第32卷 第11期 物理学报 Vol. 32, No. 11
1983年11月 ACTA PHYSICA SINICA Nov., 1983

应变晶体的弹性偶极子模型

杨正举
(南京大学物理系)
1982年9月9日收到

提要

将物体视为一弹性连续介质，其中任一处在应变状态的体积元以一弹性偶极子模拟之. 本文给出了它的等效偶极矩的表示式. 并将其划分为与此体积元及其周围基体的固有性质有关的永久偶极矩和决定于介质所处的应变状态的感生偶极矩两部分. 它们分别使弹性介质具有顺弹性和介弹性.

本文给出了在各向同性的弹性连续介质中弹性偶极子所产生的位移场的表示式，以及在考虑到其他应力源的强度和偶极子矩间存在着相互弛豫作用的情况下，弹性偶极子与其他应力场间相互作用的式子，它是 Kröner 公式加上高级修正项. 将此模型用于讨论熟知的 Cottrell 气团和两对称中心间的相互作用时，得到与前人一致且更为细致的结果.

一、引　言

在讨论晶体中的缺陷所引起的点阵畸变和缺陷与其他应力源间的相互作用时，除了用基于晶体点阵的不连续性而给出的点阵静力学方法外[1-5]，更多的是把晶体视为一弹性连续介质，其中的缺陷则为内应力源，以经典的弹性理论处理之. 此时，弹性偶极子模型被证明是特别有用的. Kröner[6] 曾指出，晶体中的一切缺陷都可以认为是弹性偶极子以一定的方式组合而成. 显然，这种模型对于晶体中各种形式的点缺陷的研究却更为方便. 所以，关于弹性偶极子的工作大多集中于这一方面[6-11]，并且现在仍然是研究金属-氢系统的有力工具[12]. 近来，弹性偶极子模型又应用于较复杂的缺陷如哑铃对、挤列等问题的研究中[13-15]. 对于小的棱柱位错回线的某些问题，亦可直接应用弹性偶极子模型的结论[16].

Kröner 还把弹性介质分为顺弹性和介弹性两种[6,7,17]. 前者是指介质中的内应力源具有永久弹性偶极矩的情形；而后者，是由于介质内存在应变，可以感生弹性偶极子而成为内应力源. 连续弹性介质的弹性偶极子模型的深入研究表明，这是一个很有用的概念.

虽然当所考察的距离与原子间距相同或仅略大时，连续弹性理论给出的结论可能是有问题的. 但在大多数情况下，它仍不失为一简便而有效的研究方法，所以我们采用弹性偶极子模型作为研究与晶体缺陷有关的某些问题的出发点. 在以往的工作中，大多认为偶极子的偶极矩为一不变的常数，很少考虑其他应力场对它的弛豫作用. 而缺陷的这种介弹效应，在考虑到缺陷与其他应力场间的交互作用时，可能是重要的. 在本文中，我们

研究在一应变晶体中缺陷的弹性偶极子模型在计及介弹性质后的特征，以后再将其应用于具体问题的研究.

二、弹性偶极子及其偶极矩

弹性偶极子是力偶极子 P_{ij} 和位移偶极子 Q_{ij} 的总称[6]. 它们间有如下关系：

$$P_{ij}=\sum_{kl}C_{ijkl}Q_{kl}. \tag{1}$$

完整晶体中的杂质原子对其周围原子有偶力的作用，因而可以用一力偶极子模拟之. 但实际上，任一处在应力及应变状态的体积元，都可以视为一弹性偶极子. 这里的体积元，在一般情况下，我们取为一个原子或原子集团，后者如一个四面体或八面体，并取其有立方体或长方体的形状.

设晶体为一无限大的各向同性的弹性连续介质，故不考虑由于表面的存在而产生的偶力[18]. 设在弹性体中有任一原因产生的应力场存在，由某点一体积元 Ω 对周围介质的偶力作用及其一对表面的相对位移，容易写出该点的弹性偶极子的偶极矩强度为

$$\bar{P}_{ij}=\sigma_{ij}\Omega, \tag{2}$$

$$\bar{Q}_{ij}=\varepsilon_{ij}\Omega, \tag{3}$$

σ_{ij} 及 ε_{ij} 为该点的应力及应变. 显然，由于存在有

$$\sigma_{ij}=\sum_{kl}C_{ijkl}\varepsilon_{kl},$$

故 $\bar{P}_{ij}$ 及 $\bar{Q}_{ij}$ 间满足方程 (1).

