

位错规范场对于位错芯区的应用

高 飞 张宏图

兰州大学材料科学系

1988年9月19日收到

本文用位错连续分布方法分析了位错所产生的应变和应力场,用位错规范场表出了位错芯区的位错分布,并在一定规范条件下求解了位错规范场。得到了螺位错芯区内、外的应力场。在螺位错芯区外,其应力场与 Volterra 位错的应力场完全一样,而在芯区内,当 ρ 趋于零时,螺位错的应力场是有解的。最后计算了螺位错的能量。

一、引 言

正确决定位错芯区的应力对于计算在近程范围内位错与位错,位错与其它缺陷的相互作用是非常重要的。最早的位错芯区模型是 Peierls-Nabarro 模型^[1-3]。在这个模型中,连续介质的线弹性与位错芯区的原子性质相结合,结果位错可以用无限小平行位错分布加以表示。位错芯区沿位错线的平面扩展开。

Edelen^[4]最近用位错连续方法修正了位错芯区的应变和应力,但没有考虑规范场。在位错密度为零的地方,应变和应力张量的滞弹性部分随 r^{-1} 衰减。

本文首先用位错规范场表出了位错芯区的位错分布,然后用 Homotopy 算符求解了位错的二次形式,导出了用规范场表示的应力和应变关系。

二、基本方程

本文仅考虑静态问题。假定参照构形 B , 是 3 维的欧几里德空间,其笛卡儿坐标为 $\{X^1, X^2, X^3\}$ 。即时构形 E 被取为 3 维欧几里德空间,其坐标为 $\{x^i | 1 \leq i \leq 3\}$ 。若没有旋错密度和旋错流存在,静态情况下,位错的二次形式为^[5]

$$D^i = \alpha^i dY \wedge dZ - \alpha^2 dX \wedge dZ + \alpha^3 dX \wedge dY. \quad (1)$$

其中

$$\alpha^i = e^{ABC} (\partial_B \phi_C^i - \partial_C \phi_B^i) \quad (2)$$

为位错密度^[6]。位错二次形式满足下面的条件:

$$dD^i = (\partial_1 \alpha^1 + \partial_2 \alpha^2 + \partial_3 \alpha^3) dX \wedge dY \wedge dZ = 0. \quad (3)$$

其中 ϕ_A^i 为位错规范场, d 为外微分算符。

如果考虑位错是平行于 z 轴,仅存在的位错密度为 α^3 ,上面所有的量都只是 X, Y 的函数。位错的二次形式为

$$D^i = \alpha^3 dX \wedge dY. \quad (4)$$

因为位错的二次形式满足条件(3)式,变形的一次形式为

$$dB^i = D^i. \quad (5)$$

上面外微分方程能够用 Homotopy 算符 $H^{[7]}$ 进行积分. 有

$$B^i = \partial_i X^j dX^j + HD^i. \quad (6)$$

其中

$$X^i = \delta_A^i X^A + u^i(X^B) \quad (7)$$

为线弹性的形变分量, $u^i(X^B)$ 为弹性位移函数. HD^i 为变形的滞弹性部分.

$$HD^i = \int_0^1 \lambda [(X^A - X_0^A) \partial_A \rfloor \alpha^{i3} [X_0^A + \lambda(X^A - X_0^A)] d\lambda. \quad (8)$$

其中 $\rfloor$ 为内积算符. 如果线型 Homotopy 的中心取作原点, $X_0 = Y_0 = Z_0 = 0$. 计算后, 其 HD^i 为

$$HD^i = h_1 \langle \alpha^{i3} \rangle (XdY - YdX). \quad (9)$$

将(2)式代入(9)式,可以得到

$$HD^i = h_1 \langle e^{3BC} (\partial_B \phi_C^i - \partial_C \phi_B^i) \rangle (XdY - YdX). \quad (10)$$

其中 h_1 为线性积分算符.

$$h_1 \langle \alpha^{i3} \rangle = \int_0^1 e^{3BC} [\partial_B \phi_C^i(X, Y) - \partial_C \phi_B^i(X, Y)] \lambda d\lambda. \quad (11)$$

设

$$\rho^2 = X^2 + Y^2 \quad 0 \leq \rho. \quad (12)$$

从而 $X = \rho \cos \theta$, $Y = \rho \sin \theta$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$, 则线性积分算符为

$$h_1 \langle \alpha^{i3} \rangle = \int_0^\rho e^{3BC} [\partial_B \phi_C^i(r \cos \theta, r \sin \theta) - \partial_C \phi_B^i(r \cos \theta, r \sin \theta)] \\ \times r dr \rho^2, \quad (13)$$

其中 $r = \lambda \rho$.

