

位错花样研究进展*

——试验研究、理论分析和计算机模拟

钱正芳 段祝平 王文标

中国科学院力学研究所非线性连续介质力学开放研究实验室, 北京 (邮政编码100080)

提要 本文详细综述了位错花样形成演化的电镜观察研究、理论分析和计算机模拟的最新进展, 并进行了简要的评述, 指出了今后研究的方向。

关键词 位错花样; 缺陷动力学; 计算机模拟; 细观力学

1 引言

在结晶固体承受疲劳、非比例循环加载、高温蠕变、高速冲击等加载过程中, 以及在剪切带中和裂纹前缘, 都发现了高度有序的位错空间结构, 称之为位错花样 (dislocation patterns), 材料科学家称为低能位错结构 (LEDSs)。现有试验研究表明, 不同材料、不同力学过程大致产生4种基本的位错花样, 即脉 (veins), 墙 (walls), 迷宫 (labyrinths), 胞 (cells) 或亚晶粒 (subgrains)。实际上, 非弹性 (塑性) 变形本身是远离热力学平衡的不可逆过程, 因此, 在细观尺度上存在着大量的位错群, 并且相互间有着强烈的非线性耦合和协同作用, 从而导致位错分布状态的失稳、分叉、花样形成等一系列非平衡自组织现象。作为典型的耗散结构系统, 位错花样与材料的各种宏观力学性能及过程 (包括材料失稳) 密切相关, 正如 Prigogine 在《探索复杂性》中指出的, “它们应该被视为在远离平衡的条件下起作用的非线性动力学体系一般性问题的组成部分。我们确信, 这种认识本身就构成了材料科学领域内一个重要的突破点”^[1]。

自从30年代位错理论创立以来, 目前, 对单个位错行为的研究已基本成熟。早在1914年金相学者就已知道了镶嵌块结构 (mosaic-block structure)^[2], 即位错胞或亚晶粒。然而, 对位错花样的现代研究, 最近几年才开始起步。研究此类迷人的位错花样的形成、失稳及其特性, 对现代塑性理论和材料设计都是一项基础性的工作, 这将促进非线性科学在力学和材料科学中的应用和发展, 将可能使晶体塑性理论进入位错群动力学研究的新阶段。

本文从位错花样的试验研究、动力学形成和演化理论、计算机模拟3方面综述了国际研究的现状和成果, 进行了简要的评述, 并提出了进一步研究的方向。

* 中国科学院八·五重点项目和国家博士后基金资助课题。

2 试验研究

2.1 疲劳位错花样^[3]

大部分位错花样都是在单晶和多晶铜的室温疲劳试验中首先发现的。单晶铜的拉伸剪应力-剪应变曲线呈现典型面心立方晶体的3阶段加工硬化特性，与晶体的取向有很大关系。然而，试验发现，除特殊情况外，恒应变幅控制循环加载条件下得到的循环剪应力-剪应变曲线对晶体取向相当不敏感，不管晶体取向如何几乎为同一条曲线，见图1。用于循环加载的单晶试件多为矩形截面，典型试件见图2^[4]。图中拉压在 $[\bar{1}23]$ 方向，主滑移面为(111)

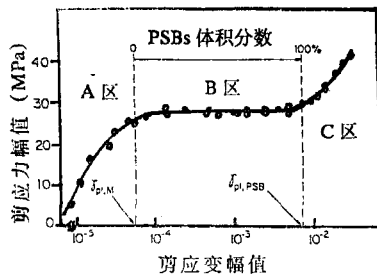


图1 铜单晶室温循环应力-应变图^[3]

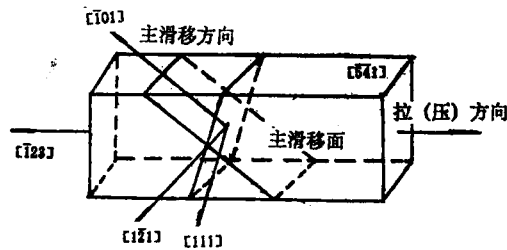


图2 循环加载用单晶试件^[4]

面，主滑移方向为 $[\bar{1}01]$ 。 $(\bar{1}21)$ 截面同时垂直于主滑移面和主滑移方向。正像单调变形中不同的硬化阶段对应于不同的位错机理一样，在循环应力应变曲线的不同阶段也对应着不同的位错花样。最令人感兴趣的是平台区，它对应于驻留滑移带(PSBs)的形成和扩展。相应于图1不同区域的位错花样描述如下。

