

几何弯结与点缺陷的弹性交互作用位场*

孙 宗 琦

中国科学院金属研究所, 沈阳 110015

1991 年 6 月 1 日收到

求得了各向同性弹性介质中直位错段的膨胀场的向量表示式。由此求出分段折线和光滑曲线组成的几何弯结与替代式溶质原子的弹性交互作用位场, 并用数值计算了 fcc 晶体中各类位错上不同宽度的几何弯结的交互作用位沿位错管道的分布。

分析了螺型位错和混合型位错上几何弯结与空位交互作用引起两种内耗的可能性。

PACC: 6170Y; 6240

一、引 言

位错弯结模型在内耗、低温塑性变形中具有重要理论价值^[1], 它甚至被称为固体中的弹性孤子^[2]。测量内耗时, 几何弯结沿位错线往复保守运动将受到可动点缺陷的滞弹性拖曳^[3-6]。作者在文献[7]中首先指出, 弯结的非线性振动当振幅超过临界振幅后, 它与点缺陷弹性交互作用能的时间平均场发生对称破缺, 由单峰变成双峰, 引起点缺陷的自组织, 并产生一种新型位错静滞后型内耗。计算机实验表明: 这种静滞后内耗与这种弹性交互作用能的细节有关。本文目的是计算各向同性弹性介质中, 位错几何弯结与球对称点缺陷的弹性交互作用位场。

二、位错段膨胀场的向量表示

图 1 中 AB 直位错段的弹性位移场为^[8]

$$\begin{aligned} u_1 &= D \left[(1 - 2\nu) \log \frac{r_A - \zeta_A}{r_B - \zeta_B} + x^2 \left(\frac{1}{r_B(r_B - \zeta_B)} - \frac{1}{r_A(r_A - \zeta_A)} \right) \right]; \\ u_2 &= D \left[\frac{y_B}{r_B(r_B - \zeta_B)} - \frac{y_B - a}{r_A(r_A - \zeta_A)} + \sin \alpha \left(\frac{1}{r_A - \zeta_A} - \frac{1}{r_B - \zeta_B} \right) \right]; \\ u_3 &= \phi_A - \phi_B + Dx \left[\frac{z_B}{r_B(r_B - \zeta_B)} - \frac{z_B - W_K}{r_A(r_A - \zeta_A)} \right] \end{aligned}$$

* 中国科学院固体物理研究所、中国科学技术大学内耗与缺陷联合开放研究实验室和中国科学院金属研究所所长基金资助的课题。

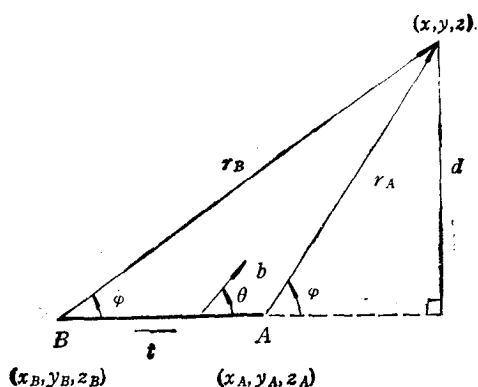


图 1 直位错段 AB, b 为 Burgers 矢量

$$+ \cos \alpha \left(\frac{1}{r_A - \zeta_A} - \frac{1}{r_B - \zeta_B} \right) \Big], \quad (1)$$

其中

$$D = \frac{b \sin \alpha}{8\pi(1-\nu)}, \quad (1a)$$

$$\zeta = y \sin \alpha + z \cos \alpha, \quad \eta = y \cos \alpha - z \sin \alpha, \quad (1b)$$

$$\phi = \frac{1}{4\pi} \left(\arctan \frac{y}{x} - \arctan \frac{\eta}{x} + \arctan \frac{xr \sin \alpha}{x^2 \cos \alpha + y\eta} \right), \quad (1c)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (1d)$$

