

二相介质中一种位错构型的 弹性场及所受的力*

杨顺华 胡小锋 马如章

北京科技大学材料物理系

1988 年 12 月 14 日收到

本文建立了二相介质中与相界斜交位错的一种理想构型。根据位错各向异性弹性理论的普遍方法,以及关于界面的 *Gebbia-Eshelby* 定理,计算得到此位错在两相中的弹性场,以及位错线段所受“像力”的数值解。本文所提出的模型及算法具有一般适用性。结果可用于进一步计算此位错与其它缺陷的相互作用。对于考虑这种斜交位错在无扩散相变中的作用,本工作也是一个有意义的起点。

一、引 言

无扩散型相变具有重要的理论意义和实际意义,关于这类相变的研究一直是人们感兴趣的课题,曾积累了大量的工作^[1]。研究表明,无扩散型相变的许多方面均与晶体中的位错结构相关^[2]。关于新相成核,相界的结构以及相界运动机制的设想,曾提出过比较具体的位错模型^[3,4]。在此类问题中,所处理过的位错一般是相界上的失配位错和转变位错,以及在某一相内与相界平行的位错^[5,6];与相界斜交位错的研究几乎没有报道。这种情况并非由于后者的重要性次于前者,而主要是由于求得数学解析解的困难所致。斜交位错对界面运动及二相介质的范性形变均应具有可观的影响,对于新相的自由能也应有贡献。

在处理二相介质时应该把它看作是各向异性弹性体,这样才能反映晶体结构和各种取向关系。

位错的各向异性弹性理论在 70 年代末发展至比较普遍完善的形式,即是以 *Eshelby-Stroh* 理论为基础,经过 *Bacon*, *Lothe* 等人的工作,所完成的“积分方法”^[7],以及 *Brown* 公式和 *Indenbom-Orlov* 公式^[8,9]。应用这个理论系统可以求得任意各向异性无限均匀弹性介质中任意无限直线位错的和二维、三维位错环的应力场,特别适用于计算机计算。但是当存在第二相及相应的相界面时,上面所述的方法不能直接应用。界面问题是一个数学上很繁难的“实际”问题,除了少数情况之外不能得到解析解^[10]。

我们的工作考虑一个存在平面相界的二相介质中一个与相界斜交的位错,求出它的应力场,以及由于异相及相界之存在,位错线段所受的力。鉴于现代的理论现实,我们

* 国家自然科学基金资助的课题。

提出一个合理的理想模型,恰当地利用位错各向异性弹性理论,计算以上问题的数值解。

这个工作是关于斜交位错在无扩散相变过程中所起作用,以及对二相介质力学性质影响的第一步。本文中提出的模型和算法、程序具有一般的适用性。

二、斜交位错的模型构作

设想坐标平面 x_2 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充满,这是共存的两个相,其间相界为 x_2 平面。这样一个二相系统可以由结构相变产生,于是可以设定两个相的晶体结构,点阵相对取向及相界的相对取向。

一个直位错由区域 (II) 通过界面 $x_2 = 0$ 进入区域 (I), 由于两相晶体结构不同,且有一定相对取向,因此在通过相界时会发生少许弯折(折射),并且处在不同相区中的两段位错可能具有不同的 Burgers 矢量,分别记作 b_1, b_2 。进而,由于 Burgers 矢量守恒的要求,必然在相界面上留下一个 $b' = \Delta b = b_1 - b_2$ 的残余位错。这便是斜交位错的一种

