

求晶体位错自能的离散弹性方案

孙宗琦 朱仕学

(中国科学院金属研究所)

1987年10月26日收到

考虑到晶体的离散点阵结构, 滑移只能在原子之间进行, 因此位错中心永远没有原子, 位错中心附近分摊到每个原子的离散弹性能量处处有限. 在刚性位错假定下, 直接应用位错弹性理论解析结果, 求出了晶体直奇异位错等效内切半径及其随位错中心位置的周期变化. 对于简单四方晶体中奇异螺型位错, 一级近似与 Peierls 模型结果巧合. 计算了 fcc 和 bcc 两种晶系中各种位错的自能和等效位错内切半径, 并初步考虑了各向异性弹性效应.

结果表明: 位错滑移面不是几何平面, bcc 螺型位错滑移面类似于蜂巢结构.

指出了用这种离散弹性方法进一步估算各种次级效应的可能.

一、引 言

自从 Volterra 的位错弹性模型^[1]问世以来, 位错理论已发展成三种流派, 即连续介质弹性理论^[2,3], 离散的点阵理论^[4,5]和介于两者之间的混合理论^[6,7]. 从理论观点来看, 连续理论较为完善, 原则上已知位错密度张量的连续分布, 就可以求出相应的弹性位移场、应变场和能量密度场^[8]. 除了数学上较为复杂以外, 它与经典场论很相似. 近年来发展了非线性弹性理论^[9], 各向异性线性弹性理论^[10]. 尽管如此, 连续弹性理论应用到晶体位错仍有根本困难, 即理论本身不能计算位错自能、中心内截半径和 P-N 应力诸量. 晶体位错的离散点阵理论最早是一维模型^[11]. 当高速电子计算机普遍使用后, 逐渐发展成更符合实际的二维或三维模型^[5]. 表面看来, 这种方法比连续介质理论更有力, 它很适合用于位错中心区. 当计及长程交互作用之后, 还能计算弹性理论不能计算的层错能. 但是, 到目前为止, 还没有希望直接从多体量子理论来计算, 不得不采用各种半经验的原子间交互作用势, 在有心力假定下, 甚至连完整晶体的弹性常数大多数不满足勾犀关系都不能解释. 此外, 在计算中又引进多种简化假定, 因此不同处理方法, 同一问题所得结果分歧不小. 这种方法并不能代替连续理论. 混合理论是在连续理论的基础上, 部分考虑到晶体的离散点阵结构, 从而获得单纯连续理论不能求解问题的解. 这方面也缺少系统的方法, 就 Peierls 模型及其后来的进一步发展来看, 理论方法也有很多不足之处, 结果的可信赖程度欠佳. 例如文献[6]和[7]的工作分别只片面地强调了位错滑移面和插入面间两层原子交互作用的非线性和离散性, P-N 为敏感地依赖于原子之间交互作用等等.

本文目的在于阐明, 只要考虑到实际晶体点阵结构, 把连续弹性介质中奇异位错的有关解析结果直接用于晶体位错, 经离散化并对所有原子求和, 有限晶体中单位长度位错的弹性自能不仅有限而且是位错中心坐标的周期函数. 因而简单地解决了 Peierls 等人在

历史上所解决的问题,而且很容易推广到任意晶系中任意位错组态。

二、基本假定和主要公式

应该指出晶体位错与连续介质位错的主要差别在于:晶体位错的滑移面只能介于原子之间,因而位错中心处永远没有原子;而连续介质位错中心可以有连续弹性介质。晶体位错的位移场是离散的只在原子所在处有定义,而连续介质位错的位移场处处有定义。晶体位错的柏氏矢量不能取任意值。晶体位错中应力张量无定义,只存在某原子与周围原子的交互作用力,晶体位错中不存在应变能密度概念,但有某原子与周围交互作用能,并且这两个量只在原子所在位置有定义。

