

弹性交互作用下直刃型位错的稳态构型 及其滑移稳定性*

于志伟¹⁾ 羌建兵¹⁾ 刘路²⁾ 关德林¹⁾ 黑祖崑¹⁾

1) 大连海事大学金属材料研究所, 大连 116026

2) 中国科学院金属研究所材料疲劳与断裂国家重点实验室, 沈阳 110015

摘要 从各向同性连续介质中直线位错之间的弹性交互作用能出发, 推导出具有任意 Burgers 矢量夹角的两平行直刃型位错之间弹性交互作用的滑移力和攀移力表达式. 指出两平行直刃型位错的弹性交互作用存在三个滑移平衡位置: $u_1=1$, $u_2=-1$, $u_3=\text{tg } \phi$, 并确定了三个滑移平衡位置成为滑移稳定平衡位置的条件. 还得到滑移、攀移共同运动情况下两平行直刃型位错在弹性交互作用下的稳态构型. 分别讨论了紧束缚、弱束缚情况下位错滑移的稳定性.

关键词 刃型位错, 弹性交互作用, 稳态构型, 滑移稳定性

中图法分类号 TG111

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(1999)04-0348-52

STABLE CONFIGURATIONS AND GLIDING STABILITY OF TWO PARALLEL STRAIGHT EDGE DISLOCATIONS UNDER ELASTIC INTERACTION

YU Zhiwei¹⁾, QIANG Jianbing¹⁾, LIU Lu²⁾, GUAN Delin¹⁾, HEI Zukun¹⁾

1) Institute of Metal Material and Technology, Dalian Maritime University, Dalian 116026

2) State Key Laboratory for Fatigue and Fracture of Materials, Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015

Correspondent: YU Zhiwei, associate professor, Tel: (0411)4682670, Fax: (0411)4671395

Manuscript received 1998-10-19, in revised form 1999-01-07

ABSTRACT Based on the elastic interaction energy between straight dislocations in the isotropic solid, the formulae described gliding and climbing forces produced by the elastic interaction between two parallel straight edge dislocations with any angle between Burgers vectors have been obtained. The elastic interaction has three gliding equilibrium positions: $u_1=1$, $u_2=-1$, $u_3=\text{tg } \phi$, and their stable conditions were also determined. The stable dislocation configurations under gliding and climbing movements were obtained. The stabilities of the dislocation gliding for strong bind and weak bind were discussed.

KEY WORDS edge dislocation, elastic interaction, stable configuration, gliding stability

位错之间的长程弹性交互作用对晶体的宏观、微观力学行为都有显著的影响. 许多位错集群组态的演变过程和稳态构型还涉及平行位错线簇之间的弹性交互作用^[1,2]. 在处理具有任意 Burgers 矢量的两平行直线位错间弹性交互作用问题时, 一般采用比较合成反应前后两位错 Burgers 矢量平方和的方法来确定性地判断其作用力性质^[3], 然而, 依据这一方法仍不能普遍确定出作用力的方向, 当两平行直线位错的 Burgers 矢量相互垂直时, 该方法也不适用. 对于直刃型位错和直螺型位错的弹性交互作用, 迄今只给出了两位错线平

行且 Burgers 矢量正、反平行情形下位错的作用力和稳态构型^[4,5]. Nabarro 推导出两平行直位错弹性交互作用力的极坐标分量表达式^[6], 但没有进一步确定其稳态构型和滑移稳定性. 由于直刃型位错与其平行的直螺型位错之间无弹性交互作用, 两平行直螺型位错的弹性交互作用已有简单的结果, 因此, 弄清一般两平行直线位错的弹性交互作用问题就归结为解决具有任意 Burgers 矢量夹角的两平行直刃型位错的弹性交互作用. 本文从各向同性连续介质中两直线位错的弹性交互作用能出发, 分析一般情形下两平行直刃型位错弹性交互作用的稳态构型和滑移稳定性.