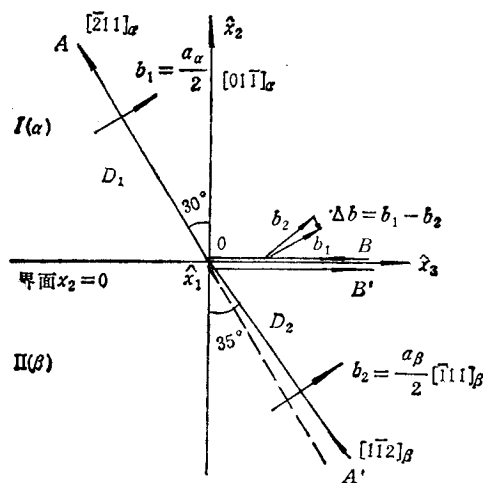


图 1

合理的理想构型(图1);我们希望研究这样一个位错系统的弹性性质,首先求出两个相区中的应力场及两个位错线段所受的力。

这个问题不能求得解析解。可以借助于一个理想的构作操作,并应用关于弹性体界面的 Geibbia 定理,求出此问题的数值解。

我们设想的构作方式如下。先假定整个空间充满介质 (I), 即晶体 (I), 其中含有折线位错 BOA (b_1), 此位错在无限空间中产生弹性场 E_I 。然后假定整个空间充满介质 (II), 即晶体 (II), 其中含有位错 $A'OB'$ (b_2), 它在无限空间中产生弹性场 E_{II} 。继之,切去上面第一种情况中的下半空间,切去第二种情况中的上半空间,剩下两个半空间,记为 (I) 和 (II), 保持其中应力场不弛豫。令这两个含有位错的半空间(相区)在平面 x_2 上连接起来。弹性力学平衡条件要求通过界面时应力场为连续。上述未弛豫的两部分介质在 x_2 面上连接起来时显然不满足应力连续的要求,即 $\Delta \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(II)}(x_2 = 0) - \sigma_{ij}^{(I)}(x_2 = 0) \neq 0$ 。连接之后若任其发生弛豫,直至平衡的终态,结果就相当于在初态下的界面上加上一个布面力 T_{I-II} , 使界面上应力连续。这个布面力会在区域 (I) 和 (II) 内分别产生弹性场 E_I' 和 E_{II}' 。于是总场 $E_{IT} = E_I + E_I'$, $E_{IIT} = E_{II} + E_{II}'$, 即为所求的最后的场。

无限介质中折线位错的场由上面提到的积分方法及 Brown 公式求得。由此求出 x_2 面上为满足连续条件所需要的布面力 T_{I-II} ; 此布面力在两个半空间中产生的位移场借

助于含弹性 Green 张量函数的面积分表示计算, 这就是 Navier 方程通解中有关的一项。由此位移场计算相应的应力场, 是附加的应力场。

为了得到数值结果, 必须取具体的两相晶体和几何布置。我们具体考虑 α/β 黄铜二相共存的情况。即取上半空间区域 (I) 为面心立方的 α 相黄铜, 下半空间区域 (II) 为体心立方 β 相黄铜, $x_2 = 0$ 平面为相界。二相间的相对取向为经典的 Nishiyama-Wassermann 关系, 即

$$\begin{aligned} [111]_{\alpha} // [110]_{\beta} // -x_1; \\ [\bar{1}10]_{\alpha} // [001]_{\beta} // x_2; \\ [11\bar{2}]_{\alpha} // [\bar{1}10]_{\beta} // x_3. \end{aligned} \quad (1)$$

参见图 1, 位错 $A'O A$ 由区域 (II) 穿过相界进入区域 (I)。 $A'O$ 段位错线在区域 (II) 中的晶体学取向是 $[\bar{1}\bar{1}2]_{\beta}$, $b_2 = \frac{a_{\beta}}{2} [\bar{1}\bar{1}1]_{\beta}$ 。 OA 段位错线在区域 (I) 中的晶体学取向是 $[\bar{2}11]_{\alpha}$, $b_1 = \frac{a_{\alpha}}{2} [01\bar{1}]_{\alpha}$ 。为了保证位错 Burgers 矢量守恒, 要引入界面上、处于 x_3 轴上的两个半无限直线位错 OB' 和 BO ; 显然它们相互重合, 位错方向分别是 $[\bar{1}10]_{\beta}$ 和 $[\bar{1}\bar{1}2]_{\alpha}$, Burgers 矢量分别为 b_2, b_1 。它们合成一个位错 OO' , Burgers 矢量为 $\Delta b = b_1 - b_2$ 。位错 OO' 可认为是位错 $A'O A$ 在界面上留下的残余位错, 它是一个界面台阶, 类似于一般的相变位错。上述几何关系如图 1 所示。