以 (2) 和 (3) 式表示的弹性连续系统中由于其他应力场的存在而形成的弹性偶极子不是应力或应变场中的奇点，因而不是内应力源. 它不产生应力场，也不受到净力的作用. 但是，这种将通常称应力或应变场中的奇点为弹性偶极子的概念的推广，将有助于讨论弹性介质的顺弹和介弹性质.

现在考虑将一异类原子引入到一无限大晶体中而成为内应力源的弹性偶极子的偶极矩. 当晶体中无其他的应力源存在时，引入的弹性偶极子的位移偶极矩为

$$\tilde{Q}^0_{ij}=Q^0_{ij}+\Omega\varepsilon^0_{ij}, \tag{4}$$

其中，$Q^0_{ij}=\Delta S_i(R_j-r_j)$，$\varepsilon^0_{ij}=(R^{\varepsilon^0}_j-R_j)/R_i$. ΔS_i 为立方体积元在垂直于 x_i 轴方向的面积元，R_j 是异类原子在引入晶体前处在无应变状态时在 i 方向的半径，$R^{\varepsilon^0}_j$ 为其引入晶体后的值，r_j 是基体原子在 i 方向的半径，Ω 是基体原子的体积，ε^0_{ij} 则是异类原子引入晶体后发生的应变. 显然，Q^0_{ij} 是刚性球型位移偶极子的偶极矩. 由于异类原子外围的电子结构与基体原子是不相同的，这意味着它的弹性模量发生了局域的变化[17]. 因此我们把异类原子视为一具有与基体晶体不同弹性性质的弹性体，而 ε^0_{ij} 乃是基体晶体的弹性系数 λ, μ 和异类原子区域的弹性系数 λ', μ' 的函数，λ 和 μ 为拉梅系数. 显然，对于刚性异类原子，$\varepsilon^0_{ij}=0$. 当它被扩张时（收缩中心），$\varepsilon^0_{ij}>0$；当它被压缩时（膨胀中心），$\varepsilon^0_{ij}<0$. (4) 式给出了缺陷的永久弹性偶极矩，它的存在使弹性介质具有了顺弹性.

当晶体中有其他应力源存在时，不难写出

$$Q_{ij}=Q_{ij}^0+\Omega\varepsilon_{ij}^0+\Omega\alpha_{ij}\varepsilon_{ij}-\Omega\varepsilon_{ij}, \tag{5}$$

其中 $\alpha_{ij}\varepsilon_{ij}=(R_j^\varepsilon-R_j^{\varepsilon^0})/R_j^{\varepsilon^0}$，$\varepsilon_{ij}=(r_j^\varepsilon-r_j)/r_i$，$R_j^\varepsilon$ 及 r_j^ε 分别是当基体晶体存在有应变场 ε_{ij} 时其中的异类原子和基体原子的半径．与 (4) 式对照可见，前两项是永久偶极子的偶极矩，导致介质的顺弹性．第三项是基体中的杂质原子由于应变场 ε_{ij} 的存在而产生的附加应变所感生的偶极矩，它导致介质的介弹性，它应与应变场正比，α_{ij} 也是 μ，λ 和 μ'，λ' 的函数．而且显然，$\alpha_{ij}>0$． 最后一项 $\varepsilon_{ij}\Omega$ 通常是被忽略了的，它是"非奇点偶极子"．而上式表明，只有在杂质原子的偶极矩超过此"非奇点偶极矩"部分，才能产生应力场，而成为应力场中的奇点． 这样，等效偶极矩是永久偶极矩 $Q_{ij}^0+\Omega\varepsilon_{ij}^0$ 及应力感生偶极矩 $\Omega\alpha_{ij}\varepsilon_{ij}-\Omega\varepsilon_{ij}$ 二者之和，这正是 Kröner 所指出的[17]．另外，我们看到，感生偶极矩正比于外来应变场，系数 $(\alpha_{ij}-1)$ 类似于 Kröner 所定义的弹性极化率[17]．由于在异类原子和基体原子两边应力场连续，再利用各向同性的条件，可以得到