ν 为泊松比, 下标 A 和 B 分别表示源点为 A 和 B 相应的量。由(1)式微商求得三个法应变场分量

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= Dx \left[\frac{x^2}{r^2(r-\zeta)^2} \left(2 - \frac{\zeta}{r} \right) - \frac{1+2\nu}{r(r-\zeta)} \right]_B^A; \\ \sigma_{rr} &= Dx \left[\frac{\sin^2 \alpha}{(r-\zeta)^2} - \frac{1}{r(r-\zeta)} + \frac{y}{r^2(r-\zeta)^2} (2y - \frac{\zeta y}{r} - 2r \sin \alpha) \right]_B^A; \\ \sigma_{zz} &= Dx \left[\frac{1-2\nu}{r(r-\zeta)} + \frac{z}{r^2(r-\zeta)^2} (2z - \frac{\zeta z}{r} - 2r \cos \alpha) + \frac{\cos^2 \alpha}{(r-\zeta)^2} \right]_B^A, \end{aligned} \quad (2)$$

以及膨胀场

$$\begin{aligned} \Theta &= \sigma_{xx} + \sigma_{rr} + \sigma_{zz} = \frac{b(1-2\nu) \sin \alpha x}{4\pi(1-\nu)} \frac{1}{r(r-\zeta)} \Big|_B^A \\ &= D_1 \frac{t \times b \cdot r}{r(r-r \cdot t)} \Big|_B^A = D_1 t \times b \cdot r \frac{r \cdot t}{r^2} \Big|_B^A, \end{aligned} \quad (3)$$

其中

$$D_1 = \frac{1-2\nu}{4\pi(1-\nu)}, \quad n = t \times b/b, \quad (3')$$

这里 t 表示沿 B 到 A 的单位矢量, Burgers 迴路与 t 组成右手坐标系, d 为场点到 AB 的距离。

(3) 式的正确性还可以通过对直位错线及方位错圈的应用得到旁证, 此处从略。Teodosiu^[9] 曾得到相当于(3)式的微分表示式。

三、几何弯结与球对称点缺陷的弹性交互作用势

原子半径为 r_0 , 错配度为 ϵ 的球对称点缺陷在弹性膨胀场 Θ 中的交互作用势为^[10]

$$U_1(r) = \frac{8\pi(1+\nu)\mu\epsilon r_0^3}{3(1-2\nu)} \Theta(r), \quad (4)$$

其中 μ 为切变模量。

对于图 2 所示, 由三段直线所组成的几何弯结 $CBAD$, 在相应的直角坐标系 yzx 中

$$U_1^*(r) = U_1(r)/D^* = \sin\theta \left(\frac{r_A + z_A}{r_A(x^2 + y_A^2)} + \frac{r_B - z_B}{r_B(x^2 + y_B^2)} \right) + \sin(\alpha - \theta) \frac{\cos\varphi_A - \cos\varphi_B}{d^2}, \quad (5)$$

其中

$$\cos\varphi = \frac{r \cdot t}{r} = \frac{z}{r} \quad (\text{参看图 2}), \quad (5a)$$

$$D^* = \frac{2(1+\nu)\mu\epsilon r_0^3 \times b}{3(1-\nu)}, \quad (5b)$$

其中(5)式等号右端第一项表示半无限直位错段 DA (图 2) 的贡献, 第二项表示 BC 的贡献, 第三项表示有限长位错段 AB 的贡献。由(5)式不难看出:

$$U_1(-x, y, z) = -U_1(x, y, z). \quad (5c)$$

此外, 由于 A 点与 B 点相对于 o 点中心对称, 因此对于绕 ox 轴转 180° 的对称变换有

$$\begin{aligned} T(r_A) &= r_B, \quad T(r_B) = r_A, \\ T(y_A) &= -y_B, \quad T(y_B) = -y_A, \\ T(z_A) &= -z_B, \quad T(z_B) = -z_A, \\ U_1(x, -y, -z) &= U_1(x, y, z). \end{aligned} \quad (5d)$$

根据离散弹性的计算^[11], 即使对于层错能无限大材料, 位错宽度并不等于零, 而等于图 2 中的 a 时, 位错自能最小。因此在计算图 2 所示折线弯结的交互作用场时, 令位错宽度

$$W_d = a, \quad (6a)$$

此外, 对场点 x, y 作如下限制:

$$x = -a/2, \quad (6b)$$

$$y = 0, \quad (6c)$$

它近似代表沿位错管道的交互作用能 $U_1^*(z)$ 。由于计算 $\theta \approx 0$ 的混合型位错的 $U_1^*(z)$ 在 $z \approx \pm W_d/2$ 处有两个极值, 估计与这里选用的折线弯结近似有关。因此还计算了图 3 所示的连续弯结。对于连续弯结的宽度 W_d 和场点 x, y 仍按 (6a)–(6c) 式给定。这时沿位错管道弯结与点缺陷的交互作用场 $U_1^*(z)$ 由下式给出:

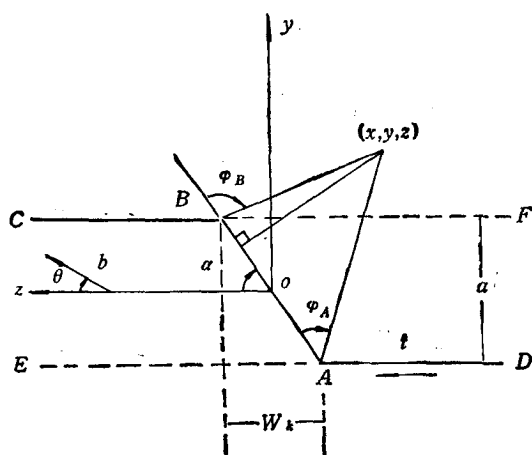


图 2 分段折线组成的几何弯结 DABC

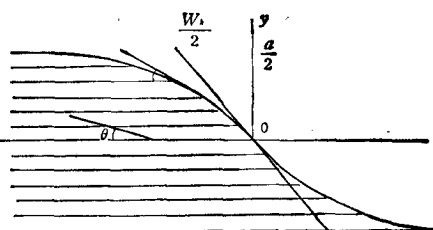


图 3 连续弯结作为分段直位错的叠加

$$U_{lc}^*(z) = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} dy_0 \int_{y_0-a/2}^{a/2} d \frac{\sin(\alpha^* - \theta)}{r(r - \zeta)}, \quad (7)$$

其中

$$r = \sqrt{\frac{a^2}{4} + y'^2 + (z - z')^2}, \quad (7a)$$

$$\zeta = y' \sin \alpha^* + (z - z') \cos \alpha^*, \quad (7b)$$

y', z' 为连续弯结中心线在滑移面上投影坐标

$$y' = y_0 + y_c, \quad (7c)$$

$$z' = \log \left\{ \tan \left[\left(\frac{y_c}{a} + 0.5 \right) \frac{\pi}{2} \right] \right\} \frac{W_k}{\pi}, \quad (7d)$$

由 (7d) 式求出

$$\alpha^* = \arctan \left(\frac{dy_c}{dz'} \right) = \arctan \left\{ \frac{a}{W_k} \sin \left[\left(\frac{y_c}{a} + 0.5 \right) \pi \right] \right\}, \quad (7e)$$

由 (7e) 式知, 在弯结中心 ($y_c = 0$)

$$\tan \alpha_0^* = \frac{a}{W_k}. \quad (7f)$$

即当 W_k 相同时, 连续弯结与图 2 所示折线弯结分别在 $y_c = \pm a/2$ 和 0 三点相切。

四、对 fcc 晶体的数值计算结果

对于 fcc 晶系(111)滑移面, 根据 (6b) 式, x 取为 $A/2\sqrt{3}$, A 为点阵常数, $a = \frac{\sqrt{6}}{4} \text{ \AA}$, $b = \sqrt{0.5} \text{ \AA}$. 图 4 表示螺型位错 ($\theta = 0$) 上不同弯结宽度 W_k 时的归一交互作用能 $U_1(x)$. 能量的单位为

$$\frac{(1+\nu)\mu sr_0^3}{3\sqrt{6}(1-\nu)}.$$

x 在图中标为 y , 长度单位为 $0.2b$ 。图 5 与图 4 的各种参数相同。图 4 表示折线弯结, 图 5 表示连续弯结的结果。对于 $\theta \approx 0$ 的混合位错上弯结的计算结果由图 6 和图 7 给出。图 6 表示 $W_k = 5b$ 时, $\theta = -5/20, -4/20, \dots, 5/20 \times \pi$ 的折线弯结的结果。图 7 表示同样参数连续弯结的计算结果。

