应用数学和力学, 第 26 卷 第 12 期(2005 年 12 月)
Applied Mathematics and Mechanics

应用数学和力学编委会编
重 庆 出 版 社 出 版

文章编号: 1000_0887(2005) 12_1459_04

立方准晶材料中的运动螺型位错*

周旺民[1], 宋玉海[2]

(1. 浙江工业大学 机电工程学院, 杭州 310032;
2. 河北工程学院 数理系, 河北 邯郸 056038)

(王彪推荐)

摘要: 发展了立方准晶的位错弹性理论• 通过引入位移势函数, 使得立方准晶的反平面弹性动力学问题归结为求解两个波动方程, 得到了运动螺型位错的位移场、应力场与能量的解析表达式及运动位错的速度极限• 这些为研究此固体材料的塑性变形的物理机理提供了重要的信息•

关 键 词: 立方准晶; 螺型位错; 弹性场; 反平面弹性问题

中图分类号: O753^{+}.3; O347.4^{+}1; O343.1 文献标识码: A

引 言

准晶作为一种新的固态物质结构 1984 年左右被发现[1~3]• 这种固体的准周期对称性不仅对传统晶体学本身带来了深刻的变革, 而且对此新材料物理与力学性能的理论与实验研究给准晶弹性理论的发展也带来了重大的机遇, 取得了一系列很有价值的成果•

准晶发现不久, 就观察到准晶的结构并不完整, 存在各种各样的缺陷[4]• 位错作为一种微观线缺陷, 直接影响准晶材料的变形行为• 对位错的研究无疑是研究准晶材料不完整性的一个极为重要的方面• 立方准晶是目前发现的两种三维准晶之一, 为了描述此材料的各种力学行为, 必须建立相应的弹性理论• 本文首先建立了立方准晶的反平面动力学弹性理论, 通过引入位移势函数得到了简单的控制方程——波动方程• 利用控制方程, 最终得到了立方准晶中运动螺型位错弹性场的精确解析解•

1 反平面动力学弹性理论

立方准晶的弹性动力学理论, 包括应力_应变关系、变形几何方程和平衡方程, 非常复杂[5], 直接求解非常困难• 但对许多情况, 方程可以简化[6], 例如, 对某些问题, 如果场变量在几何与物理上与 z 无关, 即$\partial_z = 0$, 那末由基本方程描述的立方准晶的弹性问题可以分解为两个问题的叠加• 其中之一是反平面弹性问题, 其动力学问题由下列方程描述• 其应力_应变关系:

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = C_{44}\varepsilon_{xz} + R_{44}E_{xz},\quad \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = C_{44}\varepsilon_{yz} + R_{44}E_{yz}; \tag{1}$$

* 收稿日期: 2004_06_18; 修订日期: 2005_08_17
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10372016)
作者简介: 周旺民(1964—) , 男, 陕西大荔人, 教授, 博士(联系人. Tel: + 86_571_88320252; Fax: + 86_571_88320130; E_mail: wangminzhou@ sohu. com)•

$$H_{xz}=H_{zx}=R_{44}\varepsilon_{xz}+K_{44}E_{xz},\quad H_{yz}=H_{zy}=R_{44}\varepsilon_{yz}+K_{44}E_{yz}\cdot \tag{2}$$

变形几何方程:

$$\varepsilon_{xz}=\frac{1}{2}\frac{\partial u_z}{\partial x},\quad \varepsilon_{yz}=\frac{1}{2}\frac{\partial u_z}{\partial y},\quad E_{xz}=\frac{1}{2}\frac{\partial w_z}{\partial x},\quad E_{yz}=\frac{1}{2}\frac{\partial w_z}{\partial y}\cdot \tag{3}$$

不计体力的运动平衡方程:

$$\frac{\partial\sigma_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_{yz}}{\partial y}=\rho\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2},\quad \frac{\partial H_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial H_{yz}}{\partial y}=\rho\frac{\partial^2 w_z}{\partial t^2}, \tag{4}$$

其中 ρ 代表准晶的质量密度• 另一个问题是平面弹性问题, 这里我们不去考虑•

上式中, σ_{ij}、H_{ij}、ε_{ij} 和 E_{ij} 分别是声子场与相位子场的应力张量和应变张量, u_z 与 w_z 分别是声子场与相位子场 z 方向上的位移, C_{44}、K_{44} 是声子场与相位子场弹性常数, R_{44} 是声子_相位子场耦合弹性常数•

由方程(1)~(4), 容易得到位移所满足的方程:

$$C_{44}\nabla^2 u_z+R_{44}\nabla^2 w_z=\rho\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2},\quad R_{44}\nabla^2 u_z+K_{44}\nabla^2 w_z=\rho\frac{\partial^2 w_z}{\partial t^2}, \tag{5}$$

