

振动弯结与点缺陷交互作用时间平均场的对称破缺及自组织现象*

孙 宗 琦

中国科学院金属研究所, 沈阳 110015

1991 年 8 月 19 日收到

计算了各向同性弹性介质中螺型位错上几何弯结与替代溶质原子弹性交互力场和刚度场. 计算了简谐振动弯结的弹性交互作用的按时间平均场沿螺型位错芯管道的分布. 当振幅大于近似为弯结宽度的临界振幅后, 平均交互作用场发生对称破缺, 由单峰变成双峰, 弯结中心由溶质原子的低能稳定位置变成不稳定位置. 分析了替代溶质原子沿螺型位错管道扩散自组织形成双峰气团并使弯结振动由简谐型过渡到多谐振动的参数范围.

PACC: 6240; 6170Y

一、引 言

作者在文献 [1] 中由位错段与点缺陷交互作用能的向量表达式计算了 fcc 晶体中各种位错上、各种弯结宽度和各种形状几何弯结与点缺陷弹性交互作用能沿位错管道的分布 $U_1(x)$. 本文目的是计算弯结与点缺陷弹性交互作用力场 $F_1(x)$ (U_1 的一阶导数) 和刚度场 $R_1(x)$ ($F_1(x)$ 的一阶导数) 以及沿位错线简谐振动弯结的 U_1 和 F_1 的时间平均场 $\bar{U}_1(x)$ 和 $\bar{F}_1(x)$. 这些量对严格求解弯结运动方程及点缺陷扩散方程、分析应力感生点缺陷扩散自组织现象是必不可少的^[2].

二、几何弯结与点缺陷的交互作用能、作用力和刚度的计算公式

考虑图 1 所示两种几何弯结. ACODB 是由三段直线段 AC , CD 和 DB 组成的折线几何弯结. AOB 是光滑几何弯结. 弯结线由 $y_c(z_c)$ 给定.

对于折线弯结

$$\begin{aligned} y_c &= z_c \cdot a/W_k & 0 \leq z_c \leq W_k/2; \\ &= a/2 & z_c > W_k/2, \end{aligned}$$

* 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.

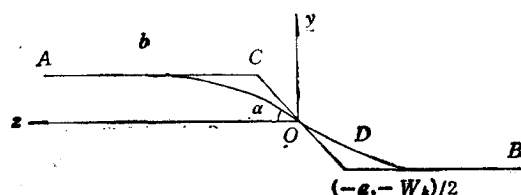


图 1 两种形状的几何弯结 弯结宽度是 W_k , 折线弯结 ACODB 和光滑几何弯结 AOB

$$y_c(-z_c) = -y_c(z_c). \quad (1)$$

对于光滑弯结

$$z_c = \log \left\{ \tan \left[\left(\frac{y_c}{a} + 0.5 \right) \frac{\pi}{2} \right] \right\} \frac{W_k}{\pi}. \quad (2)$$

位错线本身沿滑移面均匀分布, 位错宽度^[3]

$$W_d = a. \quad (3)$$

计算场点 (x, y, z) 时, 对于各向同性弹性 fcc 点阵, 取 $x = A[111]/6$, A 为点阵常数. y, z 之间函数关系对两种形状几何弯结也分别由(1)和(2)式给定. 根据文献[1], 对于螺型位错上几何弯结

$$U_1(x) = \frac{D^*}{a} \int_{-a/2}^{a/2} dy_d \int_{-a/2}^{a/2} d \frac{\sin \alpha(y_c)}{r(r-\zeta)}, \quad (4)$$

$$r^2 = x^2 + (y - y_d - y_c)^2 + (z - z_c)^2, \quad (4a)$$

$$\zeta = (y - y_d - y_c) \sin \alpha(y_c) + (z - z_c) \cos \alpha(y_c), \quad (4b)$$

$$D^* = \frac{2(1+\nu)\mu e r_0 x b}{3(1-\nu)}, \quad (4c)$$

其中 e 是点缺陷的原子半径错配参数, r_0 是原子半径, μ 是切变模量, ν 是 Poisson 比. 对于折线弯结

$$\alpha(y_c) = \alpha, \quad |z_c| \leq \frac{W_k}{2},$$

$$\alpha(z_c) = 0. \quad (4d)$$

对于光滑弯结

$$\alpha(y_c) = \arctan \left\{ \frac{a}{W_k} \sin \left[\left(\frac{y_c}{a} + 0.5 \right) \pi \right] \right\}. \quad (4e)$$