$$\alpha_{ij}=\frac{\mu}{\mu'}.$$

也就是说，可以近似地认为 α_{ij} 是一个与应变方式无关的常数． 因此，下面我们将除去 α_{ij} 的角标．

这样就得到

$$Q_{ij}=\tilde{Q}_{ij}^0+\Omega(\alpha-1)\varepsilon_{ij}. \tag{6}$$

而应力场中杂质原子所形成的力偶极子的偶极矩，由 (1) 式，显然为

$$P_{ij}=\tilde{P}_{ij}^0+\Omega(\alpha-1)\sigma_{ij}. \tag{7}$$

其中两项分别是永久力偶极矩及感生力偶极矩．

因此，任一原子(基体原子或异类原子)在产生应力场或与其他应力场相互作用时的等效偶极矩由 (6) 或 (7) 式所表示．而对于一个在应力场中的基体原子，$Q_{ij}^0=\varepsilon_{ij}^0=0$，$\alpha=1$，因此，$Q_{ij}=0$，即等效偶极矩为零．也就是说，它不产生应力场，并且，下面也将表明，它所受的净力亦为零．正与通常的连续弹性理论的结论一致．这样，我们在以弹性偶极子模型处理有关问题时，利用等效偶极子的概念，可以无需区分应力场中的点是奇点还是非奇点，是基体原子还是杂质原子，而对弹性介质中的任一体积元予以统一处理．

三、弹性偶极子所产生的应变场

Love[19] 给出，在原点 0 有一点力 $\boldsymbol{F}(X_1, X_2, X_3)$ 作用时，在 $\boldsymbol{r}(x_1, x_2, x_3)$ 点所产生的位移场 $\boldsymbol{U}(u_1, u_2, u_3)$ 为

$$\boldsymbol{U}=a\frac{\boldsymbol{F}}{r}+b\frac{\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{r}}{r^3}\boldsymbol{r}, \tag{8}$$

其中

$$a=\frac{\lambda+3\mu}{8\pi\mu(\lambda+2\mu)},\quad b=\frac{\lambda+\mu}{8\pi\mu(\lambda+2\mu)}. \tag{9}$$

λ 与 μ 为拉梅系数，它与杨氏模量 E 及泊松比 ν 间有以下关系：

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \qquad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}. \tag{10}$$

忽略多极子项[20]，设 X_i 在 k 方向产生的位移是 u_{ki}，则得到在原点的偶极矩为 $P_{ij}=X_i\Delta x_j$ 的力偶极子在 $\boldsymbol{r}$ 点所产生的位移场为

$$-P_{ij}\frac{\partial u_{ki}}{\partial x_j} = -P_{ij}\left[-a\frac{x_j}{r^3}\delta_{ki} - \frac{3b}{r^5}x_ix_jx_k + \frac{b}{r^3}\frac{\partial}{\partial x_j}(x_kx_i)\right].$$

于是得到在 0 点的力偶极子 P_{ij} 在 $\boldsymbol{r}$ 点所产生的应变场 lm 成分 $\varepsilon_{lm}(\boldsymbol{r};P_{ij}(0))$ 为

$$\begin{aligned}\varepsilon_{lm}(\boldsymbol{r};P_{ij}(0)) = -\frac{1}{2}P_{ij}\Big\{&a\frac{x_jx_m}{r^5}\delta_{li} + a\frac{3x_jx_l}{r^5}\delta_{mi} - \frac{a}{r^3}\delta_{li}\delta_{mj} - \frac{a}{r^3}\delta_{mi}\delta_{lj}\\ &+\frac{30b}{r^3}x_ix_jx_lx_m - \frac{3b}{r^5}\frac{\partial}{\partial x_m}(x_ix_jx_l) - \frac{3b}{r^5}\frac{\partial}{\partial x_l}(x_ix_jx_m)\\ &-\frac{3bx_m}{r^5}\frac{\partial}{\partial x_j}(x_ix_l) - \frac{3bx_l}{r^5}\frac{\partial}{\partial x_j}(x_ix_m)\\ &+\frac{b}{r^3}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_m}(x_ix_l) + \frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_l}(x_ix_m)\right]\Big\}.\end{aligned} \tag{11}$$

这里我们取膨胀的力偶极子(该体积元被周围介质所压缩)为正.