若采用一般的标准记号,把上指标写成下指标,则应变张量为

$$E_{ij} = e_{ij} + \bar{e}_{ij}. \quad (14)$$

其中

$$e_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad (15)$$

为线性工程应变张量的分量.

$$\bar{e}_{ij} = \frac{1}{2\rho^2} \begin{bmatrix} -2C^1Y & C^1X - C^2Y & -C^3Y \\ C^1X - C^2Y & 2C^1X & C^1X \\ -C^3Y & C^1X & 0 \end{bmatrix} \quad (16)$$

为滞弹性应变张量.

假定材料为各向同性的,则应用胡克定理,应力张量为

$$\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} + \sigma_{ij}. \quad (17)$$

其中

$$\sigma'_{ij} = \lambda e_{kk} \delta_{ij} + 2\mu e_{ij} \quad (18)$$

为相应应变张量的弹性部分所引起的应力张量的弹性部分.

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{\rho^2} \begin{bmatrix} \lambda(C^1X - C^1Y) - 2\mu C^1Y & \mu(C^1X - C^1Y) & -\mu C^1Y \\ \mu(C^1X - C^1Y) & \lambda(C^1X - C^1Y) + 2\mu C^1X & \mu C^1X \\ -\mu C^1Y & \mu C^1X & \lambda(C^1X - C^1Y) \end{bmatrix} \quad (19)$$

为滞弹性应力张量。其中 λ 和 μ 为通常的 Lamé 常数。

应力必须满足平衡方程

$$\partial_j \sigma_{ji} = 0. \quad (20)$$

将(17)式代入(20)式,可以得到

$$\partial_j \sigma'_{ji} = -\partial_j \sigma_{ij}. \quad (21)$$

对于二维问题,若已知 ϕ_i^1 和 ϕ_i^2 , 从(19)式可得出应力 σ_{ij} , 则相应的弹性问题在一定的边界条件下就可以求出。

三、位错规范场的计算

这里仅考虑与位错连续分布相联系的规范场。对于螺位错, 可以取 $C^1 = C^2 = 0$, $C^3 = C(\rho)$ 。这样问题是关于圆柱对称的, 则

$$C(\rho) = \int_0^\rho 2(\partial_x \phi_2^1 - \partial_y \phi_1^1) r dr. \quad (22)$$

(22)式意指 $(\partial_x \phi_2^1 - \partial_y \phi_1^1)$ 仅为 r 的函数。将(22)式代入(19)式, 则 σ_{ij} 的微分为

$$\partial_j \sigma_{ji} = 0. \quad (23)$$

因此有

$$\partial_j \sigma'_{ji} = 0. \quad (24)$$

如果假定材料是无穷大的均匀材料, 且在无穷远处的边界上没有外力作用, 则平衡方程(24)的积分给出

$$u^i(X, Y, Z) = 0. \quad (25)$$

它说明, 在静态情况下, 由于物体中的体力为零, 且在无穷远处的边界上外力作用, 则物体的弹性位移为零。

在考虑到条件(22)和(25)式后, 在线性情况下, ϕ_i^1 必需满足的静态规范场方程为^[6,4]

$$(\nabla^2 - k^2) \phi_E^m - k^2 \left(\delta_{Ei} \delta^{Rm} + \frac{\lambda}{\mu} \delta_E^m \delta_i^R \right) - \partial^R \partial_E \phi_R^m = 0, \quad (26)$$

