

晶体缺陷规范场方法处理运动螺型位错*

高 飞

杨 颢 华

兰州大学材料科学系, 兰州, 730001 北京科技大学材料物理系, 北京, 100083

1989年7月10日收到

本文用晶体缺陷规范场方法分析了运动螺型位错的性质, 在一定规范条件下求解了螺型位错的动力学方程, 得到了匀速运动螺型位错的应力场. 在 $K = \mu/\epsilon$ (ϵ 为耦合常数) 趋于零的情况下, 其结果与匀速运动的 Volterra 螺型位错的应力场形式上是一样的, 但螺型位错运动的极限速度是 $\sqrt{2}c$. 在螺型位错速度为零的情况下, 其应力场与 Volterra 螺型位错的应力场完全一样. 最后对所得结果进行了讨论.

PACC: 6170G; 1110

一、引 言

近几年, Kadić 和 Edelen^[1,2] 提出了晶体缺陷规范场理论, 并运用这一理论处理许多物理问题, 得到了一些结果^[2]. Lagoudas^[3] 用缺陷规范场讨论了材料中存在位错时的平面谐波问题, 其耦合常数可以用色散关系与实验比较来确定. 高飞等人^[4,5] 用缺陷规范场方法导出了螺型位错和刃型位错芯区的应力场, 其位错芯区可以用沿径向分布的无穷小位错来描述, 从一个方面解决了位错芯区的应力和能量发散问题.

本文用晶体缺陷规范场方法分析了运动螺型位错的性质, 得到了匀速运动螺型位错应力场的解析表达式. 当耦合常数非常大时, 其应力场与运动的 Volterra 螺型位错的应力场形式上是一样的. 而当螺型位错的运动速度为零时, 应力场与经典弹性理论中静止螺型位错的应力场完全一样. 得到了位错运动的极限速度为 $\sqrt{2}c$ ($c = \sqrt{\mu/\rho_0}$ 为介质中横声波速度). 而这一结论是由于缺陷规范场中新的本构关系以及位错动力学方程所决定的.

二、动力学方程及其性质

在各向同性介质里, 且没有旋错存在的情况下, 线性缺陷规范理论的位错动力学方程为^[1]

$$\nabla^2 \phi_E^m - \partial^4 \partial_E \phi_E^m - \frac{1}{y} \partial_4 \partial_4 \phi_E^m + \frac{1}{y} \partial_4 \partial_E \phi_4^m = \frac{1}{2s_1} \phi_E^m. \quad (1)$$

* 国家自然科学基金资助的课题.

$$\delta_{ij}(\nabla^2 \phi_i^j - \partial^A \partial_A \phi_i^j) = \frac{y}{2s_1} P_i, \quad (2)$$

$$\partial_i P_i - \partial_A \sigma_i^A = 0 \quad (3)$$

其中 ϕ_i^j 为位错的规范场, σ_i^A 和 P_i 分别为应力张量和动量, s_1, y 为缺陷规范场中的耦合常数(材料常数), 它们可以通过色散关系与实验进行比较加以确定^[6]. 其中在线性缺陷规范理论中的本构关系为

$$\sigma_i^A = \lambda \delta_i^A \delta_j^R (\partial_R u^j + \phi_k^j) + \mu (\delta_i^A \delta_j^R + \delta_{ij} \delta^{AR}) \times (\partial_R u^j + \phi_k^j). \quad (4)$$

$$P_i = \rho_0 \delta_{ij} (\partial_A u^j + \phi_i^j). \quad (5)$$

其中 ρ_0 为质量密度, λ, μ 为弹性常数.

在本文中, 我们考虑纯位错态的情况, 则部分弹性位移 $u^i(x^A, T)$ 为零. 将(4)和(5)式代入(1), (2)和(3)式, 得

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{y} \partial_A \partial_A \right) \phi_i^j - \left(\partial^A \partial_E \phi_A^j - \frac{1}{y} \partial_i \partial_E \phi_i^j \right) = \frac{\mu}{2s_1} \Sigma_E^j, \quad (6)$$

$$(\nabla^2 \phi_i^j - \partial^A \partial_A \phi_i^j) = \frac{\mu y}{2s_1 c^2} \phi_i^j, \quad (7)$$

$$\frac{1}{c^2} \partial_A \phi_i^j = \partial^E \Sigma_E^j, \quad (8)$$

$$\Sigma_E^j = \phi_E^j + L(\delta_i^j \delta_k^R \phi_k^R + \delta_{ij} \delta^{mR} \phi_k^R). \quad (9)$$

其中 $L = \lambda/\mu$, $c = (\mu/\rho_0)^{1/2}$ 为介质中的横声波速度.

