

相界上运动位错的弹性场*

杨 顺 华 王 朝 阳

北京科技大学材料物理系, 北京, 100083

1989年10月6日收到

本文推广 Eshelby 等人关于无限各向异性介质中静止直线位错的处理方法, 提出了计算两相介质中相界面上匀速运动位错弹性场的方案。本文所提出的简便方法有一般的适用性, 可直接用于研究在相界面上高速运动的相变位错的行为, 从而有助于理解位错运动在无扩散相变过程中的作用。最后对本文的方法及观察到的场中的间断面作了简短讨论。

PACC: 6170G; 6848

一、引 言

无扩散相变及孪生过程的进行, 或者说相界或孪晶界的推移, 一般归结为相应界面上相变位错或孪生位错的运动。这类运动位错的场及能量应该对相应的点阵转变起一定的影响作用。因此, 对此类位错弹性性质的研究具有基础的意义^[1,2]。

无限各向异性弹性介质中的任意静止直线位错已经有数种普遍方法处理^[3,4], 而对于两相系统中的位错则仅对有限几种情况得到过结果。我们曾对两相介质中一个与相界斜交的静止位错进行计算, 得到弹性场量的数值解^[5]。

关于运动位错的场也已有不少计算结果^[6,4], 包括离散的与分布的位错模型, 以及亚声速、跨声速及超声速诸速度区间。但是这些工作大多数仅限于无限各向同性介质中的运动直线位错, 没有见到对两相各向异性介质中位错的处理。

本文将经典的位错各向异性弹性理论加以推广, 处理一个平面相界上匀速运动的直线位错。所得到的公式和解是普遍的、形式的。取一个具体的理想的两相系统, 作为一个实例进行了数值计算; 而本文的方法是普适的。

二、模型与基本公式

我们的两相介质是两个半空间, 以一个平面联结; 两个半空间中分别充满一定取向的各向异性弹性介质, 这就是两个物相, 其间界面就是相界。一个给定 Burgers 矢量的直线位错在相界平面上作匀速运动, 计算此位错在两个半空间中产生的弹性场, 然后可以进一步计算弹性能和动能。

* 国家自然科学基金资助的课题。

为了确定起见,先取实验室坐标系 (x_1, x_2, x_3) , x_1x_3 面为相界. x_2 轴正方向的半空间为第一相 (I), 负方向的半空间为第二相 (II). 在 $t = 0$ 时刻位错位于 x_1 轴上, 位错以匀速 v 整体向 x_3 方向运动, 即 $v \parallel x_3$.

由于下面即将说明的理论公式的要求, 还需要取另一个“自然”坐标系, 就是与位错一起运动的坐标系 (x'_1, x'_2, x'_3) . 它在 $t = 0$ 时刻与 (x_1, x_2, x_3) 重合, 整体以匀速 v 向 x_3 方向运动, 即位错始终处在此自然坐标系的 x'_1 轴上. 两个坐标系之间的关系是简单的, 见图 1.

$$x'_1 = x_1, \quad x'_2 = x_2, \quad x'_3 = x_3 - vt. \quad (1)$$

匀速运动的位错是一个恒稳的情况. 如果采用了对位错相对静止的自然坐标系, 便可以将静止位错的解的形式推广于运动情况.

具体地讲, 弹性静力学中的基本方程是 Navier 方程, 即用位移表示的平衡方程

$$c_{ijkl}u_{k,li} + f_i = 0. \quad (2)$$

若不考虑体力, 则此方程等号左边第二项为零. 相应的运动方程为

$$c_{ijkl}u_{k,li} = \rho \ddot{u}_i. \quad (3)$$

匀速运动下解的形式为

$$u = u(x - vt). \quad (4)$$

如果作变换

$$R = x - vt, \quad (5)$$

则有

$$\frac{\partial}{\partial x_m} = \frac{\partial}{\partial R_m}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = -v_l \frac{\partial}{\partial R_l}. \quad (6)$$

于是方程(3)即可改写为

$$c'_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial R_i \partial R_l} = 0, \quad (7)$$

式中

$$c'_{ijkl} = c_{ijkl} - \rho v_i v_l \delta_{ik}. \quad (8)$$

方程(7)与(2)(其中 $f_i = 0$) 的形式完全一致, 因此方程(2)的解对于变换后的, 即在匀速运动坐标系中的方程(7)完全可用. 以下关于运动位错场的计算就是以此为基础.