其中 $k^2 = \mu/2s_1$, s_1 为耦合常数。

到现在为止, 我们仍没有考虑规范条件。我们可以强加一规范条件 $\partial^R \phi_R^m = 0$ 。方程(26)成为

$$(\nabla^2 - k^2) \phi_E^m - k^2 \left(\delta_{Ei} \delta^{Rm} + \frac{\lambda}{\mu} \delta_E^m \delta_i^R \right) \phi_k^1. \quad (27)$$

从方程(22), 我们知道仅仅存在的规范场为 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 。在本文, 若我们考虑一种对称情况, 即 $\phi_1^1 = \phi_2^1$, $\phi_2^1 = \phi_1^2$, 则(27)式变为

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi_1^1 - 2k^2 \phi_1^1 &= 0, \\ \nabla^2 \phi_2^1 - 2k^2 \phi_2^1 &= 0. \end{aligned} \quad (28)$$

因为 ϕ_2^1 和 ϕ_1^1 满足相同的方程,则可以讨论下面的方程:

$$\nabla^2 f - 2k^2 f = 0. \quad (29)$$

若用极坐标,则有

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} - 2k^2 f = 0. \quad (30)$$

设 $f = R(\rho)\Phi(\theta)$, 则(30)式可以化分为

$$\Phi'' + \lambda \Phi = 0. \quad (31)$$

$$\rho^2 \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \rho \frac{\partial R}{\partial \rho} - (2k^2 \rho^2 + \lambda) R = 0. \quad (32)$$

在自然周期边界条件下,即 $\Phi(\theta + 2\pi) = \Phi(\theta)$, 方程(31)的解为

$$\Phi = A \cos m\theta + B \sin m\theta. \quad (33)$$

定义 $x = \sqrt{2} k\rho$, (32)式变为

$$\frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR}{dx} - (x^2 + m^2) R = 0. \quad (34)$$

若对于 ρ 趋于零,方程(34)有解,其解为 $R = D \text{Im}(x)$. 其中 $\text{Im}(x)$ 为虚宗量贝塞耳函数,其阶数为 m . 代入 $R(\rho)$ 和 $\Phi(\theta)$ 进入 f , 则方程(30)的一般解应为

$$f = \sum_{m=0}^{\infty} (A \cos m\theta + B \sin m\theta) \text{Im}(\sqrt{2} k\rho). \quad (35)$$

相应的 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 的解为

$$\phi_1^1 = \sum_{m=0}^{\infty} (A_1 \cos m\theta + B_1 \sin m\theta) \text{Im}(\sqrt{2} k\rho), \quad (36)$$

$$\phi_2^1 = \sum_{m=0}^{\infty} (A_2 \cos m\theta + B_2 \sin m\theta) \text{Im}(\sqrt{2} k\rho). \quad (37)$$

因为 $(\partial_x \phi_2^1 - \partial_y \phi_1^1)$ 仅为 ρ 的函数,则必有

$$m = 1, A_1 = -B_2, B_1 = A_2. \quad (38)$$

从(36)和(37)式,则有

$$\phi_1^1 = (A_1 \cos \theta - A_2 \sin \theta) I_1(\sqrt{2} k\rho), \quad (39)$$

$$\phi_2^1 = (A_1 \cos \theta + A_2 \sin \theta) I_2(\sqrt{2} k\rho). \quad (40)$$

而 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 必须满足规范条件

$$\partial_x \phi_1^1 + \partial_y \phi_2^1 = 0, \quad (41)$$

则有

$$A_1 = B_2 = 0. \quad (42)$$

因此满足条件(38)和(42)式的规范场 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 的解为

$$\phi_1^1 = -D \sin \theta I_1(\sqrt{2} k\rho), \quad (43)$$

$$\phi_2^1 = -D \cos \theta I_1(\sqrt{2} k\rho). \quad (44)$$

其中 D 为一常数.

四、螺位错所产生的应力和能量

从(17)和(19)式, 应力张量非零的分量为

$$\sigma_{13} = \bar{\sigma}_{13} = -\mu C(\rho) \rho^{-2} Y, \quad (45)$$

$$\sigma_{23} = \bar{\sigma}_{23} = \mu C(\rho) \rho^{-2} X. \quad (46)$$

对于螺位错, 在位错芯区外 ($\rho > \rho_0$), 其位错连续分布的密度为零, 即 $C(\rho) = 0$. 而在位错芯区内 ($\rho < \rho_0$), 其位错密度为非零值. ρ_0 为位错芯区的半径.

