明位错应力场使得间隙原子形成具有非线性扩散特征的缺陷 Fermi-Dirac 分布,并增强了 Snoek 效应,在 Snoek 峰高温侧出现一个非线性扩散 Snoek 型内耗峰.

## 一、引 言

金属物理学界对 Snoek 峰机理的认识是一致的,但是在考虑了位错的影响之后,关于 S-K 峰的机理及位错对 Snoek 峰的影响却进行了长期的争论.争论的焦点在于阐明在外应力作用下间隙原子和位错交互作用的本质.首先 Hornung 和 Seeger<sup>[1-3]</sup>采用四维时空傅氏变换处理不均匀应力场中间隙原子的扩散,但是没有消除位错芯奇异造成的无穷大困难,特别是在处理 bcc 晶体八面体间隙原子的扩散时错将次近邻位置当作最近邻位置考虑,因此使主方程连同有关结果失去应用价值.本文作者之一运用离散空间的傅氏变换及周期边界条件成功地克服了位错奇异造成的无穷大困难,求得了与内耗有关的可测量的第一布里渊区有限求和表达式<sup>[4,5]</sup>.对 bcc 点阵中八面体间隙原子作者也进行了类似计算,并指出由于固有的线性近似,间隙原子与位错交互作用能项不能进入内耗激活能表达式中.Ogurtani 等人作了类似计算并得到同样结论<sup>[6,7]</sup>.最近 Ogurtani<sup>[8]</sup>考虑到非线性扩散特征,进一步使用了上述离散傅氏变换技术,但这种方法只适用于平衡值附近展开,且六重求和计算量很大.

解决以上问题处理上的局限性及带来的计算方法的困难,使争论能够统一的关键是直接求解位错运动方程和间隙原子遵从的非线性主方程,对实际晶体点阵进行从头数值计算.本文提出一个简化的一维模型以探讨这种方法的可能性.有关模型是作者以前分别提出的两个模型的继续发展<sup>[9-11]</sup>.

\* 国家自然科学基金资助的课题.

## 二、一维弹性偶极子模型

## 1. 一维简化模型

为了阐明外应力场及位错应力场与 *bcc* 晶体中八面体间隙原子交互作用的本质, 首先将问题简化为一个含有可动位错的无限长弹性偶极子一维格点模型. 图 1 所示为含有一个可动位错的具有一个平移周期的一维格点, 静止位错中心在第  $MN + 2$  个格点处,

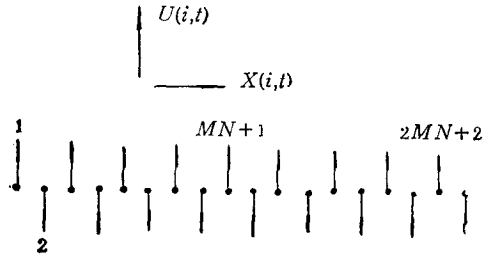


图 1 在均匀应力场中一维格点模型弹性偶极子能量分布示意图

每  $2MN + 1$  个格点是一个平移周期. 换句话说位错间距是  $2MNb$ ,  $b$  是 Burgers 矢量,  $M$  和  $N$  是两个正整数,  $Nb$  是位错中心宽度的某种测度. 采用周期边界条件, 模型在计算时多选取两个格点, 共有  $2MN + 3$  个格点. 在应力  $\sigma(i, t)$  作用下第  $i$  个格点的弹性偶极子位能是

$$U(i, t) = (-1)^i \sigma(i, t) \epsilon \Omega. \quad (1)$$

其中  $\epsilon$  是弹性偶极张量,  $\Omega$  是原子体积,

$(-1)^i$  表示弹性偶极子有两种不同取向. 在测量内耗的场合,  $\sigma(i, t)$  可表示为

$$\sigma(i, t) = \sigma_a(t) + \sigma_d(i, t), \quad \text{且 } |\sigma_a| \ll |\sigma_d|. \quad (2)$$

其中  $\sigma_a(t)$  是外加交变应力.

