第 39 卷 第 10 期　　物 理 学 报　　Vol. 39, No. 10
1990 年 10 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Oct., 1990

晶体缺陷规范场中的刃位错*

高　飞
兰州大学材料科学系，兰州 730000

1989 年 8 月 26 日收到

本文用位错连续分布方法表出了刃位错所产生的应变和应力场，得到了刃位错芯区内、外的应力场．位错芯区的无限小位错分布用缺陷规范场表出，并在一定规范条件下求解了位错规范场．在刃位错芯区外，其应力场与 Volterra 位错的应力场完全一样．而在芯区内，当 r 趋于零，刃位错的应力场为有限，消除了应力的奇异性．

PACC: 6170G; 4620; 1110

一、引　言

近年来，近代物理的一些结果直接应用于晶体缺陷理论，给进一步深入地研究晶体缺陷提供了有力的手段．人们在研究晶体缺陷规范场方面已进行了许多工作[1-4]．缺陷规范场理论的框架已基本建立，但如何应用这一理论处理具体的物理问题仍是一个复杂的工作．

正确决定位错芯区的应力对于讨论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[5-7]．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．

高飞和张宏图[8]用晶体缺陷规范场讨论了螺位错芯区问题．在螺位错芯区外，其应力场与 Volterra 螺位错的应力场完全一样．在芯区内，应力场在 $r=0$ 处为有限，消除了芯区应力的奇异性．得到了芯区内应力场的解析表达式．

本文用位错规范场表出了位错芯区的位错分布，其芯区的位错分布是沿径向扩展开的二维分布．然后用 Homotopy 算符导出了用规范场表示的应力和应变关系．结果表明位错芯区的能量比 PN 模型的芯区能量要低．

二、基 本 方 程

在本文中，我们考虑位错是平行于 z 轴，仅存在的位错密度是 α^{i3}，下面所有量都只是 X, Y 的函数．

---

* 国家自然科学基金资助的课题．

假定参照构形 B_3 是 3 维的欧几里德空间,其笛卡儿坐标是 $\{X^1, X^2, X^3\}$, 即时构形 E_3,被取为 3 维欧几里德空间,其坐标为 $\{x^1, x^2, x^3\}$, 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[9]

$$D^i = \alpha^{i3} dX \wedge dY. \tag{1}$$

其中

$$\alpha^{i3} = e^{3BC}(\partial_B \phi^i_C - \partial_C \phi^i_B) \tag{2}$$

是位错密度[3].

因为位错的二次形式满足条件 $dD^i = 0$,则变形的一次形式为

$$dB^i = D^i. \tag{3}$$

上面的外微分方程能够用 Homotopy 算符 H[10] 进行积分,有

$$B^i = \partial_j \chi^i dX^i + HD^i. \tag{4}$$

其中

$$\chi^i = \delta^i_A X^A + u^i(X^B) \tag{5}$$

是线弹性的形变分量, $u^i(X^B)$ 是线弹性位移函数, HD^i 是形变的滞弹性部分,

$$HD^i = \int_0^1 \lambda[(X^A - X^A_0)\partial_A] \rfloor \alpha^{i3}[X^A_0 + \lambda(X^A - X^A_0)] d\lambda. \tag{6}$$

其中 $\rfloor$ 是内积算符. 如果线性 Homotopy 算符的中心取作原点, $X_0 = Y_0 = Z_0 = 0$. 将(2)式代入(6)式,其 HD^i 为

$$HD^i = h_1\langle e^{3BC}(\partial_B \phi^i_C - \partial_C \phi^i_B)\rangle \langle XdY - YdX\rangle. \tag{7}$$

其中 h_1 是线性积分算符

$$h_1\langle \alpha^{i3}\rangle = \int_0^1 e^{3BC}[\partial_B \phi^i_C(\lambda X, \lambda Y) - \partial_C \phi^i_B(\lambda X, \lambda Y)]\lambda d\lambda. \tag{8}$$

在极坐标系中 $(r^2 = X^2 + Y^2)$,线性积分算符为

$$h_1\langle \alpha^{i3}\rangle = \int_0^r e^{3BC}[\partial_B \phi^i_C(\rho\cos\theta, \rho\sin\theta) - \partial_C \phi^i_B(\rho\cos\theta, \rho\sin\theta)] \times \rho d\rho r^{-2}. \tag{9}$$

其中 $\rho = \lambda r$.