我们将按如下方法引入离散的弹性位移、应变和能量诸量,设 $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}_l)$ 是处在 $\mathbf{r}_l$ 位置的原子的弹性位移, $\mathbf{r}_l'$ 是和 $\mathbf{r}_l$ 处原子最近邻的原子位置矢量,形式上写为

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{r}_{l'}) - \mathbf{u}_i(\mathbf{r}_l) = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \mathbf{u}_i(\mathbf{r}_l)}{\partial x_j} (\mathbf{r}_{l'} - \mathbf{r}_l)_j$$

$$i = 1, 2, 3; l' = 1, 2, \dots, z, \quad (1)$$

z 是配位数。原则上只需 $z = 3$ 个关系式就可求出 $\frac{\partial \mathbf{u}_i(\mathbf{r}_l)}{\partial x_j}$, 当 $z > 3$ 时,可以按最小二乘法来求误差最小的超定方程组(1)的解,然后按下式求离散的应变 $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}_l)$:

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}_l) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_i(\mathbf{r}_l)}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{u}_j(\mathbf{r}_l)}{\partial x_i} \right). \quad (2)$$

最后按下式求出离散的弹性能:

$$E(\mathbf{r}_l) = \frac{1}{2} c_{ijkl} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}_l) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}_l) Q = \varepsilon(\mathbf{r}_l) Q, \quad (3)$$

式中 c_{ijkl} 是晶体四阶线性弹性常数张量, Q 是 $\mathbf{r}_l$ 与 $\mathbf{r}_l'$ 连线中垂平面围成的元胞的体积。 $E(\mathbf{r}_l)$ 可以理解为中心为 $\mathbf{r}_l$ 处的元胞 Q 的平均弹性能量。大量有关位错点阵理论计算所得点阵位移量与连续理论所得的位移场的相应值差别不大,甚至在位错中心区也是如此,因此我们可以直接用连续介质理论的 $\mathbf{u}(\mathbf{r}_l)$ 按(2), (3)式求 $E(\mathbf{r}_l)$, 最后求出与单位长度直位错线有关的能量

$$E = \sum_{r_l < R} E(\mathbf{r}_l). \quad (4)$$

显然,这样求得的 E 不会发散,因为对位错中心附近的位置,按(2)式求得的应变有限。

在本文中,为了简化计算,观察这种离散弹性方案的直接效果,将进一步假定如下:

1. (2)式中 $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}_l)$ 直接用连续弹性理论结果 $\varepsilon_{ij}^*(\mathbf{r})_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_l}$ 代替, $\mathbf{r}_l$ 是第 l 个原子中心相对位错中心的位置矢量,即便位错中心偏离平衡位置时也是如此。类似于固体物理中刚性离子假定,我们称之为刚位错假定;

2. 只考虑直的奇异位错,不考虑位错宽度及弯曲的效应。关于这些效应将另文报道。这两点假定使计算所得能量偏高。但不会改变结果的定性特征。

三、应 用

1. 各向同性弹性近似, 螺型位错

弹性能量密度是

$$E(r_i) = \frac{\mu b^2}{8\pi^2 r_i^2} Q. \quad (5a)$$

单位长度外径 R 圆柱体, 弹性总能量是

$$E = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} = \sum_{r_i \leq R} E(r_i) = \frac{\mu b^2}{8\pi^2} \sum_{r_i \leq R} \frac{Q}{r_i^2}. \quad (5b)$$

因此, 等效内截半径

$$r_0 = R / \exp\left(\sum_{r_i \leq R} \frac{Q}{2\pi r_i^2}\right). \quad (6)$$

对于 fcc 晶体, 在垂直于位错线的 $(1\bar{1}0)$ 晶面上原子投影呈非初基直角晶胞结构。图 1 表示位错中心所在(用 $\times$ 号表示)的那个直角晶胞, $\circ$ 表示的原子平面与用 $\bullet$ 表示的原子平面间距是 $b/2$, b 是柏氏矢量, 由图 1 可知,

$$r_i^2 = (m + \alpha_i - \alpha_0)^2 A^2 + (n + \beta_i - \beta_0)^2 B^2, \quad (7)$$

