

一维六方准晶中螺形位错与楔形裂纹的相互作用*

李联和[†] 刘官厅

(内蒙古师范大学数学科学学院, 呼和浩特 010022)

(2011年7月9日收到; 2011年8月4日收到修改稿)

采用保角映射方法和扰动技巧, 研究了一维六方准晶中螺形位错和半无限楔形裂纹的相互作用. 讨论了位错的位置和楔形角对作用在位错上的力的影响, 得到了应力强度因子和作用在位错上的力的解析解. 此外, 还详细地讨论了位错对裂纹的影响. 当楔形角参数 $\lambda = 1/2$ 时, 半无限楔形裂纹退化成半无限尖裂纹, 相应的结果可以作为特殊情况而直接得到.

关键词: 准晶, 位错, 楔形裂纹

PACS: 61.44.Br, 62.20.D-, 02.30.Em

1 引言

准晶是 1984 年发现的一种新的固体结构^[1], 在理论和实验上已引起科技人员的极大兴趣, 其物理性质 (例如结构、光、电、磁和弹性等性质) 已被广泛地研究. 在 Landau 弹性理论框架内, 文献 [2—4] 研究了准晶的缺陷 (如位错) 问题. 1989 年, 在实验中首次发现了准晶中含有缺陷^[5,6], 此后, 这一领域的研究取得了很大的进步^[7,8]. 研究者们采用不同的方法获得了准晶缺陷问题的解析解. 文献 [9] 采用迭代的方法, 分析了五次对称二维准晶中的位错, 并且获得了位移场的解析表达式; 文献 [10] 利用 Fourier 变换方法研究了十次对称二维准晶中的 Griffith 裂纹, 具有开创性. 文献 [11] 利用扰动方法研究了十次对称二维准晶中的圆形裂纹; 文献 [12] 采用复变函数方法研究了二十面体准晶中的椭圆孔. 上述工作研究的都是准晶中的单缺陷问题.

我们知道, 缺陷相互作用对于理解材料的物理和力学行为起着至关重要的作用. 但对于准晶材料, 目前有关这方面的研究还很少.

本文研究一维六方准晶中螺形位错与楔形裂

纹的相互作用. 讨论了位错的位置和楔形角对作用在位错上的力的影响, 得到了应力强度因子和作用在位错上的力的解析解. 此外, 还详细讨论了位错对裂纹的影响.

2 控制方程与基本解

本文研究的物理模型如图 1 所示. 一维六方准晶中, 在楔形裂纹的附近有一螺形位错, 准晶在无穷远处受剪切力 τ_∞ 和广义剪切力 τ_∞^h 的作用, 并假设楔形裂纹沿 x 轴负方向为无限长, α 表示楔形角. 位错位于点 $z_0(r_0, \theta_0)$, Burgers 矢量为 $(b_3^//, b_3^\perp)$.

由于所有场变量都与 z 无关, 所以变形几何方程为^[13]

$$\begin{aligned} \varepsilon_{zx} &= \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial x}, \\ \varepsilon_{zy} &= \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial y}, \\ w_{zx} &= \frac{\partial w_z}{\partial x}, \\ w_{zy} &= \frac{\partial w_z}{\partial y}; \end{aligned} \quad (1)$$

* 国家自然科学基金 (批准号: 11026175, 11061019)、内蒙古自治区自然科学基金 (批准号: 2009MS0102, 2009BS0104) 和内蒙古自治区高等学校科学研究基金 (批准号: NJ08024, NJ10047) 资助的课题.

[†] E-mail: nmglilianhe@163.com

平衡方程 (忽略体力) 为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial H_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial H_{zy}}{\partial y} &= 0; \end{aligned} \quad (2)$$

广义胡克定律为

$$\begin{aligned} \sigma_{zy} &= 2C_{44}\varepsilon_{zy} + R_3w_{zy}, \\ \sigma_{zx} &= 2C_{44}\varepsilon_{zx} + R_3w_{zx}, \\ H_{zy} &= 2R_3\varepsilon_{zy} + K_2w_{zy}, \\ H_{zx} &= 2R_3\varepsilon_{zx} + K_2w_{zx}. \end{aligned} \quad (3)$$

这里 σ_{ij} , ε_{ij} 和 u_z 分别为声子场的应力、应变和位移. H_{ij} , w_{ij} 和 w_z 分别为相位子场的应力、应变和位移. C_{44} 和 K_2 分别为声子场和相位子场的弹性常数, R_3 为声子场与相位子场耦合弹性常数.