若我们采用一般的标准记号,把上指标写成下指标,并注意到(4)和(7)式, 则应变张量为

$$E_{ij} = e'_{ij} + \bar{e}_{ij}. \tag{10}$$

其中

$$e'_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j) \tag{11}$$

是线性工程应变张量的分量.

$$\bar{e}_{ij} = \frac{1}{2r^2}\begin{bmatrix} -2C^1Y & C^1X - C^2Y & -C^3Y \\ C^1X - C^2Y & 2C^2X & C^3X \\ -C^3Y & C^3X & 0 \end{bmatrix} \tag{12}$$

是滞弹性应变张量. 其中

$$C^i = \int_0^r e^{3BC}[\partial_B \phi^i_C - \partial_C \phi^i_B]\rho d\rho. \tag{13}$$

假定材料是各向同性的，则应用胡克定理，应力张量为

$$\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} + \bar{\sigma}_{ij}. \tag{14}$$

其中

$$\sigma'_{ij} = \lambda e'_{kk}\delta_{ij} + 2\mu e'_{ij} \tag{15}$$

是相应应变张量的弹性部分所引起的应力张量的弹性部分.

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{r^2}\begin{bmatrix} \lambda(C^2X - C^1Y) - 2\mu C^1Y & \mu(C^1X - C^2Y) & -\mu C^3Y \\ \mu(C^1X - C^2Y) & \lambda(C^2X - C^1Y) + 2\mu C^2X & \mu C^3X \\ -\mu C^3Y & \mu C^3X & \lambda(C^1X - C^2Y) \end{bmatrix} \tag{16}$$

是滞弹性应力张量．其中 λ 和 μ 是通常的 Lanie 常数．

应力必须满足平衡方程

$$\partial_j\sigma_{ij} = 0. \tag{17}$$

对于刃位错，可以取 $C^2 = C^3 = 0$，$C^1 = C(r)$．将(14)式代入(17)式，并注意到(16)式，可以得到

$$\partial_j\sigma'_{ji} = -f_i. \tag{18}$$

其中有效体力分量为

$$f_1 = \partial_X[-(\lambda + 2\mu)r^{-2}C(r)Y] + \partial_Y[\mu r^{-2}C(r)X], \tag{19}$$

$$f_2 = \partial_X[\mu r^{-2}C(r)X] + \partial_Y[-\lambda r^{-2}C(r)Y]. \tag{20}$$

对于二维问题，若已知 ϕ^i_2 和 ϕ^i_1，从(16)式可得出应力 $\bar{\sigma}_{ij}$，然后求出有效体力分量 f_i，则相应的弹性问题在一定边界条件下就可以求出.

三、缺陷规范场

在讨论晶体缺陷规范场之前，我们首先求解方程(18)．假定材料是无限大的均匀材料，且在无穷远处的边界上没有外力作用．将(19)和(20)式代入(18)式，求解整理得

$$\sigma'_{11} = \left(\frac{1}{2}\frac{\lambda}{1-\nu} + \mu\right)\frac{C(r)Y}{r^2} - \frac{\mu}{1-\nu}\left[\frac{2YX^2}{r^4}C(r) + \frac{Y^3}{r^3}\partial_r C(r)\right], \tag{21}$$

$$\sigma'_{12} = \frac{\mu\nu}{1-\nu}\frac{C(r)X}{r^2} - \frac{\mu}{1-\nu}\left[\frac{2XY^2}{r^4}C(r) - \frac{XY^2}{r^3}\partial_r C(r)\right], \tag{22}$$

$$\sigma'_{22} = \left(\lambda - \frac{\mu}{1-\nu}\right)\frac{C(r)Y}{r^2} + \frac{\mu}{1-\nu}\left[\frac{2YX^2}{r^4}C(r) - \frac{X^2Y}{r^3}\partial_r C(r)\right]. \tag{23}$$

可见在位错芯区由于存在有效体力，弹性应力再不为零，则相应的弹性位移也同样不为零．但位错芯区的有效体力是由于芯区的位错连续分布所引起的，所以下面讨论缺陷规范场时，可以只考虑纯位错规范场的情况.

对于刃位错，$C(r)$ 为

$$C(r) = 2\int_0^r(\partial_X\phi^1_2 - \partial_Y\phi^1_1)\rho d\rho. \tag{24}$$

此式意指 $(\partial_X\phi_2^1-\partial_Y\phi_1^1)$ 仅是 ρ 的函数.