A区：快速硬化区，塑性剪应变幅值低于 10^{-4} 。相应的位错花样为脉结构，它主要由刃型位错偶极子束组成，主要分布在主滑移面(111)上。而在垂直于(111)的截面 $(\bar{1}21)$ 上，观察到的是偶极子或多极子圈斑(loop patches)，又称为脉基体(matrix vein)。在3维情况，这些脉可粗略地看成圆柱状，它们之间被很多通道(channels)分隔开，而通道中含有密度相当低的螺位错。随着循环应力增加，圈斑的体积分数将增大，达到平台区

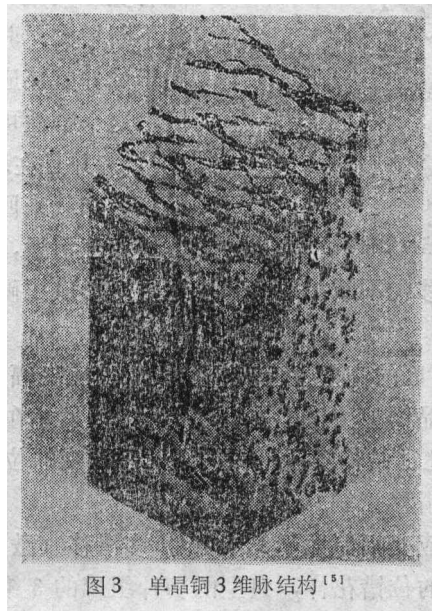


图3 单晶铜3维脉结构^[5]

(B区)时,圈斑体积分数可达50%,此时,脉变得更加弯曲蜿蜒。A区典型的切片透射电镜照片组成的3维花样见图3^[6]。

B区:平台区,平台应力28MPa是驻留滑移带出现的特征流动应力。驻留滑移带首先在偶极子(多极子)圈斑中出现并在其中扩展。因此,平台应力也是圈斑失稳形成驻留滑移带所需的应力,典型的位错花样见图4^[6]。单个驻留滑移带又称为梯子形结构(ladder structure),它的每个梯级称为位错墙(walls)。墙主要由刃型位错偶极子组成,墙之间的通道是密度非常低的螺位错区,更典型的位错墙见图5^[6],这些排列的示意图见图6^[8]。

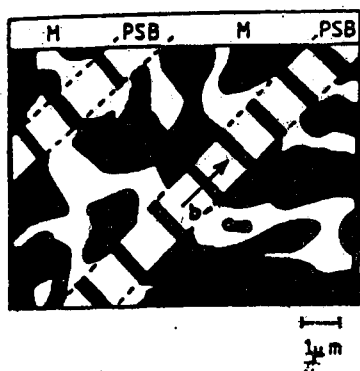


图4 驻留滑移带(PSBs)的形成^[6]

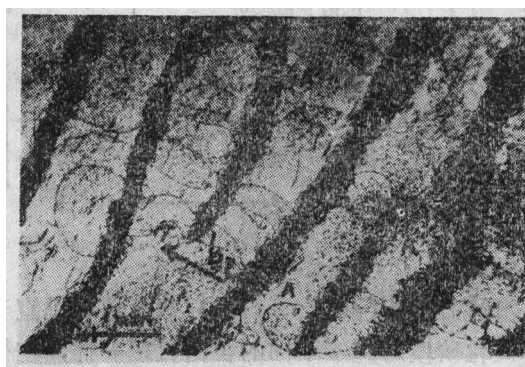


图5 疲劳单晶铜位错墙^[6]

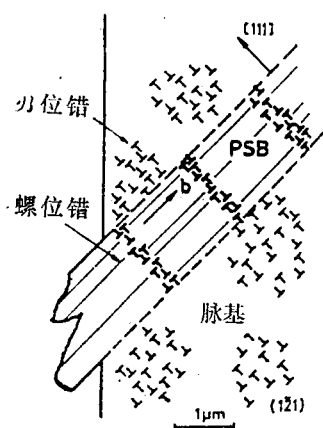


图6 PSB,位错墙(梯级)及脉基位错排列示意图^[8]

值得注意的是墙和驻留滑移带的特征尺寸有较大差别,而且,驻留滑移带可形成宏观剪切带,后者是裂纹成核和起裂的关键因素。令人感兴趣的是,驻留滑移带形成和扩展时,循环应力几乎不变(平台应力),而随着变形(循环应变幅)增加,它的体积分数不断增大。驻留滑移带中的局部应变大大高于试件整体应变,形成局部化集中变形区,这个特性可由著名的应变两相体模型描述^[9]。并且在墙结构中,位错圈在通道中随疲劳加载来回穿梭运动,促使异号螺位错分量相互销毁,而刃位错分量则保留下来形成稳定的墙,这样使驻留滑移带不断扩展。相应地,墙形成了硬相,而通道成为软相,变形主要集中在软相通道中^[3]。