三、理论公式和算法

按照上节所述的理想模型构作, 首先是要计算各向异性无限介质中折线位错的应力场。采用积分方法求出直线位错的应力因子 Σ_{ij} , 然后代入 Brown 公式求得具体折线位错的应力场。

积分方法一般采用晶体学坐标作为基本坐标系, 在此坐标系中弹性常数张量具有较为简单的标准形式。另取以直线位错线作为单轴 t 的另一自然坐标系 (t, m, n) 。如图 2 所示。 t 在位错所在的平面中的角坐标为 θ , 此平面的法矢量为 N ; 而 m, n 在 N 与 $\partial t / \partial \theta$ 所决定的平面内, 角坐标为 ω 。

对任意两个矢量 a, b , 参考基本坐标系, 定义矩阵

$$(ab)_{jk} \equiv a_i c_{ijk} b_l. \quad (2)$$

积分方法得出直线位错 $t(b)$ 的角应力因子为^[7]

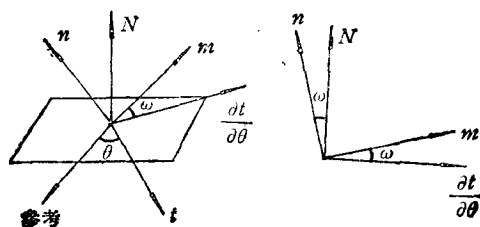


图 2

$$\Sigma_{mn}(\theta) = \frac{1}{2\pi} c_{mni p} b_s \left\{ -\frac{\partial t_p}{\partial \theta} S_{is} + N_p (NN)^{-1}_{ik} \right. \\ \left. \times \left[4\pi B_{ks} + \left(N \frac{\partial t}{\partial \theta} \right)_{kr} S_{ri} \right] \right\}. \quad (3)$$

角应力因子的一阶导数为

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \Sigma_{mn}(\theta) = \frac{1}{2\pi} c_{mni p} b_s \left\{ t_p S_{is} - \frac{\partial t_p}{\partial \theta} \frac{\partial S_{is}}{\partial \theta} \right. \\ \left. + N_p (NN)^{-1}_{ik} \left[4\pi \frac{\partial B_{ks}}{\partial \theta} + \left(N \frac{\partial t}{\partial \theta} \right)_{kr} \frac{\partial S_{ks}}{\partial \theta} - (Nt)_{kr} S_{ri} \right] \right\}, \quad (4)$$

式中所需三个基本重要的矩阵 Q_{ks} , S_{ks} , B_{ks} 的积分表示式如下:

$$O_{ks}(\mathbf{t}) = Q_{ks}(\mathbf{t}) \equiv -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (nn)^{-1}_{ki} d\omega, \quad (5)$$

$$S_{ks}(\mathbf{t}) \equiv -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (nn)^{-1}_{ki} (nm)_{is} d\omega, \quad (6)$$

$$B_{ks}(\mathbf{t}) = B_{sk}(\mathbf{t}) \equiv \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \{ (mm)_{ks} - (mn)_{kr} (nn)^{-1}_{ri} (nm)_{is} \} d\omega. \quad (7)$$

还需要 S_{ks} , B_{ks} 对 θ 的一阶导数 $\frac{\partial S_{ks}}{\partial \theta}$, $\frac{\partial B_{ks}}{\partial \theta}$, 不难由上式导出.

Brown 公式^[8]是用直线位错的应力因子 $\Sigma_{ij}(\theta)$ 及其二阶导数 $\Sigma''_{ij}(\theta)$ 表出一个任意平面位错环 L 的应力场, 参考图 3, 有

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \oint_L [\Sigma_{ij}(\theta) + \Sigma''_{ij}(\theta)] \frac{\sin(\theta - \alpha)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} ds. \quad (8)$$

对于有限长直线位错或半无限直线位错 Brown 公式具有比较简单的形式, 其中仅含 $\Sigma_{ij}(\theta)$ 及其一阶导数 $\Sigma'_{ij}(\theta)$. 求一个折线位错的应力场要将关于半无限直线位错的 Brown 公式应用于此位错的二支. 参考图 4, Brown 公式的形式如下:

$$\sigma_{ij}(\theta) = \frac{1}{2d} \{ \Sigma_{ij}(\alpha) + \Sigma_{ij}(\theta) \cos(\theta - \alpha) - \Sigma'_{ij}(\theta) \sin(\theta - \alpha) \}. \quad (9)$$

如此便分别求得两个折线位错的“ ∞ 场”, $E\text{I}$ 和 $E\text{II}$.