式中 m, n 是任意整数, A 是矢量 $[110]a/2$ 的模, B 是 $[001]a$ 的模, a 是点阵常数,

$$\alpha_1 = 0, \beta_1 = 0.5, \alpha_2 = 0.5, \beta_2 = 0.$$

$(\alpha_0 A, \beta_0 B)$ 是螺型位错中心坐标。每个原子投影位置分摊的柱体体积为

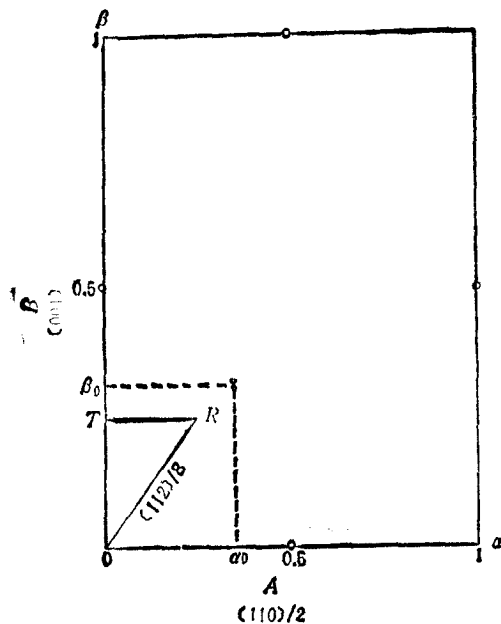


图 1 fcc 的 $(1\bar{1}0)$ 晶面上原子投影

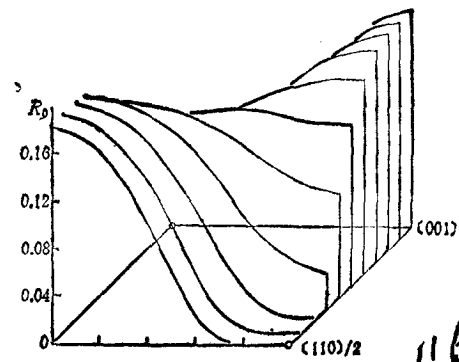


图 2 fcc 晶体中螺型位错内截半径随中心位置的变化 R_0 的单位取作点阵常数, 底面上圆圈位置表示原子投影位置

$$Q = \frac{AB}{P} \quad P = 2. \quad (8)$$

把(8)和(7)式代入(6)式, 求出

$$r_0(\alpha_0, \beta_0) = R / \exp \left(\frac{AB}{2\pi P} \sum_m \sum_n \sum_{l=1}^P \right. \\ \left. \times \frac{1}{(m + \alpha_l - \alpha_0)^2 A^2 + (n + \beta_l - \beta_0)^2 B^2} \right). \quad (9)$$

对于 bcc 的(111)螺型位错相应的参数为

$$P = 2, \alpha_1 = 0, \beta_1 = 0; \alpha_2 = 0.5, \beta_2 = 0.5 \\ A = \sqrt{\frac{2}{3}} a, B = \sqrt{2} a.$$

把两组参数代入(9)式, 对各种 α_0, β_0 及 R 计算, 当 $R > 20a$ 以后, 一般计算结果与 R 无关 (误差小于百分之一)。图 2 和图 3 分别表示 fcc 和 bcc 两种晶系中螺型位错等效内截半径随位错中心位置的变化。由于明显的周期性和对称性, 图中只显示 (α_0, β_0) 在 $(0, 0; 1, 1)$ 中的一部分。 r_0 最大的位置是位错自能最小位置, $r_0 = 0$ 表明位错中心与某列原子中心重合, 因而能量无限大。

2. 各向同性弹性, 刃型位错

离位错中心 (x, y) 处弹性能密度是

$$\varepsilon(x, y) = \frac{\mu b^2}{8\pi^2(1-\nu)^2} \frac{x^2 + (1-2\nu)y^2}{r^4} \\ = \frac{\mu b^2}{8\pi^2(1-\nu)^2} \frac{1 - 2\nu \sin^2 \varphi}{r^2}. \quad (10)$$