求解方程(7)的方法是 Eshelby 方法^[7]的直接推广, 处理 $\partial_t \equiv 0$ 的准平面问题.

设方程(7)的解具有形式

$$u_k(x'_2, x'_3) = u_k(\xi') = A_k f(\xi'), \quad (9)$$

$$\xi' = x'_2 + p x'_3.$$

将(9)式代入原方程(7)后可得关于诸 A_k 的齐次代数方程

$$a_{ik} A_k = 0, \quad (10)$$

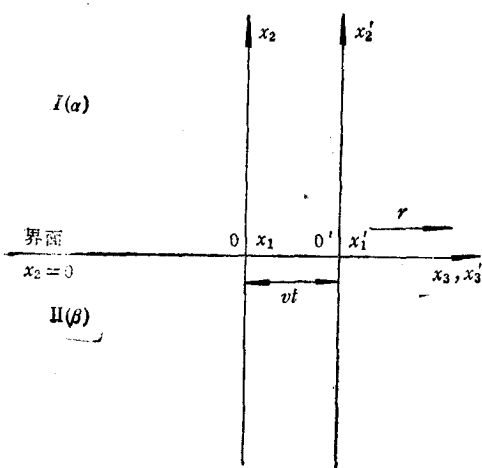


图 1 两个坐标系

$$a_{ik} = c_{i2k2} + p(c'_{i2k3} + c'_{i3k2}) + p^2 c'_{i3k3}. \quad (11)$$

方程(10)具有非零解的条件为系数行列式为零,即

$$\det |a_{ik}| = 0. \quad (12)$$

(12)式是关于 p 的一个 6 次代数方程,它应有 6 个根 $p_l, l = 1, \dots, 6$, 一般用数值法均可得解. 代入方程组(10), 求出诸 $A_k(l)$.

这样,解(9)式的一般形式为

$$u_k(x'_2, x'_3) = \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 A_k(l) f_l(\xi'_l) \right], \quad (13)$$

$$\xi'_l = x'_2 + p_l x'_3, \quad (14)$$

相应的应力分量为

$$\sigma_{ij}(x'_2, x'_3) = \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 B_{ijl} \frac{df_l(\xi'_l)}{d\xi'_l} \right], \quad (15)$$

$$B_{ijl} = (c_{ijk2} - p_l c_{ijk3}) A_k(l). \quad (16)$$

至此 $f_l(\xi'_l)$ 还是一个未知函数,它可以用如下方法确定. 根据应力在每一相区中均为单值解析函数之要求,可将 $\frac{df_l(\xi'_l)}{d\xi'_l}$ 在 (x'_2, x'_3) 坐标系中, $x'_2 x'_3$ 平面上除原点之外的环域中展为罗朗级数,积分后可得

$$f_l(\xi'_l) = \frac{D_l}{2\pi i} \ln \frac{\xi'_l}{\xi'_{0l}} + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n(l) \xi'^n_l. \quad (17)$$

(17)式中引致环行跃变的项是对数项,它是对位错位移有贡献的项,因此在解(13)式时保留此项¹⁾,即令

$$f_l(\xi'_l) = \frac{D_l}{2\pi i} \ln \frac{\xi'_l}{\xi'_{0l}} = \frac{D_l}{2\pi i} \ln \xi'_l + D_{0l}, \quad (18)$$

于是相应于位错的解为

$$u_k(x'_2, x'_3) = \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 A_k(l) \left(\frac{D_l}{2\pi i} \ln \xi'_l + D_{0l} \right) \right], \quad (19)$$

$$\sigma_{ij}(x'_2, x'_3) = \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 B_{ijl} \frac{D_l}{2\pi i} \frac{1}{\xi'_l} \right]. \quad (20)$$