第二步是进行上节中所述的理想的切割和连接, 将分别含有“ ∞ 场” $E\text{I}$ 和 $E\text{II}$ 的相区 (I) 和 (II) 看作是处于未弛豫态. 弛豫后的终态下界面上应力连续, 相当于在界面上作用布面力 T_{I-II} 的结果, 这个布面力为 x_2 面上的应力不连续量 $\frac{1}{2} \Delta \sigma_{ij} = \frac{1}{2} [\sigma_{ij}^{\infty}(x_2 = 0^+) - \sigma_{ij}^{\infty}(x_2 = 0^-)] \equiv \sigma_{ij}$ 所决定. 为了求得此表面应力在上、下半空间中产生的弹性场, 应当利用以位移表示的弹性力学平衡方程, 即 Navier 方程, 在有边界弹性体中的通解, 并给定边界条件^[10]. 在这里就是令 x_2 面上的应力为 $\sigma_{ij}(x_2 = 0)$, 于是, 应用上述通解中含面力的一项可给出相区 (I) [或相区 (II)] 中的附加应力场, 记作 $\sigma_{ij}^A(\mathbf{x})$:

$$\sigma_{ij}^A(\mathbf{x}) = c_{ijmn}^{(1)} u_{m,n} = c_{ijmn}^{(1)} \iint -\sigma_{ij}(\mathbf{x}') G_{km,n}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dS'_k, \quad (10)$$

式中 G_{km} 是 Navier 方程的基本解, 相当于一般数学物理方程的 Green 函数, 故称弹性

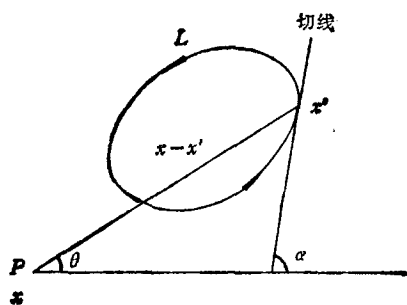


图 3

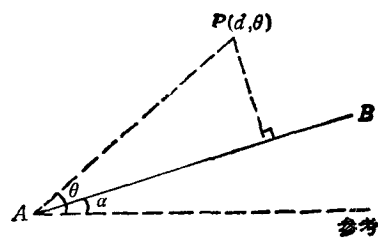


图 4

Green 张量函数^[7], $G_{km}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ 有几种不同形式的表达式。我们为了与上述求位错弹性场的积分方法相一致, 选用以 Q 矩阵表示 G_{km} 的表示式

$$G_{km}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{Q_{km}}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (11)$$

$$G_{km,i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{1}{8\pi^2|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \int_0^{2\pi} [t_i(\mathbf{nn})_{km}^{-1} - n_i F_{km}] d\omega, \quad (12)$$

式中

$$F_{km} = F_{mk} = (\mathbf{nn})_{km}^{-1} \{(\mathbf{nt})_{rp} + (\mathbf{tn})_{rp}\} (\mathbf{nn})_{rp}^{-1}. \quad (13)$$

将由(9)与(10)式算出的应力相加得出相区 (I) 和相区 (II) 内的总场。

最后, 计算位错线段 $A'O$ 和 OA 所受的力是采用经典的 Peach-Koehler 公式

$$\begin{aligned} F_k^I(\lambda) &= \varepsilon_{kji} b_i^a \sigma_{ij}^{(\alpha)}(P) t_{1j}; \\ F_k^{II}(\lambda) &= \varepsilon_{kji} b_i^b \sigma_{ij}^{(\beta)}(P) t_{1j}, \end{aligned} \quad (14)$$

式中 $\sigma_{ij}^{(\alpha, \beta)}(P)$ 分别是相区 (I) 和 (II) 中由于残余位错及相界和异相与其中位错线段之存在所引起的应力场, 故此力[(14)式]的意义不言而喻。