单位长位错能量

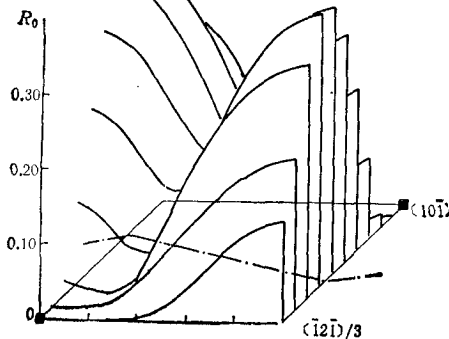


图 3 bcc 晶体中螺型位错内截半径随位错中心位置的变化 底面上表示原子投影位置

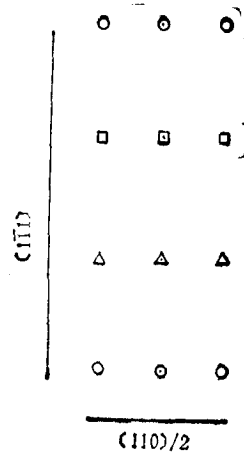


图 4 fcc $(\bar{1}12)$ 晶面上原子位置投影

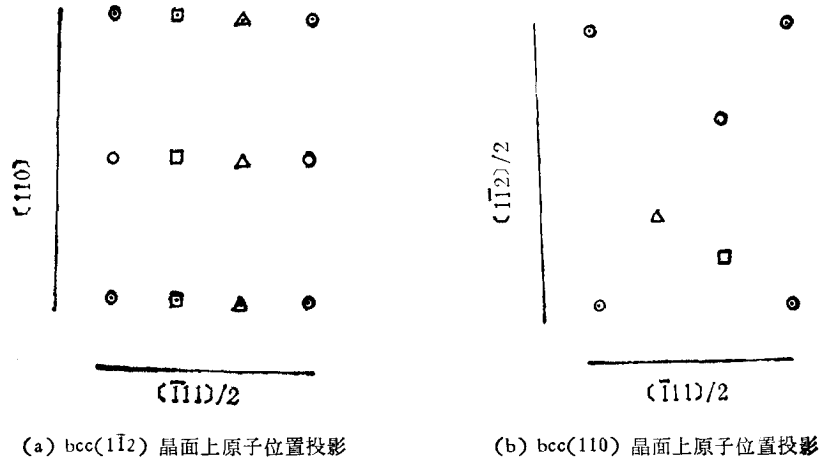


图 5

$$E = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{r_0}^R \varepsilon(x, y) dr r = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (11)$$

因此,等效内截半径

$$r_0 = R / \exp \frac{AB}{2\pi(1-\nu)P} \sum_m \sum_n \sum_{\substack{i=1 \\ r_{mni} < R}}^P \frac{x_{mi}^2 + (1-2\nu)y_{ni}^2}{r_{mni}^4}, \quad (12)$$

$$\text{式中 } x_{mi} = (m + \alpha_i - \alpha_0)A, \quad y_{ni} = (n + \beta_i - \beta_0)B, \quad r_{mni}^2 = x_{mi}^2 + y_{ni}^2. \quad (13)$$

图 4 表示 fcc 晶体中垂直于刃型位错线的 $(\bar{1}12)$ 平面上原子投影位置。对于 bcc 晶体中 (110) 滑移面上沿 $[1\bar{1}2]$ 方向的刃型位错, 图 5(a) 表示 $(1\bar{1}2)$ 上原子投影位置。图 5(b) 表示刃型位错沿 $[1\bar{1}0]$ 方向 ($(1\bar{1}2)$ 滑移面) 时相应的投影图。图 6 至图 8 表示按 (12) 和 (13) 式的计算结果。