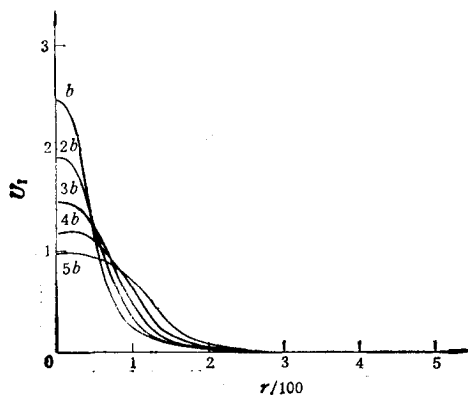


图 4 fcc 晶体中螺型位错上不同宽度 $W_k = b, 2b, 3b, 4b$ 和 $5b$ 的折线弯结与点缺陷的弹性交互作用位场 y 沿螺型位错线方向; 长度单位为 $0.2b$; 纵坐标能量单位为 $\frac{(1+\nu)\mu\sigma r_0^2}{3\sqrt{6}(1-\nu)}$; $U_I(y, W_k)$

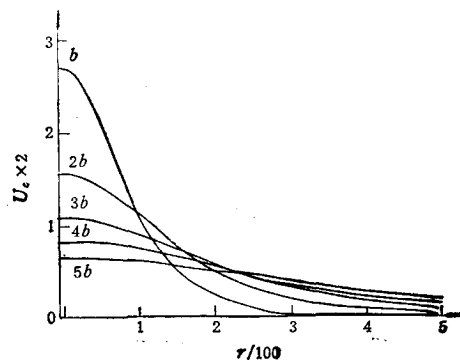


图 5 螺型位错上连续弯结的弹性交互作用场
所有参数同图 4, $U_c(y, W_k)$

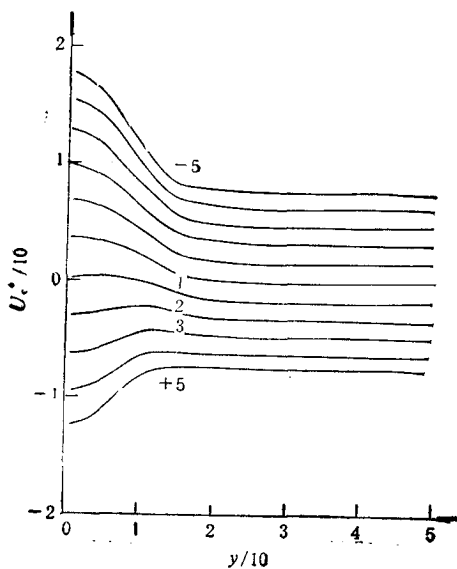


图 6 $W_k = 5b, \theta = -5\theta_0, -4\theta_0, \dots, 5\theta_0$ ($\theta_0 = \pi/20$) 的混合位错上折线弯结的弹性交互作用位场 $U_I(y, \theta)$

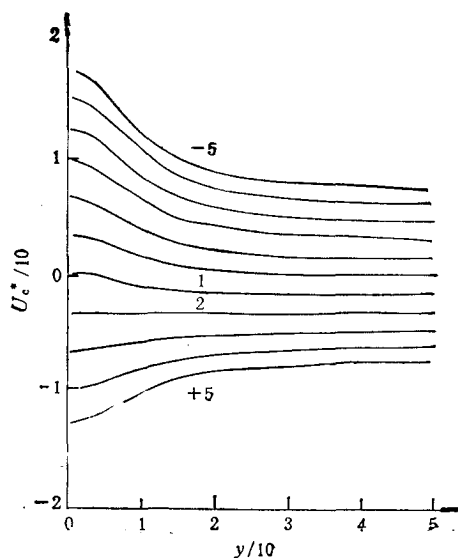


图 7 连续弯结的弹性交互作用位场 $U_c(y, \theta)$
所有参数同图 6

根据图 4—图 7 及对称关系 (5c) 和 (5d) 式不难总结出如下规律性:

1. 弯结与点缺陷交互作用能一般在弯结中心处最大, 弯结宽度越小, 交互作用越大, 在远处交互作用能逐渐减小到零(螺型位错)或常数(混合位错)。
2. 连续弯结与折线弯结的差别在于前者有效位错弯结宽度比 W_k 大, 因而交互作用