数值计算中所用 α 黄铜和 β 黄铜的物理常数列于表 1 中^[11]。

表 1

	c_{11}	c_{12}	c_{44}	s_{11}	s_{12}	s_{44}	晶格常数
	$10^{11} \text{ dyn} \cdot \text{cm}^{-2}$			$10^{-12} \text{ cm}^2 \cdot \text{dyn}^{-1}$			$a(\text{\AA})$
α 黄铜 (fcc) 64 at % Cu	14.75	11.15	7.194	1.94	-0.835	1.39	3.6925
β 黄铜 (bcc) 55.1 at % Cu	12.04	10.37	7.46	4.105	-1.90	1.34	2.9440

采用 FOTRAN 语言设计程序。

基本的计算单元(量)是矩阵 $(\mathbf{nm})_{ij}$, $(\mathbf{mn})_{ij}$, $(\mathbf{mm})_{ij}$, $(\mathbf{nn})_{ij}$, $(\mathbf{Nt})_{ij}$, $(\mathbf{mt})_{ij}$, $(\mathbf{nt})_{ij}$, $(\mathbf{NN})_{ij}$, $\left(\mathbf{N} \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial \theta}\right)_{ij}$ 。由之导出 Q_{ij} , S_{ij} , B_{ij} 和 $\frac{\partial}{\partial \theta} Q_{ij}$, $\frac{\partial}{\partial \theta} S_{ij}$, $\frac{\partial}{\partial \theta} B_{ij}$, 再算得 Σ_{mn} 和 Σ'_{mn} 。为此设计了各个子程序块。重要的子程序共有 8 个。整个计算中有有效的计算程序语句约为 2000 条左右。数值积分采用 CUBINT 积分程序。

利用(11)和(12)式由面积分计算应力场 σ_{ij}^A , 由于 σ_{ij} 及 $G_{ij,s}$ 均随位错的距离下降很快, 所以(10)式中的积分面积在所考虑的精度范围内定为 $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$ 的正方形区域。

四、计算和结果

1. 区域 I(α) 和 II(β) 中的应力场

我们计算的第一步是区域 I(α) 与区域 II(β) 中的应力场。参考图 5, 下面将给出区域 I(α) 和区域 II(β) 中 (x_2, x_3) 平面内与界面平行的直线 l_1 及 l_2 上的应力场数值计算结果。

区域 I(α) 中任意点上的应力场量由三部分组成, 它们分别由下述的应力源产生: 1) 半无限位错 OA , 其 Burgers 矢量为 b_1 ; 2) 界面上的残留位错(台阶) OO' , 其 Burgers 为 α 相中的 Δb ; 3) 区域 (II) 中的应力源, 通过界面在区域 (I) 内产生应力场。

与此相似, 区域 II(β) 中任意点上的应力场量也是由三部分组成, 分别由下述的应力源产生: 1) 半无限位错 $A'O$, 其 Burgers 矢量为 b_2 ; 2) 界面上的残留位错(台阶) OO' , 其 Burgers 矢量为 β 相中的 Δb ; 3) 区域 (I) 中的应力源, 通过界面在区域 (II) 内产生应力场。

图 6—图 11 中给出六个典型计算结果, 即直线 l_1 上的应力场 $\sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{22}, \sigma_{23}$; 直线 l_2 上的应力场 σ_{12}, σ_{13} 。