四、弹性偶极子与其他应力场间的相互作用

Kröner[6] 曾给出了原先偶极矩为 $\widetilde{Q}^0_{ij}$（或 $\widetilde{P}^0_{ij}$）的弹性偶极子在引入了应变场 ε_{ij}（或应力场 σ_{ij}）后，它们间的相互作用能的表示式为

$$U = -\sum_{ij}\sigma_{ij}\widetilde{Q}^0_{ij} = -\sum_{ij}\varepsilon_{ij}\widetilde{P}^0_{ij}. \tag{12}$$

上式实际上是在两个假定下得到的，1) 在偶极子引入的过程中，不影响应力场 σ_{ij} 本身的分布．2) 引入的位移偶极子的偶极矩值与该点是否存在应力场无关．但是，容易看出，偶极子的引入(其他任何应力源也一样)要改变原来的应力场本身的值，而应力场的存在，又对引入的弹性偶极子的偶极矩产生影响．而这实质在于一内应力源的强度要被其他应力源所产生的应变场所弛豫，弛豫的程度则由两应力源的弹性性质的差异以及它们在对方所在位置所产生的应变场等因素所决定．(6) 或 (7) 式中的后一项正是考虑到这个因素而出现的项．这一点，正是以前很多研究缺陷与其他应力场间相互作用的弹性理论所忽略了的．下面推求考虑到这种弛豫作用后，弹性偶极子与其他应力场间的相互作用的表示式．

先计算两个偶极子间的相互作用．设在原点 0 有一力偶极子，其单独存在时的强度为 $\widetilde{P}^0_{ij}(0)$，它所产生的应变场由 (11) 式给出，写作

$$\varepsilon_{lm}(\boldsymbol{r};P_{ij}(0)) = \widetilde{P}^0_{ij}(0)f^{ij}_{lm}(\boldsymbol{r};0).$$

设在 $\boldsymbol{r}$ 点引入另一弹性偶极子，它单独存在时的偶极矩为 $\widetilde{P}^0_{ij}(\boldsymbol{r})$．在引入的过程中，考虑到上述的弛豫作用，按 (7) 式可得 $\boldsymbol{r}$ 点的应力场为

$$\sigma_{ij}(\boldsymbol{r}) = \sum_{kl,mn} C_{ijkl}[\tilde{P}^0_{mn}(0) + (\alpha(0)-1)\Omega\sigma_{mn}(0)]f^{mn}_{kl}(\boldsymbol{r};0)$$
$$= \sigma_{ij}(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0)) + \sigma_{ij}(\boldsymbol{r};(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\tilde{P}^0(\boldsymbol{r})))$$
$$+ \sum_{\substack{kl,mn\\ \alpha\beta,\xi\zeta}} [\alpha(0)-1][\alpha(\boldsymbol{r})-1]\Omega^2 C_{ijkl}C_{mn\alpha\beta}\sigma_{\xi\zeta}(\boldsymbol{r})f^{mn}_{kl}(\boldsymbol{r};0)f^{\xi\zeta}_{\alpha\beta}(0;\boldsymbol{r}) + \cdots$$

其中未加角标的量表示包括了各个分量的整个张量．上式中的第一项是 0 点单独存在的力偶极子的各个分量 $\tilde{P}^0_{ij}(0)$ 在 $\boldsymbol{r}$ 点产生的应力场，第二项是由于在 $\boldsymbol{r}$ 点的力偶极子的各个分量 $\tilde{P}^0_{ij}(\boldsymbol{r})$ 在 0 点产生了感生的力偶极子 $(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(\boldsymbol{r}))$，后者的各个分量在 $\boldsymbol{r}$ 点所产生的应力场．它表现为 $\tilde{P}^0(\boldsymbol{r})$ 对其自身的反作用．这实际上就是 $\tilde{P}^0(\boldsymbol{r})$ 对 $\tilde{P}^0(0)$的强度的弛豫作用．将上式进行反复迭代得

$$\sigma_{ij}(\boldsymbol{r}) = \sigma_{ij}(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0)) + \sigma_{ij}(\boldsymbol{r};(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\tilde{P}^0(\boldsymbol{r})))$$
$$+ \sigma_{ij}(\boldsymbol{r};(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;(\alpha(\boldsymbol{r})-1)\Omega\sigma(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0)))) + \cdots. \tag{13}$$

