

磁致塑性效应下的位错动力学机制

李桂荣 王宏明 李沛思 高雷章 彭琮翔 郑瑞

Mechanism of dislocation kinetics under magnetoplastic effect

Li Gui-Rong Wang Hong-Ming Li Pei-Si Gao Lei-Zhang Peng Cong-Xiang Zheng Rui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 148102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.148102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.148102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I14>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

剪切应变下刃型位错的滑移机理的晶体相场模拟

Phase-field-crystal simulation of edge dislocation climbing and gliding under shear strain

物理学报.2015, 64(10): 106104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106104>

Mn-N 共掺 p 型 ZnO 的第一性原理计算

First-principles study of Mn-N co-doped p-type ZnO

物理学报.2014, 63(19): 196101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.196101>

数字剪切散斑干涉法研究铝合金中 Portevin-Le Chatelier 带的离面变形行为

Digital shearography investigation on the out-plane deformation of the Portevin-Le Chatelier bands

物理学报.2014, 63(6): 066201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.066201>

多晶银纳米线拉伸变形的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation of polycrystal silver nanowires under tensile deformation

物理学报.2014, 63(1): 016201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.016201>

第一性原理研究 Te-N 共掺 p 型 ZnO

First-principles study of p-type ZnO by Te-N codoping

物理学报.2012, 61(17): 176105 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.176105>

## 磁致塑性效应下的位错动力学机制\*

李桂荣† 王宏明 李沛思 高雷章 彭琮翔 郑瑞

(江苏大学材料科学与工程学院, 镇江 212013)

(2015年1月12日收到; 2015年2月25日收到修改稿)

基于磁致塑性效应探讨了磁场作用下位错受力和运动机制, 对磁场下的位错动力学机制进行了定性和定量分析. 选择氧化铝纳米颗粒强化铝基复合材料为实验对象, 在不同磁感应强度下(0—3 T范围)对试样进行磁场处理. 结果表明, 随着磁感应强度增加, 位错密度提高, 表现出塑性变形特征. 分析认为, 磁场力不足以驱动位错运动, 位错增殖诱因在于磁致塑性效应, 即磁场改变了顺磁性位错芯与障碍间自由基对中的电子自旋状态, 促使自由基对从强键结合单线态向弱键结合三重态转化, 位错穿越障碍时所需能量减小, 退钉扎趋势明显; 位错运动中的限速环节是位错在障碍处的停留, 磁场诱发的电子激发和原子重排速度很快, 表现出磁场作用的高效性. 磁场起作用的临界磁感应强度约为3 T, 低于3 T时磁场作用随磁场强度增加而变得明显, 高于3 T后磁场效果会减小. 计算得到3 T时位错运动速度是 $10^{-3}$  m/s, 位错线长度比未加磁场时增加两个数量级, 位移与磁感应强度平方和磁场作用时间成正比. 实验和理论研究表明磁场具有改善材料塑性变形能力的显著作用.

**关键词:** 磁致塑性, 位错动力学, 变形和塑性, 铝基复合材料

**PACS:** 81.40.Lm, 61.72.Bb, 62.20.F-

**DOI:** 10.7498/aps.64.148102

## 1 引言

位错动力学是研究材料塑性变形机制的核心问题, 其研究的关键参量是位错移动速度 $V$ 和位错线长度 $L$ . 在无磁场等外加物理场的常规条件下, 对 $V$ 和 $L$ 推导计算的文献报道比较多<sup>[1,2]</sup>, 但是在磁场作用下, 特别是强磁场条件下 $V$ 和 $L$ 的表征却鲜见报道.

常规意义上, 位错动力学和塑性变形理论中认为: 材料的塑性与位错线缺陷的运动及增殖密切相关. 位错在运动过程中会受到晶格阻力作用, 阻力取决于晶格特性及位错芯的原子特性. 当没有磁场作用时, 讨论塑性变形多是从“材料科学基础”角度的位错形核、运动等入手<sup>[3]</sup>, 很少从量子力学角度分析电子或原子核的自旋运动与宏观塑性变形间的关系, 因为此时原子和电子旋转是无方向和无序的, 不能对材料的组织和宏观性能产生显著影响,

但在磁场条件下情况就迥异了.

从磁场特别是强磁场在材料研发中的作用看, 磁场可以引发凝固过程或热处理过程中的相变并起到细化晶粒的作用<sup>[4,5]</sup>, 改善化学反应的速率和产率<sup>[6]</sup>, 也可以导致材料弹性变形即磁致弹性<sup>[7]</sup>. 20世纪60年代初, 学者们观察到磁场可以引起位错运动和塑性变形. 1965年, Chebotkevich首先提出了磁致塑性现象, 发现静磁场和低频交变磁场影响了铁磁体中的位错运动和宏观塑性, 并认为这种现象不可能是磁致伸缩效应引起的<sup>[8]</sup>. 从1996年到1977年密集报道了液氮温度下纯抗磁性金属(比如铜)在5—10 T下的塑性变形<sup>[9]</sup>. 1987年, Al'shits观察到磁场存在时可以促进NaCl晶体中位错的运动. 1997年, Molotskii和Fleurov<sup>[10]</sup>报道了磁场的存在促进了铁镍合金中位错的运动、发射和增殖, 此时处于磁场中的材料塑性会增强, 并定义为磁致塑性效应. 2004年, Golovin<sup>[9]</sup>指明了该领域有待深入研究的方向和要点, 提出异相(包括

\* 国家自然科学基金(批准号: 51371091, 51174099)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [liguirong@ujs.edu.cn](mailto:liguirong@ujs.edu.cn)

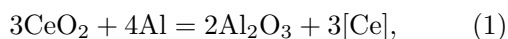
非基体的合金原子或者强化相, 比如颗粒强化等)影响磁致塑性效应的实验数据很少, 涉及的异相也很少, 有待通过磁场下位错行为特征的实验数据来支持磁致塑性效应理论, 并有待构建磁致塑性效应下的位错动力学新机制. 2007年, 刘兆龙等<sup>[11]</sup>指出磁场作用下, 顺磁性障碍物钉扎区的位错芯发生膨胀, 位错更容易移动. 但是, 为了准确解释磁致塑性效应, 不仅要进行微观位错分析, 也要对电子自旋行为做出合理的解释.

从量子尺度看, 位错形核、运动、增殖的根本原因在于原子重排和重组, 原子运动的根本原因又在于电子行为的变化. 在没有磁场时, 电子是无序排布的, 无论是轨道磁矩还是自旋磁矩都对原子行为没有明显影响; 但是在磁场作用下, 特别是强磁场作用下, 位错和障碍间在近距离范围内会形成自由基对, 而自由基对中的电子自旋行为将受到磁场的显著影响, 进而影响到原子运动和重组, 并影响到位错行为, 从而对材料塑性变形能力产生直接的正面的影响, 该现象称为磁致塑性效应<sup>[12]</sup>. 在磁致塑性效应作用下, 位错动力学将表现出新特征和新机制, 这是本文研究的主要内容.