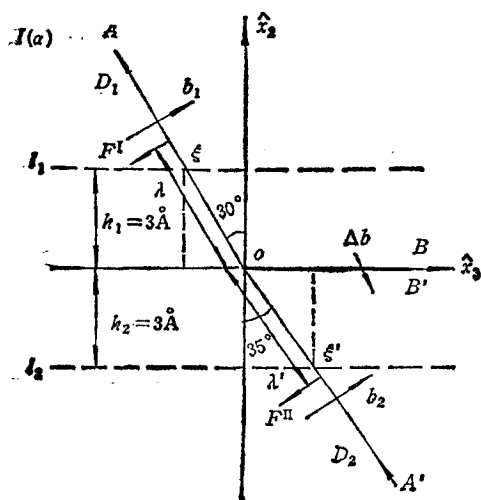


图 5

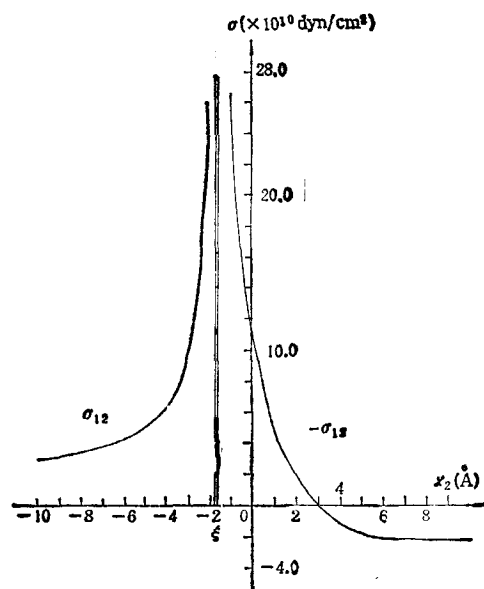
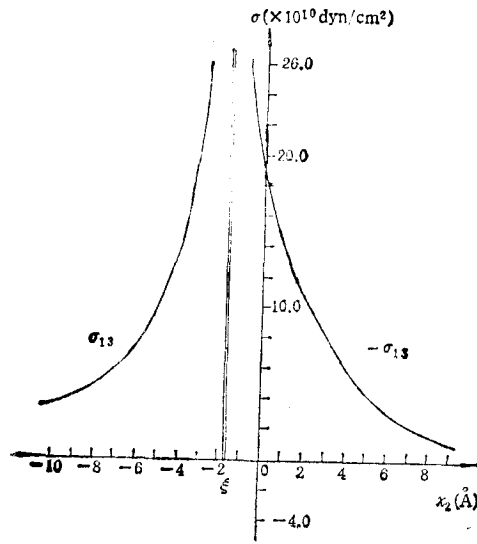
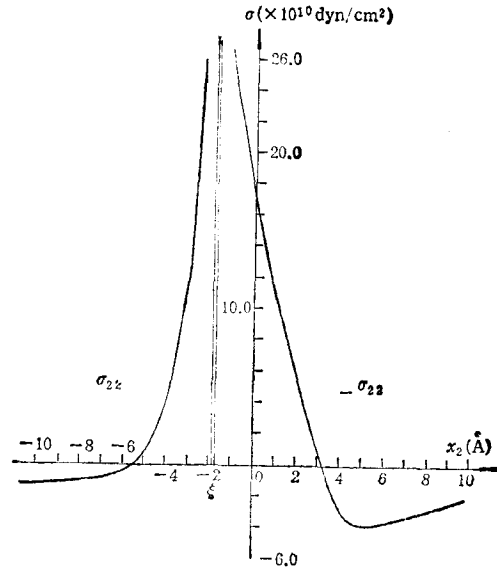
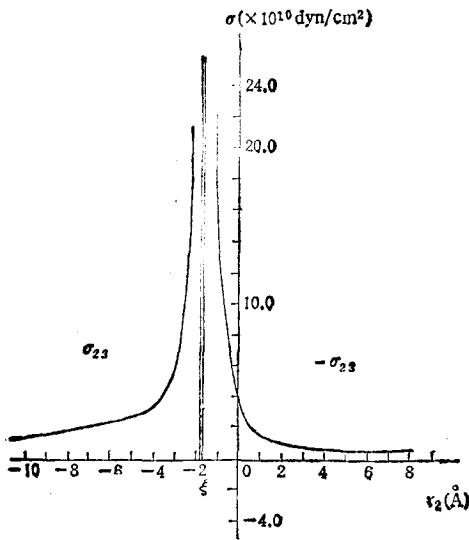
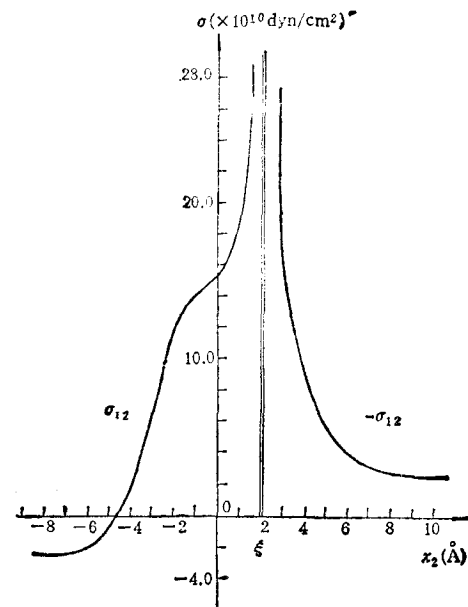