以上的表示式都是对一个单相适用的. 现在处理的是以 $x_2 = 0$ 平面相连结的两个相, x_2 轴正向的半空间为相 (I), 负向的半空间为相 (II). 两相的晶体结构不同,弹性常数及密度不同,弹性波速也不同; 两者的物理常数和有关的物理量分别以上标 I, II 记之. 这样,当处理在 $x_2 = 0$ 平面上匀速运动的位错时,对于上、下半空间分别进行 (7)~(20)式的推算和计算,便可得到上、下半空间中的诸场量 $u_k^I, \sigma_{ij}^I, u_k^{II}, \sigma_{ij}^{II}$.

直至(19),(20)式,诸系数 $D_l^I, D_l^{II}, D_{0l}^I, D_{0l}^{II}$ 还是未知的. 由相界面 $x_2 = 0$ 平面上位移 u_k 和应力分量 σ_{2k} 连续的要求,可以得到如下三组方程:

1) (17)~(23)式中出现的因子 i 为虚数单位 $\sqrt{-1}$, 与张量下标 i 不同,请勿相混.

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 (A'_k(l) D'_{0l} - A''_k(l) D''_{0l}) \right] = 0, \quad (21)$$

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 (i A'_k(l) D'_l - i A''_k(l) D''_l) \right] = 0, \quad (22)$$

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 (i B'_{kl} D'_l - i B''_{kl} D''_l) \right] = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (23)$$

另外,从位错条件 $\Delta u_k = b_k$, 以及作用在位错芯的壁上的净力为零的要求, 可得如下两组方程:

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 (A'_k(l) D'_l + A''_k(l) D''_l) \right] = b_k, \quad (24)$$

$$\operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^6 (B'_{kl} D'_l + B''_{kl} D''_l) \right] = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (25)$$

方程组(22)–(25)确定诸 D'_l, D''_l . 至于诸 D'_{0l}, D''_{0l} 只有一组方程(21)限定, 不失一般性可以取它们全为零. 由此解出诸 D , 以及上面求出的诸量 A 和 B , 代入(19), (20)式, 即可求出两个相区中由上述匀速运动位错产生的位移场和应力场.

三、具体的数值的例

作为一个具体的数值的例, 借以确认上述求解过程各个步骤的实现, 考虑 α/β 黄铜共存的两相. 即取定相区 (I) 为 α 黄铜, 结构为面心立方; 相区 (II) 为 β 黄铜, 结构为体心立方. 其取向关系为经典的 Nishiyama-Wassermann 关系

$$\begin{aligned} [111]_{\alpha} // [110]_{\beta} &= \hat{x}_1, \\ [\bar{1}10]_{\alpha} // [001]_{\beta} &= \hat{x}_2, \\ [11\bar{2}]_{\alpha} // [\bar{1}10]_{\beta} &= \hat{x}_3. \end{aligned} \quad (26)$$

两个相的弹性常数在标准(晶体立方)坐标系中的数值及点阵常数、质量密度均在表 1 中列出. 黄铜中的纵波声速与切变波声速也列于表 1 中.

表 1

	c_{11}	c_{12}	c_{44}	v_l	v_t	v_c	点阵常数 $a(\text{\AA})$	质量密度 $\rho(\text{gm/cc})$
	$(10^{11} \text{ dyne/cm}^2)$			(m/s)				
α 黄铜 (fcc) 64at%Cu	14.75	11.15	7.194	4700	2110	3480	3.6925	8.6
β 黄铜 (bcc) 55at%Cu	12.04	10.37	7.46				2.9440	