假定 S_1 为三维空间 B_3 上的二维曲面, 其曲面的边界记 ∂S_1 , 且 ∂S_1 包围了直螺位错线. 柏格斯矢量定义为

$$b = \int_{S_1} D^3 \quad (\rho > \rho_0). \quad (47)$$

因为 $D^3 = dH(D^3) + H(dD^3)$, 则有 $D^3 = dH(D^3)$, 因此在 S_1 上的积分可以应用斯托克斯公式化为 HD^3 在 ∂S_1 的线积分, 即

$$b = \oint_{\partial S_1} HD^3 \quad (\rho > \rho_0). \quad (48)$$

将(10)式代入上式, 可以得到

$$b = \oint C(\rho_0) \frac{1}{\rho^2} (X dY - Y dX) = \oint C(\rho_0) d\theta, \quad (49)$$

则必有

$$C(\rho_0) = \int_0^{\rho_0} 2(\partial_X \phi_2^3 - \partial_Y \phi_1^3) r dr = \frac{b}{2\pi}. \quad (50)$$

在螺位错芯区外, 其螺位错所产生的应力为

$$\sigma_{13} = -\frac{\mu b}{2\pi} \rho^{-2} Y, \quad \sigma_{23} = \frac{\mu b}{2\pi} \rho^{-2} X \quad (\rho > \rho_0). \quad (51)$$

该应力与柏格斯矢量沿着 z 轴的 Volterra 位错所产生的应力场完全一样^[9].

将(43)和(44)式代入(50)式, 得

$$D = \frac{b}{4\pi} \frac{1}{\{\rho_0 I_1(\sqrt{2k\rho_0}) + \sqrt{2k^{-1}}[1 - I_0(\sqrt{2k\rho_0})]\}}. \quad (52)$$

其中 $I_1(x)$ 和 $I_0(x)$ 为 1 阶和零阶虚宗量贝塞耳函数.

在螺位错芯区内, 将(43)式和(44)式代入(22)式得

$$\mathcal{C}(\rho) = \int_0^\rho 2 \left[D \rho \frac{dI_1}{d\rho} d\rho - D I_1 d\rho \right]. \quad (53)$$

对上式进行积分, 得

$$\mathcal{C}(\rho) = 2D[\rho I_1(\sqrt{2k\rho})] + \sqrt{2k^{-1}}[1 - I_0(\sqrt{2k\rho})]. \quad (54)$$

在螺位错芯区的应力为

$$\sigma_{13} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{\rho I_1(\sqrt{2k\rho}) + \sqrt{2k^{-1}}[1 - I_0(\sqrt{2k\rho})]}{\rho_0 I_1(\sqrt{2k\rho_0}) + \sqrt{2k^{-1}}[1 - I_0(\sqrt{2k\rho_0})]} \frac{Y}{\rho^2}, \quad (55)$$

$$\sigma_{23} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{\rho I_1(\sqrt{2} k \rho) + \sqrt{2} k^{-1}[1 - I_0(\sqrt{2} k \rho)]}{\rho_0 I_1(\sqrt{2} k \rho_0) + \sqrt{2} k^{-1}[1 - I_0(\sqrt{2} k \rho_0)]} \frac{x}{\rho^2}. \quad (56)$$

(55)和(56)式定义了位错芯区的非零的应力. 当 $\rho \rightarrow \rho_0$ 时, 位错芯区的应力等于芯区外的应力. 当 $\rho \rightarrow 0$ 时, 其位错芯区的应力为有限, 其值为零. 与 Volterra 位错的解相比, 我们的解存在每一个地方. 所有的应力都是有界的.