* 辽宁省自然科学基金 962044 资助项目

收到初稿日期: 1998-10-19, 收到修改稿日期: 1999-01-07

作者简介: 于志伟, 男, 1959 年生, 副教授

1 弹性交互作用下直刃型位错的稳态构型

在各向同性连续介质中, 当具有任意 Burgers 矢量的两

平行直位错线的长度远大于其间距时, 由于弹性交互作用, 单位长度的 α 和 β 位错从原间距 R 相互接近达到间距 r , 将这两个组态的能量差定义为两位错的弹性交互作用能 E , 近似有^[7]

$$E = -\frac{\mu}{2\pi}(\vec{b}_\alpha \cdot \vec{t})(\vec{b}_\beta \cdot \vec{t})\ln(r/R) - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)}(\vec{b}_\alpha \times \vec{t})(\vec{b}_\beta \times \vec{t})\ln(r/R) - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)r^2}[(\vec{b}_\alpha \times \vec{t}) \cdot \vec{r}][(\vec{b}_\beta \times \vec{t}) \cdot \vec{r}] \quad (1)$$

式中, μ 和 ν 分别为介质的切变模量和 Poisson 比, \vec{t} 为位错线方向的单位矢量. 式 (1) 右边第一项为两位错螺型分量之间的弹性交互作用能, 第二、三项为两位错刃型分量之间的弹性交互作用能.

引入直角坐标系 $x_1x_2x_3$, 设两直刃型位错线均平行于 x_3 轴, 坐标原点 O 处 α 位错的 Burgers 矢量 \vec{b}_α 沿 Ox_1 方向, (r, θ) 处 β 位错的 Burgers 矢量 \vec{b}_β 与 \vec{b}_α 成任意角 ϕ (见图 1), 此时式 (1) 可简化成

$$E(r, \theta, \phi) = -A[\cos\phi\ln(r/R) + \sin\theta\sin(\theta - \phi)] \quad (2)$$

式中, $A = \mu b_\alpha b_\beta / 2\pi(1-\nu)$. 将坐标系 $x_1x_2x_3$ 绕 x_3 轴旋转 ϕ 角得新坐标系 $x_gx_cx_3$, 以使坐标轴 Ox_g, Ox_c 分别与 β 位错的滑移和攀移方向平行. 根据两坐标系的变换关系, 再引入两个无量纲的距离参量 $u = x_g/x_c, v = x_c/R (\ll 1)$, 式 (2) 可写成

$$E(u, v, \phi) = -A \left[\cos\phi \ln|v\sqrt{1+u^2}| + \frac{\cos\phi + u \sin\phi}{1+u^2} \right] \quad (3)$$

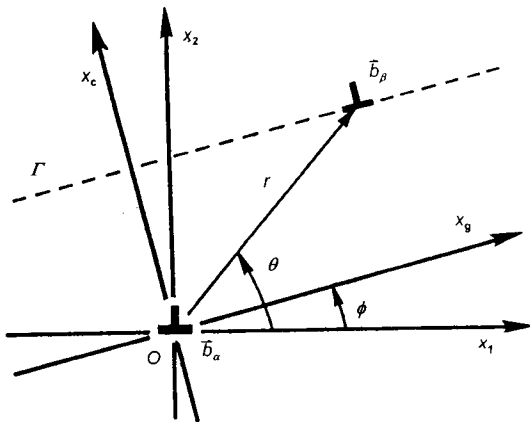


图 1 具有任意 Burgers 矢量取向的两平行直刃型位错

Fig.1 Two parallel straight edge dislocations with arbitrary Burgers vectors

β 位错所受的滑移力和攀移力分别为

$$F_g = -\frac{\partial E}{\partial x_g} = \frac{A}{x_c(1+u^2)^2}(u \cos\phi - \sin\phi)(u-1)(u+1) \quad (4)$$

$$F_c = -\frac{\partial E}{\partial x_c} = \frac{A}{x_c(1+u^2)^2} \left[u(u^2-1)\sin\phi + (3u^2+1)\cos\phi \right] \quad (5)$$

当位错处于平衡位置时 $F_g=0, F_c=0$, 位错处于稳定平衡位置时还应满足 $\nabla^2 E > 0$. 以下分别确定纯滑移和一般运动情况下两直刃型位错弹性交互作用的稳定平衡位置和稳定条件. 为了讨论方便, 假设 α 位错始终静止, 仅 β 位错运动.

