

简单立方晶体中混合位错分析方法

张东波¹, 李铁萍²

1. 中国轻型燃气轮机开发中心, 北京 100028
2. 环境保护部核与辐射安全中心, 北京 100082

摘要 表征晶体中位错的 Peierls-Nabarro(PN)模型的控制方程十分复杂,求解往往直接给出解答,而没有给出求解过程,这为 PN 模型的应用带来了困难。针对 Peierls-Nabarro 模型的这一局限性,提出一种新的方法分析简单立方晶体中混合位错的成核过程。该方法将位错密度场表示成第一类 Chebyshev 多项式的形式,而滑移面上的剪应力表示成三角级数的形式,得到了新的控制方程,最后运用 Newton-Raphson 法对新的控制方程进行求解。计算结果表明,本文提出的方法对于分析简单立方晶体中混合位错的成核过程具有简单、精确的特点。

关键词 Peierls-Nabarro 模型;混合位错;Chebyshev 多项式;三角级数

中图分类号 O77+2

文献标识码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2012.12.008

An Analytical Method for Mixed Dislocation in a Simple Cubic Crystal

ZHANG Dongbo¹, LI Tieping²

1. China Light Gas-turbine Development Center, Beijing 100028, China
2. Nuclear and Radiation Safety Center, Ministry of Environmental Protection, Beijing 100082, China

Abstract The governing equation of Peierls-Nabarro (PN) model is very complex, and its solution is given often without any solving process, which restricts the application of the PN model. A new method is proposed to describe the propagation of a mixed dislocation in a simple cubic crystal. First, the shear stress field and the dislocation density field on the slip plane are expressed as the trigonometric series and the first Chebyshev polynomial series, respectively, and then a set of governing equations are obtained; finally, the Newton-Raphson method is used to solve the governing equations. The results show that the method proposed in this paper is simple and effective for analyzing the propagation of mixed dislocations in a simple cubic crystal.

Keywords Peierls-Nabarro model; mixed dislocation; Chebyshev polynomial series; trigonometric series

0 引言

早在 1934 年, Taylor, Polanyi 和 Orowan 3 位科学家分别独立地明确提出晶体中位错的概念和图像^[1-3]。随后,许多科学家对位错的点阵模型进行了研究。1938 年, Frenkel 和 Kontorova 从完整晶体出发, 采用一个简单的一维模型, 得出晶体在受外力作用过程中点阵中会有位错传播的论断^[4]; 1940 年, Peierls^[5]提出关于简单立方晶体中刃型位错的一个部分离散模型; 1947 年, Nabarro^[6]对 Peierls 的模型加以发展, 完成了著名的 Peierls-Nabarro 模型; 1950 年, 由 Van der Merwe^[7]提出的点阵模型是研究位错的附加半原子平面左右两侧的拉伸形变的弛豫, 这一模型与 Peierls-Nabarro 模型很

类似, 它们仅在几何上有所不同。

在众多的位错点阵模型中, 尤以 Peierls-Nabarro 模型最为著名。近年来, 仍有许多学者对 Peierls-Nabarro 模型进行研究^[8-10], 但是针对 Peierls-Nabarro 模型控制方程的研究尚未见文献报道。Peierls-Nabarro 模型的基本思想是沿滑移面将晶体一分为二, 把这两部分之间的相互作用作为原子间的非 Hooke 相互作用处理。以往研究在求解 Peierls-Nabarro 模型的控制方程时, 往往直接给出方程的解答, 而没有给出具体的求解过程, 这就为 Peierls-Nabarro 模型的应用带来诸多困难, 如处理有限体中的位错。本文针对 Peierls-Nabarro 模型的这一局限性, 提出一种新的方法来分析混合位错的成核过

收稿日期: 2012-03-19; 修回日期: 2012-04-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(11072243)

作者简介: 张东波, 工程师, 研究方向为结构微尺度力学及界面力学性能评估, 电子邮箱: nushi_ren@163.com

程。该方法是将位错密度场表示成第一类 Chebyshev 多项式的形式,而滑移面上的剪应力表示成三角级数的形式,采用 Newton-Raphson 法对所得到的控制方程进行求解。