从 $U_1(x)$ 计算 $F_1(x)$ 虽然可以采用数值微商方法, 为了得到较精确结果, 我们采用对(4)式场变量 z 微商的方法

$$F_1(x) = \frac{\partial U_1(x)}{\partial z} + \frac{\partial U_1(x)}{\partial y} \tan \alpha(x) = \frac{D^*}{a} \int dy_d \int d \left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial y} \tan \alpha(x) \right] \cdot \frac{\sin \alpha(y_c)}{r(r-\zeta)}. \quad (5)$$

考虑到

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{r(r-\zeta)} = \frac{-1}{r(r-\zeta)} \left(\frac{z-z_c}{r^2} + \frac{z-z_c-r \cos \alpha(y_c)}{r(r-\zeta)} \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{r(r-\zeta)} = \frac{-1}{r(r-\zeta)} \left(\frac{y-y_c}{r^2} + \frac{y-y_c-r\sin\alpha(y_c)}{r(r-\zeta)} \right)$$

$$\frac{\partial \sin\alpha(y_c)}{\partial z} = \frac{\partial \sin\alpha(y_c)}{\partial y} = 0, \quad (5')$$

代入(5)式便可求 U_1 相同的方法计算 $F_1(x)$ 。对于刚度场 $R_1(x)$, 如果用相同方法对(5)式求偏导数结果很繁, 不如直接对 $F_1(x)$ 数值微商。先对相邻三点的 $F_1(z_i)$ 抛物线拟合

$$F_1 = a_1 z_i^2 + a_2 z_i + a_3; \quad F_2 = a_1 z_i^2 + a_2 z_i + a_3; \quad F_3 = a_1 z_i^2 + a_2 z_i + a_3. \quad (6)$$

求出 a_1 和 a_2 。相应点的刚度是

$$R_1 = 2a_1 z_1 + a_2, \quad R_2 = 2a_1 z_2 + a_2, \quad R_3 = 2a_1 z_3 + a_2. \quad (6')$$

对于全部 z_1 到 z_n , z_3 到 z_{n-2} 各点将有三种结果, z_2 和 z_{n-1} 的刚度有二次机会, 取各点刚度的几次结果的算术平均值。

三、振动弯结的时间平均场的计算公式

当几何弯结沿 z 作振幅为 a_m 的简谐振动时, 可动点缺陷首先能跟踪的并不是弯结的瞬时交互作用能场 $U_1(z - a_m \sin \omega t)$, 而是它的时间平均场 $\bar{U}_1(x)$

$$\bar{U}_1(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} U_1(z - a_m \sin \theta) d\theta, \quad (7)$$

$$\bar{F}_1(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F_1(z - a_m \sin \theta) d\theta. \quad (8)$$

在文献[2]中作者对 U_1 采用

$$U_1 = \frac{U_{\max}}{1 + |z^3|},$$

近似研究了 $\bar{U}_1(x)$ 随 a_m 增大的对称破缺及自组织现象。以下将对实际几何弯结按(4)——(8)式数值计算。计算定积分采用矩形近似。由于对位错宽度 y_d 的积分对结果精度影响不大。取 $\Delta y_d = a/3$ 。对 y_c 的积分比对 z_c 的积分方便, 因为后者上下限是无限, 不适合于数值积分。取 $\Delta y_c = a/200$, 两端两段舍去, 因为 $y_c = \pm a/2$ 对应于 $z_c = \pm \infty$ 。对时间的平均: $\Delta \theta = \pi/100$ 。

四、数值计算结果

图2表示折线几何弯结(图1中 $ACODB$)的各种弯结宽度时的交互作用力场 $F_1^*(z^*)$, 其中

$$F = \frac{D^*}{A^2} F^* = \frac{(1+\nu)\mu a r_0^2}{3\sqrt{6}(1-\nu)A} F^*, \quad z = 0.1bz^*.$$