1.1 位错滑移的平衡位置及稳定条件

根据式 (4), 当 β 位错仅能在其滑移面 Γ 上滑移时, 在有限距离内 β 位错有三个滑移平衡位置: $u_1=1, u_2=-1, u_3=\tan\phi$. u_1 和 u_2 分别为 x_gOx_c 平面坐标系下 I, III, 和 II, IV 象限的角平分线; u_3 即为 α 位错半原子面所在的 x_2 轴. 将三个平衡位置分别代入位错滑移稳定平衡的必要条件 $\frac{\partial F_g}{\partial x_g} < 0$ 得: u_1 为滑移稳定平衡位置时必须满足 $\pi/4 < \phi < 5\pi/4, u_2$ 为滑移稳定平衡位置时必须满足 $3\pi/4 < \phi < 7\pi/4, u_3$ 为滑移稳定平衡位置时必须满足 $-\pi/4 < \phi < \pi/4; \pi/2 < \phi < 3\pi/4; -3\pi/4 < \phi < -\pi/2$.

从图 2 可见, 除 $\phi = \pm\pi/4$ 无滑移稳定平衡位置外, 一般当 $|\phi| \leq \pi/2$ 时, β 位错在 Γ 平面上仅有一个滑移稳定平衡位置; 除 $\phi = \pm 3\pi/4$ 仅有一个滑移稳定平衡位置外, 一般当 $\pi/2 < |\phi| \leq \pi$ 时, β 位错在 Γ 平面上存在两个滑移稳定平衡位置. 据此, 当 \vec{b}_α 与 \vec{b}_β 正平行时 ($\phi=0$), $u_3(x_2$ 轴) 是 β 位错唯一的滑移稳定平衡位置, 而 u_1 和 u_2 (即 $x_g = \pm x_c$) 为不稳定平衡位置; 当 \vec{b}_α 与 \vec{b}_β 反平行时 ($\phi =$

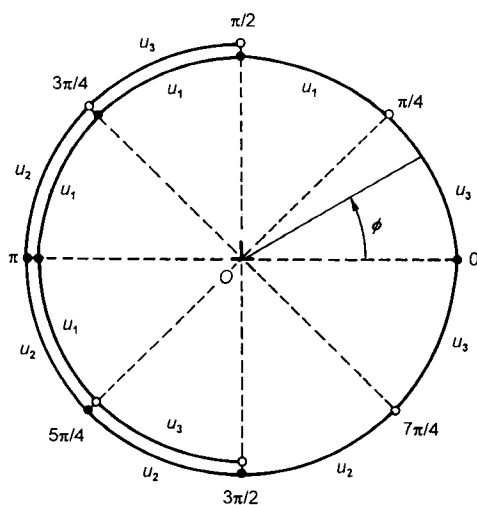


图 2 位错的滑移稳定平衡位置与其 ϕ 的取值范围

Fig.2 Stable equilibrium positions of dislocation gliding and range of ϕ

π), u_1 和 u_2 为 β 位错的两个可能滑移稳定平衡位置, 而 u_3 为不稳定平衡位置. 本文得到的此两特例结果与众所周知的结论完全相同.