第三项的意义容易看出，其后各项依此类推．由于各项的衰减很快，实际上只考虑第二项修正即可．

考虑到两应力源相互弛豫作用的存在，应力场 σ_{ij} 与位移偶极子间的相互作用能应由下式计算：

$$U = -\sum_{ij}\int \sigma_{ij}dQ_{ij}, \tag{14}$$

其中 σ_{ij} 应以 (13) 式的结果代入，Q_{ij} 具有(6)式所示的形式，而其中的 ε_{ij} 则应写成

$$\varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0)) + \varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r};(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\tilde{P}^0(\boldsymbol{r}))) + \cdots. \tag{15}$$

由此，可以算出考虑到弛豫作用后的相互作用能为

$$U = -\Big[\sum_{ij}\sigma_{ij}(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0))\tilde{Q}^0_{ij}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}\sum_{ij}\sigma_{ij}(\boldsymbol{r};(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\tilde{P}^0(\boldsymbol{r})))\tilde{Q}^0_{ij}(\boldsymbol{r})$$
$$+ \sum_{ij}\sigma_{ij}(\boldsymbol{r};(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;(\alpha(\boldsymbol{r})-1)\Omega\sigma(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0))))\tilde{Q}^0_{ij}(\boldsymbol{r}) + \cdots$$
$$+ \frac{1}{2}\Omega(\alpha(\boldsymbol{r})-1)\sum_{ij}\sigma_{ij}(\boldsymbol{r})\varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r})\Big] \tag{16}$$

其中 $\sigma_{ij}(\boldsymbol{r})$ 及 $\varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r})$ 如 (13) 及 (15) 式所示．在上式的计算中我们利用了 $\tilde{P}^0_{ij}$ 是对称的偶极矩张量的性质[17]．上式表示了正确到二级修正项的相互作用表示式．为了易于理解 (16) 式所给的各项的意义，可将它写成如下的形式，但仅正确到一级修正项，但这对于一般实际应用已足够了．

$$U = -\sum_{ij}\Big[\sigma_{ij}(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0)) + \frac{1}{2}\sigma_{ij}(\boldsymbol{r};(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\tilde{P}^0(\boldsymbol{r})))\Big]$$
$$\times\Big[\tilde{Q}^0_{ij}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}(\alpha(\boldsymbol{r})-1)\Omega\varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r};\tilde{P}^0(0))\Big] \tag{17}$$

或

$$U = -\sum_{ij}\left[\varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r};\ \tilde{P}^0(0)) + \frac{1}{2}\varepsilon_{ij}(\boldsymbol{r};\ (\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\ \tilde{P}^0(\boldsymbol{r})))\right]$$
$$\times\left[\tilde{P}^0_{ij}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}(\alpha(\boldsymbol{r})-1)\Omega\sigma_{ij}(\boldsymbol{r};\ \tilde{P}^0(0))\right]. \tag{18}$$

显然，修正项是在两应力源间引入相互弛豫作用后的结果.

若 0 点不是弹性偶极子，而是有一定的体力分布的应力源，由于它可以视为以一定方式组合而成的弹性偶极子的集合[6]，因而，正确到一级修正项，以该应力源在 $\boldsymbol{r}$ 点所产生的应力场或应变场代替上二式中偶极子 $\tilde{P}^0(0)$ 所产生的应力场或应变场即可. 同样可见，若上二式中修正项可略去，则化成了 Kröner (12) 式. 而考虑到弛豫修正，由于各项衰减很快，一般只保留一级修正即可.

五、模型应用的例子

下面把包含了两应力源间的相互弛豫效应和弹性偶极子的介弹效应这两种因素的 (17) 及 (18) 二式应用于我们最熟悉的两种情形.