图3是光滑弯结相应的图。对比图3与图2, 光滑弯结的力场比折线弯结的小, 并且随弯结宽度增加减小得快, 最大作用力所在位置比较靠近中心点。图4是光滑弯结的刚度场。

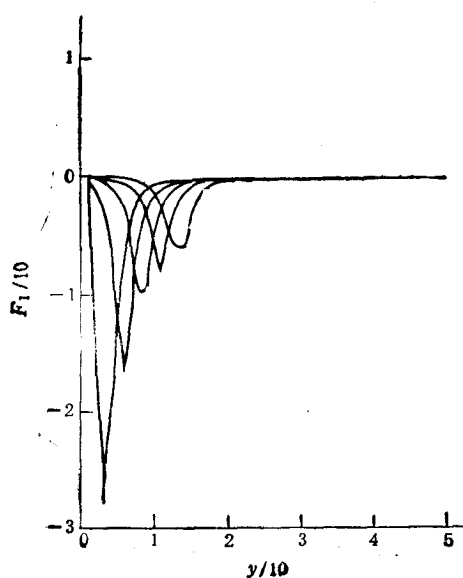


图 2 折线弯结的 $F_1(z)$ $W_k = b, 2b, \dots, 5b, Y = z$, 单位是 $0.1b$; 力场的单位是 $\frac{(1+\nu)\mu\epsilon r_0^3}{3(1-\nu)\sqrt{6}A}$, A 是点阵常数; $F_1(y, W_k), \theta = 0$

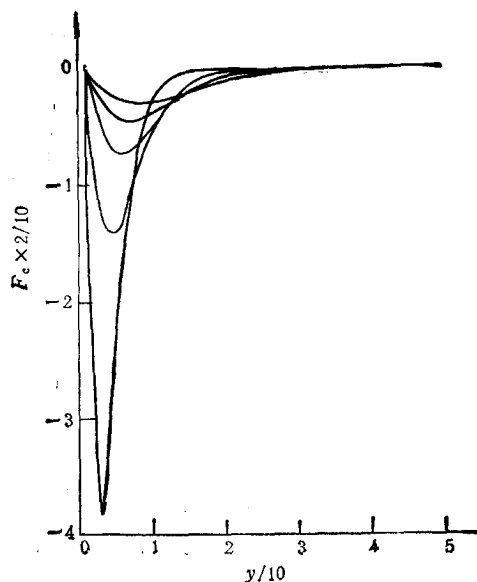


图 3 光滑弯结的交互作用力场 $W_k = b, 2b, \dots, 5b, z$ 单位是 $0.1b, F_c(y, W_k), \theta = 0$, 力单位是 $\frac{(1+\nu)\mu\epsilon r_0^3}{3\sqrt{6}(1-\nu)A}$

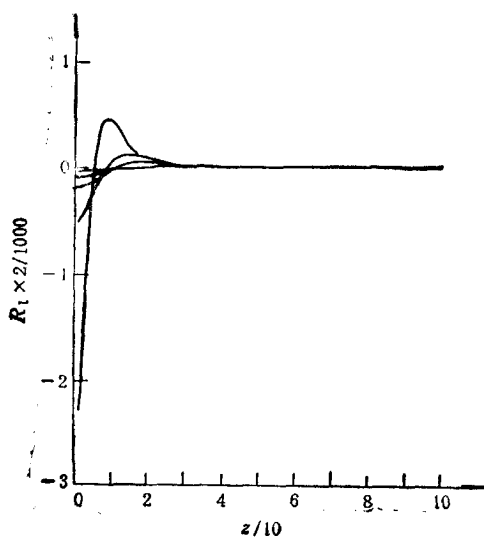


图 4 光滑弯结的刚度场 $R_1(z)$ $W_k = b, \dots, 5b$, 刚度单位是 $\frac{(1+\nu)\mu\epsilon r_0^3}{3\sqrt{6}(1-\nu)A^2}$, $R_1(z, W_k), \theta = 0$