1.2 位错滑移和攀移复合运动的稳态构型

当 β 位错不仅能滑移, 还可进行攀移运动时, 若使其处于稳定平衡状态必须同时满足滑移和攀移两个稳定平衡条件. 将三个滑移稳定平衡位置 u_1, u_2 和 u_3 分别代入式 (5). 当 $\phi = \pm\pi/2$ 时, u_1 和 u_2 也为攀移平衡位置. 再将它们代入攀移稳定平衡条件 $\partial F_c / \partial x_c < 0$: 当 $\phi = \pi/2$ 时, u_1 为 β 位错滑移和攀移的稳定平衡位置; 当 $\phi = -\pi/2$ 时, u_2 为 β 位错滑移和攀移的稳定平衡位置 (图 3). 位错线的这种交替排列方式与一般对称小角晶界的位错构型是一致的.

2 弹性交互作用下直刃型位错的滑移稳定性

依据式 (3) 可得到一系列取向的滑移面上两直刃型位错之间弹性交互作用能的曲线簇 (图 4).

滑移面 Γ 上 E 曲线的形态与两位错弹性交互作用的平衡状态相对应. 当 $|\phi| < \pi/2$ 时, 除 $\phi = 0$ 为对称的双峰单

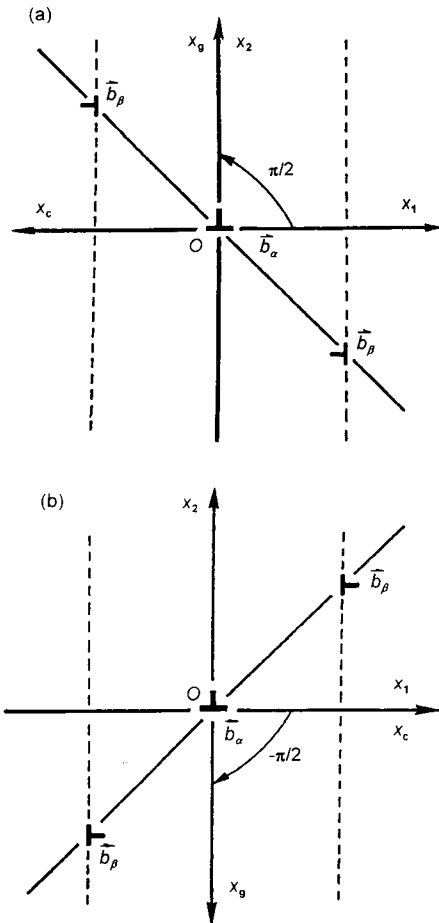


图 3 滑移、攀移复合运动时直刃型位错间弹性交互作用的稳态构型
Fig.3 Stable configurations of the elastic interaction between straight edge dislocations under gliding and climbing
 (a) $\phi = \pi/2, u_1$ (b) $\phi = -\pi/2, u_2$

谷、 $\phi = \pm\pi/4$ 各有一单势峰外, 一般 Γ 平面上 E 曲线的形态为不对称的双峰单谷; 当 $\pi/2 < |\phi| \leq \pi$ 时, 除 $\phi = \pi$ 为对称的单峰双谷、 $\phi = \pm 3\pi/4$ 各有一单势谷外, 一般 Γ 平面上 E 曲线的形态为不对称的单峰双谷; 当 $\phi = \pm\pi/2$ 时, E 曲线均呈单峰单谷形态. 随着 v 增大, Γ 平面上的 E 曲线趋于平坦, 位错间的弹性交互作用减弱; 随着 $|\phi|$ 增大, E 曲线整体降低, 位错间的弹性交互作用增强. 在不受外界力场作用情况下, β 位错达到滑移稳定平衡位置时应处于其 Γ 平面上的能谷处. 当 β 位错从外界获得滑移能量时便偏离原来的稳定平衡位置, 甚至脱离 α 位错的束缚. 下面从两种束缚情况来讨论位错滑移的稳定性.