1 基本方程

实际情形下晶体中的位错多以混合位错的形式存在。与 Peierls-Nabarro 模型保持一致,本文研究简单立方晶体中含有单个位错的情况。假设位错滑移面上的剪应力 τ 与相对滑错位移动 δ 采用 Frenkel 正弦关系为

$$\tau = \tau_{\max} \sin\left(2\pi \frac{\delta}{b}\right) \quad (1)$$

其中, b 为 Burgers 常数。

如图 1 所示, Oxz 为滑移面, 滑移方向与 x 轴成角度 ϕ , 沿滑移方向的滑错位移动记为 δ , 并记滑移方向上的剪应力为 τ , δ_x 和 δ_z 分别为刃型及螺型滑错位移动。对滑错位移动及剪应力沿滑移方向进行分解, 得

$$\delta_x = \delta \cos \phi \quad (2)$$

$$\delta_z = \delta \sin \phi \quad (3)$$

$$\tau = \tau_{yx} \cos \phi + \tau_{yz} \sin \phi \quad (4)$$

滑移面上的剪应力 τ_{yx} 和 τ_{yz} 分别为

$$\tau_{yx} = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\delta_x}{x-x'} dx' \quad (5)$$

$$\tau_{yz} = -\frac{\mu}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\delta_z}{x-x'} dx' \quad (6)$$

其中, μ , ν 分别为剪切模量和泊松比。

由式(2)一式(6)可得

$$\tau = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} h(\phi) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\delta}{x-x'} dx' \quad (7)$$

其中, $h(\phi) = \cos^2 \phi + (1-\nu) \sin^2 \phi$ 。

考虑位错密度函数 $\frac{d\delta(s)}{ds}$ 的对称性, 式(7)可写为

$$\tau = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} h(\phi) x \int_0^{+\infty} \frac{1}{x^2 - \tau^2} \frac{d\delta}{d\tau} d\tau^2 \quad (8)$$

令 $\tau^2 = b^2 \frac{1-\eta}{1+\eta}$, $x^2 = b^2 \frac{1-\xi}{1+\xi}$, $-1 < \eta < 1$, $-1 < \xi < 1$, 代入式(8)得到

$$\tau = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} h(\phi) \sqrt{1-\xi^2} \int_{-1}^1 \frac{\frac{d\delta}{d\tau}}{\sqrt{1-\eta^2} (\eta-\xi)} d\eta \quad (9)$$

将位错密度函数表示成级数形式

$$\frac{d\delta}{dx} = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m T_m(\xi) = \alpha_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m T_m(\xi) \quad (10)$$

这里 $T_m(\xi)$ 为第一类 Chebyshev 多项式, $\xi = \cos \theta$ 。

将式(10)代入式(9), 并运用公式^[11]

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{T_m(\eta) d\eta}{(\eta-\xi)(1-\eta^2)^{1/2}} = U_{m-1}(\xi) \quad (11)$$

可得

$$\tau = -\frac{\mu}{2(1-\nu)} h(\phi) \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \sin m\theta \quad (12)$$

对式(10)进行积分得到

$$\begin{aligned} \delta &= \int_0^x \frac{d\delta}{dx} dx = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m \int_0^x \cos(m\theta) dx + \frac{b}{2} \\ &= b \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m \int_0^{\theta} \frac{\cos m\varphi}{1+\cos\varphi} d\varphi + \frac{b}{2} \\ &= b \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m G_m(\theta) + \frac{b}{2} \end{aligned} \quad (13)$$

其中

$$\begin{aligned} \theta &= \arccos\left(\frac{b^2 - x^2}{b^2 + x^2}\right) \\ \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m G_m(\theta) &= \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m \int_0^{\theta} \frac{\cos m\varphi}{1+\cos\varphi} d\varphi \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \int_0^{\theta} \frac{\cos m\varphi - \cos m\pi}{1+\cos\varphi} d\varphi + \\ &\quad \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m (-1)^m \int_0^{\theta} \frac{1}{1+\cos\varphi} d\varphi \end{aligned}$$

将式(12)、式(13)代入式(1), 控制方程可写为

$$-\frac{\mu}{2(1-\nu)} h(\phi) \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \sin m\theta = \tau_{\max} \sin\left(2\pi \frac{\delta}{b}\right) \quad (14)$$