相应的应力张量为

$$\sigma_E^j = \mu \Sigma_E^j. \quad (10)$$

假定 e_1, e_2, e_3 为参照构型中笛卡尔坐标系的单位向量, 则向量 ϕ^i 和 Σ^i 定义为

$$\phi^i = \phi_A^i e_A, \quad \Sigma^i = \Sigma_A^i e_A, \quad (11)$$

将方程(8)代入方程(6)和(7), 则向量 ϕ^i 和 ϕ_i^j 所满足的方程为

$$\left(\nabla \wedge \nabla \wedge \phi^m - \frac{1}{y} \partial_i \partial_i \phi^m \right) + \frac{c^2}{y} \nabla (\nabla \cdot \Sigma^m) = \frac{\mu}{2s_1} \Sigma^m, \quad (12)$$

$$\left(\nabla \cdot \nabla - \frac{1}{y} \partial_i \partial_i \right) \phi_i^j = \frac{\mu y}{2s_1 c^2} \phi_i^j. \quad (13)$$

上面方程为位错规范场所满足的动力学方程. 从(9)式的定义知道, Σ_E^j 仅为 ϕ_E^j 的函数. 这样方程(12)仅为与 ϕ_E^j 有关的动力学方程, 而方程(13)仅为与 ϕ_i^j 有关的方程, 则只要分别求解方程(12)和(13)就可以确定 ϕ_E^j 和 ϕ_i^j .

到现在为止, 我们仍没有考虑规范条件, 因此可以试加一规范条件

$$\phi_1^1 = \phi_1^2, \quad \phi_1^2 = \phi_1^3, \quad \phi_2^3 = \phi_2^1. \quad (14)$$

其物理意义是我们假定了螺型位错的场具有轴对称. 这与经典情况是完全对应的.

若将这一规范条件应用于表达式(9), 即可得到

$$\Sigma_E^j = L(\delta_i^j \phi_A^i) \delta_E^j + 2\phi_E^j. \quad (15)$$

因此有

$$2\phi_E^j = \Sigma_E^j - \frac{L}{3L+2} (\delta_i^j \Sigma_A^i) \delta_E^j. \quad (16)$$

引入参量

$$a = \frac{L}{3L + 2}, \quad (17)$$

得

$$2\phi_E^m = \Sigma_E^m - a(\delta_i^i \Sigma_A^i) \delta_E^m. \quad (18)$$

三、运动螺型位错

在本文中,我们考虑伯格矢量平行于 z 轴的一直线螺型位错,故此问题仅是一个二维问题。下面所有的量仅是 x, y 以及时间 t 的函数。对于螺型位错,仅存在的规范场为 ϕ_1^i, ϕ_2^i 和 ϕ_3^i 。从方程(18)可以得到

$$2\phi_E^m = \Sigma_E^m. \quad (19)$$

从规范条件知道 ϕ_1^i 和 ϕ_3^i, ϕ_2^i 和 ϕ_3^i 必需满足同样的动力学方程。分析方程(18),可见必有

$$y = 2c^2. \quad (20)$$

而位错动力学方程变为

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{2c^2} \partial_i \partial_i \right) \phi^m = \frac{\mu}{2s_1} \Sigma^m, \quad (21)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{2c^2} \partial_i \partial_i \right) \phi_i^m = \frac{\mu}{s_1} \phi_i^m. \quad (22)$$

从方程(11),我们知道 Σ_E^m 与应力张量 ϕ_E^m 仅差一弹性常数 μ 。根据经典弹性理论,我们同样可以引入螺型位错的位移场 f ,则 f 与 Σ 的关系为

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \partial_x \\ 0 & 0 & \partial_y \\ \partial_x & \partial_y & 0 \end{pmatrix} f(x, y). \quad (23)$$

将表达式(23)代入方程(21),经过简单计算可以得到

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{2c^2} \partial_i \partial_i \right) f = \frac{\mu}{s_1} f. \quad (24)$$

考虑一个方向平行于 z 轴的螺型位错,它在 x 方向作匀速运动,其速度为 $v = v\mathbf{i}$ 。

引入对位错相对静止的坐标系 (x', y', z') , 而参考坐标系为 (x, y, z) 。令原点 o, o' 在 $t = 0$ 时重合, o' 沿 x 轴以速度 v 向 x 轴正向作匀速运动。作下面的变数变换:

$$\begin{aligned} x' &= (x - vt)/\beta, \quad y' = y, \quad z' = z, \\ t' &= (t - vx/c_i^2)/\beta, \quad \beta = (1 - v^2/c_i^2)^{1/2} \end{aligned} \quad (25)$$

其中 $c_i^2 = 2c^2$ 。

经过变换后,方程(24)的形式依然是

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y'^2} - \frac{1}{c_i^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t'^2} = \frac{\mu}{s_1} f. \quad (26)$$