其中 ∇^2 是 Laplace 微分算子 $\nabla^2=\partial_x^2+\partial_y^2$• 如果 $C_{44}K_{44}-R_{44}^2\neq 0$, 式(5)可以表示成与其等价的形式:

$$\nabla^2 u_z=\frac{\rho}{C_{44}K_{44}-R_{44}^2}\left(K_{44}\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}-R_{44}\frac{\partial^2 w_z}{\partial t^2}\right), \tag{6}$$

$$\nabla^2 w_z=\frac{\rho}{C_{44}K_{44}-R_{44}^2}\left(C_{44}\frac{\partial^2 w_z}{\partial t^2}-R_{44}\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}\right)\cdot \tag{7}$$

引进位移势 $\phi(x,y,t)$ 与 $\psi(x,y,t)$ 如下:

$$u_z=a\phi-R_{44}\psi,\quad w_z=R_{44}\phi+a\psi, \tag{8}$$

其中 $a=\left[C_{44}-K_{44}+\sqrt{(C_{44}-K_{44})^2+4R_{44}^2}\right]/2$• 方程(6)、(7)可以写成

$$\nabla^2\phi=\frac{1}{s_1^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2},\quad \nabla^2\psi=\frac{1}{s_2^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}, \tag{9}$$

其中 s_1 与 s_2 代表立方准晶准周期场在反平面应变情形下波的传播速度, 它们由下式表达:

$$s_j=\sqrt{\varepsilon_j/\rho}\qquad (j=1,2), \tag{10}$$

这里

$$\varepsilon_1=\left[C_{44}+K_{44}+\sqrt{(C_{44}-K_{44})^2+4R_{44}^2}\right]/2,$$

$$\varepsilon_2=\left[C_{44}+K_{44}-\sqrt{(C_{44}-K_{44})^2+4R_{44}^2}\right]/2\cdot$$

这表明声子场与相位子场波的传播是相互耦合的•

通过应力_应变关系(1)、(2)与(8)式可得到位移势 ϕ 与 ψ 表示的应力分量• 由于所有的位移与应力均可以由 ϕ 与 ψ 表示, 只要在适当的初始条件与边界条件下求解波动方程(9), 便可确定位移场与应力场•

2 运动螺型位错问题

下面我们进行立方准晶中的位错问题动力学处理•

立方准晶中的螺型位错, 设其平行于 z 方向, 则 Burgers 矢量为 $\boldsymbol{b}^{\parallel}\oplus\boldsymbol{b}^{\perp}=(0,0,b_3^{\parallel},0,0,b_3^{\perp})$, 其中 $\boldsymbol{b}^{\parallel}$ 为与声子场相对应的 Burgers 矢量, $\boldsymbol{b}^{\perp}$ 为与相位子场相对应的 Burgers 矢量• 同

时假设位错线以匀速 V 沿 x 方向运动，作变换 $x = X - Vt$(其中 X 代表固定坐标，x 代表与位错一起运动的运动坐标)，则 $\partial_t = -V\partial_x$，因而方程(9)可写为

$$\beta_1^2\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=0,\quad \beta_2^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=0, \tag{11}$$

其中 $\beta_j = \sqrt{1 - V^2/s_j^2},\qquad j = 1, 2$.

此问题具有边界条件

$$\oint_\Gamma u_z\,\mathrm{d}l = b_3^{\parallel},\quad \oint_\Gamma w_z\,\mathrm{d}l = b_3^{\perp}\qquad (\Gamma\text{ 为包围位错芯的任一回路}). \tag{12}$$

方程(11)有解

$$\phi(x, y_1) = \frac{A}{2\pi}\arctan\frac{y_1}{x},\quad \psi(x, y_1) = \frac{B}{2\pi}\arctan\frac{y_2}{x}, \tag{13}$$

其中 $y_j = \beta_j y; j = 1, 2; A, B$ 为待定系数.

由边界条件(12)确定 A 与 B 如下:

$$A = \frac{ab_3^{\parallel} + R_{44}b_3^{\perp}}{a^2 + R_{44}^2},\quad B = \frac{ab_3^{\perp} - R_{44}b_3^{\parallel}}{a^2 + R_{44}^2}. \tag{14}$$

由此可得位移分量如下:

$$u_z(X, y, t) = \frac{1}{2\pi(a^2 + R_{44}^2)}\left[\left(a^2\arctan\frac{\beta_1 y}{X - Vt} + R_{44}^2\arctan\frac{\beta_2 y}{X - Vt}\right)b_3^{\parallel} + \left(\arctan\frac{\beta_1 y}{X - Vt} - \arctan\frac{\beta_2 y}{X - Vt}\right)R_{44}ab_3^{\perp}\right], \tag{15}$$

$$w_z(X, y, t) = \frac{1}{2\pi(a^2 + R_{44}^2)}\left[\left(R_{44}^2\arctan\frac{\beta_1 y}{X - Vt} + a^2\arctan\frac{\beta_2 y}{X - Vt}\right)b_3^{\perp} + \left(\arctan\frac{\beta_1 y}{X - Vt} - \arctan\frac{\beta_2 y}{X - Vt}\right)R_{44}ab_3^{\parallel}\right]. \tag{16}$$

应力分量的表达式太长，这里略去.