本文以微纳尺度颗粒增强铝基复合材料作为研究对象<sup>[12]</sup>, 在脉冲处理实验研究的基础上, 对磁致塑性效应下的位错动力学规律进行定性和定量分析. 从选材依据看, 在新型金属材料中, 铝基复合材料具有除优越塑性变形能力外的其他特性, 比如高比强度、高比模量、高耐磨、低密度、低热膨胀、低制备成本等优越特性, 但增强相的引入成为塑性变形过程中位错运动的强障碍物质, 在没有任何外力、外场条件下, 高密度、高分散的强障碍物质严重限制了复合材料塑性变形能力的提高, 也限制了复合材料应用领域的进一步扩大. 所以, 通过过程优化提高复合材料塑性变形能力就成为改善复合材料综合力学性能并扩展其应用领域的重要研究课题.

## 2 实验方法

选择纯铝作为铝基复合材料的基体, 以碳酸铈  $\text{Ce}_2(\text{CO}_3)_2$  作为原料, 经过高温烘烤后充分去除结晶水和离子水, 并同时分解得到  $\text{CeO}_2$  作为反应物, 通过与高温铝合金液间的直接化学反应生成  $\text{Al}_2\text{O}_3$  原位内生颗粒铝基复合材料, 记做  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}$  复合材料. 原位合成反应方程式为



具体合成过程见文献<sup>[13, 14]</sup>. 将铸态样品加工成  $20\text{ mm} \times 20\text{ mm} \times 2\text{ mm}$  的片状试样, 嵌入带有切槽的耐火材料块中. 耐火材料块主要起到磁场中固定试样的目的, 因耐火材料的磁导率接近零, 可以忽略其对试样受力状态的影响. 试样安放状态及与磁场的关系见图 1, 其中  $B$  是磁感应强度, 单位 T(特斯拉).

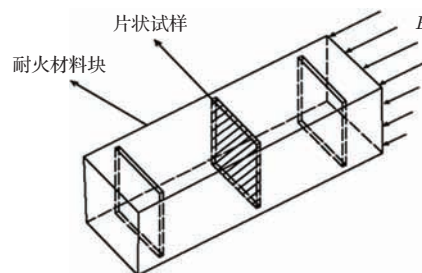


图 1 试样在脉冲磁场中的位置示意图

Fig. 1. Schematic of sample position in pulsed magnetic field.

对铸态复合材料样品进行脉冲磁场冲击处理, 用 LZ-610H 特斯拉计测定加载时试样安放位置的磁感应强度(符号  $B$ , 单位 T), 通过调控电控柜的输出电压和电流, 控制物料管内磁感应强度  $B$  分别为 1, 2 和 3 T, 共处理 30 个脉冲周期. 将冲击处理后的样品进行抛光、凹坑处理和离子减薄后, 用 JEOL-2100F 型透射电镜观察冲击处理后材料的组织特征, 透射电镜工作电压为 200 kV.

## 3 结果分析与讨论

### 3.1 磁场处理下复合材料中的位错特征

图 2 是不同磁感应强度下 ( $B = 0, 1, 2, 3\text{ T}$ ) 磁场处理铝基复合材料的位错特征图. 图 2(a) 中箭头所示颗粒通过衍射分析(图 2(a)插入图)确定为氧化铝相. 从位错分布可见: 与未处理样品相比(图 2(a)), 磁场处理后的位错密度明显增加; 且随着  $B$  值增加, 位错密度呈逐渐增加的趋势. 图 2(c) 较图 2(b) 增幅明显, 但图 2(d) 较图 2(c) 的增幅不明显, 从图 2(e) 位错密度变化图中可见该趋势, 即在  $B = 3\text{ T}$  位置处出现位错密度的近饱和状态. 此外, 微纳尺度的氧化铝颗粒起到位错钉扎中心的作用, 如图 2(c) 所示, 图中黑色箭头为位错运动方向, 可以看到位错靠近障碍(M处)和位错越过障碍(N处)时的形貌特征.

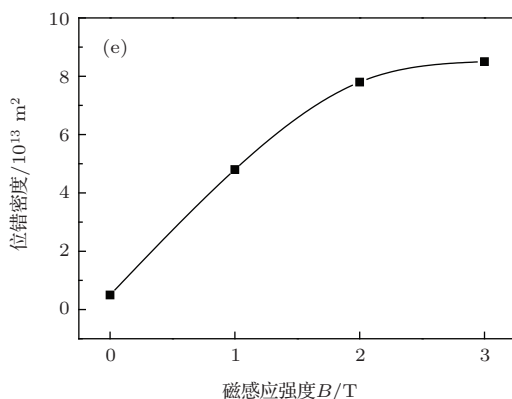
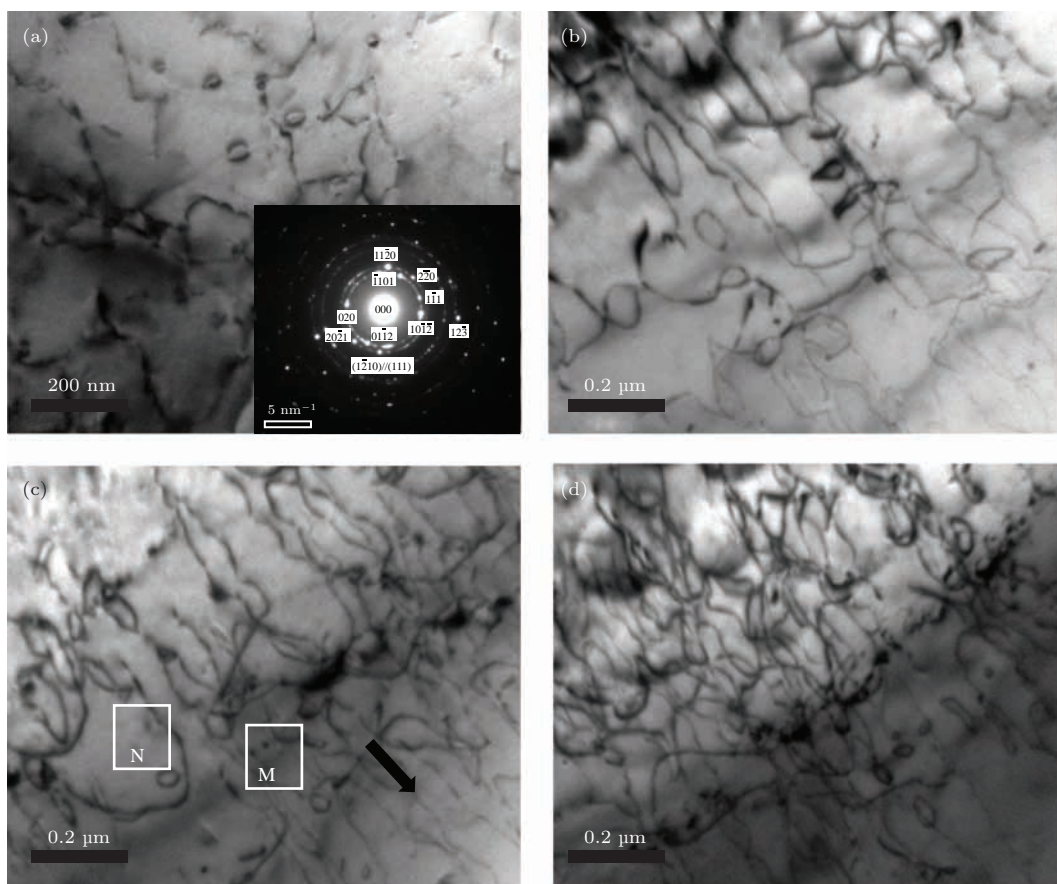