$$\sigma_a(t) = \sigma_{am} \exp(i\omega t) \quad (3)$$

$\omega$  是测量圆频率.  $\sigma_d(i, t)$  是可动位错的应力场, 为了简化计算, 假定  $\sigma_d(i, t)$  有如下简约形式:

$$\sigma_d(i, t) = \frac{\sigma_{dm}}{1 + X^2(i, t)} \quad (4)$$

其中  $X(i, t)$  是归一化坐标.  $X(i, t)Nb$  是第  $i$  个格点到位错瞬时中心  $X_d(t)$  的距离.

$$X(i, t) = X_c(i) - X_d(t). \quad (5)$$

其中

$$X_d(t) \ll 1, \quad X_c(i) = \frac{i - MN - 2}{N}. \quad (5.1)$$

把(2)和(4)式代入(1)式, 求出位能的 Taylor 展开为

$$U(i, t) = U_0(i) + V_0(i)X_d(t) + \sigma_a \epsilon \Omega (-1)^i. \quad (6)$$

其中  $U_0(i)$  是位错静止时第  $i$  个格点的弹性偶极子的位能,

$$U_0(i) = \frac{U_{dm} (-1)^i}{1 + X_c^2(i)}. \quad (6.1)$$

$U_{dm}$  是位错与弹性偶极子的交互作用能,

$$V_0(i) = \left( \frac{\partial U(i, t)}{\partial X_d} \right)_{X_d=0} = - \frac{\partial U_0(i)}{\partial X_c(i)} = \frac{2X_c(i)U_{dm}(-1)^{i-1}}{[1 + X_c^2(i)]^2}. \quad (6.2)$$

$-V_0(i)/Nb$  是第  $i$  个格点的弹性偶极子作用在静止位错上的力. (6) 式等号右边第三项是外加交变应力对位能的贡献.

## 2. 非线性扩散主方程和位错运动方程

设  $C(i, t)$  是第  $i$  个格点上间隙原子的瞬时浓度, 且  $C(i, t) \leq 1$ . 按细致平衡原理, 由一维模型  $C(i, t)$  满足如下非线性主方程:

$$\begin{aligned} \frac{1}{W} \cdot \frac{\partial C(i, t)}{\partial t} = & -C(i, t)[1 - C(i+1, t)] \exp \frac{U(i) - U(i+1)}{2kT} \\ & - C(i, t)[1 - C(i-1, t)] \exp \frac{U(i) - U(i-1)}{2kT} \\ & + C(i+1, t)[1 - C(i, t)] \exp \frac{U(i+1) - U(i)}{2kT} \\ & + C(i-1, t)[1 - C(i, t)] \exp \frac{U(i-1) - U(i)}{2kT}. \end{aligned} \quad (7)$$

位错在外力和间隙原子作用下的运动按位错的弦振动模型处理, 位错运动方程是

$$B_d \dot{X}_d(t) + K_d [X_d(t) - X_n(t)] = - \sum_{i=2}^{2MN+1} \frac{C(i, t)V(i, t)}{(Nb)^2} + \sigma_a/N \quad (8)$$

其中  $B_d$  是位错平均阻尼系数,  $K_d$  是位错平均刚度,  $X_n$  是位错上强钉扎点或网络节点在较高温度下的平均蠕变位移,

$$K_d [X_d(t) - X_n(t)] = B_n \dot{X}_n(t). \quad (8.1)$$

$B_n$  满足 Arrhenius 关系

$$B_n = B_{n0} \exp(Q_n/kT). \quad (8.2)$$

(8)式等号右边第一项求和表示全部间隙原子作用在运动位错上的合力, 第二项表示外加交变应力作用在位错上的力,  $-V(i, t)/Nb$  表示第  $i$  个格点弹性偶极子作用在运动位错上的力, 可表示为

$$V(i, t) = \frac{2X(i, t)U_{dm}(-1)^{i-1}}{[1 + X^2(i, t)]^2} = V_0(i) + V_K(i)X_d(t), \quad (9)$$

$$V_K(i) = \frac{2[1 - 3X^2(i)]U_{dm}(-1)^i}{[1 + X^2(i)]^3}. \quad (9.1)$$

## 三、计算方法与结果

### 1. 内耗可测量 $Q^{-1}$ 和 $dM/M$ 的求解步骤

本模型考虑了  $2MN + 3$  个格点, 故整个模型中间隙原子的浓度是  $2MN + 3$  个由 (7)式组成的方程组. 当设定模型中每个格点的初始间隙原子浓度  $C(i, 0) = C_0$  后, 用微扰法求解此方程组.