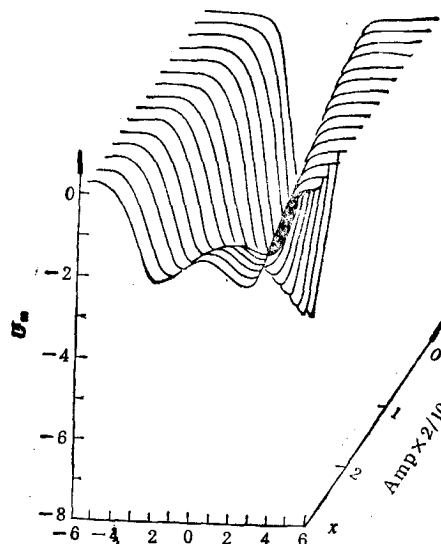


图 5 振动弯结的时间平均交互作用场 $W_k = 2b, x = z$, 单位是 b , 能量单位是 $\frac{(1+\nu)\mu\epsilon r_0^3}{3\sqrt{6}(1-\nu)}$, 振幅单位是 $0.2b, U_m(y, AMP), W_k = 2.0 \times \epsilon, \theta = 0$

图 5 是弯结宽度为 $2b$ 的平均交互作用位场随振幅的变化图。图 6 表示相应的平均交互作用力场。

由图 5 可以看出, 当振幅逐渐增加时, $\bar{U}_1(x)$ 逐渐变平, 当振幅到临界值 a_c 时, $\bar{U}_1'(0) = 0$, $a_m > a_c$ 后, $\bar{U}_1''(0) < 0$, 交互作用能的极值发生在 $z = \pm z_m$ 处,

$\bar{U}_1(\pm z_m) = 0$, z_m 与弯结振幅 a_m 相近. 这里 z_m 与 a_m 的关系与二级相变及一般远离平衡系统中的对称破缺现象极其相似^[4]. 所不同的是, 这里的外参数不是温度、浓度等量, 而是弯结的振幅(后者又依赖于外加应力振幅). 当 $a_m > a_c$ 后, $z = 0$ 附近是不稳定区, 这里的可动点缺陷在振动弯结的平均交互作用力场(图 6)作用下逐渐扩散到两侧 $z \approx \pm z_m$ 处. 而点缺陷在两端聚集后, 振动弯结在中心点也不稳定, $z > 0$ 处, 弯结加快向 $+z_m$ 处运动, 回摆时又力图多在 z_m 处停留片刻, 然后很快地移到 $-z_m$ 处, 直到外力强迫它返回 $+z$, 这种由简谐运动向多谐振动转变的过程更加增加了(7)和(8)式中 $\theta = \pi/2$ 和 $3\pi/2$ 的权重, 从而加深了双峰的深度, 因此进一步促进点缺陷向 $\pm z_m$ 处聚集. 因此这种现象在一定参数范围内是稳定的. 弯结与可动点缺陷是相互促进的.

我们估算出现这种自组织现象的有关参数范围. 首先在测量内耗过程中, 点缺陷应有时间扩散到 $\pm z_m$ 处,

$$D_i t \geq a_m^2 \approx W_k^2 \approx 100b^2. \quad (9)$$

这里 D_i 是螺型位错的管道扩散系数, W_k 取作 $10b$, 对于声频内耗, t 取作 $1-10s$, 对于低频扭摆实验, t 取成 $10-100s$, 这时 D_i 的范围应在 $10^{-18} \text{m}^2/\text{s}$ 以上, 根据文献[5]的扩散实验数据统计, 对于全位错, 相应温度约在 $1/3$ 熔点附近, Al 的层错能较高, 熔点低, 在室温附近就会发生这种应力感生自组织现象.

其次弯结振动速度应比点缺陷扩散速度高得多, 否则缺陷将“紧跟”弯结, 只见瞬时场不见平均场.

$$\omega a_m \gg \frac{a_m}{t_m}, \text{ 即 } \omega t_m \gg 1. \quad (10)$$

对于声频内耗或组合石英振子法, 显然满足这种条件, 低频扭摆也勉强满足这项条件.

此外, 点缺陷浓度太高或其它不可动杂质太多时, 在测量内耗最大应变振幅范围内, 弯结振幅小于 a_c , 上述现象也不会发生.