位错的弹性能为

$$W_{\mathrm{e}} = \frac{1}{2}\iint_\Omega\left(\sigma_{xz}\frac{\partial u_z}{\partial x} + \sigma_{yz}\frac{\partial u_z}{\partial y} + H_{xz}\frac{\partial w_z}{\partial x} + H_{yz}\frac{\partial w_z}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \frac{k_{\mathrm{e}}}{8\pi}\ln\frac{R}{r_0}; \tag{17}$$

位错的动能为

$$W_{\mathrm{k}} = \frac{1}{2}\rho\iint_\Omega\left[\left(\frac{\partial u_z}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial w_z}{\partial t}\right)^2\right]\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \frac{k_{\mathrm{k}}}{8\pi}\ln\frac{R}{r_0}, \tag{18}$$

其中 r_0 是位错芯半径，R 为某一有限值，代表位错网或嵌镶块尺寸;

$$k_{\mathrm{e}} = A^2(C_{44}a^2 + K_{44}R_{44}^2 + 2aR_{44}^2)(\beta_1 + \beta_1^{-1}) + B^2(C_{44}a^2 + K_{44}R_{44}^2 - 2aR_{44}^2)(\beta_2 + \beta_2^{-1}),$$

$$k_{\mathrm{k}} = \rho V^2(R_{44}^2 + a^2)(A^2\beta_1^{-1} + B^2\beta_2^{-1}).$$

3 结论与讨论

从上面的结果可知，若 $V = 0$，我们以上的解还原为立方准晶位错静力学解[7]；再者，若 $b_3^{\perp} = 0$，$R_{44} = 0$，则上述结果与传统晶体中运动位错著名的 Eshelhy 结果一致[8]. 另一方面，若 $V \to s_2$，这时能量将变成无穷大，这当然是不可能的，因而 s_2 是位错运动速度的极限. 位错应力与能量表达式当 $r_0 \to 0$ 时发散，这是由于准晶线弹性理论不适用于严重畸变的位错芯部

分,只适用于芯外部分区域,因而位错芯的应力与能量的计算需要引入更接近于实际的离散模型或用分子动力学方法进行计算•

[参 考 文 献]

[1] Shechtman D, Blech I, Gratias D, et al. Metallic phase with long_range orientational order and no translational symmetry[J]. Physics Review Letter, 1984, **53**(20): 1951—1953.

[2] Levine D, Steinhardt P J. Quasicrystals: a new class of ordered structure[J]. Physics Review Letter, 1984, **53**(26): 2477—2480.

[3] Ye H Q, Wang D N, Kuo K H. Five_fold symmetry in real and reciprocal spaces[J]. Ultramicroscopy, 1985, **16**(2): 273—278.

[4] Zhang Z, Urban K. Transmission electron microscope observation of dislocation and stacking faults in a decagonal Al_Cu_Co alloy[J]. Philosophical Magazine Letter, 1989, **60**(1): 97—102.

[5] Yang W G, Wang R H, Ding D H, et al. Linear elasticity theory of cubic quasicrystals[J]. Physics Review B, 1993, **48**(10): 6999—7002.

[6] 范天佑. 准晶数学弹性力学与缺陷力学[J]. 力学进展, 2000, **30**(2): 161—172.

[7] 周旺民, 尹姝媛, 王念鹏. 立方准晶中螺型位错的弹性场[J]. 河北建筑科技学院学报(自然版), 2001, **18**(3): 63—65.

[8] Hirth J P, Lothe J. Theory of Dislocation[M]. New York: McGraw_Hill Book Company, 1968.

Moving Screw Dislocation in Cubic Quasicrystal

ZHOU Wang_min[1], SONG Yu_hai[2]

(1. College of Mechanical &Electrical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310032, P. R. China;

2. Department of Mathematics and Physics, Hebei Institute of Engineering, Handan, Hebei 056038, P. R. China)

Abstract: The elasticity theory of the dislocation of cubic quasicrystals is developed. The governing equations of anti_plane elasticity dynamics problem of the quasicrystals were reduced to a solution of wave equations by introducing displacement functions, and the analytical expressions of displacements, stresses and energies induced by a moving screw dislocation in the cubic quasicrystalline and the velocity limit of the dislocation were obtained. These provide important information for studying the plastic deformation of the new solid material.

Key words: cubic quasicrystal; screw dislocation; elasticity field; anti_plane elasticity problem