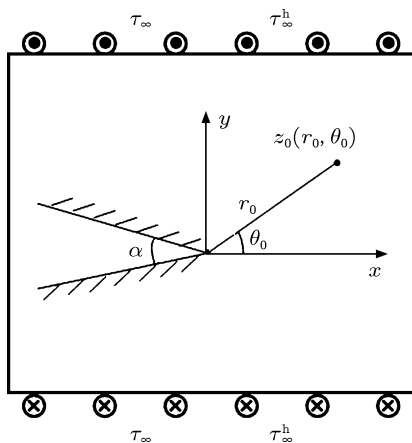


图1 一维六方准晶中螺形位错与楔形裂纹的相互作用

把方程 (1) 代入方程 (3), 再利用方程 (2) 可得

$$\begin{aligned} C_{44}\nabla^2 u_z + R_3\nabla^2 w_z &= 0, \\ R_3\nabla^2 u_z + K_2\nabla^2 w_z &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 ∇^2 为二维拉普拉斯算子. 由方程 (4) 可得位移向量 \mathbf{u} 的一般表达式, 即

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= [u_z, w_z]^T \\ &= \text{Re} [f_u(z), f_w(z)]^T \\ &= \text{Re}[\mathbf{f}(z)]. \end{aligned} \quad (5)$$

这里 Re 表示实部, $f_u(z)$, $f_w(z)$ 表示关于变量 z 的任意解析函数, 上标 T 表示转置. 对于本文所考虑的物理模型, 复向量函数 $\mathbf{f}(z)$ 可表示为

$$\mathbf{f}(z) = \mathbf{f}_0(z) + \mathbf{f}_1(z), \quad (6)$$

其中 $\mathbf{f}_0(z)$ 与未受扰动的场相关, 在复平面上除了点 z_0 之外解析, $\mathbf{f}_0(z)$ 可选择如下:

$$\mathbf{f}_0(z) = \mathbf{A} \ln(z - z_0) + \mathbf{B}z. \quad (7)$$

这里

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= [A_1 i, A_2 i]^T, \\ \mathbf{B} &= \{B_1 i, B_2 i\}^T, \end{aligned} \quad (8)$$

其中,

$$\begin{aligned} A_1 &= -\frac{b_3^{\parallel}}{2\pi}, \\ A_2 &= -\frac{b_3^{\perp}}{2\pi}, \\ B_1 &= \frac{R_3\tau_{\infty}^h - K_2\tau_{\infty}}{C_{44}K_2 - R_3^2}, \\ B_2 &= \frac{R_3\tau_{\infty} - C_{44}\tau_{\infty}^h}{C_{44}K_2 - R_3^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

函数 $\mathbf{f}_1(z)$ 与受到裂纹扰动的场相关, 除裂纹处之外是解析的.

由方程 (1), (3) 和 (5), 沿任意弧 AB 的合力为

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \int_A^B \mathbf{t}_x dy - \mathbf{t}_y dx \\ &= \mathbf{C} \text{Im}[\mathbf{f}(z)]_A^B. \end{aligned} \quad (10)$$

这里, Im 表示虚部, \mathbf{t}_x , \mathbf{t}_y 和 \mathbf{C} 可表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_x &= [\sigma_{zx}, H_{zx}]^T, \\ \mathbf{t}_y &= [\sigma_{zy}, H_{zy}]^T, \\ \mathbf{C} &= \begin{bmatrix} C_{44} & R_3 \\ R_3 & K_2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

因此, 在楔形裂纹表面 $\theta = \pm(\pi - \alpha/2)$ 处的边界条件为

$$\mathbf{T}(z) = 0. \quad (12)$$

为了获得满足边界条件 (12) 式的复函数 $\mathbf{f}(z)$, 引进保角映射如下:

$$z = \zeta^{1/\lambda}, \quad (13)$$

其中

$$\begin{aligned} \lambda &= \pi/(2\pi - \alpha), \\ \zeta &= \xi + i\eta. \end{aligned}$$