2.1 位错的紧束缚滑移稳定性

处于滑移稳定平衡位置的 β 位错若从外界获得的滑移能量 ΔE 还不足以克服 α 位错对其的束缚时, β 位错只能在势谷内小范围滑移. 此时可用等值的 ΔE 使 β 位错偏离平衡位置的距离 $\delta = x_g - x_{g0}$ 来衡量紧束缚情况下 β 位错在 x_{g0} 点的滑移稳定性. 将 $x_{g0} + \delta$ 处的弹性交互作用能在 x_{g0} 点按 Taylor 级数展开

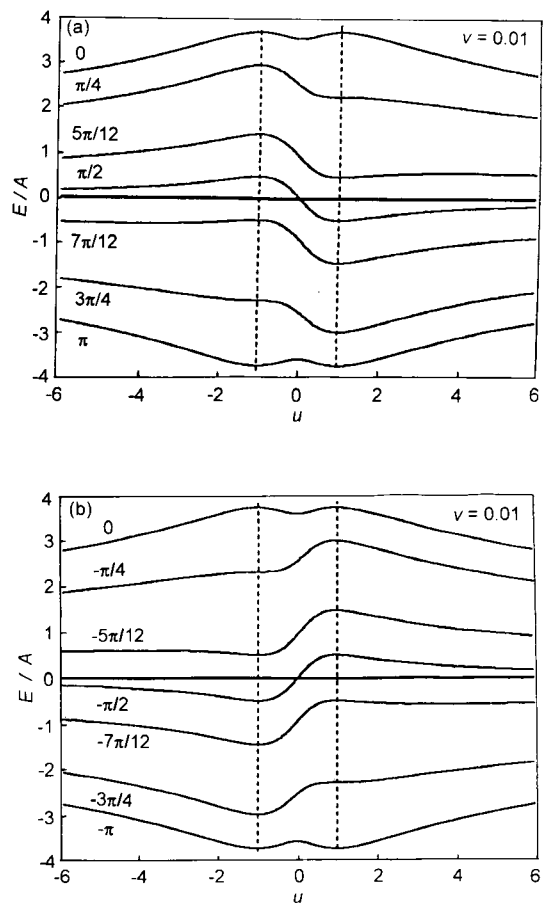


图 4 系列取向的滑移面上两直刃型位错的弹性交互作用能
Fig.4 Elastic interaction energy between straight edge dislocations on the gliding planes with various orientations
 (a) $0 < \phi < \pi$ (b) $-\pi < \phi < 0$

$$E(x_{g0} + \delta) = E(x_{g0}) + \left[\frac{\partial E}{\partial x_g} \right]_{x_{g0}} \delta + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial x_g^2} \right]_{x_{g0}} \delta^2 + \frac{1}{6} \left[\frac{\partial^3 E}{\partial x_g^3} \right]_{x_{g0}} \delta^3 + \dots \quad (6)$$

定义紧束缚滑移稳定系数 $\lambda = 1/\delta$, 由于 $(\partial E/\partial x_g)_0 = 0$, $\Delta E = E(x_{g0} + \delta) - E(x_{g0})$, 在二级近似下, 忽略 δ^3 以上各项, 将式 (3) 代入式 (6), 整理得

$$\lambda^2 = \frac{A}{\Delta E R^2 v^2} \frac{(u^4 - 6u^2 + 1)\cos \phi + 2u(3 - u^2)\sin \phi}{2(1 + u^2)^3} \quad (7)$$

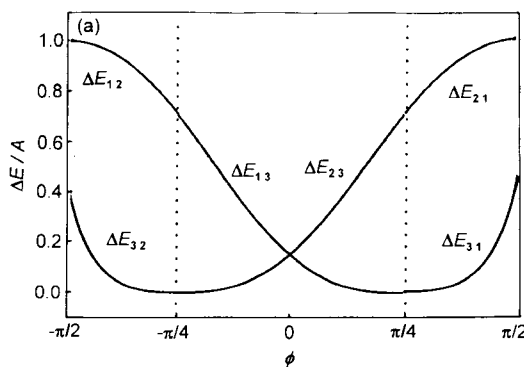
3 个滑移稳定位置 u_1 , u_2 和 u_3 的紧束缚滑移稳定系数依次为

$$\lambda_1 = \left[\frac{\sqrt{2}A}{4\Delta E R^2 v^2} \sin(\phi - \pi/4) \right]^{1/2}, \quad \pi/4 < \phi < 5\pi/4 \quad (8)$$