位错处于界面, 即 $x_2 = 0$ 平面上, 与 x'_1 轴重合. 取位错的 Burgers 矢量

$$\mathbf{b} = \frac{a_{\alpha}}{2} [110]_{\alpha}.$$

位错的自然坐标系相对于实验室坐标系以速度 $\mathbf{v} = v_3 \hat{x}_3$ 匀速运动. 在计算中取 $v_3 =$

1000m/s, 约为切变波速 v_t 的 1/2, 此时有效弹性系数(8)式等号右端第二项 ρv_i^2 比第一项小一个数量级左右, 影响适度。

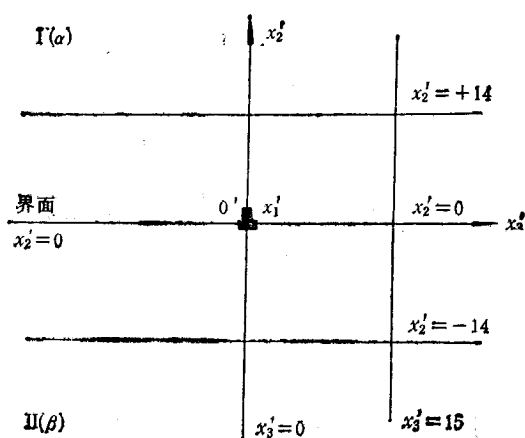


图2 运动坐标系和场点