这一保角映射把 z 平面上的边界 $\theta = \pm(\pi - \alpha/2)$ 映射到了 ζ 平面的虚轴上. 那么, 在 ζ 平面上边界条件 (12) 式变为

$$\mathbf{T}(\zeta_c) = 0, \quad (14)$$

其中 ζ_c 表示虚轴上的值. 方程 (14) 可以改写为

$$f(\zeta_c) - \bar{f}(\bar{\zeta}_c) = 0, \quad (15)$$

其中, \bar{f} 表示 f 的复共轭, $\bar{\zeta}_c$ 表示 ζ_c 的复共轭. 由方程 (6), (12) 和 (15), 并且注意到沿着虚轴有 $\bar{\zeta}_c = -\zeta_c$ 成立, 再利用解析延拓技巧^[14] 可得

$$f_1(\zeta) = \bar{f}_0(-\zeta). \quad (16)$$

由方程 (7) 和 (16), 在 ζ 平面上可获得复向量函数 $f(\zeta)$ 如下:

$$f(\zeta) = A \ln(\zeta - \zeta_0) + \bar{A} \ln(\zeta + \bar{\zeta}_0) + 2i \text{Im} B \zeta, \quad (17)$$

因此在物理平面上, 我们有

$$f(z) = A \ln(z^\lambda - z_0^\lambda) + \bar{A} \ln(z^\lambda + \bar{z}_0^\lambda) + 2i \text{Im} B z^\lambda. \quad (18)$$

3 应力强度因子

由方程 (1), (3), (5) 和 (18), 可以获得整个应力场和位移场的解析表达式 (附录 A 中给出了声子场和相位子场的应力表达式).

与经典弹性理论类似, 定义复应力强度因子向量如下:

$$K = \begin{bmatrix} K_{\sigma_{zx}} - iK_{\sigma_{zy}} \\ K_{H_{zx}} - iK_{H_{zy}} \end{bmatrix}. \quad (19)$$

由于在裂纹尖端附近所有的场变量都具有 $r^{\lambda-1}$ ($\frac{1}{2} \leq \lambda \leq 1$) 阶奇异性, 可以把方程 (19)

改写为

$$K = \lim_{z \rightarrow 0} (2\pi z)^{(1-\lambda)} (t_x - it_y) = \lim_{z \rightarrow 0} (2\pi z)^{(1-\lambda)} [C f'(z)]. \quad (20)$$

将声子场和相位子场的应力表达式代入 (20) 式可得

$$K_{\sigma_{zy}} = -\frac{2\lambda}{(2\pi r_0)^\lambda} [(C_{44} b_3^{//} + R_3 b_3^\perp) \cos \lambda \theta_0 + 2\pi(C_{44} B_1 + R_3 B_2)], \quad (21)$$

$$K_{H_{zy}} = -\frac{2\lambda}{(2\pi r_0)^\lambda} [(R_3 b_3^{//} + K_2 b_3^\perp) \cos \lambda \theta_0 + 2\pi(R_3 B_1 + K_2 B_2)]. \quad (22)$$

以上结果表明, 螺形位错仅仅是在沿着 x 轴方向对楔形裂纹的应力强度因子有贡献, 这一点与普通晶体中的尖裂纹情形相类似. 在不考虑相位子场的情况下, 方程 (21) 和 (22) 退化成文献 [15] 中的相应结果.

4 广义 Peach-Koehler 力

利用文献 [16] 给出的准晶广义 Peach-Koehler 力公式, 由裂纹诱导的作用在位错的上方的力为

$$F_x = b_3^{//} \sigma_{zy}^T + b_3^\perp H_{zy}^T, \quad (23)$$

$$F_y = -b_3^{//} \sigma_{zx}^T - b_3^\perp H_{zx}^T. \quad (24)$$

这里 $\sigma_{zx}^T, \sigma_{zy}^T, H_{zx}^T$ 和 H_{zy}^T 是在没有位错的情况下, 由于裂纹的存在而产生的应力, 其详细表达式见附录 B. 对于本文所考虑的物理模型, 方程 (23) 和 (24) 可以表示为

$$F_x = \frac{1}{4\pi r_0} (C_{44} b_3^{//2} + 2R_3 b_3^{//} b_3^\perp + K_2 b_3^\perp{}^2) \left[(\lambda - 1) \cos \theta_0 - \frac{\lambda \cos(\lambda - 1)\theta_0}{\cos \lambda \theta_0} \right] - [(C_{44} B_1 + R_3 B_2) b_3^{//} + (R_3 B_1 + K_2 B_2) b_3^\perp] (2\lambda r_0^{\lambda-1} \cos(\lambda - 1)\theta_0 - 1), \quad (25)$$

$$F_y = \frac{1}{4\pi r_0} (C_{44} b_3^{//2} + 2R_3 b_3^{//} b_3^\perp + K_2 b_3^\perp{}^2) \left[(\lambda - 1) \sin \theta_0 + \frac{\lambda \sin(\lambda - 1)\theta_0}{\cos \lambda \theta_0} \right] + 2[(C_{44} B_1 + R_3 B_2) b_3^{//} + (R_3 B_1 + K_2 B_2) b_3^\perp] \lambda r_0^{\lambda-1} \sin(\lambda - 1)\theta_0. \quad (26)$$