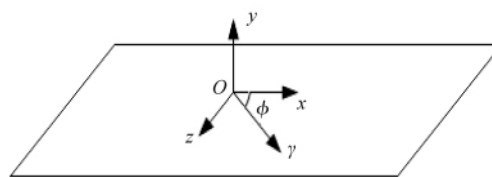


图 1 滑移面示意

Fig. 1 Schematic diagram of the slip plane

2 计算方法

采用在滑移面上选择配置点的方法对控制方程进行数值求解。在滑移面上选择 M 个配置点:

$$x_i = b \sqrt{\frac{1-\cos\theta_i}{1+\cos\theta_i}} \quad i=1, 2, \dots, M \quad (15)$$

其中, $\theta_i = \frac{(i-1)\pi}{M}$ 。把级数截取到 M 项, 这样控制方程(14)就化成关于系数 α_m 的非线性代数方程组:

$$-\frac{\mu}{2(1-\nu)} h(\phi) \sum_{m=1}^M \alpha_m \sin m\theta_i = \tau_{\max} \sin\left(2\pi \frac{\delta_i}{b}\right) \quad (16)$$

其中, δ_i 为在 $x_i = b \sqrt{\frac{1-\cos\theta_i}{1+\cos\theta_i}}$ 处的滑错位移动。

方程(16)可以运用 Newton-Raphson 法进行求解, 当系数确定后, 滑移面上各点的剪应力及滑错位移动也就确定了。

3 计算结果

本文分别计算了纯刃型位错 ($\phi=0$)、纯螺型位错 ($\phi=\pi/2$)

及混合位错($\phi=\pi/6, \pi/3$)的情况,在滑移面上选取了 $M=90$ 个配置点,取 $\nu=0.3, \tau_{\max}/\mu=0.159$ 。

图2、图3 分别表示在纯刃型位错情况下的剪应力和滑

错位移,图4、图5 则给出了在纯螺型位错情况下的剪应力和滑错位移。从图示结果可以看出,本文的计算结果与 Peierls-Nabarro 模型的结果完全吻合。图6、图7 分别为在混合位错