1. 位错-溶质原子间的相互作用

Cottrell[21] 曾计算了溶质原子与刃位错间的相互作用. 在现在的情形下，位错作为应力源有较大的强度，故溶质原子对它的弛豫效应可以忽略，而只需考虑位错应力场对弹性偶极子的弛豫作用. 于是 (18) 式化为

$$U = -\sum_{ij}\varepsilon^{\perp}_{ij}(\boldsymbol{r})\left[\tilde{P}^0_{ij}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}(\alpha-1)\Omega\sigma^{\perp}_{ij}(\boldsymbol{r})\right],$$

其中 $\varepsilon^{\perp}_{ij}(\boldsymbol{r})$ 及 $\sigma^{\perp}_{ij}(\boldsymbol{r})$ 分别是在原点的刃位错在 $\boldsymbol{r}$ 点所产生的应变场及应力场. 由于 $\tilde{P}^0_{ij} = P\delta_{ij}$，而 P 已给出为[10]1)

$$P = 4\pi(\lambda + 2\mu)r^2(r' - r), \tag{19}$$

其中 r 及 r' 分别为基体原子和溶质原子半径. 代入已给出的刃位错的 $\sigma^{\perp}_{ij}$ 及 $\varepsilon^{\perp}_{ij}$ 的式子[22]，可得溶质原子与刃位错间的相互作用能为

$$U = \frac{3\lambda + 6\mu}{3\lambda + 2\mu}\frac{1}{3\pi}\frac{1+\nu}{1-\nu}\mu b\Delta v\frac{\sin\theta}{r}$$
$$-\frac{1}{2}(\alpha-1)\Omega\left(\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\right)^2\mu\left(\frac{1}{r^2} - \frac{2\nu\sin^2\theta}{r^2}\right). \tag{20}$$

式中各量相同于位错理论中通常使用的符号. 上式中的第一项即是熟知的 Cottrell 的结果，仅多一个与 1 相差不大的常系数 $\left(1 + \frac{4\mu}{3\lambda + 2\mu}\right)$. 对后一项，冯端等人[23]曾预言，在不均匀应力场中，除了 Cottrell 效应以外，溶质原子还应存在有被吸引到应力场绝对值比较大的区域的倾向，这一项正是表明了这种效应. 但究竟是吸向或离开位错实心，则决定于 $-(\alpha-1)$ 即 $\mu' - \mu$ 的符号. 若溶质原子的切变模量较小，则受到一附加的吸

1) 文献 [10] 中取收缩的力偶极子为正，与本文相反.

引力;反之,则为排斥力. 这一结论是容易解释的. 若杂质原子较"软",则同样的形变量所蕴藏的弹性能较少,因而有一附加的被吸向应力场绝对值较大的区域以降低系统的能量的倾向.

同样地,通常认为螺位错与溶质原子间的相互作用为零,而考虑到弛豫作用后,螺位错也存在有把溶质原子吸向或排离螺位错实心的倾向. 和上面的推导相似,利用已给出的关于螺位错的应力场和应变场的式子[22],容易求得溶质原子和螺位错间的相互作用能为

$$U = -\frac{1}{2}(\alpha - 1)\Omega 4\mu\left(\frac{b}{4\pi}\right)^2\frac{1}{r^2}. \tag{21}$$

2. 两对称中心间的相互作用

Eshelby[18] 及其后所有的弹性理论都表明,在无限大各向同性介质中,两对称中心间通常的弹性相互作用能为零. 我们现在利用(17)式来讨论这一问题. 在现在的情形下,由于是对称中心,故可以并不特殊地取其分别在原点 0 及 $\boldsymbol{r}(x, 0, 0)$ 点,且它们单独存在时的偶极矩为

$$\tilde{P}^0_{ij}(0) = P_1\delta_{ij}, \qquad \tilde{P}^0_{ij}(\boldsymbol{r}) = P_2\delta_{ij}$$

由(11)式,得到 $\tilde{P}^0(0)$ 在 $\boldsymbol{r}$ 点所产生的应变场为

$$\varepsilon(\boldsymbol{r};\ \tilde{P}^0(0)) = \frac{a-b}{x^3}P_1\begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{22}$$

$$\sigma(r;\ \tilde{P}^0(0)) = 2\mu\frac{a-b}{x^3}P_1\begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{23}$$

由于

$$(\alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\ \tilde{P}^0(r)) = (\alpha(0)-1)\Omega 2\mu\frac{a-b}{x^3}P_2\begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{24}$$