按照定义,在匀速运动位错的情况下,在上述运动坐标系中观察位错周围的位移场应不随时间变化,即方程(25)的左边第三项为零,于是 f 应满足

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y'^2} - \frac{\mu}{s_1} f = 0. \quad (27)$$

若用极坐标系,则有

$$\frac{1}{\rho'} \frac{\partial}{\partial \rho'} \left(\rho' \frac{\partial f}{\partial \rho'} \right) + \frac{1}{\rho'^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta'^2} - \frac{\mu}{s_1} f = 0. \quad (28)$$

分离变数 $f = R(\rho')\Phi(\theta')$, 则(28)式可以分解为下面两个方程:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\theta'^2} + \lambda \Phi = 0 \quad (29)$$

$$\rho'^2 \frac{d^2 R}{d\rho'^2} + \rho' \frac{dR}{d\rho'} - \left(\frac{\mu}{s_1} \rho'^2 + \lambda \right) R = 0. \quad (30)$$

因为位错的位移场 f 在 (ρ', θ') 平面上为一多值函数, 故必有 $\lambda = 0$. 从方程(30)知道 R 满足的方程是贝塞耳函数类型的方程. 若要求 f 在无限远 $(\rho' \rightarrow \infty)$ 处为有限, 且当 $s_1 \rightarrow \infty$ 时保证本文所得的结果返回到经典弹性位错的结果, 则必有 $s_1 < 0$. 令 $s_1 = -s$, $K^2 = \frac{\mu}{s}$, 则方程(29)和(30)变为

$$\frac{d^2 \Phi}{d\theta'^2} = 0, \quad (31)$$

$$\rho'^2 \frac{d^2 R}{d\rho'^2} + \rho' \frac{dR}{d\rho'} + K^2 \rho'^2 R = 0, \quad (32)$$

方程(31)的解为

$$\Phi = A\theta'. \quad (33)$$

对于 $\rho' \rightarrow \infty$, 方程(32)有解, 其解为

$$R = B J_0(\sqrt{K} \rho'). \quad (34)$$

其中 J_0 为零阶贝塞耳函数. 将 Φ 和 R 代入 f , 则方程(27)的解为

$$f = D \tan^{-1} \frac{y'}{x'} J_0(\sqrt{K} \sqrt{x'^2 + y'^2}). \quad (35)$$

其中 D 为常数.

将(25)式代入上式, 最后 f 为

$$f = D \tan^{-1} \frac{\beta y}{x - vt} J_0 \left(\frac{\sqrt{K}}{\beta} \sqrt{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2} \right). \quad (36)$$

四、螺型位错的应力场

上面从位错的动力学方程导出了运动螺型位错的位移场, 下面我们首先导出运动螺型位错的应力场, 然后对所得的结果进行简短讨论.

将(36)式代入(23)式, 立即得到

$$\Sigma = 2\phi = D \frac{\beta J_0}{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -y \\ 0 & 0 & x - vt \\ -y & x - vt & 0 \end{pmatrix}$$

$$-D \frac{\sqrt{K}}{\beta} \tan^{-1} \left(\frac{\beta y}{x - vt} \right) \frac{J_1}{\sqrt{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & x - vt \\ 0 & 0 & \beta^2 y \\ x - vt & \beta^2 y & 0 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

其中 $J_0 = J_0 \left(\frac{\sqrt{K}}{\beta} \sqrt{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2} \right)$, $J_1 = J_1 \left(\frac{\sqrt{K}}{\beta} \sqrt{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2} \right)$. 相应的应力张量为

$$\sigma_E^m = \mu \Sigma_E^m. \quad (38)$$

从(37)式知道,当耦合常数 s 非常大时(即 $K \rightarrow 0$),从(37)和(38)式可以得到

$$\sigma = D \frac{\mu}{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -y \\ 0 & 0 & x - vt \\ -y & x - vt & 0 \end{pmatrix}. \quad (39)$$

若取 $D = b/2\pi$ (下面将证明),则螺型位错所产生的应力场与经典弹性理论中匀速螺型位错所产生的应力场形式上是一样的^[7].

当 $v = 0$,即位错静止的情况下,从(39)式可以得到

$$\sigma = D \frac{\mu}{x^2 + y^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -y \\ 0 & 0 & x \\ -y & x & 0 \end{pmatrix}. \quad (40)$$

从文献[8]知道,实际位错的伯格斯矢量定义为

$$b^i = \oint 2\phi^i. \quad (41)$$

迴路积分围绕直位错线,其中 ϕ^i 为位错规范场的一次形式^[9].