在线性情况下,位错规范场 ϕ_E^i 必需满足的静态规范场方程为[4,10]

$$(\nabla^2-k^2)\phi_E^m-k^2\left(\delta_{Ej}\delta^{Rm}+\frac{\lambda}{\mu}\delta_E^m\delta_j^R\right)-\partial^R\partial_E\phi_R^m=0 \tag{25}$$

其中 $k^2=\mu/2s_1$, s_1 是耦合常数.

若我们强加一规范条件 $\partial^R\phi_R^i=0$,方程(25)成为

$$(\nabla^2-k^2)\phi_E^m=k^2\left(\delta_{ij}\delta^{Rm}+\frac{\lambda}{\mu}\delta_E^m\delta_j^R\right)\phi_R^i. \tag{26}$$

从方程(24),我们知道对于刃位错仅存在的规范场是 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1. 本文中若我们考虑一种对称情况,即 $\phi_1^2=\phi_2^1$,则(26)式变为

$$\nabla^2\phi_2^1-2k^2\phi_2^1=0, \tag{27}$$

$$\nabla^2\phi_1^1-\left(2k^2+\frac{\lambda}{\mu}\right)\phi_1^1=0. \tag{28}$$

因为 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 满足相似的方程,则可以讨论下面的方程:

$$\nabla^2 f-b^2 f=0. \tag{29}$$

对于方程(27), $b^2=2k^2$, 而对于方程(28),

$$b^2=2k^2+\frac{\lambda}{\mu}.$$

若用极坐标,则有

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

在自然周期边界条件下 $[f(\theta+2\pi)=f(\theta)]$,对于 r 趋于零 $f(r,\theta)$ 有界的通解为

$$f=\sum_{m=0}^{\infty}(A_m\cos m\theta+B_m\sin m\theta)I_m(b\rho). \tag{31}$$

其中 $I_m(x)$ 是 m 阶虚宗量贝塞耳函数.

相应的 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 的解为

$$\phi_1^1=\sum_{m=0}^{\infty}(A_{1m}\cos m\theta+B_{1m}\sin m\theta)I_m(\alpha\rho), \tag{32}$$

$$\phi_2^1=\sum_{m=0}^{\infty}(A_{2m}\cos m\theta+B_{2m}\sin m\theta)I_m(\sqrt{2}k\rho). \tag{33}$$

其中

$$\alpha=\sqrt{2}k(1+\beta)^{1/2},\quad \beta=\lambda s_1. \tag{34}$$

根据文献[11]中的公式 6.545 和 6.406-3,可以证明

$$I_m(\alpha\rho)=(1+\beta)^{m/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\beta\sqrt{2}k\rho}{2}\right)^n I_{n+m}(\sqrt{2}k\rho). \tag{35}$$

对于刃位错,在位错芯区外没有位错连续分布,位错连续分布仅存在芯区内, 则可以假定 $\sqrt{2}k\rho\ll 1$. 在一级近似下,(35)式可以写成

$$I_m(\alpha\rho) \doteq (1+\beta)^{m/2} I_m(\sqrt{2}k\rho). \tag{36}$$

则

$$\phi_1^1 = \sum_{m=0}^{\infty}(1+\beta)^{m/2}(A_{1m}\cos m\theta + B_{1m}\sin m\theta)\, I_m(\sqrt{2}k\rho). \tag{37}$$

因为 $(\partial_X\phi_2^1 - \partial_Y\phi_1^1)$ 仅是 ρ 的函数，则必有

$$A_{21} = -B_{11}(1+\beta)^{\frac{1}{2}}, \quad B_{21} = A_{11}(1+\beta)^{\frac{1}{2}}, \tag{38}$$

其余常数为零。从(33)和(37)式，有

$$\phi_1^1 = (1+\beta)^{\frac{1}{2}}\,(A_{11}\cos\theta + B_{11}\sin\theta) I_1(\sqrt{2}k\rho), \tag{39}$$

$$\phi_2^1 = (1+\beta)^{\frac{1}{2}}(-B_{11}\cos\theta + A_{11}\sin\theta)\, I_1(\sqrt{2}k\rho). \tag{40}$$