$$\lambda_2 = \left[-\frac{\sqrt{2}A}{4\Delta E R^2 v^2} \sin(\phi + \pi/4) \right]^{1/2}, \quad 3\pi/4 < \phi < 7\pi/4 \quad (9)$$

$$\lambda_3 = \left[\frac{\sqrt{2}A}{2\Delta E R^2 v^2} \cos 2\phi \cos^3 \phi \right]^{1/2}, \quad |\phi| < \pi/4, \pi/2 < |\phi| < 3\pi/4 \quad (10)$$

由式 (8—10) 可知, 在三个稳定平衡位置 β 位错的紧束缚滑移稳定性均随着 x_c 的增大而降低, 在 x_c 相同情况下, 每一滑移稳定平衡位置的 λ 值还随 ϕ 变化. 由图 5 可见, 在 $\pi/2 < |\phi| < 3\pi/4$ 范围内, 虽然 u_3 可作为 β 位错的滑移稳定平衡位置, 但其滑移稳定性较低. 处于 u_1 , u_2 和 u_3 位置的 β 位错分别呈 $3\pi/4$, $-3\pi/4$ 和 0 取向时具有最高的滑移稳定性, 随着与这三个取向的偏差增大, 对应稳定位置的 λ 值降低, 与 u_1 和 u_2 相比, u_3 位置具有较高 λ 值的取值范围较小. 上述讨论结果与 E 曲线 (图 4) 的形态符合. 比较图 4 还可知, 尽管 $\phi=0$ 时 $u_3=0$ 点两侧的对称势垒并不高, 但势垒较陡, 在紧束缚情况下 β 位错在势谷内的滑移距离较短, 因而其滑移稳定性高.



2.2 位错的弱束缚滑移稳定性

处于稳定平衡位置的 β 位错若从外界获取的滑移能量 ΔE 大于它与 α 位错交互作用而产生的滑移束缚能时, β 位错便能脱离 α 位错的束缚成为自由位错. 此时, 可用束缚能来表征弱束缚情况下 β 位错所处位置的滑移稳定性. 根据式 (3), 在 u_1 , u_2 和 u_3 位置两位错的弹性交互作用能分别为

$$E_1(u_1, v, \phi) = -A[\cos \phi \ln|\sqrt{2}ev| + (1/2)\sin \phi] \quad (11)$$

$$E_2(u_2, v, \phi) = -A[\cos \phi \ln|\sqrt{2}ev| - (1/2)\sin \phi] \quad (12)$$

$$E_3(u_3, v, \phi) = -A[\cos \phi \ln|\frac{v}{\cos \phi}| + \cos \phi] \quad (13)$$

当 $|\phi| \leq \pi/2$ 时, 在滑移稳定平衡位置 β 位错的束缚能即为滑移面上能谷两侧的势垒高度 $\Delta E_{ij} = E_i - E_j$ ($i \neq j$; $i, j=1, 2, 3$). 从式 (11) 至式 (13) 可知 ΔE_{ij} 与 v 无关. 从图 4 可见, 一般能谷两侧的势垒高度不相等, 当 β 位错可沿 $\pm x_g$ 方向滑移时其束缚能等于较低一侧势垒的高度. 从图 6a 可见, 在 $|\phi| \leq \pi/2$ 范围内, 当 $\phi=0$ 时 u_3 位置的