图2 不同磁感应强度下复合材料中的位错特征 (a)  $B = 0$  T; (b)  $B = 1$  T; (c)  $B = 2$  T; (d)  $B = 3$  T(放大100 K); (e) 位错密度与  $B$  关系

Fig. 2. Dislocation characteristics in composites subjected to different magnetic induction intensity: (a)  $B = 0$  T; (b)  $B = 1$  T; (c)  $B = 2$  T; (d)  $B = 3$  T; (e) relationship between dislocation density and  $B$ .

### 3.2 磁场下位错受力分析

按照经典位错理论,晶体的滑移必须在一定外力条件下才能发生,说明位错运动必须要克服一定的障碍阻力,此时位错的滑移会受到障碍类型、数量和尺寸等的限制.在材料塑性变形的低温区 ( $T < 0.2T_m$ ,  $T$  是塑性变形时的温度,  $T_m$  是测试材料熔点),塑性变形主要有两种机制,如图3所示.图3(a)是离散型障碍占优,应变速率取决于位错

切过障碍时的动力学条件;图3(b)是晶格障碍占优,应变速率取决于扭折形核和增殖.事实上,这两种障碍具有阻碍位错运动的共同特征,图3(a)属于强障碍,图3(b)属于弱障碍,前者的激活能数值是后者的十余倍(激活能是指不需要借助应力就能驱动位错越过障碍的能量).但无论是哪种障碍,从量子尺度分析磁场作用机制时都具有共性,本文所讨论的磁场下位错动力学机制适用于这两种塑性变形机制.

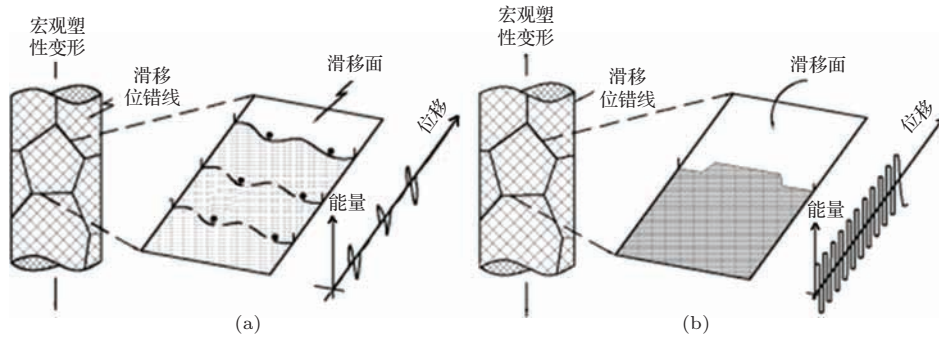


图3 低温区多晶体材料塑性变形机制 (a) 离散型障碍占优; (b) 晶格阻碍占优

Fig. 3. Low temperature plasticity mechanism in polycrystals: (a) limited by discrete obstacles; (b) limited by a lattice resistance.

按照塑性变形理论, 材料中发生位错运动、塑性变形等的诱因是基于力的作用, 所以首先分析磁场下位错的受力特征. 图4是磁场处理后铝基复合材料中的局部位错线形貌和分布. 从中选择两条位错线D1, D2, 二者夹角 $\varphi$ , D1与磁场 $H$ (磁场强度, 单位A/m)方向夹角为 $\theta$ . 磁场力作用下位错所受到的应力 $\sigma_M$ 为<sup>[15]</sup>

$$\sigma_M = BH[\cos \theta - \cos(\theta + \varphi)]. \quad (2)$$

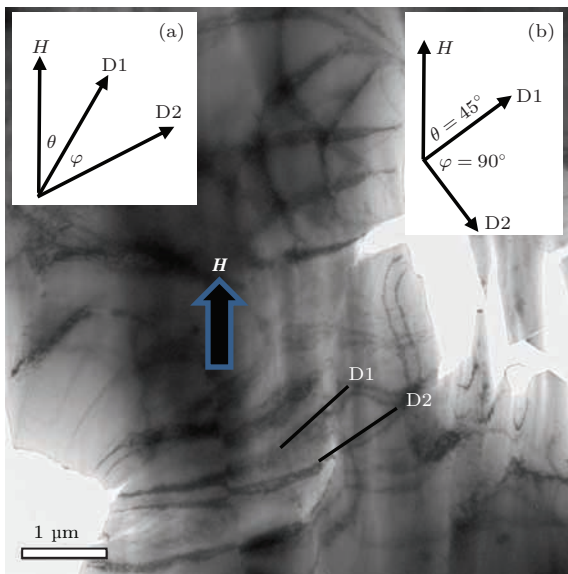


图4 铝基复合材料中位错特征 (a) 任意条件下的 $\theta$ 和 $\varphi$ ; (b) 位错受力最大时的 $\theta$ 和 $\varphi$

Fig. 4. Dislocation characteristic in aluminum matrix composites: (a)  $\theta$  and  $\varphi$  at random condition; (b)  $\theta$  and  $\varphi$  corresponding to the maximum magnetic force.

按照经典位错动力学理论, 驱动铝基体滑移面[111]位错运动所需要的最小应力要大于Peierls力(符号 $\sigma_P$ ). 当选定柏格斯矢量 $\mathbf{b} = 0.289 \text{ nm}$ ,  $\nu = 0.33$ (泊松比),  $d_{[111]} = a/\sqrt{6} = 1.65 \times 10^{-10} \text{ m}$  ( $d_{[111]}$ 是[111]滑移面上的晶格间距,  $a$ 是铝晶格常数, 取 $4.04 \times 10^{-10} \text{ m}$ )<sup>[16]</sup>, 计算得到 $\sigma_P$ 为20 MPa.