而 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 必须满足规范条件：

$$\partial_X\phi_1^1 + \partial_Y\phi_2^1 = 0, \tag{41}$$

则有

$$A_{11} = 0. \tag{42}$$

满足条件(38)和(42)式的规范场 ϕ_1^1 和 ϕ_2^1 的解为

$$\phi_1^1 = (1+\beta)^{\frac{1}{2}} D\sin\theta I_1(\sqrt{2}k\rho), \tag{43}$$

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

其中 D 是一常数。

四、刃位错的应力场和能量

从(14)，(16)，(21)，(22)和(23)式，刃位错的应力张量非零的分量为

$$\sigma_{11} = -\frac{\mu}{1-\nu}\left[\frac{C(r)Y}{r^2}\left(1+\frac{2X^2}{r^2}\right) + \frac{Y^3}{r^3}\partial_r C(r)\right], \tag{45}$$

$$\sigma_{12} = \frac{\mu}{1-\nu}\left[\frac{C(r)X}{r^2}\left(1-\frac{2Y^2}{r^2}\right) + \frac{XY^2}{r^3}\partial_r C(r)\right], \tag{46}$$

$$\sigma_{22} = -\frac{\mu}{1-\nu}\left[\frac{C(r)Y}{r^2}\left(1-\frac{2X^2}{r^2}\right) + \frac{X^2Y}{r^3}\partial_r C(r)\right]. \tag{47}$$

对于刃位错，在位错芯区外 $(r > r_0)$，其位错连续分布的密度为零，即 $C(r) = 0$。而在位错芯区内 $(r < r_0)$，其位错密度为非零值。r_0 是位错芯区的半径。

假定 S_2 是二维空间 B_2 上的二维曲面，其曲面的边界记 ∂S_2，且 ∂S_2 包围了直刃位错线、刃位错的伯格斯矢量定义为

$$b = \int_{S_2} D^1. \tag{48}$$

因为 $D^1 = dH(D^1) + H(dD^1)$，根据 $dD^1 = 0$，则 $D^1 = dH(D^1)$。因此在 S_2 上的积分可以应用斯托克斯公式转化成 HD^1 在 ∂S_2 上的线积分，即

$$b = \oint_{\partial S_2} HD^1 \qquad (\rho > \rho_0). \tag{49}$$

将(7)式代入上式

$$b=\oint_{\partial S_1} C(r_0)\frac{1}{r^2}(XdY-YdX)=\oint_{\partial S_1} C(r_0)d\theta, \tag{50}$$

则必有

$$C(r_0)=2\int_0^{r_0}(\partial_X\phi_2^1-\partial_Y\phi_1^1)\,\rho d\rho=\frac{b}{2\pi}. \tag{51}$$

在刃位错芯区外，其刃位错所产生的应力为

$$\sigma_{11}=-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{Y}{r^2}\left(1+\frac{2X^2}{r^2}\right), \tag{52}$$

$$\sigma_{12}=\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{X}{r^2}\left(1-\frac{2Y^2}{r^2}\right), \tag{53}$$

$$\sigma_{22}=-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{Y}{r^2}\left(1-\frac{2X^2}{r^2}\right). \tag{54}$$

该应力与伯格斯矢量沿 X 方向的 Volterra 刃位错所产生的应力场完全一样[12].
将(43)和(44)式代入(50)式，得

$$D=-\frac{b}{2\pi}\frac{1}{(1+\beta)^{1/2}r_0I_1(\sqrt{2}kr_0)}. \tag{55}$$

其中 $I_1(x)$ 是 1 阶虚宗量贝塞耳函数.

在刃位错芯区内，将(43)和(44)式代入(24)式，积分得

$$C(r)=\frac{\mu b}{2\pi}\frac{rI_1(\sqrt{2}kr)}{r_0I_1(\sqrt{2}kr_0)}. \tag{56}$$

在刃位错芯区内的应力场为

$$\begin{aligned}\sigma_{11}=&-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{r_0I_1(\sqrt{2}kr_0)}\left\{\frac{Y}{r}\left(1+\frac{2X^2}{r^2}\right)I_1(\sqrt{2}kr)\right.\\&\left.+\frac{Y^3}{r^3}\partial_r[rI_1(\sqrt{2}kr)]\right\},\end{aligned} \tag{57}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{12}=&\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{r_0I_1(\sqrt{2}kr_0)}\left\{\frac{X}{r}\left(1-\frac{2Y^2}{r^2}\right)I_1(\sqrt{2}kr)\right.\\&\left.+\frac{XY^2}{r^3}\partial_r[rI_1(\sqrt{2}kr)]\right\},\end{aligned} \tag{58}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{22}=&-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{r_0I_1(\sqrt{2}kr_0)}\left\{\frac{Y}{r}\left(1-\frac{2X^2}{r^2}\right)I_1(\sqrt{2}kr)\right.\\&\left.+\frac{X^2Y}{r^3}\partial_r[rI_1(\sqrt{2}kr)]\right\}.\end{aligned} \tag{59}$$

(56),(58)和(59)式定义在位错芯区的非零的应力. 当 $r\to r_0$ 时，位错芯区的应力等于芯区外的应力. 当 $r\to 0$，其位错芯区的应力为有限值，消除了应力的奇异性. 与 Volterra 刃位错的解比较，我们的解存在每一个地方所有的应力都是有界的.