$$C(i, t) = C_0(i, t) + \hat{C}(i, t) \exp(i\omega t), \text{ 且 } |\hat{C}| \ll |C_0(i, t)|. \quad (10)$$

瞬态浓度  $C_0(i, t)$  由静止位错应力场决定, 满足非线性偏微分方程

$$\frac{1}{W} \cdot \frac{\partial C_0(i, t)}{\partial t} = -C_0(i, t)[1 - C_0(i+1, t)]/f(U_0(i))$$

$$\begin{aligned}
& - C_0(i, t)[1 - C_0(i - 1, t)]f(U_0(i)) \\
& + C_0(i + 1, t)[1 - C_0(i, t)]f(U_0(i)) \\
& + C_0(i - 1, t)[1 - C_0(i, t)]/f(U_0(i)), \quad (11)
\end{aligned}$$

$$f(U_0(i)) = \exp \frac{U_0(i + 1) - U_0(i)}{2kT}. \quad (11.1)$$

复浓度  $\hat{C}(i, t)$  是时间  $t$  的慢变函数, 满足复数线性代数方程组

$$\begin{aligned}
\frac{i\omega}{W} \hat{C}(i, t) = & - [1 - C_0(i + 1, t)]\hat{C}(i, t)/f(U_0(i)) \\
& + C_0(i, t)\hat{C}(i + 1, t)/f(U_0(i)) - [1 - C_0(i - 1, t)]f(U_0(i))\hat{C}(i, t) \\
& + C_0(i, t)f(U_0(i))\hat{C}(i - 1, t) + [1 - C_0(i, t)]f(U_0(i))\hat{C}(i + 1, t) \\
& - C_0(i + 1, t)f(U_0(i))\hat{C}(i, t) + [1 - C_0(i, t)]\hat{C}(i - 1, t)/f(U_0(i - 1)) \\
& - C_0(i - 1, t)\hat{C}(i, t)/f(U_0(i - 1)) + A(i)\hat{X}_d + B(i)\varepsilon_e, \quad (12)
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
A(i) = & \frac{1}{2kT} \{ [C_0(i, t)(1 - C_0(i + 1, t))/f(U_0(i)) \\
& + C_0(i + 1, t)(1 - C_0(i, t))f(U_0(i))] \cdot [V_0(i + 1) \\
& - V_0(i)] + [C_0(i, t)(1 - C_0(i - 1, t))f(U_0(i)) \\
& + C_0(i - 1, t)(1 - C_0(i, t))/f(U_0(i - 1))] \cdot [V_0(i - 1) \\
& - V_0(i)] \}, \quad (12.1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B(i) = & \frac{\sigma_{am}\varepsilon_Q(-1)^{i-1}}{kT\varepsilon_e} \{ C_0(i, t)[1 - C_0(i + 1, t)]/f(U_0(i)) \\
& + C_0(i + 1, t)[1 - C_0(i, t)]f(U_0(i)) \\
& + C_0(i, t)[1 - C_0(i - 1, t)]f(U_0(i - 1)) \\
& + C_0(i - 1, t)[1 - C_0(i, t)]/f(U_0(i - 1)) \}. \quad (12.2)
\end{aligned}$$

其中  $\varepsilon_e$  是弹性应变。

方程组(11)的数值求解采用欧拉法, 计算方法与文献[9]相近。线性方程组(12)的数值求解采用高斯消去法。考虑到  $C_0(i, t)$  相对于位错的中心对称及周期边界条件, 方程组(11)和(12)的数值求解均只对模型中位错任一侧格点进行, 这样大大节省了计算机内存和运算时间。采用迭代法求解位错运动方程(8)和线性方程组(12), 使解得的  $\hat{C}(i, t)$  的实部  $C_1(i, t)$  和虚部  $C_2(i, t)$  及位错位移  $\hat{X}_d(t)$  的实部  $X_d(t)$  和虚部  $X_{d_2}(t)$  的误差小于给定值为止。当解得以上各量的数值解后, 内耗  $Q^{-1}$  和模量亏损  $dM/M$  均可由滞弹性弛豫理论的定义解得。