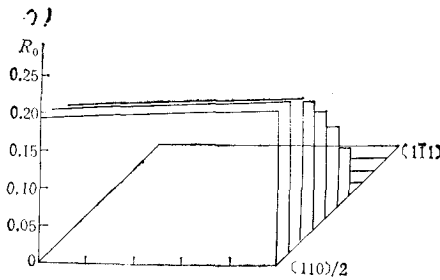
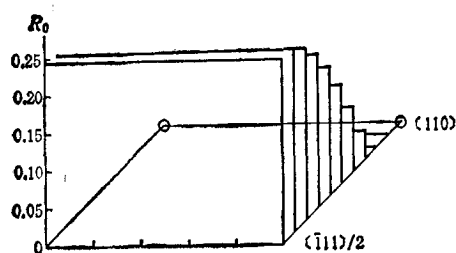
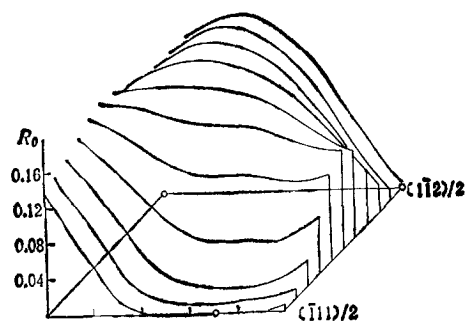


图 6 fcc 晶体中刃型位错的内截半径

以上计算中,忽略了引入刃型位错后,原子位置的变化。为了用实际位置 x'_m, y'_n 代替 x_m, y_n , 可使用下式:

$$\begin{aligned} x'_m &= x_m + \frac{b}{4\pi(1-\nu)} \frac{x_m y_n}{r_{mn}^2} - \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{x_m}{y_n}, \\ y'_n &= y_n - \frac{(1-2\nu)b}{8\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_{mn}^2}{b^2} + \frac{b}{4\pi(1-\nu)} \frac{y_n^2}{r_{mn}^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

图 7 bcc 晶体中 $[1\bar{1}2]$ 方向刃型位错的 R_0 图 8 bcc 晶体中 $[110]$ 方向刃型位错的内截半径
O 表示原子投影位置

经(14)式修正后,所得结果与图 6 至图 8 形状相似,但 R_0 约减少百分之五。

3. 各向异性弹性, bcc 中螺型位错

令 x , y 和 z 轴分别沿着 $[11\bar{2}]$, $[\bar{1}10]$ 和 $[111]$ 方向, 则 (x, y) 处弹性能量密度可按式求得:

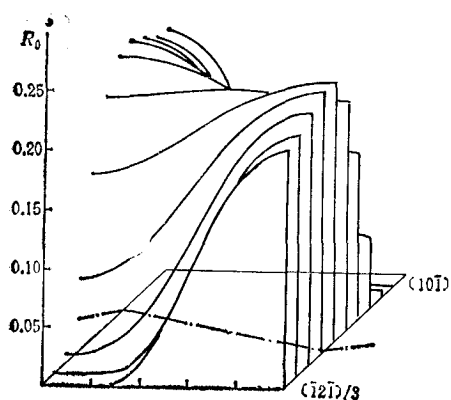
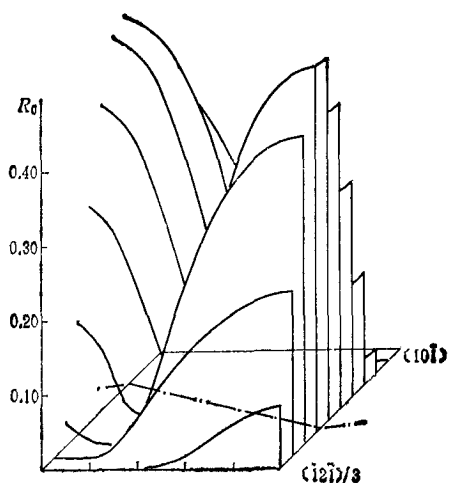
$$\begin{aligned} \varepsilon(x, y) = & \frac{1}{2} [s_{11}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) + s_{44}(\sigma_4^2 + \sigma_5^2) + s_{66}\sigma_6^2 + 2s_{12}\sigma_1\sigma_2 \\ & + 2s_{15}(\sigma_1\sigma_5 - \sigma_2\sigma_5 - 2\sigma_4\sigma_6)], \end{aligned} \quad (15)$$