为了获得刃位错的能量，我们分别计算刃位错芯区内、外的能量. 在刃位错芯区外，在半径 r_0 和 R 的圆柱体里，每单位长度的刃位错所贮存的应变能为[13]

$$W_1 = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}. \tag{60}$$

在芯区内，每单位长度刃位错的应变能为

$$W_0 = \int_0^{r_0} r dr \int_0^{2\pi} d\theta \left[\frac{1}{2\mu} \sigma_{12}^2 + \frac{1}{2E} (\sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 - 2\nu\sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{33}^2) \right]. \tag{61}$$

对于位错芯区，可假定$\sqrt{2}k\rho \ll 1$，则有

$$I_1(\sqrt{2}kr) \doteq \frac{\sqrt{2}kr}{2\Gamma(2)}. \tag{62}$$

将(62)式代入(45)，(46)和(47)式，然后代入(61)式，积分得

$$W_0 = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} - \frac{\mu b^2}{16\pi(1-\nu)^2}. \tag{63}$$

为了比较，我们给出 PN 模型相应的表达式[13].

$$W_0' = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}.$$

上面计算表明，位错芯区能量 W_0 比 W_0' 小．因为应变能 W_1 与 PN 模型的弹性能完全一样，则我们计算的刃位错的总能量比 PN 模型刃位错的总能量低．说明在实际晶体中，刃位错的形成更加容易．

在 $r > r_0$ 的区域，本文所得的结果与连续介质弹性理论所得到结果完全一样，但是对于位错中心部分，连续介质弹性理论无法处理．为了研究位错中心，人们采用不同的原子点阵模型加以处理[12]．Peierls-Nabarro 模型是把晶体分为滑移面上边和下边两个部分，将这两个部分各看作是连续弹性体，只是这两个部分通过滑移面的相互作用是非 Hooke 型的线性关系，而是正弦关系，然后认为在滑移面上可以用连续分布的无限小位错加以描述．而在本文计算中，位错芯区是用在一平面上沿径向的无穷小位错加以描述．用这样的模型描述芯区更接近于实际情况．当然，在本文的模型中，如何考虑芯区的原子结构，如何加原子势这一项的贡献，则是更进一步的工作．

[1] A. Golebiewska, *Int. J. Eng. Sci.*, **17** (1979), 329.
[2] A. Golediewska D. G. B. Edelen, *ibid.*, **17** (1979), 335.
[3] A. Kadić D. G. B. Edelen, Lecture Notes in Physics, 174, Springer, Berline, (1983).
[4] 高飞、张宏图，兰州大学学报(自然科学版)，**24**(1988)2;41.
[5] P. Peierls, *Proc. Phys. Soc.*, **52** (1940), 54.
[6] F. R. N. Nabarro, *ibid.*, **59**(1947), 256.
[7] A. J. Foreman, M. A. Jawson and J. K. Wood, *ibid.*, **A64** (1951), 156.
[8] 高飞、张宏图，物理学报，**38**(1989)，1127.
[9] D. G. B. Edelen, *Int. J. Eng. Sci.*, **18**(1980), 1095.
[10] A. Kadić and D. G. B., Edelen, *ibid.*, **20** (1982), 433.
[11] И. M. 雷日克，И. C. 格拉德什坦，函数表与积分表，高等教育出版社，(1959).
[12] F. R. N. Nabarro, Theory of Crystal Dislocation, Clarendon Press, Oxford, (1967).
[13] J. P. Hirth and J. Lothe, Theory of Dislocation, McGraw-Hill, New York, (1968).

EDGE DISLOCATION IN CRYSTAL DEFECT GAUGE FIELD

GAO FEI

Department of Materials Science, Lanzhou University, Lanzhou, 730000

(Received 26 August 1989)

ABSTRACT

In this paper, the strain and stress field produced by an edge dislocation are expressed by means of continuous dislocation distribution. The stresses inside and outside the core of the edge dislocation are obtained. The dislocation distribution of infinitesimal strength is expressed by crystal defect gauge field, which are calculated under certain gauge condition. In side the core, the stresses are finite when r goes to zero. The singularity of stresses is removed. Finally, the energy of the edge dislocation are calculated.

PACC: 6170G; 4620; 1110