当位错位于 x 轴的正半轴时, 即 $z_0 = x_0 (x_0 > 0)$, 以上结果可以化简为

$$F_x = -\frac{1}{4\pi x_0} (C_{44} b_3^{//2} + 2R_3 b_3^{//} b_z^\perp + K_2 b_z^\perp{}^2) - [(C_{44} B_1 + R_3 B_2) b_3^{//}$$

$$+ (R_3 B_1 + K_2 B_2) b_3^\perp] (2\lambda x_0^{\lambda-1} - 1), \quad (27)$$

$$F_y = 0. \quad (28)$$

这意味着作用在位错上的力是沿着 x 轴的, 但很难直接判断出这个力是吸引力还是排斥力.

5 结论

本文采用保角映射方法和扰动技巧, 首先给出了与所要研究物理模型相对应的复势函数, 在此基础上给出了应力强度因子和作用在位错上的力的解析表达式. 本文的结果可以用来研究在裂纹附近位错的可能平衡位置. 当 $\lambda = 1/2$ 时, 半无限楔形裂纹退化成半无限尖裂纹, 相应的结果可以作为本文的特殊情况而直接得到.

附录 A 声子场和相位子场的应力表达式

声子场和相位子场的应力表达式为

$$\sigma_{zx} = (C_{44}A_1 + R_3A_2)(X_2 - X_1) - 2(C_{44}B_1 + R_3B_2)\lambda r^{\lambda-1} \sin(\lambda - 1)\theta, \quad (\text{A1})$$

$$\sigma_{zy} = (C_{44}A_1 + R_3A_2)(Y_2 - Y_1) - 2(C_{44}B_1 + R_3B_2)\lambda r^{\lambda-1} \cos(\lambda - 1)\theta, \quad (\text{A2})$$

$$H_{zx} = (R_3A_1 + K_2A_2)(X_2 - X_1) - 2(R_3B_1 + K_2B_2)\lambda r^{\lambda-1} \sin(\lambda - 1)\theta, \quad (\text{A3})$$

$$H_{zy} = (R_3A_1 + K_2A_2)(Y_2 - Y_1) - 2(R_3B_1 + K_2B_2)\lambda r^{\lambda-1} \cos(\lambda - 1)\theta. \quad (\text{A4})$$

这里,

$$X_1 = \frac{\lambda r^{\lambda-1} [r_0^\lambda \sin(\lambda\theta_0 - (\lambda - 1)\theta) - r^\lambda \sin \theta]}{r^{2\lambda} + r_0^{2\lambda} - 2r^\lambda r_0^\lambda \cos \lambda(\theta - \theta_0)},$$

$$X_2 = \frac{\lambda r^{\lambda-1} [r_0^\lambda \sin(\lambda\theta_0 + (\lambda - 1)\theta) - r^\lambda \sin \theta]}{r^{2\lambda} + r_0^{2\lambda} + 2r^\lambda r_0^\lambda \cos \lambda(\theta + \theta_0)},$$

$$Y_1 = \frac{\lambda r^{\lambda-1} [r^\lambda \cos \theta - r_0^\lambda \cos(\lambda\theta_0 - (\lambda - 1)\theta)]}{r^{2\lambda} + r_0^{2\lambda} - 2r^\lambda r_0^\lambda \cos \lambda(\theta - \theta_0)},$$

$$Y_2 = \frac{\lambda r^{\lambda-1} [r^\lambda \cos \theta + r_0^\lambda \cos(\lambda\theta_0 + (\lambda - 1)\theta)]}{r^{2\lambda} + r_0^{2\lambda} + 2r^\lambda r_0^\lambda \cos \lambda(\theta + \theta_0)}.$$