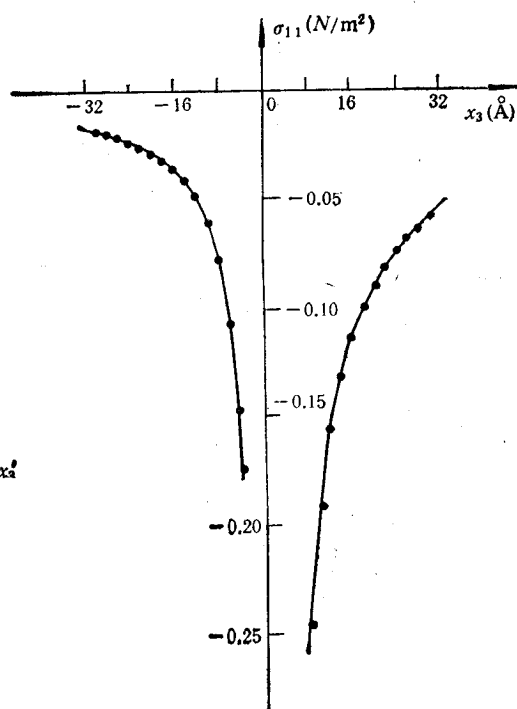


图3 $x_2' = 0$

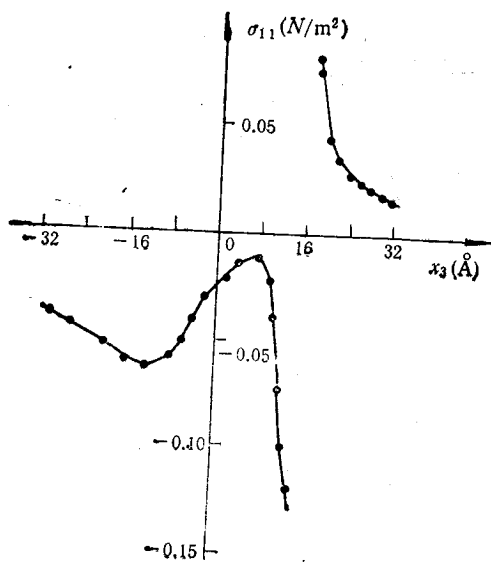


图4 $x_2' = 14 \text{ Å}$

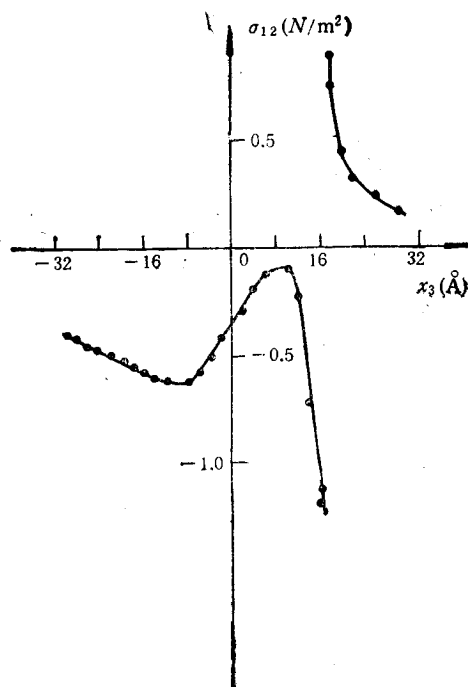
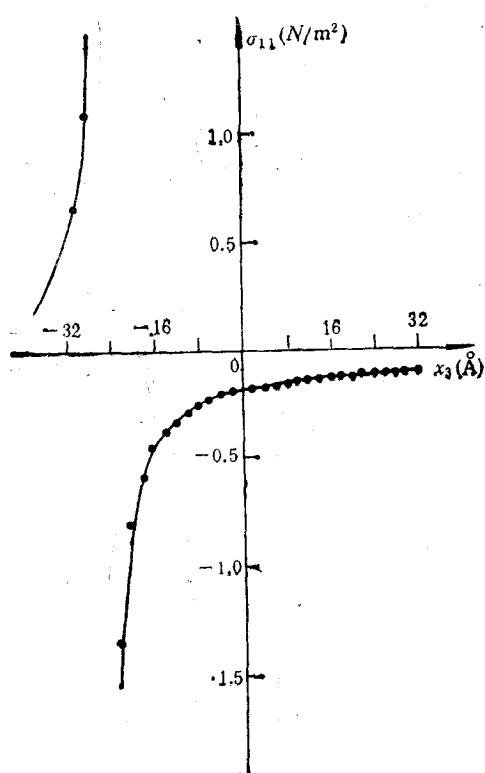
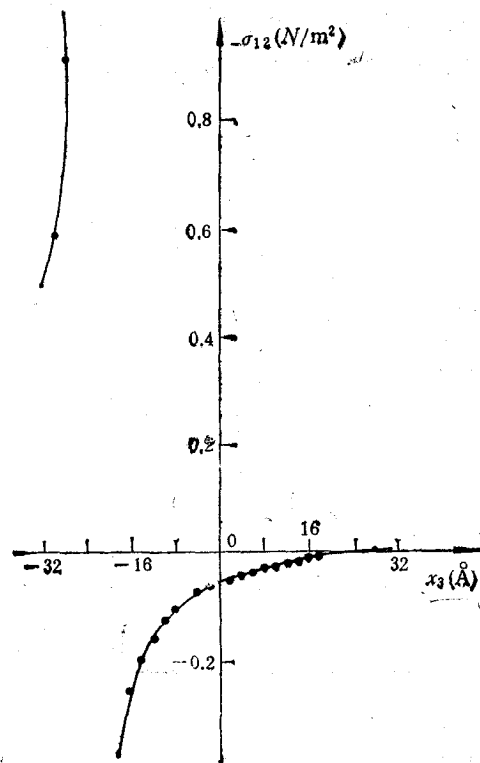
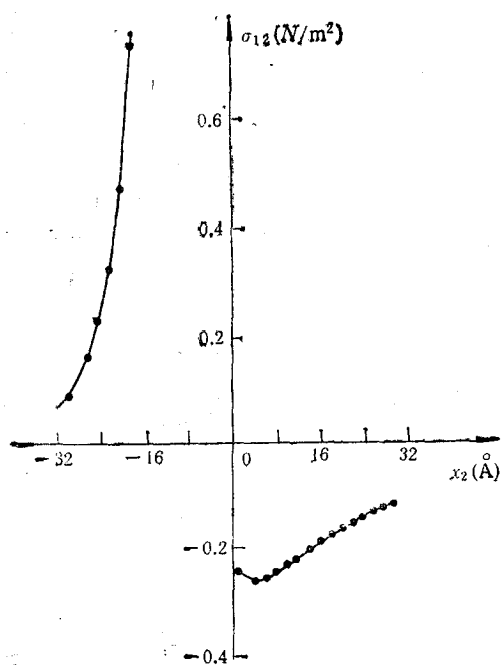
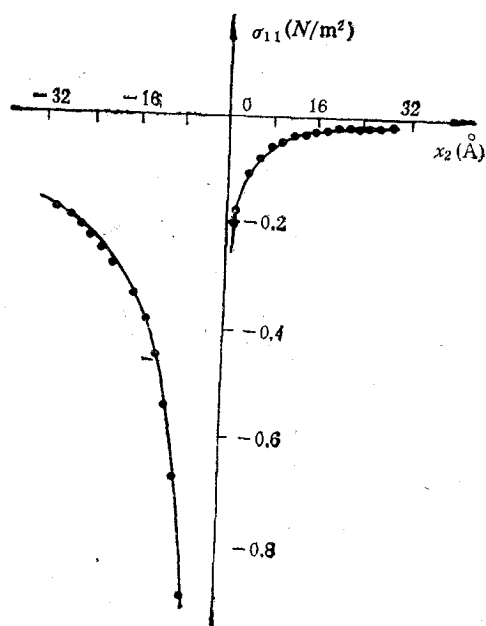