式中 s_{ij} 和 σ_i 已由周以苍等人计算出^[12], 代入化简, 最后得到

$$\varepsilon(x, y) = \frac{b^2 D^2 (x^2 + y^2)^2}{8\pi^2 s_{44} \{ [x(x^2 - 3y^2)]^2 + [Dy(3x^2 - y^2)]^2 \}}, \quad (16)$$

式中

$$D^2 = s_{11}s_{44}/(s_{11}s_{44} - s_{15}^2),$$

(a) $D = 1.5$ (b) $D = 2$ 图 9 各向异性弹性 bcc 晶体中螺型位错内截半径随位错中心位置变化
 $D = 1$ 时与图 3 相同

$$\begin{aligned}
 s_{11} &= \frac{1}{12} \left[\frac{11(c_{11} - 5c_{12} + 2c_{44})}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12} + c_{44})} + \frac{2}{c_{44}} \right], \\
 s_{12} &= \frac{1}{12} \left[\frac{7c_{11} - 13c_{12} - 2c_{44}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12} + c_{44})} - \frac{2}{c_{44}} \right], \\
 s_{15} &= \frac{\sqrt{2}}{3} \left[\frac{1}{2c_{44}} - \frac{1}{c_{11} - c_{12}} \right].
 \end{aligned} \quad (17)$$

把(16)式对 $r_0 \leq r \leq R$ 求积, 得到

$$E = \frac{Db^2}{2\pi s_{44}} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (18)$$

由(18), (16)和(13)式及 A, B 和 D 参数, 求出螺型位错有效内截半径随各向异性参数 D 的变化参看图 9.

四、讨 论

本文计算出的 r_0 一般小于原子半径, 这与 Peierls 理论和原子模型的结果是完全符合的.

原则上已知 $r_0(\alpha_0, \beta_0)$, 由它的对数对 α_0, β_0 求梯度, 便可求出使位错运动的 P-N 应力. 为了提高计算精度和节省计算时间, 利用下列公式较为便利:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{Px} &= \frac{-1}{bA} \sum_{r_l \leq R} \frac{\partial \varepsilon(r_l) Q}{\partial \alpha_0}, \\
 \sigma_{Py} &= \frac{-1}{bB} \sum_{r_l \leq R} \frac{\partial \varepsilon(r_l) Q}{\partial \beta_0},
 \end{aligned} \quad (19)$$

式中 σ_{Px}, σ_{Py} 分别表示沿 x, y 方向的 P-N 应力. 对于各向同性弹性螺型位错

$$\begin{aligned}
 \sigma_{Px} &= \frac{\mu A^2 B b}{4\pi^2 P} \sum_m \sum_n \sum_{i=1}^P \frac{(m + \alpha_i - \alpha_0)}{[(m + \alpha_i - \alpha_0)^2 A^2 + (n + \beta_i - \beta_0)^2 B^2]^2} \\
 &= \frac{\mu b}{4PA} \sum_n \sum_{i=1}^P \left\{ \operatorname{sh} \left[2\pi \frac{B}{A} (n + \beta_i - \beta_0) \right] \cdot \sin [2\pi(\alpha_i - \alpha_0)] \right\} / \\
 &\quad \left\{ (n + \beta_i - \beta_0) \left[\operatorname{ch} \left(2\pi \frac{B}{A} (n + \beta_i - \beta_0) \right) - \cos(2\pi(\alpha_i - \alpha_0)) \right]^2 \right\} \quad (20)
 \end{aligned}$$

当 $P=1$, 只考虑 $n = \pm 1$, 即滑移面上两层原子的贡献时, (20) 式结果与经典的 Peierls 模型所得结果符合, 也就是说错配能与相应的离散弹性能相同. 考虑到 P-N 应力与位错宽度有关, 本文考虑的只是直奇异位错, 有关 P-N 应力的计算结果不再给出. 但在这种离散弹性模型基础上, 不难进一步考虑位错宽度、原子热振动、非线性弹性等次级效应的影响.