## 2. 一维简化模型对 Snoek 弛豫的解析特解

考虑位错应力场为零的特例, 即 Snoek 弛豫。由(9), (9.1), (11.1)式知:  $U_{dm} = 0$ ,  $f(U_0(i)) = 1$ ,  $V_0(i) = 0$  和  $V_x(i) = 0$ 。方程组(11)和(12)的解为:  $C_0(i, t) = C_0$ ,  $A(i) = 0$ ,  $B(i) = 4C_0(1 - C_0)(-1)^{i-1} \frac{\sigma_{am}\varepsilon_Q}{kT\varepsilon_e}$ , 内耗和模量亏损为

$$\left(\frac{dM}{M}\right)_t = \frac{\Delta}{1 + \omega^2\tau^2}, \quad Q_t^{-1} = \Delta \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}, \quad (13)$$

$$\text{其中} \quad \tau = \frac{1}{4W}, \quad \Delta = \frac{C_0(1 - C_0)\sigma_{am}\epsilon_0 Q}{kT\epsilon_s}. \quad (13.1)$$

由本模型得到的 Snoek 弛豫特解解析表达式, 与滞弹性弛豫理论中标准滞弹性固体的表达式一致<sup>[12]</sup>, 由此也表明了本模型理论和计算方法的可靠性。

## 四、模拟计算结果与讨论

### 1. 一维模型的 Fermi-Dirac 缺陷分布

图 2 为方程组(11)和(11.1)式计算得到的一维模型在给定初始浓度  $C(i, 0) = C_0$  条件下, 经充分退火“时效”后各格点上间隙原子浓度  $C_0(i, t)$  的分布。由于位错应力场引起的非线性扩散效应, 使得在位错应力场内的不同格点之间间隙原子的扩散速率不同, 在位错芯区每间隔一个格点的实际扩散速率近于零。由于一维模型的局限, 这近于零的扩散率实际阻塞了间隙原子的扩散, 每个格点间隙原子的浓度交替为  $2C_0$  和 0 因此间隙原子在位错周围只能形成局部平衡的 Snoek 气团, 未能形成 Cottrell 气团。在位错气团半径相应的  $U_0(i) \approx kT$  处,  $C_0(i, t)$  才逐渐变化并在  $U_0(i) \ll kT$  处才达到平均值  $C_0$ 。这种分布函数与 Fermi-Dirac 分布极为相似, 我们称之为缺陷的 Fermi-Dirac 分布。Snoek 气团的非饱和区为气团费密面, 费密半径即是位错气团半径。在实际的 bcc 晶体中经过充分退火时效后间隙原子可以在螺位错周围形成 Cottrell 气团, 但是在其后的动态条件下间隙原子浓度分布的瞬态响应仍要受非线性扩散效应控制。一维模型所特有的 Fermi-Dirac 缺陷分布最典型地表现了在位错应力场作用下间隙原子扩散的非线性特征, 这也是进一步重新认识 Snoek 弛豫和 S-K 弛豫的出发点。

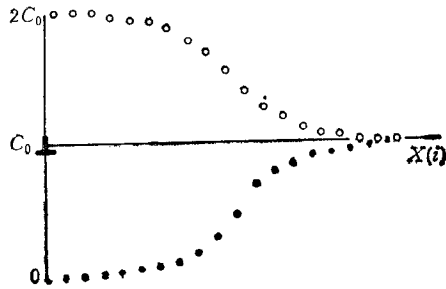


图 2 一维模型各格点上间隙原子在给定初始均匀浓度  $C_0$  经充分时效后浓度分布示意图

### 2. 内耗可测量量的模拟计算

前节已讨论了在无位错应力场时一维模型退化为 Snoek 弛豫, 解析特解与滞弹性弛豫理论一致。再用计算机模拟计算了无位错应力场时的 Snoek 峰, 模拟结果所获得的 Snoek 峰特征与公认的 Snoek 峰机理一致, 即峰高与浓度成正比, 当测量频率增加时峰温向高温移动且峰高略降低, 变频法获得的弛豫激活能即为间隙原子扩散激活能<sup>[12]</sup>。图 3 为其中某一间隙原子浓度的结果, 由此也验证了计算机模拟计算程序的可靠性。