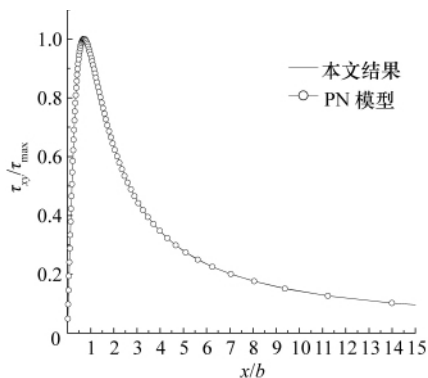


图2 纯刃型位错情况下滑移面上剪切应力分布

Fig. 2 Shear stresses on the slip plane for a pure edge dislocation

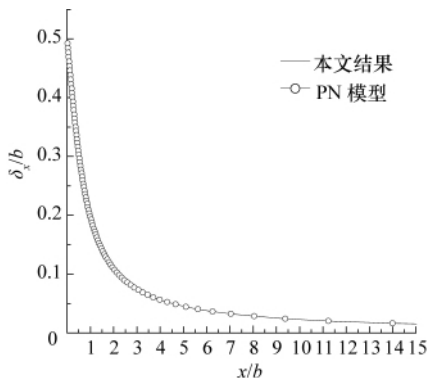


图3 纯刃型位错情况下滑移面上滑错位移分布

Fig. 3 Slip displacements on the slip plane for a pure edge dislocation

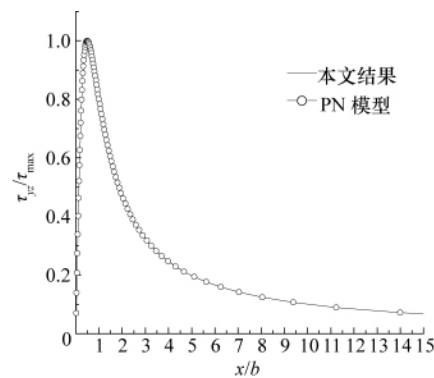


图4 纯螺型位错情况下滑移面上剪切应力分布

Fig. 4 Shear stresses on the slip plane for a pure screw dislocation

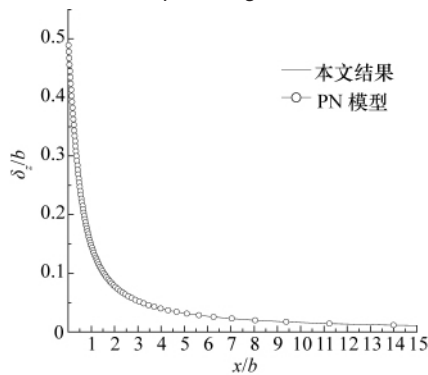


图5 纯螺型位错情况下滑移面上滑错位移分布

Fig. 5 Slip displacements on the slip plane for a pure screw dislocation

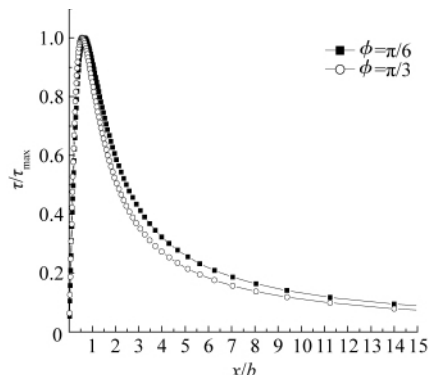


图6 混合位错情况下滑移面上剪切应力分布

Fig. 6 Shear stresses on the slip plane for a mixed dislocation

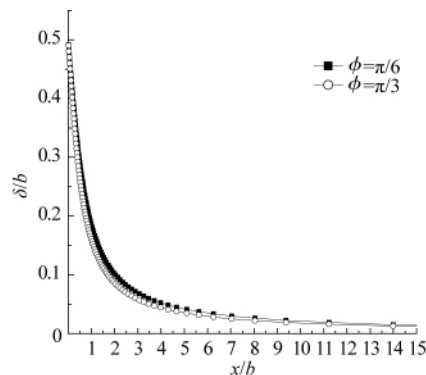


图7 混合位错情况下滑移面上滑错位移分布

Fig. 7 Slip displacements on the slip plane for a mixed dislocation

情况下的剪应力和滑错位移在滑移面上的分布。

4 结论

本文将位错密度场表示成第一类 Chebyshev 多项式的形式,而滑移面上的剪应力表示成三角级数的形式,得到了新的 PN 位错模型的控制方程;采用 Newton-Raphson 法求解新的控制方程,计算结果表明,该方法简单而且精度很高。同时,本文还给出了2种混合型位错情况下控制非常求解结果。本文方法可以用于求解有限体中混合位错的情形,这就克服了 PN 原始位错模型应用上的一些局限,本文方法同样适用于求解多个位错的交互作用,而这些将作为下一步的工作持续开展。

参考文献 (References)

- [1] Taylor G I. The mechanism of plastic deformation of crystals[J]. *Proc Roy Soc A*, 1934, 145(855): 362-395.
- [2] 钱临照, 杨顺华. 晶体缺陷与金属强度[M]. 北京: 科学出版社, 1962.

Qian Linzhao, Yang Shunhua. Crystal defects and metal strength [M]. Beijing: Science Press, 1962.

- [3] Nabarro F R N. Fifty-year study of the Peierls-Nabarro stress[J]. *Materials Science and Engineering A*, 1997, 234-236: 67-76.
- [4] 杨顺华. 晶体位错理论基础[M]. 第1卷. 北京: 科学出版社, 1998.
- [5] Yang Shunhua. Crystal dislocation theory foundation [M]. Vol 1. Beijing: Science Press, 1998.
- [6] Peierls R. The size of a dislocation[J]. *Proc Phys Soc A*, 1940, 52(1): 34-37.
- [7] Nabarro F R N. Dislocations in a simple cubic lattice [J]. *Proc Phys Soc A*, 1947, 59(2): 256-272.
- [8] Van der Merwe. On the stresses and energies associated with inter-crystalline boundaries[J]. *Proc Roy Soc A*, 1950, 63(6): 616-637.
- [9] Lu G, Koussis N, Bulatov V V, et al. The Peierls-Nabarro model revisited [J]. *Philosophical Magazine Letters*, 2000, 80(10): 675- 682.
- [10] Schoeck G. The Peierls model: Progress and limitations[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2005, 400-401: 7-17.
- [11] Schoeck G. The core structure of dislocations: Peierls model vs atomic simulation[J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(18): 4865-4870.
- [12] Erdogan F, Gupta G D. On the numerical solution of singular integral equations[J]. *Quarterly of Applied Mathematics*, 1972, 29: 525-534.

(责任编辑 马宇红,代丽)