位场分布较宽。

3. 混合位错上的弯结, 当 $0 < \theta < \alpha$ 时, 交互作用能呈现多极值现象, 例如图 6 中, $\theta = \pi/20$ 时 $x = -a/2, z = 0$ 和 $x = a/2, z \approx \frac{\pm W_k}{2}$ 都是点缺陷最稳定位置; $\theta = 2\pi/20, x = \frac{a}{2}, z = 0$ 和 $z \approx \pm W_k/2$ 都是稳定位置。对于连续弯结, $\theta = 2\pi/20$ 时, 交互作用能近似为常数, $z \approx \pm W_k/2$ 为稳定位置。

4. 弯结中心处交互作用能极大值近似为

$$U_1(0) \cong \frac{2(1+\nu)\epsilon\mu r_0^2 b \sin\theta \cos\alpha + 2\sin(\alpha-\theta)}{3(1-\nu)\sqrt{1+\sin^2\alpha}}. \quad (8a)$$

当扣除直位错线的交互作用能后, 对于 $|z| \gg W_c$ 处

$$U_1(z) \cong \frac{4(1+\nu)\epsilon\mu r_0^2 b \cos\theta}{3(1-\nu)|z|^3}. \quad (8b)$$

到目前为止, 还不存在可直接观察 a 等于原子尺度的弯结的实验方法, 当然更不能测定弯结的位形。但是, 灵敏的内耗实验却与弯结特征相关。

在高于 Bordoni 峰温时^[12], 交变应力作用下, 螺型位错上交替形成正负双弯结, 根据 (5c) 式, 可动点缺陷(例如空)只需在滑移面上作短程跳跃就能引起一种近似弛豫型内耗。

Gilman^[13] 曾用位错偶极子在不动点缺陷的交互作用能的双能谷之间热激活跳跃来解释 Bordoni 峰, 但是按此算得的激活能太大。如果本文第 3 点关于混合位错上某种弯结与点缺陷交互作用能在 $z = 0$ 和 $z \approx \pm W_k/2$ 同时最大的结论正确, 则根据 (8a) 式, 有关激活能与 Bordoni 峰的激活能是相近的。

关于振动弯结与点缺陷交互作用的时间平均场的对称破缺现象见文献[14]。

- [1] A. Seeger and P. Schiller, in *Physical Acoustics*, Vol. III A, ed. W. P. Mason (Academic Press, New York, London, 1966), p. 361.
- [2] A. Seeger, in *Continuum Models of Discrete System*, ed. E. Kröner and K. H. Anthony (University of Waterloo press, Waterloo, Ontario, 1980).
- [3] J. P. Hirth and J. Lothe in *Theory of Dislocations* (John Wiley & Sons, 1982), p. 670.
- [4] 孙宗琦, 物理学报, **31**(1982), 561.
- [5] Sun Z. Q., *Scientia Sinica*, **A15**(1982), 1279.
- [6] 孙宗琦, 物理学报, **33**(1984), 989.
- [7] Sun Z. Q., and Jiang F. X. and Lu J. Z., in *Internal Friction and Ultrasonic Attenuation in Solids*, ed. T. S. Kê (International Academic Publishers, 1989), p. 57.
- [8] E. H. Yoffe, *Phil. Mag.*, **5**(1960), 161.
- [9] C. Teodosiu, *Elastic Models of Crystal Defects*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1982), p. 133.
- [10] A. H. Cottrell, *Dislocations and Plastic Flow in Crystals* (Oxford University Press, 1953).
- [11] 孙宗琦, 韩明辉, 物理学报, **38**(1989), 183.
- [12] A. S. Nowick and B. S. Berry in *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids* (Academic Press, 1972), p. 381.
- [13] J. J. Gilman, *J. Phys. Soc. Japan Suppl. I*, **18**(1963), 172.
- [14] 孙宗琦, 本刊本期。

INTERACTION POTENTIAL FIELD BETWEEN A GEOMETRICAL KINK AND A POINT DEFECT

SUN ZONG-QI

Institute of Metal Research, Academia Sinica, Shenyang 110015

(Received 1 June 1991)

ABSTRACT

A vector expression of the dilatation field of a segment of dislocation line was obtained with isotropic elasticity. The interaction potential field between a geometric kink, made of straight segments or a smooth curve of dislocation, and a point defect was thus obtained. The distribution of the potential along the dislocation tube for different types and widths of kink was calculated numerically.

The possibility of the dislocation relaxation associated with the interaction between a mobile vacancy and the geometric kink on screw and mixed dislocations was analysed.

PACC: 6170Y; 6240