图5 $x_2' = 14 \text{ Å}$

图 6 $x_2 = -14 \text{\AA}$ 图 7 $x_2 = -14 \text{\AA}$ 图 8 $x_3 = 15 \text{\AA}$ 图 9 $x_3 = 0$

用牛顿迭代法解两个相中关于 p 的 6 次方程(12)。由于使用的是有效弹性常数(8)式,运动的效果即含于其中,故此与静态的情况不一样,可以放松 p 的根俱为共轭复数的要求。关于这一点, Bacon 等人曾有简短的间接讨论^[3]。

计算了垂直于位错直线的 $x'_1x'_3$ 平面上 $-29 \text{ \AA} \leq x'_1 \leq 29 \text{ \AA}$, $-30 \text{ \AA} \leq x'_3 \leq 30 \text{ \AA}$ 范围内的 σ'_{11} , σ'_{12} , σ''_{11} , σ''_{12} 的数值,网点间隔为 $2 \text{ \AA}$ 。

作为结果示例,用图表示几条典型直线上的应力分量,见图 2 和图 3 至图 10。

用这里的方法作精度更高的计算,或算出其他应力分量都是直接易行的。

由我们结果的图上可以看出,在以此速度运动的位错的应力场中出现一个间断面,反映了这种场在某种条件下可能出现有如冲击波的性质,在此间断面上普通的线性弹性理论可能不适用。关于这种性质及出现的条件需要更进一步较全面的研究和计算。由图可以看出在 α , β 两相中场间断点的位置有对应关系。

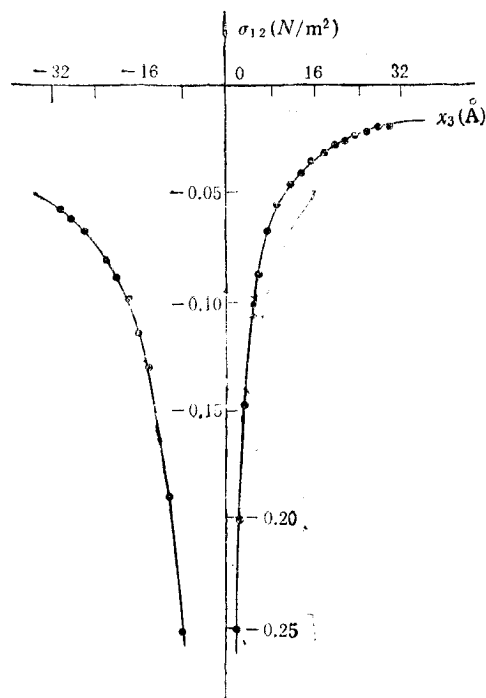


图 10 $x_3 = 0$

四、讨 论

Teutonico^[8] 曾研究过无限各向异性介质中匀速运动直线位错的问题,他的公式化法与本文的方法是原则上等价的,但不尽相同。他在解一个 6 次代数方程以后再求解 18 个参数以定位移,没有明确地定义和引用相当于本文的 D 这一组参数,其结果是使得使用边界条件时自由的程度略低;所以对两相介质问题而言,本文的公式化方法似较好。