图 6 α 相中 l_1 线上的应力场 σ_{12}

由计算的应力场数值看出, 当场点接近于位错的 ξ 或 ξ' 点时, 强度趋向于无穷; 远离 ξ 或 ξ' 点, 强度很快下降。在位错线的两边, 切应力符号改变。与一般所知的位错应力场的行为符合。

图7 α 相中 l_1 线上的应力场 σ_{13} 图8 α 相中 l_1 线上的应力场 σ_{23} 图9 α 相中 l_1 线上的应力场 σ_{23} 图10 β 相中 l_2 线上的应力场 σ_{12}

2. 斜交位错位错线段所受力

参看图5, 计算区域(I)中位错 OA 的位错线段所受的力, 它是由界面上的残留位错 OO' 及区域(II)中应力源通过界面在区域(I)中产生的应力场作用引起。同样, 计算区域(II)中位错 OA' 的位错线段所受的力, 其来源与以上所述同理。计算结果示于图12中, 位错 OA 的线段和位错 OA' 的线段单位长度所受的作用力分别是 F^I 和 F^{II} 。

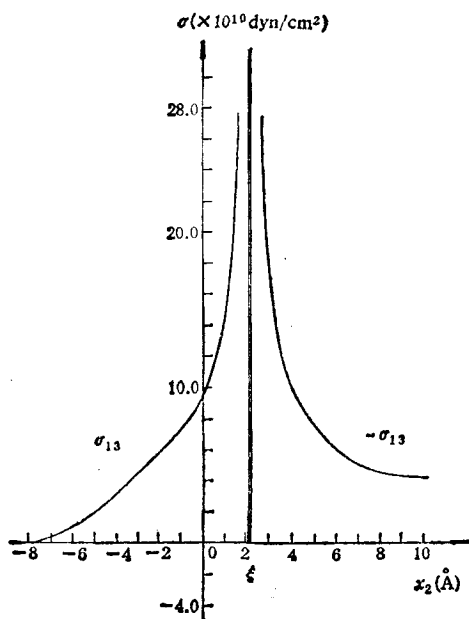
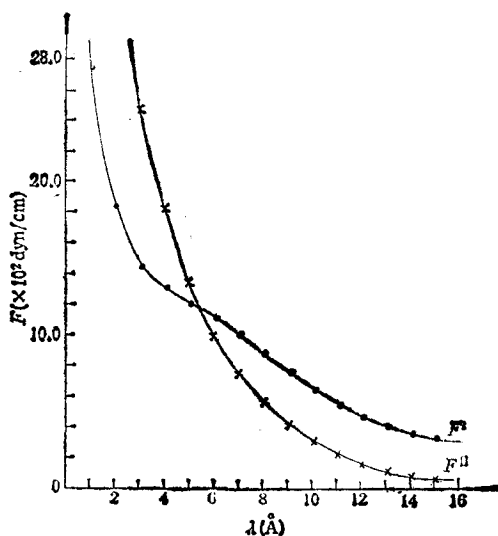
图 11 β 相中 l_2 线上的应力场 σ_{13} 

图 12

由此计算结果可见, F^I 和 F^{II} 的大小随位错线段与界面的距离 λ 之增大而很快减小, 因此, 当距离 λ 充分大时, 界面对位错的影响变得很小. 在此力的作用下, 位错组态的变化趋势向一条直线接近, 而不是消失于界面.

五、结 论

1. 我们建立了 α/β 二相黄铜介质中与界面斜交位错的一种构型. 根据各向异性介质中位错弹性理论的积分方法, 普遍的 Brown 公式, 以及处理有限介质中弹性场的普遍 Green 函数方法, 推求二相中的弹性场, 设计了计算程序. 利用此程序计算了二相中比位错系统的应力场, 具体给出与界面平行的两条直线上应力场的数值结果, 作为示例. 二相区域中任意一点上的应力场量都可以同样算出.