附录 B 裂纹引起的应力表达式

裂纹引起的应力表达式为

$$\sigma_{zx}^T = \frac{1}{4\pi r_0} (C_{44}b_3^{\prime\prime} + R_3b_3^{\perp}) \times \left[(1 - \lambda) \sin \theta_0 - \frac{\lambda \sin(\lambda - 1)\theta_0}{\cos \lambda\theta_0} \right] - 2(C_{44}B_1 + R_3B_2)\lambda r_0^{\lambda-1} \sin(\lambda - 1)\theta_0, \quad (\text{B1})$$

$$\sigma_{zy}^T = \frac{1}{4\pi r_0} (C_{44}b_3^{\prime\prime} + R_3b_3^{\perp}) \times \left[(\lambda - 1) \cos \theta_0 - \frac{\lambda \cos(\lambda - 1)\theta_0}{\cos \lambda\theta_0} \right] - 2(C_{44}B_1 + R_3B_2)\lambda r_0^{\lambda-1} \cos(\lambda - 1)\theta_0, \quad (\text{B2})$$

$$H_{zx}^T = \frac{1}{4\pi r_0} (R_3b_3^{\prime\prime} + K_2b_3^{\perp}) \times \left[(1 - \lambda) \sin \theta_0 - \frac{\lambda \sin(\lambda - 1)\theta_0}{\cos \lambda\theta_0} \right] - 2(R_3B_1 + K_2B_2)\lambda r_0^{\lambda-1} \sin(\lambda - 1)\theta_0, \quad (\text{B3})$$

$$H_{zy}^T = \frac{1}{4\pi r_0} (R_3b_3^{\prime\prime} + K_2b_3^{\perp}) \times \left[(\lambda - 1) \cos \theta_0 - \frac{\lambda \cos(\lambda - 1)\theta_0}{\cos \lambda\theta_0} \right] - 2(R_3B_1 + K_2B_2)\lambda r_0^{\lambda-1} \cos(\lambda - 1)\theta_0. \quad (\text{B4})$$

[1] Shechtman D, Blech I, Gratias D, Cahn J W 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1951
 [2] Bak P 1985 *Phys. Rev. B* **32** 5764
 [3] Levine D, Steinhardt P J 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 2477
 [4] Socolar J E S, Lubensky T C, Steinhardt P J 1986 *Phys. Rev. B* **34** 3345
 [5] Zhang Z, Urban K 1989 *Philos. Mag. Lett.* **60** 97
 [6] Ebalard S, Spaepen F J 1989 *Mater. Res.* **4** 39
 [7] Fan T Y, Mai Y W 2004 *Appl. Mech. Rev.* **57** 325
 [8] Hu C Z, Wang R H, Ding D H 2000 *Rep. Prog. Phys.* **63** 1

[9] De P, Pelcovits A 1987 *Phys. Rev. B* **35** 8609
 [10] Li X F, Fan T Y, Sun Y F 1999 *Philos. Mag. A* **79** 1943
 [11] Peng Y Z, Fan T Y 2002 *Physica B* **311** 326
 [12] Li L H, Fan T Y 2008 *Sci. China E* **51** 1
 [13] Ding D H, Yang W G, Hu C Z 1993 *Phys. Rev. B* **48** 7003
 [14] Muskhelishvili N I 1963 *Some Basic Problems of Mathematical Theory of Elasticity* (Noordhoff: Groningen) pp123—132
 [15] Ohr S M, Chang S J, Thomson R J 1985 *Appl. Phys.* **57** 1839
 [16] Li X F, Fan T Y 1999 *Phys. Stat. Sol. B* **212** 19

A screw dislocation interacting with a wedge-shaped crack in one-dimensional hexagonal quasicrystals*

Li Lian-He[†] Liu Guan-Ting

(College of Mathematical Science, Inner Mongolia Normal University, Huhhot 010022, China)

(Received 9 July 2011; revised manuscript received 4 August 2011)

Abstract

The interaction between a screw dislocation and a semi-infinite wedge-shaped crack in one-dimensional hexagonal quasicrystal is investigated by the conformal transformation method and the perturbation technique. Analytical solutions are obtained for the stress intensity factor of crack, and the force on dislocation. The effects of the dislocation location and the wedge angle on the image force of the dislocation are revealed. At the same time the influence of the dislocation on crack behaviour is also discussed in detail. The corresponding results of the sharp crack can be obtained as a special case of the present solutions (i.e. $\lambda = 1/2$).

Keywords: quasicrystals, dislocation, wedge-shaped crack

PACS: 61.44.Br, 62.20.D-, 02.30.Em

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11026175, 11061019), the Natural Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant Nos. 2009MS0102, 2009BS0104), and the Scientific Research Foundation of Institution of Higher Education of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant Nos. NJ08024, NJ10047).

[†] E-mail: nmglilianhe@163.com