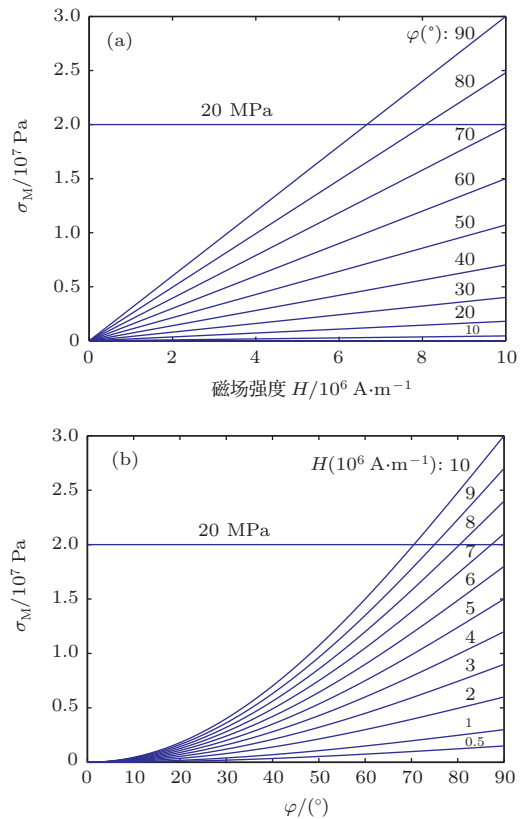


图5  $\theta = 0^\circ$ ,  $B = 3 \text{ T}$ 时 $H$ 和 $\varphi$ 值对 $\sigma_M$ 的影响 (a)  $\sigma_M$ - $H$ ; (b)  $\sigma_M$ - $\varphi$

Fig. 5. Influence of  $H$  and  $\varphi$  on the  $\sigma_M$  when  $\theta = 0^\circ$  and  $B = 3 \text{ T}$  (a)  $\sigma_M$ - $H$ ; (b)  $\sigma_M$ - $\varphi$ .

图5反映了 $\theta = 0^\circ$ ,  $B = 3 \text{ T}$ 时, 磁场强度 $H$ ,  $\varphi$ 对 $\sigma_M$ 的影响, 并将应力计算结果与 $\sigma_P$ 进行比较. 图5(a)是 $H$ 在 $0-10 \times 10^6 \text{ A/m}$ 变化时,  $\varphi$ 取值对 $\sigma_M$ 的影响. 由图5可知, 随 $\varphi$ 值增加,  $\sigma_M$ 增加, 在设定 $H$ 范围内, 当 $\varphi < 70^\circ$ 时,  $\sigma_M < 20 \text{ MPa}$ ; 当 $\varphi = 90^\circ$ 时,  $H \geq 6.7 \times 10^6 \text{ A/m}$ 时,  $\sigma_M$ 高于20 MPa, 即在最大 $\varphi$ 值时 $H$ 值的下限是 $6.7 \times 10^6 \text{ A/m}$ . 图5(b)是 $\varphi$ 在 $0-90^\circ$ 变化时 $H$ 取值对 $\sigma_M$ 的影响. 可见随着 $H$ 值增加,  $\sigma_M$ 增加,

在设定  $\varphi$  范围内时, 当  $H < 6.7 \times 10^6$  时  $\sigma_M < 20$  MPa; 当  $H = 10 \times 10^6$  时,  $\varphi \geq 70^\circ$  时  $\sigma_M$  高于 20 MPa, 即在最大  $H$  值时对  $\varphi$  值的下限要求是  $70^\circ$ . 而在低于  $\sigma_M = 20$  MPa 横线下的实验条件所对应的  $\sigma_M$  达不到驱动位错运动的要求.

图 6 是  $H = 7 \times 10^6$  A/m 时  $\theta$  和  $\varphi$  与  $\sigma_M$  函数关系的三维图像. 可见, 当  $H$  一定时, 在  $\theta = 45^\circ$ ,  $\varphi = 90^\circ$  条件下得到最大  $\sigma_M$ , 数值为 32 MPa. 因此认为, 从磁场下位错受力角度来看, 只有  $H$ ,  $\theta$

和  $\varphi$  达到一定的匹配关系时, 磁场施加给位错的力  $\sigma_M$  才能超过 Peierls 力, 从而达到驱动位错运动的目的. 众所周知, 在无序分布的位错群中对  $\theta$  和  $\varphi$  的匹配要求是不容易达到的, 但在实验中却发现: 即使实际磁场强度低于临界磁场强度下限值 ( $6.7 \times 10^6$  A/m) 时, 仍能观察到位错密度增高的现象, 说明磁场对位错行为的影响不限于力的因素, 更是基于其他诱因, 即量子尺度下磁场对电子自旋的影响.

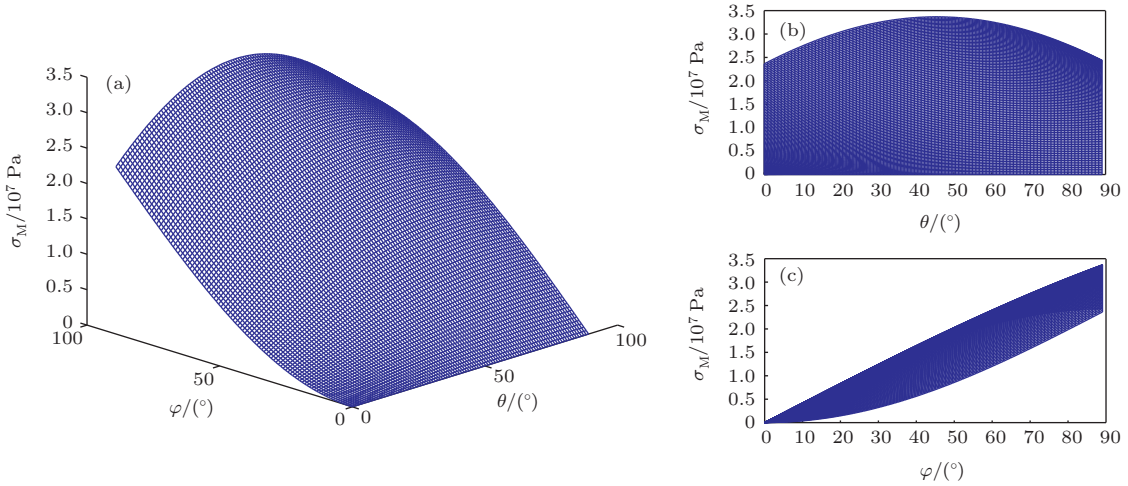


图 6  $H = 7 \times 10^6$  A/m 时  $\theta$  和  $\varphi$  对  $\sigma_M$  的影响 (a) 全视图; (b) 最大  $\sigma_M$  取值时  $\sigma_M$ - $\theta$  函数关系的截面图; (c) 最大  $\sigma_M$  取值时  $\sigma_M$ - $\varphi$  函数关系的截面图

Fig. 6. Influence of  $\theta$  and  $\varphi$  on the  $\sigma_M$  when  $H = 7 \times 10^6$  A/m: (a) monolithic illustration; (b) screenshot for  $\sigma_M$ - $\theta$  relationship showing maximum  $\sigma_M$ ; (c) screenshot for  $\sigma_M$ - $\varphi$  relationship showing maximum  $\sigma_M$ .