设 ε_0 是外加应变振幅, C_k 是弯结链的平均刚度. 上述条件变成

$$\mu \varepsilon_0 a b > (C_k + R_1) W_k \approx (0.1 C_k + 0.1 R_1) b. \quad (11)$$

$0.1 C_k < \mu \varepsilon_0 a$ 相当于 $l_c/a > \sqrt{\varepsilon_0} \approx 10^{-2}$, 这条件比较容易满足, 只要有足够多的新位错, 并且位错线上不动杂质原子之间距离 l_c 不太小, 例如纯金属或低合金就能满足. 现在估算 R_1 的数量级, 根据文献[1], 设 c 是可动点缺陷浓度,

$$R(0) \approx U_1(0)/W_k^2 \approx \frac{4(1+\nu)\varepsilon\mu r_0^2 b a}{3(1-\nu) W_k^2}$$

$$\varepsilon_0 > \frac{0.3 \cdot r_0^2 c}{W_k^2}$$

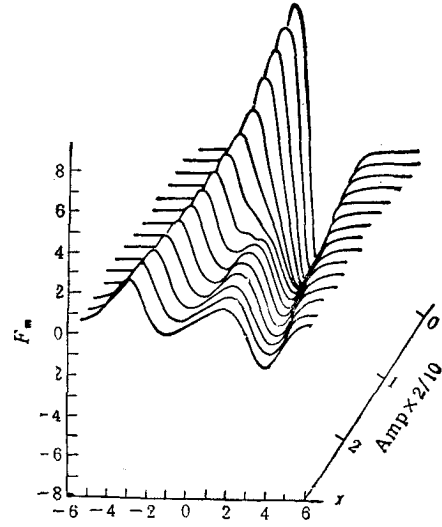


图 6 振动弯结的平均交互作用力场 $W_k = 2b$, 力单位是 $\frac{(1+\nu)\mu\sigma r_0^2}{3\sqrt{6}(1-\nu)A}$, 振幅单位是 $0.2b$, 振幅大于临界振幅后, 弯结中心区成了不稳定区; 图中 x 轴代表 z 方向, 单位是 b , $F_m(y, \text{AMP})$, $\theta = 0$, $W_k = 2.0 \times c$

时,(11)式成立,因此可动点缺陷浓度 $c < 10^{-2}$ 时弯结振幅在 $\varepsilon_c = 10^{-5} \sim 10^{-4}$ 时就能超过临界振幅.

最后对 c 参数下限有一定要求,因为 c 太小时,它们虽然发生自组织扩散,但是对位错运动影响不大,由于 c_k 的作用,弯结振动基本上保持简谐型,只有可动点缺陷双峰气团的负刚度区不被 c_k 正刚度抵消时,才有较明显的可以测量的弯结运动方式变化. 这种条件可表示成

$$C_k + cR_1 < 0. \quad (12)$$

其实在内耗试样中,无论 ε_c , C_k 和 c 都呈现很宽分布,总会有部分区域满足条件(12)式,关于自组织现象的计算机模拟将另文报道.

[1] 孙宗琦,本刊本期.

[2] 孙宗琦、吕金钟,内耗与超声衰减,葛庭燧,张立德等编著(原子能出版社,北京 1989).

[3] 孙宗琦、韩明辉,物理学报, 38(1989),183.

[4] H. Haken, Advanced Synergetics (Springer-Verlag, 1983).

[5] N. A. Gjostein Diffusion (Amer. Soc. Metals, Park, Ohio, 1973).

DEFECT OF SYMMETRY OF THE TIME-MEAN-INTERACTION-FIELD BETWEEN AN OSCILLATING KINK AND POINT DEFECT AND SELF-ORGANIZATION PHENOMENON

SUN ZONG-QI

Institute of Metal Research, Academia Sinica, Shenyang 110015

(Received 19 August 1991)

ABSTRACT

The elastic interaction force field and rigidity field between kinds on screw dislocation and a substitutional foreign atom were calculated with isotropic elastical approximation.

The time-mean-interaction-potential of a harmonic oscillating kink along the tube of the screw dislocation was calculated. There appeared a defect of symmetry of the mean potential at the amplitude larger than a critical amplitude. Double peaks of potential instead of a single peak occurred. The center of the kink turned the lowest energy position for the substitutional atom into an instable position.

The range of parameters in favor of the transition of the diffusional self-organization along the tube of screw dislocation, to form an atmosphere with double maximums of concentration, and of the harmonic oscillation to flip-flop of the kink was estimated.

PACC: 6240; 6170Y