得到(24)式所表示的 0 点的偶极子在 $\boldsymbol{r}$ 点所产生的应力场为

$$\sigma(\boldsymbol{r};\ \alpha(0)-1)\Omega\sigma(0;\ \tilde{P}^0(\boldsymbol{r})) = \frac{2\mu}{x^6}(-a+b)(\alpha(0)-1)\Omega P_2$$

$$\times\begin{pmatrix} 6\lambda(a-b)+8\mu(2b+a) & 0 & 0 \\ 0 & 6\lambda(a-b)-2\mu(7b-a) & 0 \\ 0 & 0 & 6\lambda(a-b)-2\mu(7b-a) \end{pmatrix}. \tag{25}$$

而由(1)式

$$\tilde{Q}^0_{ij}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{3\lambda+2\mu}P_2\delta_{ij}. \tag{26}$$

将(22),(23),(25)及(26)式代入(1)式,得到两个相距为 $\boldsymbol{r}$ 的对称中心间的相互作用

能为

$$U = -6\mu \frac{(b-a)^2}{r^6} \Omega(P_1^2(\alpha_2 - 1) + P_2^2(\alpha_1 - 1)) + \cdots, \tag{27}$$

其中，$\alpha_1 = \alpha(0)$，$\alpha_2 = \alpha(\boldsymbol{r})$． 由上式可见，与 r^3 成反比的两对称中心间的相互作用能项为零，正是通常的结果． 也正是在这种情形下，修正项不能略去． 而这一计及偶极矩强度的弛豫效应所得到的相互作用能与 r^6 成反比，再其后则为与 r^9 成反比的项． 由上式还可看出，两对称中心间的相互作用是各向同性的，且与其为收缩中心或膨胀中心无关，但与点缺陷的弹性性质有关． 两对称中心间的相互作用是引力还是斥力决定于 $\left(P_2^2 \frac{\mu_1 - \mu_0}{\mu_1} + P_1^2 \frac{\mu_2 - \mu_0}{\mu_2}\right)$ 的符号，其中 μ_1，μ_2 及 μ_0 分别为偶极子 P_1，P_2 和基体材料的切变模量．若两点缺陷相同，且它的切变模量较基体点阵的切变模量为小时，它们间有引力的相互作用，反之为斥力．其物理实质可以和上面一样解释．

六、讨　　论

本文给出了应变晶体的弹性偶极子模型．并作为模型的检验对两种熟知的情况进行了计算，得到了比前人更为细致的结果． 以后我们还将报道应用本文给出的模型对于一种具体问题的研究．但仍有几点值得说明．

首先，关于以弹性偶极子描述缺陷特别是点缺陷的合理性问题，可以注意到如下事实．基于点阵静力学方法的研究，Hardy 和 Bullough[2] 表明，两点缺陷分开距离较大时，存在一与 r^5 反比的相互作用项，而此在弹性理论中从未出现过． 但后来，Siems[20] 的弹性理论计算表明，一缺陷可以一力多极子描述之． 而两各向同性的点缺陷间的不等于零的最低项的相互作用为来自于偶极子-八极子的贡献，它反比于 r^5，除相差一常数 3/4 外，与 Hardy 和 Bullough 的结果完全一致． 从而肯定了弹性理论在描述大距离情形下弹性性质方面的可应用性．

其次，Eshelby[24] 曾表明，若两各向同性缺陷的弹性性质不同于母相介质，则此弹性不均匀性造成其间有相互作用能

$$U = 6\Omega \frac{1}{r^6} (M_1 \Delta V_2^2 + M_2 \Delta V_1^2).$$

其中 ΔV_1 及 ΔV_2 是二缺陷产生的体积变化，它与偶极子的偶极矩成正比，M 近似与含缺陷及不含缺陷的基体介质的切变模量之差成正比．上式表明，具有正 M_1 及 M_2 值的两缺陷（“硬缺陷”）相互排斥． Hardy 和 Bullough 指出[2,4]，上定所代表的相互作用属感生相互作用，即一缺陷的强度被另一缺陷所改变而引起的，这也正是本文所考虑的弛豫作用．且本文所得的 (27) 式与上式完全一致． Hardy 和 Bullough 由点阵静力学方法对两相同缺陷间的感生相互作用的计算结果亦与此相似． 这从而也说明本文得到的 Kröner 相互作用能的修正公式的正确性．