### 3.3 磁场下位错运动的实质

从量子尺度讨论磁场能量对位错的影响时首先考虑到的是塞曼效应, 基于塞曼效应产生的塞曼能有助于位错运动. 理论计算表明, 在  $H = 10 \times 10^6$  A/m 范围内时塞曼能  $\Delta U_m$  很小, 有  $\Delta U_m = \mu_B g B \approx 10^{-4}$  eV, 其中  $\mu_B$  是玻尔磁子, 取国际单位制时数值为  $9.27 \times 10^{-24}$  J/T,  $g$  是光谱分裂因子. 其次考虑到的有助于位错运动的是交变磁场的热能  $U_T$ , 有  $U_T \approx kT \approx 10^{-2}$  eV. 其中  $k$  是玻尔兹曼常数,  $T$  是热力学温度. 而位错运动时需要克服的能量障碍主要有两个: 一是位错越过障碍的激活能  $U_a \approx 0.1-1$  eV, 二是位错和障碍间的交换能  $U_{ex} \approx 1$  eV. 可见塞曼能与热能之和不能满足位错克服障碍所需的能量, 但是磁场下位错行为变得活跃却是实验观察到的客观事实. 以下从量子尺度电子自旋、自由基对理论等角度分析磁场下的位错动力学机制.

在金属晶体中, 电子被位错芯中的割阶、节点

等俘获, 所以位错芯中包含有顺磁性中心, 金属晶体中位错处于顺磁状态是客观事实<sup>[17]</sup>(特别当有外应力存在时这些顺磁中心数量会随着应变的增加而增加). 此外, 非零磁矩的多种点缺陷都可以作为顺磁性障碍, 这些顺磁性障碍包括: 其他位错与目标位错的交互作用点、固溶体、析出相、晶界、晶格周期性内摩擦、空位、过渡金属杂质及前述点缺陷的混合物<sup>[18]</sup>. 因此, 在宏观反磁性物质中, 顺磁性中心(局域化电子、空位、三线态激子和离子自由基等)是存在的, 并且会参加不同电子自旋态间的互换作用.

按照磁致塑性理论, 含有顺磁性中心的位错芯和障碍悬空键之间会形成自由基对. 依据量子理论, 自由基对有单重态(singlet state, S态)和三线态(triplet state, T态)两种电子自旋状态. S态的自由基对只有一种状态, 如图 7(a) 所示. 而 T态分为三种, 即 T0(图 7(b)), T+(图 7(c)) 和 T-(图 7(d)).

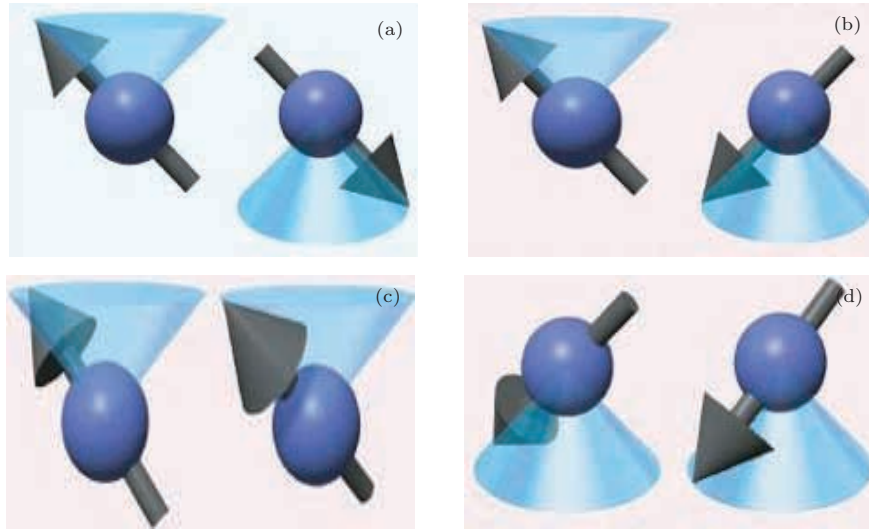


图7 自由基对的四种存在状态 (a) S态; (b) T0态; (c) T+态; (d) T-态

Fig. 7. Four states of radical pairs: (a) S state; (b) T0 state; (c) T+ state; (d) T- state.

当处于不同态的自由基对距离较大时( $\geq 10^{-9}$  m), S态与三种T态的能量匹配处于共存共振区<sup>[19]</sup>. 当两个自由基对逐渐靠近时, 并当二者之间距离较短时( $< 10^{-9}$  m), 在位错芯和障碍之间会激发出电子, 在磁场条件下, 磁场的作用会使电子自旋状态发生改变, 进而改变自由基状态, 此时发生S, T态间的转换, 破坏了原有的共存共振状态, 体系处于一种非平衡状态<sup>[20]</sup>. 在一定磁场条件下(主要是磁场强度条件), 发生从S态向T态的大量转化.

从能量角度看, 自由基对中位错和障碍间的结合能大小主要取决于自由基对的状态. 当处于S态时, 位错和障碍间的结合能大, 位错不容易从障碍处退钉扎; 而在T态时, 位错和障碍间的结合能

较弱, 此时位错很容易穿越障碍, 有助于位错的退钉扎. 磁场作用促进了S态向T态的转换, 导致T态自由基对数量增加, 有助于位错退钉扎和位错增殖. 图8是磁场处理前后位错钉扎和退钉扎示意图.

磁场对电子自旋的影响调整了自由基对的交换作用, 从而导致有效的自旋晶格松弛, 而对应的晶格松弛转换只允许发生在同等态下, 比如T0和T±间, 而S和T态之间的转化是禁止的. 因此, 进一步分析认为磁场对自由基对存在状态的影响过程为: 首先是因电子自旋转变发生从S态到T0态的转化, 然后是磁场诱发自旋晶格松弛, 转化到T±态, 此条件下位错穿越障碍, 完成退钉扎过程.

磁场中自由基对密度  $D$  由密度矩阵决定:

$$i \frac{\partial D}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} [H_a, D] - i \frac{D}{t}, \quad (3)$$

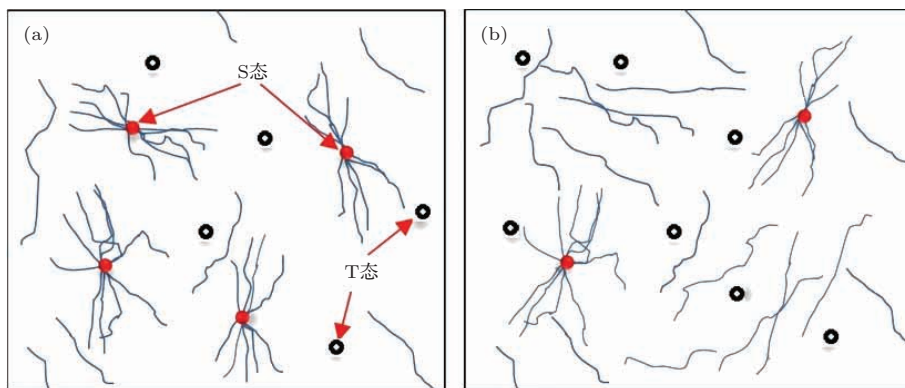


图8 磁场处理前后位错钉扎和退钉扎示意图 (实心点表示S态钉扎位错的障碍, 空心点表示T态退钉扎后的障碍, 线条表示位错)

Fig. 8. Schematic of dislocation pinning (solid points) and depinning (hollow points) before (a) and after (b) magnetic field treatment.