2. 计算了与界面斜交的位错受到的作用力, 此力是由界面及第二相与其中应力源之存在而引起的. 在这个力作用下, 位错组态的变化趋势向一条直线接近, 而不是消失于界面. 由于还没有比较不同位错构型的能量, 所以这个论断是相对的.

3. 在解决了求应力场这个基本问题后, 可以进一步考虑位错组态能量问题, 确定何种位错构型为最稳定状态. 还可以考虑这类位错之间的相互作用, 以及与点缺陷的相互作用. 二相介质在范性形变过程中这种斜交位错的行为与上述这些相互作用均密切相关.

4. 对于马氏体相变, 斜交位错对相界移动的影响, 以及对新相自由能的贡献, 应是研究相变动力学中所不容忽视的因素. 在晶态固体中, 在诸如通过一级相变形成的有序相与母相之间, 以及经过 spinodal 机制分解后的二相间都会出现界面, 其特征与马氏体相和母相间的界面有类同之处. 本文所述问题及方法在此都可以得到应用. 总之, 对于任何

两相晶体结构, 两相点阵及界面的相对取向, Burgers 矢量 b_1 和 b_2 的取向, 位错 D_1 及 D_2 的取向, 本计算方法和程序都适用。因此我们的理论和计算方法具有普遍的可用性。

作者感谢平爵云副教授对计算工作所给予的协助。

- [1] 徐祖耀, 马氏体相变与马氏体, 科学出版社, (1980).
- [2] J. W. Christian, *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*, Pergamon Press, Oxford, 2nd ed., part I, (1975);
J. W. Christian, in *Dislocation and Properties of Real Materials*, Institute of Metals, London, (1985), p. 94.
- [3] J. W. Christian and A. G. Crocker in *Dislocations in Solids*, F. R. N. Nabarro ed., North-Holland Publishing Co., (1980), Vol. 3, Chap. II.
G. B. Olson and M. Cohen, in *Dislocations in Solids*, F. R. N. Nabarro ed., Elsevier Sci. Publishers B. V., (1986), Vol. 7, chap. 37.
- [4] 钱扬、马如璋、何永枢、黄懋容、刘小丹, *Crystal Res. Technol.*, 22(1987), 12.
- [5] D. M. Barnett and J. Lothe, *J. Phys. F*, 4(1974), 1618.
- [6] M. Dupeux and R. Bonnett, *Acta Metall.*, 28(1980), 721.
- [7] D. J. Bacon, D. M. Barnett and R. O. Scattergood, *Progr. in Mat. Sci.*, 23(1979), 51. 杨顺华, 晶体位错理论基础, 科学出版社, (1988), 第一卷, 第五章, 附录 A.
- [8] L. M. Brown, *Phil. Mag.*, 15(1967), 363.
- [9] V. L. Indenbom and S. S. Orlov, *Soviet Phys. JETP.*, 6(1964), 274.
- [10] J. D. Eshelby, in *Dislocations in Solids*, F. R. N. Nabarro ed., North-Holland Publishing Co., (1979), Vol. 1, Chap. 5.
- [11] H. B. Huntington, *Solid State Physics*, 7(1958), 213.

THE ELASTIC PROPERTIES OF A DISLOCATION IN TWO PHASE MEDIUM

YANG SHUN-HUA HU XIAO-FENG MA RU-ZHANG

Department of Materials Physics, Beijing University of Science and Technology

(Received 14 December 1988)

ABSTRACT

We propose an ideal configuration of a dislocation obliquely intersecting the phase boundary in a two phase medium. By employing the general integral method of anisotropic elastic theory of dislocations and the Gibbs-Eshelby theorem for boundaries, we obtain the numerical solutions for elastic field of this dislocation as well as the "image" force acting on it. Our model and computing method are shown to be applicable in general. The results can be used to further calculate the interaction between this dislocation and other defects. This work is also a meaningful starting point for considering the effect of such oblique dislocations in diffusionless phase transformations.