本文的处理,和 Teutonico 的工作一样,具有比较简化的特征。即是较简单地应用伽利略式的变换(1)式,得到运动坐标系中的基本方程(7)与静止情况下的 Navier 方程(2)形式上的一致。我们还没有细致地去分析各向异性介质中的弹性波传播问题,从而象各向同性情况中那样确定几个特征速度和速度区间,关于各向异性的情况, Barnett 好象着手进行了一些考虑¹⁾,但至今未见发表。我们也愿意留待下一步的工作。取位错速度为各向同性切变波速 V_s 之半并没有将 V_s 作为一个极限速度看待,而只是从数值量级上说希望这个取法是适度的,能够看出位错运动对所产生的场给出的效果。

1) 私人通信。

我们这样初步的工作,还没有能对所见到的弹性场中的“间断面”作出充分的解释。在各向同性的情况下,位错作超声速运动时,其弹性场中会出现如冲击波前传播的现象,实际上就是间断面。

本工作着眼于探讨各向异性两相系统中运动位错弹性场问题的简捷求解方法,并不是研究某个真实系统中相变位错的行为。因此主要是基本方程的建立,边界条件的表达,以及求解过程各个步骤的确认。计算所采用的系统只是作为一个数值的例来说明上述求解过程的实现。因此所取两相晶体结构和取向关系,几何配置等都比较简单,所考虑的位错也是一个比较理想化的普通界面位错,而并不是此系统中的真实相变位错。本文的模型与计算方法对于任意两相介质,只要其晶体结构,物理常数,相对取向及界面取向已知,则均可应用,故具有一定的普适性。进一步处理探讨接近于现实的相变位错的行为,将是我们下面工作的目标。

工作中曾与马如璋教授进行有益的讨论,特此致谢。

- [1] J. W. Christian and A. G. Crocker, in “Dislocations in Solids”, F. R. N. Nabarro ed., North-Holland Publishing Co., (1980), Vol. 3, Chap. 11.
- [2] 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.
- [3] D. J. Bacon *et al.*, *Progr. in Mat. Sci.*, **23**(1971), 51.
- [4] 杨顺华,晶体位错理论基础,第一卷,科学出版社,(1988).
- [5] 杨顺华、胡小锋、马如璋,物理学报,**38**(1989),1483.
- [6] J. Weertman and J. R. Weertman, in “Dislocations in Solids”, F. R. N. Nabarro ed., North-Holland Publishing Co., (1980), Vol. 3, Chap. 8.
- [7] J. D. Eshelby *et al.*, *Acta Met.*, **1**(1953), 251.
- [8] L. J. Teutonico, *Phys. Rev.*, **124**(1961), 1939; *ibid.*, **127** (1962), 413; *Acta Met.*, **11**(1963), 1233.

ELASTIC FIELD OF A DISLOCATION UNIFORMLY MOVING ON THE PHASE BOUNDARY

YANG SHUN-HUA WANG CHAO-YANG

Department of Materials Physics, Beijing University of Science and Technology, Beijing, 100083

(Received 6 October 1989)

ABSTRACT

We extended the method of Eshelby *et al.* for treating a static straight dislocation in infinite anisotropic medium, to compute the elastic field of a dislocation uniformly moving on the phase boundary of a two-phase medium. The simple theory proposed in this paper is applicable in general, and can be employed directly to investigate the behavior of a transformation dislocation in high speed motion on phase boundary, and therefore be helpful in understanding the role played by the motion of transformation dislocation in diffusionless phase transformation. Finally, the method used in this work and the discontinuity appeared in the computed field are discussed in brief.

PACC: 6170G; 6848