对在位错应力场条件下间隙原子非线性应力感生扩散引起的内耗现象进行了模拟计算。图 4 为一典型结果。模拟计算条件除计入  $U_{dm} = 0.23\text{eV}$  外, 其他均与图 3 相同。在原 Snoek 峰温处出现一内耗峰, 峰高比 Snoek 峰增加, 变频模拟得到的激活能为间隙

原子扩散激活能,即 Snoek 弛豫激活能,故此峰确认为 Snoek 峰. 模拟结果表明位错应力场增强了 Snoek 效应. 图 4 又表明在 Snoek 峰高温侧出现了一个内耗峰, 且变频法获得的弛豫激活能仍约为间隙原子扩散激活能. 在讨论缺陷的 Fermi-Dirac 分布时,我

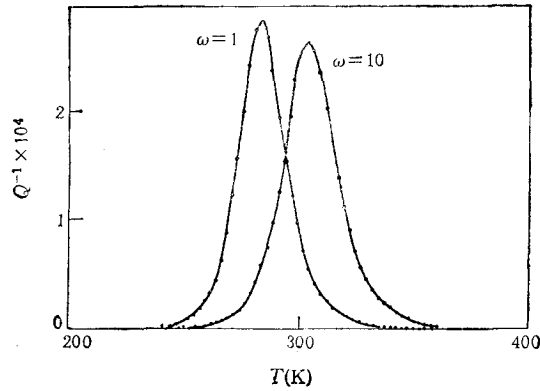
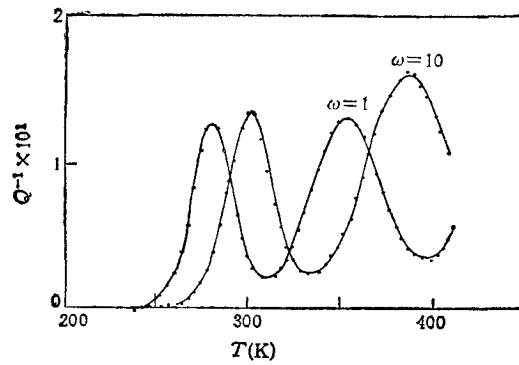
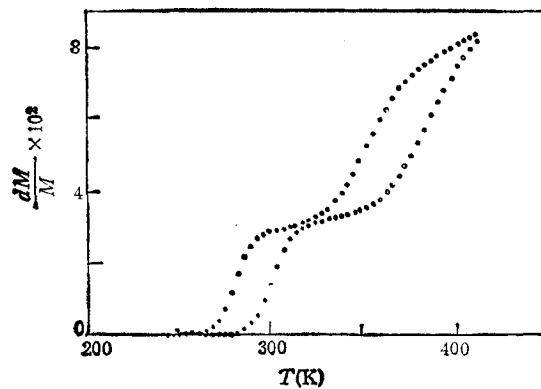


图 3 一维模型在无位错应力场时计算机模拟计算获得的 Snoek 峰 模拟计算条件为:  
 $C_0 = 10^{-4}$ ; 间隙原子扩散激活能  $Q_M = 0.84\text{eV}$ ;  $M = 5$ ;  $N = 6$ . 模拟结果为:  
 当  $\omega = 1$ ,  $T_p = 284\text{K}$ ; 当  $\omega = 10$ ,  $T_p = 305\text{K}$



(a) 内耗



(b) 模量亏损

图 4 一维模型在位错应力场条件下间隙原子非线性应力感生扩散的计算机模拟 模拟计算条件同图 3, 并计入位错与间隙原子相互作用能  $U_{dm} = 0.23\text{eV}$ ; 模拟结果表明在 Snoek 峰高温侧出现一个内耗峰