此处,  $i$  表示矩阵矢量单位,  $t$  是位错运动时间,  $h$  是普朗克常数,  $| |$  表示矩阵,  $H_a$  是自由基对的自旋 Hamiltonian(汉密尔顿)函数. 自由基对从 S 向 T0 态转化过程中相应的能量变化  $E_M$  为

$$E_M = \frac{1}{2} \Delta g \mu_B H, \quad (4)$$

其中  $\Delta g$  是自由基对状态的  $g$  因子差别, 取  $10^{-3}$  [21].

位错和障碍间形成了无关联的四种自由基对, 因此可以假定初始条件下的密度矩阵为

$$D_S(0) = D_{T0}(0) = D_{T+}(0) = D_{T-}(0) = \frac{1}{4}. \quad (5)$$

在内应力无序场驱动下位错进行运动, 通过 S, T 态共振区通道时的时间函数是随机分布的. 根据泊松时间分布得到磁场  $H$  下处于 S 态自由基对的平均数量  $D_S(H)$  为

$$D_S(H) = \frac{1}{t_0} \int_0^\infty D_S(t) \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right) dt, \quad (6)$$

其中,  $t_0$  是自由基对穿越 S, T 共振区的平均时间. 结合 (3) 式分析得到,  $D_S(H)$  是  $D_S(t)$  的 Laplace 转化, 可得到线性公式:

$$D_S(H) = \frac{1}{4} \left[ \left(1 + \frac{T1}{t_0}\right) \left(1 + \frac{T2}{t_0}\right) + \frac{H^2}{H_m^2} \right] \times \left[ \left(1 + \frac{T1}{t_0}\right) \left(1 + \frac{T2}{t_0}\right) + \left(1 + \frac{t_0}{2T1}\right) + \frac{H^2}{H_m^2} \right]^{-1}, \quad (7)$$

其中  $T1, T2$  是纵向和切向的自旋松弛时间, 对于金属中的自旋晶格松弛可取约  $2.4 \times 10^9$  s [22], 其中  $H_m$  是临界磁场强度, 有

$$H_m = \frac{h}{\Delta g \mu_B \sqrt{T1 \cdot T2}}. \quad (8)$$

将  $h = 6.63 \times 10^{-34}$  J·s,  $\Delta g \approx 10^{-3}$ ,  $\mu_B = 9.27 \times 10^{-24}$  J/T,  $T1 = T2 \approx 2.4 \times 10^9$  s 代入后得到  $H_m$  为  $3 \times 10^6$  A/m, 对应的  $B$  值为 3 T, 即为临界磁感应强度. 其含义为: 当  $B$  从 0 上升到 3 T

的过程中, 随磁感应强度增加, 磁场诱发自由基对从 S 向 T 态转化的作用程度逐渐增加, 而当  $B$  高于 3 T 后磁场作用效果就趋于平缓. 该结论与图 2 所示的实验现象相符合.

### 3.4 磁场下位错运动过程和特征时间

图 9 显示了磁场下位错在一个周期内(从越过一个障碍到越过下一个障碍的时间)的运动过程. 基于颗粒强化的材料组织特征, 以图 3(a) 的塑性变形机制为例. 图中所示平面为位错滑移面, 阴影部分是位错滑移过的面积. 位错运动过程具体地分为四个阶段.

第一阶段, 如图 9(a) 所示, 位错处于初始状态. 图 9(a) 箭头所示为位错滑移方向, 左上角图表示磁场条件. 此时位错完成了上一次退钉扎, 越过了障碍群, 离开障碍向前运动. 位错沿滑移面在障碍间向前滑移, 所需的特征时间为  $10^{-3}—10^{-8}$  s, 具体时间取决于相邻障碍间的距离.

第二阶段, 如图 9(b) 所示, 位错逐渐靠近下一个障碍. 当位错距离障碍较远时, 所穿越的区域电子自旋处于 S 态、T 态共振共存区; 当位错靠近障碍足够近 ( $<10^{-9}$  m) 时有电子激发出来, 在位错和障碍间形成自由基对. 形成自由基对所需要的特征时间为  $10^{-14}—10^{-6}$  s, 该特征时间短, 说明电子激发几乎是瞬间完成. 在  $\Delta g$  机制下, 促使自由基对从 S 态向 T0 态转换, 此时磁场影响自由基对中的电子自旋状态, 发生原子重排, 进而诱发自旋晶格松弛, 进一步完成从 T0 向 T± 的转化. 完成原子重排需要的时间为  $10^{-12}—10^{-8}$  s.

第三阶段如图 9(c) 所示, 位错在障碍处停留. 虽然因磁场作用位错越过障碍所需要的能量减少, 但仍有一定的能量需求, 能量来源可能是热能、应力能等. 该阶段的特征时间为  $10^{-5}$  s 到  $\infty$ , 当没有足够能量激发位错运动时, 位错将停留在障碍位置处.

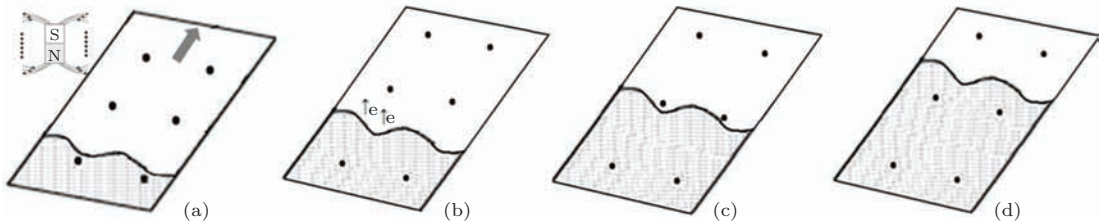


图 9 磁场下位错运动过程示意图 (a) 初始态; (b) 靠近障碍; (c) 障碍处停留; (d) 越过障碍

Fig. 9. Schematic of dislocation movement: (a) initial state; (b) approaching the obstacle; (c) waiting nearby the obstacle; (d) surmounting the obstacle and moving forward.

第四阶段完成位错退钉扎,如图9(d)所示.在达到临界能量后,位错完成退钉扎,并离开障碍沿滑移面继续运动,运动1—2个晶格常数的距离所需时间为 $10^{-5}$ — $10^{-10}$  s.完成位错运动的一个周期.