从(40)式知道, $\phi^1 = \phi^2 = 0$,只存在 $\phi^3 = \phi_A^3 dx^A$. 根据(41)式,应用(39)式得

$$b = \oint \frac{D}{\rho^2} (-y dx + x dy). \quad (42)$$

积分得

$$D = b/2\pi.$$

可见(40)式与经典弹性理论中静止螺位错所产生的应力场是完全一样的^[7]. 最后,匀速运动螺型位错所产生的应力场为

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{2\pi} \frac{\beta J_0}{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -y \\ 0 & 0 & x - vt \\ -y & x - vt & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad - \frac{\mu b}{2\pi} \frac{\sqrt{K}}{\beta} \tan^{-1} \left(\frac{\beta y}{x - vt} \right) \\ &\quad \times \frac{J_1}{\sqrt{(x - vt)^2 + \beta^2 y^2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & x - vt \\ 0 & 0 & \beta^2 y \\ x - vt & \beta^2 y & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (43)$$

当 $K \rightarrow 0$ 时,所得的(39)式形式上与经典弹性理论是一样的,但我们必须注意到

$\beta = (1 - v^2/c_t^2)^{1/2}$, 也就是说螺型位错运动的理论极限速度为 $v^c = c_t = \sqrt{2}c$ ($c = \sqrt{\mu/\rho_0}$ 为横声波速度), 而并不是 c . 我们知道缺陷规范场的本构关系和动力学方程与经典弹性理论的本构关系以及运动方程是完全不一样的. $v^c = \sqrt{2}c$ 正是缺陷规范场的新的本构关系以及动力学方程所要求的. 这就说明了含有缺陷的材料的本构关系不能简单地仅用经典弹性理论的本构关系来表示. 对比经典弹性理论中关于跨声速与超声速运动位错的处理和讨论^[10], 从另一角度来看, 本文中的理论极限速度也可以考虑为本文理论的某种限度. 在此限度附近或超出此限度的情况下, 对于理论的某些具体细节或形式需要作一些改动或推进. 这些问题, 以及与实验的对比, 可留待下一步工作研讨. 当 $K \rightarrow 0$, 即耦合常数 $s \rightarrow \infty$, $v = 0$ 时, 结果与经典弹性理论中螺型位错的结果完全一样. 我们知道其它缺陷对位错的作用可以通过耦合常数来体现. $s \rightarrow \infty$ 就意味着其它缺陷对位错的作用完全可以忽略, 于是所得结果与经典弹性理论的结果一样是合理的. 若考虑其它缺陷与位错的相互作用, 则应力场应由(43)式描述. 而耦合常数可以用色散关系与实验比较来确定. 这方面的工作可参阅文献[3]. 有关用缺陷规范场方法处理运动刃型位错的工作将另文报道.

- [1] A. Kadić and D. G. B. Edelen, *Int. J. Engng. Sci.*, 20(1982), 433.
- [2] A. Kadić and D. G. B. Edelen, *Lecture Notes in Physics*, 174, Springer Verlag, Berlin, (1983).
- [3] D. C. Lagoudas, *Int. J. Engng. Sci.*, 25(1987), 1323.
- [4] 高飞, 张宏图, 物理学报, 33(1989), 1127.
- [5] 高飞, 物理学报, 待发表.
- [6] D. G. B. Edelen and D. C. Lagoudas, *Int. J. Engng. Sci.*, 26(1988), 837.
- [7] 杨顺华, 晶体位错理论基础, 第一卷, 科学出版社, (1988).
- [8] D. G. B. Edelen, *Int. J. Engng. Sci.*, 20(1982), 49.
- [9] D. G. B. Edelen, *Lagrangian Mechanics of Nonconservative Nonholonomic System*, Noorhoff Leyden, (1977).
- [10] 同文献[7], 及 J. Weertman and J. R. Weertman, in "Dislocations in Solids", ed. by F. R. N. Nabarro, North-Holland, Vol. 2(1980), p. 1.

A STUDY ON MOVING SCREW DISLOCATION BY THE METHOD OF GAUGE FIELD THEORY FOR CRYSTAL DEFECTS

GAO FEI

Department of Materials Science, Lanzhou University, Lanzhou, 730001

YANG SHUN-HUA

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

(Received 10 July 1989)

ABSTRACT

In this paper, the gauge field theory of crystal defects is applied to analyse the characteristics of moving screw dislocation. The dynamic equations of screw dislocation are solved under certain gauge condition and the stress fields of uniformly moving screw dislocation are obtained. When $K = \mu/s$ (s is the coupling constant) approaches zero, the form of stress fields tends to be the same as that of uniformly moving Volterra dislocation, but the limiting velocity happens to be $\sqrt{2}c$. When the velocity of this dislocation is zero, the stress are the same as that of Volterra dislocation at rest. Finally, the results are discussed in brief.

PACC: 6170G; 1110