但是，和所有其它的缺陷的弹性理论一样，缺陷的弹性偶极子模型在描述近距离下的行为，特别是在描述距离只有原子直径大小时的行为，是有困难的．另外，在此模型中，把

单个缺陷模拟为具有明确的弹性性质的弹性体也几乎是大部分弹性理论不可避免的有问题的假设．尽管如此，弹性理论对于缺陷的描述仍具有很多优点．而本文给出的应变晶体的弹性偶极子模型在一定的程度上又给予了改进，给出了更细致、深入的结果．另外，近来，某些材料的铁弹性质[25]引起了人们的很大兴趣，弹性偶极子模型对于铁弹性质的描述应该是特别合适的．这一模型的其它应用的研究正在进行中．

在本工作进行的过程中，曾得到冯端教授的指导，并和张杏奎、李齐等同志进行过有益的讨论．谨致衷心的谢意．

参 考 文 献

[1] J. R. Hardy, *Phys. Chem. Solid,* **15**(1960), 39.
[2] J. R. Hardy and R. Bullough, *Phil. Mag.,* **15**(1967), 237.
[3] J. W. Flocken and J. R. Hardy, *Phys. Rev.,* **175**(1968), 919.
[4] J. R. Hardy and R. Bullough, *Phil. Mag.,* **16**(1967), 405.
[5] L. I. Ivanov, Yu, M. Platov and M. N. Pletnev, *Phys. Stat. Sol.* (*b*), **64**(1974), 771.
[6] E. Kröner, Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, Berlin, Springer-Verlag, (1958).
[7] U. Dehlinger and E. Kröner, *Z. Metall Kunde,* **51**(1960), 457.
[8] A. Seeger, E. Mann and R. V. Jan, *J. Phys. Chem. Solid,* **23**(1962), 639
[9] A. S. Nowick and W. R. Haller, *Adv. in Phys.,* **12**(1963), 251.
[10] 杨正举，物理学报，**22**(1966)，281.
[11] 杨正举，物理学报，**22**(1966)，294.
[12] H. Waguer, Hydrogen in Metals I, p. 5, (ed. by G. Alefeld and J. Völkl, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1978).
[13] H. Kronmüller and H. E. Schaefer, *Phys. Stat. Sol.* (*b*), **66**(1974), 407.
[14] H. E. Schaefer and H. Kronmüller, *Phys. Stat. Sol.* (*b*), **67**(1975), 63.
[15] W. Schen, W. Frank and H. Kronmüller, *Phys. Stat. Sol.* (*b*), **82**(1977), 523.
[16] M. H. Yoo, *Phys. Stat. Sol.* (*b*), **61**(1974), 411.
[17] E. Kröner, Theory of Crystal Defects, p. 215, (Proceedings of the Summer School held in Hrazany, 1964).
[18] J. D. Eshelby, *Solid State Phys.,* **3**(1956), 79.
[19] A. E. H. Love, The Mathematical Theory of Elasticity, (Cambridge University Press, 1952, 4th ed.).
[20] R. Siems, *Phys. Stat. Sol.,* **30**(1968), 645.
[21] A. H. Cottrell, Dislocations and Plastic flow in Crystals, Oxford, The Clarendon Press, (1956).
[22] F. R N. Nabarro, Theory of Crystal Dislocations, Oxfold, The Clarendon Press, (1967).
[23] 冯端、王业宁、丘第荣，金属物理(上册)，科学出版社，(1964).
[24] J. D. Eshelby, *Acta Met.,* **3**(1955), 487.
[25] N. Nakanishi, *Progress in Material Science,* **24**(1979), 145.

THE ELASTIC DIPOLE MODEL OF STRAINED CRYSTALS

YANG ZHENG-JU
(*Department of Physics, Nanjing University*)

ABSTRACT

In our treatment, crystals are considered as elastic continual, so that any strained volum element can be simulated by an elastic dipole. The effective moment of the dipole is found and classified into a permanent part and an induced part. The former depends upon the elastic property of the volum element and the surrounding matrix; while the latter defends upon the strain state of the medium. These two parts of the effective. moment make the medium aquires paraelastic and dielastic charateristies respectively.

The displacement field produced by elastic dipole in an isotropic, unbounded, elastic continuum is given. Taking relaxation into account, we obtain the expression for interaction between elastic dipole and the strain field produced by other sources. This expression is simply the Kroner's formula with by some higher order terms added to it. In treating the problems of the interaction between the dislocation and a solute atom and that between two symmetrical centers, the results agree in general with the previous studies but with some higher order correction terms included.