图10是磁场下位错运动各阶段特征时间的对比图.矩形图高度表示位错完成对应阶段运动所需特征时间的数量级范围,高度值越大表明完成该阶段所需时间的不确定程度越高,按照从高到低的顺序依次为:障碍处停留>电子激发>位错在障碍间运动=位错退钉扎>原子重排.图中矩形图位置高表明时间数量级大,对应需要时间长,按照从长到短的顺序依次为:障碍处停留>位错在障碍间运动>位错退钉扎>电子激发>原子重排.可见,障碍处的停留是位错运动中的限制性环节,而电子激发和原子重排需要的时间短,即磁场对位错运动的影响可在短时间内完成,磁场作用具有高效性.

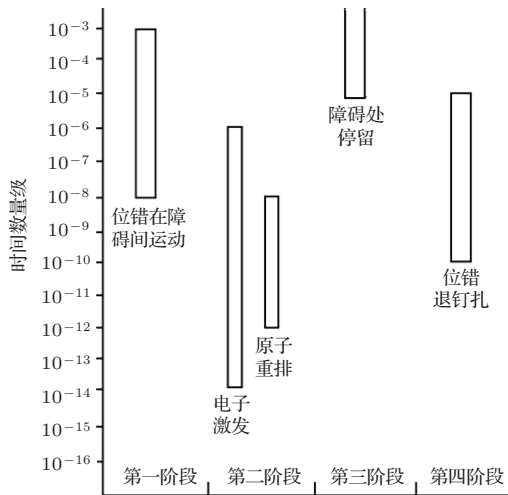


图10 磁场下位错运动各阶段特征时间的对比

Fig. 10. Comparative diagram of characteristic time of separate steps for dislocation movement.

进一步计算位错在障碍物附近停留的时间 $t_w$ .滑移面上障碍物之间的平均距离 $\lambda$ 为

$$\lambda = a\sqrt{Z/C}, \quad (9)$$

$Z$ 是障碍总数, $C$ 是障碍浓度, $a$ 是晶格常数.

位错在障碍间的黏滞移动时间 $t_m$ 表达式为

$$t_m = \frac{\lambda\eta}{\tau b}, \quad (10)$$

其中, $\eta$ 为位错的黏性移动系数, $\tau$ 是滑移面上的切应力.定义位错移动速度为 $V$ ,有

$$V = \frac{\lambda}{(t_m + t_w)}. \quad (11)$$

在一般晶体中, $\eta$ 值很小,黏滞移动时间短,可忽略 $t_m$ ,则有

$$t_w \approx a\sqrt{Z/C}/V. \quad (12)$$

通过数据估计可以得出,在无应力场单独磁场作用条件下,当 $a = 0.404$  nm, $V = 10^{-3}$  m/s, $Z/C \approx 10^{10}$ — $10^{14}$ ,此时 $t_w \approx 10^{-2}$ — $1$  s;在有应力场和磁场同时作用时,即有宏观塑性变形时 $V \approx 1$  m/s<sup>[1]</sup>,此时 $t_w \approx 10^{-5}$ — $10^{-3}$  s,停留时间变短,但仍处于图10设定的 $10^{-5}$ — $\infty$ 的范围.

### 3.5 磁场下位错运动速度、位错线长度和位移

设位错保持钉扎状态的概率为 $N(H)$ ,则有

$$N(H) = (1-p) + p \cdot D_S(H), \quad (13)$$

其中 $p$ 是位错出现在障碍附近的概率,第一项 $(1-p)$ 表示位错通过障碍,第二项 $p \cdot D_S(H)$ 表示处于S态的自由基对,显然此时位错处于钉扎态.

磁场中平均位错线长度 $L$ 的相对变化 $L(H)$ 为

$$\begin{aligned} L(H) &= L(0) \frac{N(0)}{N(H)} \\ &= L(0) \frac{(1-p) + p \cdot D_S(0)}{(1-p) + p \cdot D_S(H)}. \end{aligned} \quad (14)$$

显然 $L(H)$ 与 $N(H)$ 成反比,即存在“位错钉扎率高, $L$ 短;位错退钉扎后, $L$ 增长”的事实.

在 $H \gg H_m$ 条件下,根据(5),(7)和(14)式可计算 $L$ 的平均饱和值 $L(\infty)$ :

$$L(\infty) = L(0) \frac{(1-p) + p \cdot D_S(0)}{(1-p) + p \frac{D_S(0)}{1 + t_0/2T1}}. \quad (15)$$

在磁场强度 $H < H_m$ 条件下可以得到

$$L(H) = L(0) \left( 1 + \frac{H^2}{H_0^2} \right), \quad (16)$$

其中 $H_0$ 表达式为

$$\begin{aligned} H_0 &= H_m \times \sqrt{\frac{(1-p) + p \cdot D_S(0)}{p \cdot D_S(0)}} \left( \frac{2T1}{t_0} \right) \\ &\times \left( 1 + \frac{T1}{t_0} \right) \left( 1 + \frac{T2}{t_0} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

在位错运动到障碍位置并处于停留状态时,障碍处出现位错的概率高,存在 $p \approx 1$ .根据实验得到的 $H_m = 3 \times 10^6$  A/m, $H_0 \approx (0.3 \sim 0.5) \times 10^6$  A/m的事实<sup>[10]</sup>,将 $T1 \approx T2 \approx 2.4 \times 10^9$  s代入(17)式可得 $t_0$ 数量级为 $10^{-7}$  s<sup>[17]</sup>.若磁场引起S, T态转化的尺寸范围在晶格常数( $10^{-10}$  m)范围内,则此

时位错运动速度是 $10^{-3}$  m/s, 即是磁场下位错穿越障碍时的速度.

与初始态 $L(0)$ 相比, 根据(16)式得到位错线长度 $L(H_m) \approx (36 \sim 100)L(0)$ , 即位错线长度以 $10^2$ 的数量级增加, 此时材料塑性变形能力提高. 再者, 磁场下位错的平均位移 $l$ 正比于“磁处理”时间 $t$ , 且正比于磁感应强度的平方, 即 $l \propto B^2t$ . 变化的位错密度随磁感应强度 $B$ 和时间 $t$ 而增加, 并且随着 $B^2t$ 的值增高, 位移 $l$ 也逐渐达到饱和. 此外, 位移 $l$ 随着顺磁性障碍浓度的增加而减少, 这是因为顺磁性障碍数量多时, 位错滑移需要克服的阻力大, 同样的时间内滑移量就会减少.