为了获得螺位错的能量, 我们分别计算位错芯区的能量和芯区外的能量. 在位错芯区外, 在半径为 ρ_0 和 R 的圆柱体里, 每单位长度的螺位错所贮存的应变能为^[10]

$$W_1 = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{R}{\rho_0}. \quad (57)$$

在位错芯区内, 螺位错的应变能密度为

$$W_0 = \frac{1}{2} [e_{13}\sigma_{13} + e_{23}\sigma_{23} + \sigma_{31}e_{31} + \sigma_{32}e_{32}]. \quad (58)$$

将(55), (56)和(16)式代入上式, 得

$$W_0 = \frac{\mu b^2}{8\pi^2} \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{F} \{ \rho I_1(\sqrt{2} \rho k) + \sqrt{2} k^{-1}[1 - I_0(\sqrt{2} \rho k)] \}^2. \quad (59)$$

其中

$$F = \{ \rho_0 I_1(\sqrt{2} k \rho_0) + \sqrt{2} k^{-1}[1 - I_0(\sqrt{2} k \rho_0)] \}^2. \quad (60)$$

因为我们讨论位错芯区的问题, 则可以假定 $\sqrt{2} k \rho \ll 1$, 则有

$$\text{Im}(x) \doteq \frac{x^m}{2^m \Gamma(1+m)}. \quad (61)$$

从(59)式, 我们立刻得到

$$W_0 = \frac{\mu b^2}{8\pi^2 \rho_0} \rho^2. \quad (62)$$

结果, 在位错芯区每单位长度的螺位错的能量为

$$W_0 = \int_0^1 d\varepsilon \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\rho_0} \frac{\mu b^2}{8\pi^2 \rho_0} \rho^2 d\rho = \frac{\mu b^2}{16\pi}. \quad (63)$$

为了比较, 我们给出 PN 模型相应的表达式^[11]

$$W'_0 = \frac{\mu b^2}{4\pi}. \quad (64)$$

上面的计算表明, 位错芯区的能量 W_0 比 W'_0 约小 $\frac{1}{4}$. 因为应变能 W_1 与 PN

模型的弹性能是一样的, 则我们计算的螺位错的总能量要比 PN 模型螺位错的总能量要低. 这说明在实际晶体中, 位错的形核更加容易. 从上面知道, 在本文的计算中, 位错芯区用一平面上沿径向的无穷小的位错分布加以描述, 而用这样的描述位错芯区更接近于实际情况.

[1] R. Peierls, *Proc. Phys. Soc.*, 52(1940), 34.

[2] F. R. N. Nabarro, *Proc. Phys. Soc.*, 59(1947), 256.

[3] A. J. Foreman, M. A. Jawson and J. K. Wood, *Proc. Phys. Soc.*, A64(1951), 156.

- [4] D. G. B. Edelen, *Int. J. Engng. Sci.*, 25(1987), 395.
- [5] D. G. B. Edelen, *Int. J. Engng. Sci.*, 18(1980), 1095.
- [6] A. Kadic and D. G. B. Edelen, *Int. J. Engng. Sci.*, 20(1982), 433.
- [7] D. G. B. Edelen, *Lagrangian Mechanics of Nonconservation Nonholonomic Systems*, Noordhoff, Leyden, (1977).
- [8] 高飞、张宏图, 兰州大学学报(自然科学版), 24(1988), 41.
- [9] F. R. N. Nabarro, *Theory of Crystal dislocation*, Clarendon Press, Oxford, (1967).
- [10] C. Teodosin, *Elastic Models of Crystal Defects*, Springer, Berlin, (1982).
- [11] J. P. Hirth and J. Lothe, *Theory of dislocation*, McGraw-Hill, New York, (1968).

THE APPLICATION OF DISLOCATION GAUGE FIELD FOR THE DISLOCATION CORE

GAO FEI ZHANG HONG-TU

Department of Materials Science, Lanzhou University

(Received 19 September 1988)

ABSTRACT

In this paper, the strain and stress fields produced by the dislocation are analysed by means of continuous dislocation distribution. The dislocation distribution inside the core is expressed by the dislocation gauge fields which are calculated under certain gauge condition. The stresses inside and outside the core of a screw dislocation are obtained. Outside the core, the stresses are the same as that of Volterra dislocation, but inside the core, the stresses of the screw dislocation approach zero when ρ goes to zero. Finally, the energy of the screw dislocation is calculated.