金属表层稳定位错组态

李　东[①]　毛卫民[①②]　余永宁[①]

(① 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083; ② 新金属材料国家重点实验室, 北京 100083. E-mail: donglee1980@126.com)

摘要　根据位错能量理论计算了金属表层位错的稳定组态, 结果表明金属表层稳定的位错组态只受柏氏矢量的影响, 并表现为位错线在接近与自由表面垂直的有限范围内变动.

关键词　金属　表层位错　稳定组态

靠近晶体自由表面的位错会受到映像力的作用. 越是靠近自由表面, 位错受到的映像力及溢出表面的倾向越大[1]. 金属表层中的位错有可能因映像力的作用而调整成更稳定的组态, 所以金属表层的位错组态会与内部的位错组态有所差异. 金属表层位错的分布情况会直接影响到材料表面的力学[2~4]、物理冶金[5]和电化学[6]等性能, 所以研究金属表层位错的稳定组态非常重要.

如图 1 所示, x_2 轴左侧为半无限各向同性的金属介质, 右侧为真空或空气介质. 金属介质中有一滑移面垂直于自由表面且平行于纸面的位错. 滑移面上有一个柏氏矢量$\boldsymbol{b}$与自由表面夹角为β的位错线AC, 与x_2轴交于表面C点, 夹角为δ. 位错线与柏氏矢量的夹角为γ, 参照图 1 可知$\delta=\gamma+\beta$, 取值范围为 $0°\leqslant\beta\leqslant90°$, $-\beta\leqslant\gamma\leqslant180°-\beta$. 设表面附近位错能够借助调整组态以降低其总能量所涉及的范围为d以内的区域, 由位错能量公式[1]可得图 1 中AC段位错的能量E为

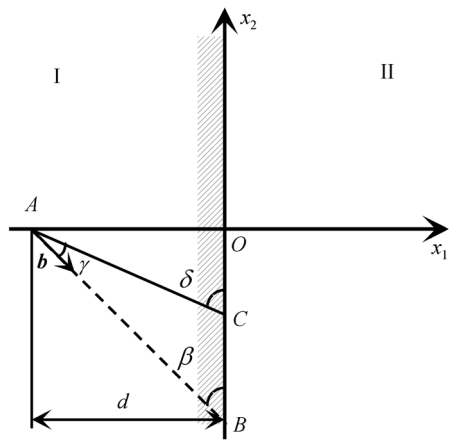


图 1　滑移面垂直于自由表面的位错及位错线图示

I 为金属介质; II 为真空或空气介质

$$E=\frac{\left[\cos^2\gamma+\dfrac{\sin^2\gamma}{1-\upsilon}\right]\mu\boldsymbol{b}^2d}{4\pi\left|\sin\delta\right|}\ln\frac{R}{\lambda\boldsymbol{b}}=\frac{\left[\cos^2\gamma+\dfrac{\sin^2\gamma}{1-\upsilon}\right]\mu\boldsymbol{b}^2d}{4\pi\left|\sin(\gamma+\beta)\right|}\ln\frac{R}{\lambda\boldsymbol{b}},\tag{1}$$

式中μ为金属位错的有效切变模量, υ为金属的泊松比, $\boldsymbol{b}$为金属的柏氏矢量, R为位错能量影响区半径[1], λ为位错能量计算引入的参数[1]. 作为无限连续介质模型下位错能量公式, (1)式在本文的能量估算中已能提供足够好的结果[7], 可设

$$m=\frac{4\pi E}{\mu\boldsymbol{b}^2d\ln\dfrac{R}{\lambda\boldsymbol{b}}}=\frac{\left[\cos^2\gamma+\dfrac{\sin^2\gamma}{1-\upsilon}\right]}{\left|\sin(\gamma+\beta)\right|}.\tag{2}$$

常见金属的υ在 0.20~0.50[8]之间. 图 2 给出了当$\beta=45°$, $\upsilon=0.2$, 0.36, 0.5 三个值时, 在γ从–45°到135°的范围内m的变化情况.

由图 2 可以看出在三条曲线都存在最低点, 这

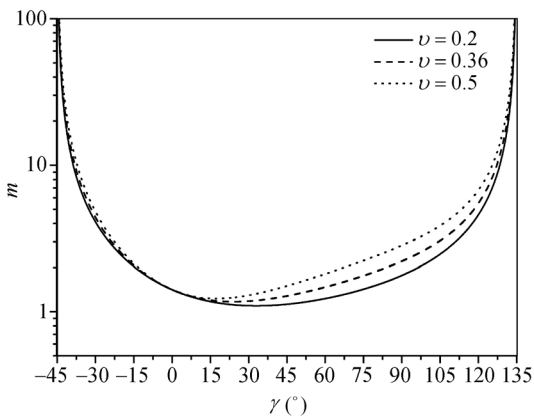


图 2　$\beta=45°$时 m 随γ的变化关系

2006-11-10 收稿, 2007-01-25 接受

国家自然科学基金(批准号: 50571020)和高等学校博士学科点专项科研基金项目(编号: 20040008010)资助

时的 m 达到最低值而使位错处在最稳定的状态.