们已指出了在缺陷的费密面上非线性扩散的特征, 即相邻格点的间隙原子浓度相差很大, 且扩散速率相差也很大, 则费密面上的表观扩散速率要远小于费密面外的, 相应表观扩散弛豫时间  $\tau_0$  变大. 只有当温度高于 Snoek 峰温后才有可能使  $\omega\tau = 1$ , 即可出现一弛豫峰. 同时, 温度升高费密半径不变, 但费密面面积增大, 费密面上包含的间隙原子增多, 可使得弛豫强度增加, 因而有一个内耗峰显现出来. 故在 Snoek 峰高温侧的内耗峰是 Snoek 型的. 实际晶体中即便形成了 Cottrell 气团, 气团非饱和区的间隙原子在动态条件下仍具有这种非线性扩散特征, 仍可在 Snoek 峰高温侧出现 Snoek 型的内耗峰. 因此关于 S-K 弛豫的机理, 除了 Schoeck 模型<sup>[13]</sup>, Seeger 模型<sup>[14]</sup>, Hirth<sup>[15]</sup> 模型外, 非线性扩散 Snoek 型内耗峰也是一种可以考虑的机制.

## 五、结 论

提出一种简化的一维弹性偶极子模型讨论在位错应力场中间隙原子的非线性应力感生扩散. 计算机模拟结果表明一维模型如下特征: 位错周围间隙原子可以形成具有非线性扩散特征的缺陷 Fermi-Dirac 分布, 位错增强了 Snoek 效应, 在 Snoek 峰高温侧出现一个非线性扩散 Snoek 型内耗峰. 由于一维模型的局限性, 有必要推广到二维非线性扩散的情形. 有关工作正在进行中.

- [ 1 ] A. Seeger & W. Hornung, in *Internal Friction and Ultrasonic Attenuation in Crystalline Solids* (Ed. D. Lenz & K. Lucke) Vol. 1, Springer, Berlin-Heidelberg New York, (1975), p. 222.
- [ 2 ] W. Hornung, *Phys. Stat. Sol.*, (b) 54(1972), 341.
- [ 3 ] W. Hornung, *Phys. Stat. Sol.*, (b)54(1972), 441.
- [ 4 ] 孙宗琦, 中国科学A辑, (11) (1982), 1035.
- [ 5 ] 孙宗琦, 物理学报, 33(1984), 989.
- [ 6 ] T. Ogurtani & A. Seeger, *J. Chem. Phys.*, 79(1983), 5041.
- [ 7 ] T. Ogurtani & A. Seeger, *J. Appl. Phys.*, 54(1983), 3867.
- [ 8 ] T. Ogurtani & A. Seeger, *J. Appl. Phys.*, 62(1987), 852.
- [ 9 ] 孙宗琦, 物理学报, 31(1982), 561.
- [ 10 ] Fang-xing Jiang & Tong-yi Zhang, *Scripta Metall.*, 22(1988), 773.
- [ 11 ] Fang-xing Jiang & Tong-yi Zhang, *Scripta Metall.*, 22(1988), 779.
- [ 12 ] A. S. Nowick & B. S. Berry, *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, Academic Press, New York & London, (1972).
- [ 13 ] G. Schoeck, *Acta Metall.*, 11(1963), 617.
- [ 14 ] A. Seeger, *Phys. Stat. Sol.*, (a) 55(1979), 457.
- [ 15 ] J. P. Hirth, *Metall. Trans.*, 11A(1980), 861.

## SIMPLIFIED ELASTIC DIPOLE MODEL OF NONLINEAR STRESS-INDUCED DIFFUSION OF INTERSTITIALS

SUN ZHONG-QI

*Institute of Metal Research, Academia Sinica, Shenyang*

JIANG FANG-XING

*Department of Physics Beijing University of Science and Technology*

(Received 24 December 1988)

### ABSTRACT

A simplified model of one dimensional elastic dipole discrete lattice containing oscillating dislocations is proposed to study the nonlinear stress-induced diffusion of interstitials in the inhomogeneous stress field of dislocation and to set up a foundation for further numerical calculation in real crystals, consequently, to clarify the interaction of the external stress, the dislocations and the octahedral interstitials in bcc crystals and to explain S-K relaxation and the effect of dislocation on Snoek relaxation theoretically. The simulation computation shows that the nonlinear diffusion of interstitials induced by the dislocation stress field makes the interstitials form a Fermi-Dirac distribution of defects and enhances Snoek effect, hence, a peak of Snoek effect of nonlinear diffusion appears at higher temperature than that of Snoek peak.