从所得结果来看, 位错中心力求远离原子中心以减少弹性能量, 对于 bcc 螺型位错, 位错在应力作用下, 将尽量沿 r_0 较大的低能位置运动, 因而螺型位错的滑移面不是严格的几何平面, 更象是六角蜂房结构(图 3 和图 9 中的点划线). 即使对于刃型位错, 滑移面亦微呈波纹状. 不同晶系的不同位错, 凡是 A, B 较小, P 较大的, 位错自能较大, r_0 较

小。但相应的 P-N 应力反而比较小,因为 r_0 的梯度较小,根据(20)式,位错中心附近原子对 P-N 应力都有贡献。以往的混合型理论,一概只考虑滑移面间原子作用力的效应,当交互作用偏离正弦型时, P-N 应力急剧减少。这里, P 大于 1 的效应等价于偏离正弦形, P-N 应力的相应减少不是那样强烈,有关 P-N 应力的进一步处理将另文报道。

本文所用方法可以用来计算几何变结的自能以及使它沿位错运动必需克服来自离散点阵结构的所谓超 P-N 应力。

- [1] V. Volterra, *Ann. Ecole Normale Sup. Paris*, **24**(1907), 400.
- [2] J. P. Hirth, J. Lothe, "Theory of dislocations", 2nd ed., London, John Wiley & Sons, (1982).
- [3] F. R. N. Nabarro, "Theory of crystal dislocation", Oxford University Press, (1967).
- [4] A. A. Maradudin, *J. Phys. Chem. Solids*, **9**(1958), 1.
- [5] R. Bullough & V. K. Tewaty, "Dislocations in Solids", ed. F. R. N. Nabarro, North-Holland, Amsterdam, **6**(1979), 1.
- [6] R. Peierls, *Proc. Phys. Soc. Lond.*, **52**(1940), 34.
- [7] J. H. Van Der Merwe, *Proc. Phys. Soc.*, **63A**(1950), 616.
- [8] E. Kröner, "Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen", Springer, Berlin, (1958).
- [9] B. K. D. Gairola, "Dislocations in Solids", Ed. F. R. N. Nabarro, North-Holland, Amsterdam, **1**(1979), 223.
- [10] J. W. Steeds, J. R. Willis, *ibid.*, **1**(1979), 143.
- [11] J. Frenkel, T. Kontorowa, *J. Phys. Chem. Moscow*, **1**(1939), 137.
- [12] Y. T. Chou, T. E. Mitchell, *J. Appl. Phys.*, **38**(1967), 1535.

A DISCRETE ELASTIC APPROACH FOR THE SELF-ENERGY OF THE CRYSTALLINE DISLOCATION

SUN ZONG-QI ZHU SHI-XUE

(Institute of Metal Research, Academia Sinica, Shenyang)

ABSTRACT

As the discrete lattice structure of crystal is considered, it is easy to see that slip can only take place between atoms, thus no atom is situated at the centre of dislocation exactly, the discrete elastic energy belongs to each atom near the centre of dislocation is limited everywhere. Under the assumption of rigid dislocation, using the analytical results of the elastic theory for dislocations directly, the inner cut radius of a singular crystalline dislocation and its periodic variation along with the position of dislocation centre are obtained. For the case of singular screw dislocation in simple orthogonal crystal, the first order approximation coincides with the result of Peierls model. The self energies and effective inner cut radii for two kinds of crystalline system (fcc and bcc) are calculated, and the effect of anisotropic elasticity is taken into account primarily.

It is shown that the slip plane for a dislocation is not a geometric plane. The slip plane for the screw dislocation in bcc crystal looks like a bee nest.

The possibility to further estimate some secondary effects by this discrete elasticity approach is pointed out.