参照(1)式求 E 取最小值时的 $\gamma_{(E_{\min})}$ 值，这时有 $\frac{\partial E}{\partial \gamma}=0$，可得

$$\tan\beta=\frac{(1-2\upsilon)\tan^2\gamma_{(E_{\min})}+(1-\upsilon)}{\tan^3\gamma_{(E_{\min})}+(1+\upsilon)\tan\gamma_{(E_{\min})}}. \quad (3)$$

位错稳定时的位错线与自由表面夹角为 $\delta_{(E_{\min})}=\gamma_{(E_{\min})}+\beta$，所以可得 β 与 $\delta_{(E_{\min})}$ 的关系如图 3 所示.

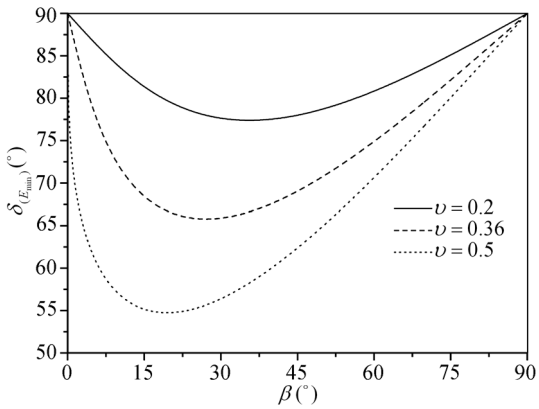


图 3 不同柏氏矢量的表层位错稳定时位错线方向与自由表面的夹角关系

由图 3 可知，滑移面垂直于自由表面的位错的稳定位置即稳定时的位错线与自由表面夹角 $\delta_{(E_{\min})}$ 只与β 角有关，而与γ和 d 无关. 由此可见，滑移面垂直于自由表面的稳定的位错组态只与位错的柏氏矢量有关.

图 3 显示表层稳定位错的 $\delta_{(E_{\min})}$ 角在 55°和 90°之间，因此表面附近稳定的位错线和自由表面夹角都为大角度，接近与自由表面垂直. 位错理论认为[9]：映像力通常会使表面位错线改变方向，使之接近于表面正交，本文的计算和分析与这一认识非常接近. 表面位错线的稳定走向还会受到柏氏矢量方向的显著影响；泊松比υ越低，$\delta_{(E_{\min})}$ 越接近 90°.

如图 4 所示，滑移面不垂直于自由表面且与自由表面的夹角为φ时，设表面附近位错能够借助调整组态以降低其总能量所涉及的范围为 Lr 以内的区域，参照图 1 有

$$Lr=d\sin\varphi. \quad (4)$$

可以看出当表层位错的滑移面不垂直于自由表面时，造成的结果只是映像力驱动表面位错调向稳定组态的影响范围的不同，而不会影响到滑移面上位错靠近表面一端的稳定组态.

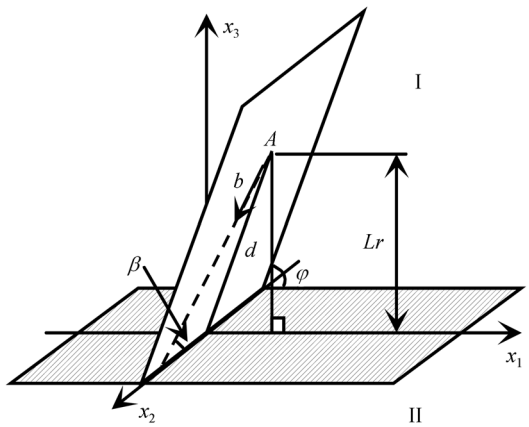


图 4 滑移面不垂直于自由表面的位错及位错线图示
I 为金属介质；II 为真空或空气介质

本文的相关计算是建立在各向同性介质上的，所以对于接近各向同性金属介质如 Al，W 等中的位错更加适合. 实际的金属表层位错稳定组态情况还与许多因素有关，如实际金属中的夹杂、金属表面的氧化膜等会影响到表层中位错的能量及其实际承受的映像力，相关的研究有待深入进行.

参 考 文 献

1 余永宁，杨平. 材料科学基础. 北京：高等教育出版社，2006. 374—379
2 Wang Y U, Jin Y M, Khachaturyan A G. Phase field microelasticity modeling of dislocation dynamics near free surface and in heteroepitaxial thin films. Acta Metall, 2003, 51: 4209—4223
3 Polák J, Petrenec M, Man J. Dislocation structure and surface relief in fatigued metals. Mater Sci Eng, 2005, A400-401: 405—408
4 Lin K M, Lin H C, Chen K C, et al. Elastic interaction between screw dislocations and a circular surface crack. Mater Sci Eng. 1997, A400-401: 216—220
5 Du D, Srolovitz D J. Faceted dislocation surface pits. Acta Metall, 2004, 52: 3365—3374
6 Horváth Z J, Ádám M, Szabó I, et al. Electrical behaviour of Al/SiGe/Si heterostructures: Effect of surface treatment and dislocations. Appl Surf Sci, 2004, 234: 54—59[DOI]
7 余永宁，毛卫民. 材料的结构. 北京：冶金工业出版社，2001. 161—162
8 Bilby B A, Miller K J, Willis J R. Fundamentals of deformation and fracture: Eshelby memorial symposium. New York: Cambridge University Press, 1985. 400—401
9 Hirth J P, Lothe J. Theory of dislocations. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1982. 150—156