## 4 结 论

对氧化铝强化纯铝基复合材料进行不同磁感应强度下(0—3 T范围)的磁场处理, 随磁感应强度增加, 材料中位错密度增加, 此时可移动的位错数量增加, 塑性变形能力改善. 分析驱动位错运动的主要原因不是传统变形与塑性理论中的磁场力的作用, 而是基于量子尺度的磁致塑性效应. 对该效应下位错动力学机制的讨论结果表明: 当具有顺磁特征的位错靠近障碍时会激发出电子并在位错和障碍间形成自由基对, 磁场作用影响了电子自旋状态, 从而使自由基对从高键能结合的S态向低键能结合的T态转化, 位错穿越障碍所需的能量降低, 位错退钉扎趋势增加, 材料塑性变形能力提高. 位错运动周期中限速环节是障碍处的停留, 电子激发和原子重排所需要时间短, 磁场作用具有高效性.  $B = 3$  T是磁场发挥作用的临界磁感应强度值, 即低于此值时随磁感应强度增加位错密度增加, 高于此值时磁场作用效果会减弱. 在临界磁感应强度下, 计算得到磁场下位错运动速度为 $10^{-3}$  m/s, 位错线长度比未加磁场时增加两个数量级, 磁场下位错的平均位移正比于磁处理时间, 且正比于磁感应强度的平方. 研究表明, 磁场作用有改善复合材料塑性变形能力的潜力. 在后期研究中将探讨磁

场、应力场协同作用下复合材料的塑性变形过程和机制, 为将磁场应用到复合材料塑性加工过程以改善材料塑性变形能力提供理论基础.

## 参考文献

- [1] Kim C S, Galligan J M 1996 *Acta Mater.* **44** 775
- [2] Nes E, Marthinsen K 2002 *Mat. Sci. Eng. A* **322** 176
- [3] Li W, Fan T Y 2011 *Chin. Phys. B* **20** 036100
- [4] Wang H M, Li G R, Zhao Y T, Zhang Z 2011 *J. Alloys Compd.* **509** 5696
- [5] Li H T, Wang Q, Wang K, He J C 2011 *Intermetallics* **19** 187
- [6] Li G R, Wang H M, Zhao Y T, Chen D B, Chen G, Cheng X N 2010 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **20** 577
- [7] Barham M, Steigmann D J, White D 2012 *Inter. J. Non-Linear Mech.* **47** 185
- [8] Li H Q, Chen Q Z, Wang Y B, Chu W Y 1997 *Chin. Sci. Bull.* **42** 2282 (in Chinese) [李红旗, 陈奇志, 王燕斌, 褚武扬 1997 科学通报 **42** 2282]
- [9] Golovin Y I 2004 *Phys. Solid State* **46** 789
- [10] Molotskii M, Fleurov V 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2779
- [11] Liu Z L, Hu H Y, Fan T Y 2007 *Trans. Beijing Institute of Technology* **27** 113 (in Chinese) [刘兆龙, 胡海云, 范天佑 2007 北京理工大学学报 **27** 113]
- [12] Buchachenko A L 2006 *J. Exp. Theor. Phys.* **129** 909
- [13] Li G R, Wang H M, Zhao Y T 2009 *J. Alloys Compd.* **471** 530
- [14] Wang H M, Li G, Zhao Y T 2010 *Mat. Sci. Eng. A* **527** 2881
- [15] Urusovskaya A A, Alshits V I, Smirnov A E, Bekkauer N N 2003 *Crystallography Report* **48** 796
- [16] Li G R, Wang H M, Yuan X T, Zhao Y T 2013 *Mater. Lett.* **99** 50
- [17] Molotskii M I 1989 *Soviet Scientific Reviews* (London: Harwood Press) p1
- [18] Hutchinson B, Ridley N 2006 *Scripta Mater.* **55** 299
- [19] Salikhov K M, Molin Y N, Sagdeev R Z, Buchachenko A L 1984 *Spin Polarization and Magnetic Effects in Radical Reactions* (Amsterdam: Elsevier Press) pp1
- [20] Molotskii M, Fleurov V 2000 *Phys. Chem. B* **104** 3812
- [21] Molotskii M I 2000 *Mat. Sci. Eng. A* **287** 248
- [22] Mullner P, Chernenko V A, Kistorz G 2003 *J. Magn. Magn. Mater.* **267** 325

# Mechanism of dislocation kinetics under magnetoplastic effect\*

Li Gui-Rong<sup>†</sup> Wang Hong-Ming Li Pei-Si Gao Lei-Zhang Peng Cong-Xiang Zheng Rui

(School of Materials Science and Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

( Received 12 January 2015; revised manuscript received 25 February 2015 )

## Abstract

The plasticity of material is associated closely with the movement and proliferation of dislocation. Therefore, in the deformation and plasticity theory the dislocation kinetics is an important topic. In the case of no magnetic field, the conventional dislocation kinetics normally focuses on the dislocation microstructure, nucleation and mobility, and the inherent relationship between electron spin and plasticity is seldom concerned. As a matter of fact, the electron rotation is directionless and unordered in the absence of magnetic field, so the electron behavior will not take an apparent effect on the microstructure and properties of material. Nevertheless, in the presence of magnetic field the case is different. The magnetic field will influence the electron spin and, therefore, atomic rearrangement. The dislocation behavior and plasticity will also be affected by the magnetic field, which is called the magnetoplastic effect. In this paper, on the basis of magnetoplastic effect the dislocation kinetics involving dislocation stress, mobility and others is discussed both qualitatively and quantitatively. It has rarely reported currently in the literature. The pulsed magnetic field is first utilized to process solid nanometer alumina particulates reinforced aluminum matrix composites. The experimental results demonstrate that the dislocation density increases with magnetic induction intensity increasing from zero to 3 T. The phenomenon reveals the characteristic of plastic deformation in a processed sample. The further theoretical analysis displays that the generated magnetic force is not large enough to activate the dislocation movement. The fundamental reason lies in the magnetoplastic effect, that is, the magnetic field brings about the transition of electron spin in the radical pairs between paramagnetic dislocation cores and obstacles. The radical pairs tend to be converted from the singlet state with high bonding energy to the triplet state with low bonding energy, therefore, the prerequisite energy for dislocation to surmount the obstacles will be lowered and the depinning tendency will be apparent. In a period of dislocation movement, the rate limiting consists in the dislocation stopping at the obstacle; on the contrary, the electron excitation and atomic arrangement governed by the magnetic field take negligible time. Hence, it can be seen that the performance of magnetic field is highly efficient. The critical magnetic induction intensity is calculated to be 3 T. That is, when the intensity is lower than 3 T, the magnetoplastic effect becomes strong with the increase of magnetic induction intensity and action time; when the intensity is higher than 3 T, the effect changes gently. Under this critical magnetic induction intensity, the dislocation velocity is deduced to be on the order of  $10^{-3}$  m/s. Moreover, the dislocation length will be increased by two orders of magnitude. The displacement of dislocation is proportional to the square of magnetic induction intensity and action time of magnetic field. To sum up, the magnetic field treatment has been proved to be an efficient approach to improve the plasticity of material. The prospective research will focus on the mechanical properties of alloys or composites subjected to magnetic field, together with tensile stress so as to acquire the effect of magnetic field parameters of macro plasticity of materials.

**Keywords:** magnetoplastic effect, dislocation dynamics, deformation and plasticity, aluminum matrix composites

**PACS:** 81.40.Lm, 61.72.Bb, 62.20.F–

**DOI:** 10.7498/aps.64.148102

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51371091, 51174099).

† Corresponding author. E-mail: [liguirong@ujs.edu.cn](mailto:liguirong@ujs.edu.cn)