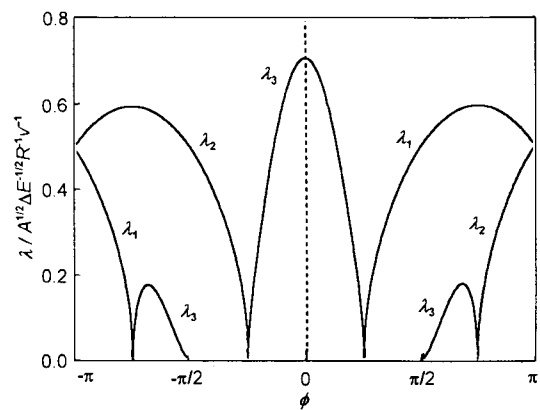


图 5 u_1 , u_2 和 u_3 位置的紧束缚滑移稳定系数 λ 随 ϕ 变化的曲线

Fig.5 Stability coefficient λ under strong bind at the positions of u_1 , u_2 and u_3

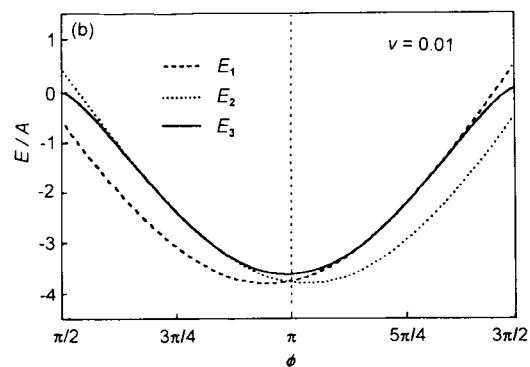


图 6 弱束缚情况下滑移势垒和滑移势阱随 ϕ 的变化

Fig.6 Gliding barrier and gliding trap under weak bind vs ϕ

(a) gliding barrier (b) gliding trap

束缚能约为 $0.15 A$; $\phi = \pi/2$ 时 u_1 位置和 $\phi = -\pi/2$ 时 u_2 位置的束缚能均为 $0.5 A$. 在这三种情形下 β 位错具有较高的滑移稳定性.

当 $\pi/2 < |\phi| \leq \pi$ 时, 在滑移稳定位置 β 位错的束缚能等于所处位置的势阱深度 $E_i (i=1,2,3)$. 由于滑移面上两个稳定位置的势阱深度不同 (图 4), 两者的滑移稳定性也有差异. 在 v 一定情况下, 当 $\pi/2 < \phi < \pi$ 时, u_1 位置更稳定; 当 $\pi < \phi < 3\pi/2$ 时, u_2 位置更稳定. 随着 $|\phi|$ 增大, u_1 或 u_2 位置的滑移稳定性增强. 按式 (11) 和式 (12), 当 $\text{ctg } \phi = \pm \ln(2ev^2)$ 时, $u_1(+)$ 和 $u_2(-)$ 位置的势阱深度取得极值 (图 6b). 此外, E_i 也依赖于 v , 在 ϕ 相同的情况下, v 愈小则两位错之间的弹性交互作用愈强, 其滑移稳定性愈高.

参考文献

- [1] Li J C M. *Acta Metall.*, 1960; 8: 296
- [2] Divincenzo D P, Rottman C. *Phys Rev.*, 1988; B37: 5242
- [3] Feng D. *Physics of Metals (Vol.1)*. Beijing: Science Press, 1980: 229
(冯端. 金属物理学 (第一卷). 北京: 科学出版社, 1980: 229)
- [4] Koevich A M. In: Nabarro F R N ed., *Dislocations in Solids*, Vol.1, Amsterdam: North-Holland, 1979: 66
- [5] Hirth J P, Lothe J. *Theory of Dislocations*. 2nd ed., New York: John Wiley & Sons, 1982: 117
- [6] Nabarro F R N. *Adv Phys.*, 1952; 1: 269
- [7] Yang S H. *Theory Basis of Dislocations in Crystals (Vol.1)*. Beijing: Science Press, 1988: 138
(杨顺华. 晶体位错理论基础 (第一卷). 北京: 科学出版社, 1988: 138)