进一步细分B区,在B区的高塑性应变幅阶段(剪应变幅为 2×10^{-3} — 8×10^{-3})发现了迷宫结构。此结构首先在多晶铜疲劳试验中发现^[10],以后才在单晶铜疲劳中观察到,见图7^[11]。从图7可以看出,迷宫结构实际上由两组几乎正交的位错墙组成,此时,存在两个几乎正交的柏氏矢量,是双滑移控制。

C区:胞结构区,塑性应变幅值大于 8×10^{-3} ,多滑移(激活滑移系 ≥ 3)控制着变形。位错胞结构几乎是发现最早的位错花样,典型的切片组成的3维透射电镜(TEM)照片空

间花样见图 8^[8]。胞结构可看成多组 (≥ 3) 几乎平行的位错墙组成, 而在其内部则是低位错密度区。随着应力的增加, 胞的特征尺寸 (平均半径) 越来越小, 胞也发展得更精致, 而胞的取向不明显, 几乎是等轴的, 胞的尺寸分布也趋于一致。实际上, 迷宫结构也可看成是最简单的胞结构。

我们把上述 4 种位错花样的基本特征总结



图 7 疲劳单晶铜迷宫结构^[10]

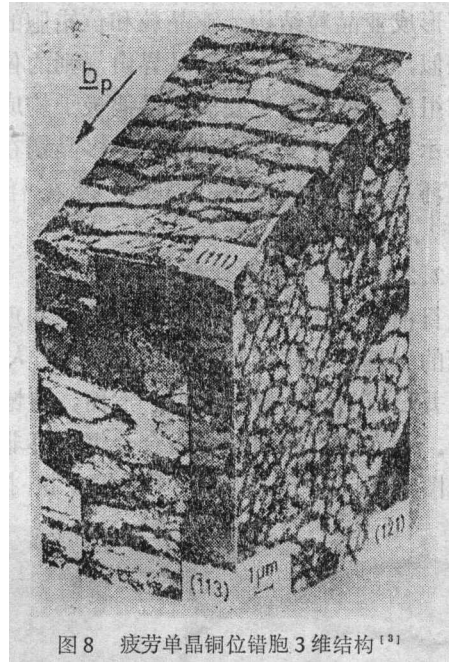


图 8 疲劳单晶铜位错胞 3 维结构^[8]

如表 1。值得注意的是, 不同的切片 (不同的观察方向) 将会观察到不同的位错花样, 而 $(1\bar{2}1)$ 切片是最有效的, 这些结果总结在表 2 中。

表 1 位错花样基本特征

花 样	波 长	壁 厚	柏 氏 矢 量	几 何
脉	\bar{d}	\bar{t}	偶 (多) 极子	单滑移
墙	d	t	1 个	单滑移
迷宫	\bar{d} d_1, d_2	\bar{t} t_1, t_2	2 个	双滑移
胞	$d_i (i \geq 3)$ \bar{d}	$t_i (i \geq 3)$ \bar{t}	3 (多) 个	3 (多) 滑移

表 2 位错花样空间形态

($1\bar{2}1$) 垂直滑移面 和滑移方向	脉基 → 梯 → 迷 宫 → 胞 → 单 墙 → 双 墙 → 3 (多) 墙 → 单周期 → 双周期 → 3 (多) 周期 → 循环应变幅增加 →
(111) 平行滑移面	脉 → 充分发展的脉 → 墙 → 有序度增加 →

另一方面，高温疲劳中，也同样发现了上述位错花样。高温下，位错可进行攀移运动，从而形成亚晶粒结构。亚晶粒和位错胞的形状相似，不同之处在于亚晶界由规则的位错排列组成，而胞壁主要由位错偶极子构成。图9示出了总应变幅0.064%的多晶铜在不同循环数目和不同温度下的位错花样分布^[12]。

2.2 非比例加载位错花样

目前，由于工程技术上的重要性和理论研究的兴趣，非比例加载已越来越引人注目，并已成为一个研究热点。然而，遗憾的是，唯象学描述较多，其微观物理机理研究很不充分。令人感兴趣的是，在合金钢循环非比例加载中，出现了铜单晶中发现的同样的位错花样。图10和图11分别为304不锈钢在拉-扭循环非比例加载中形成的胞结构和迷宫结构^[13]。

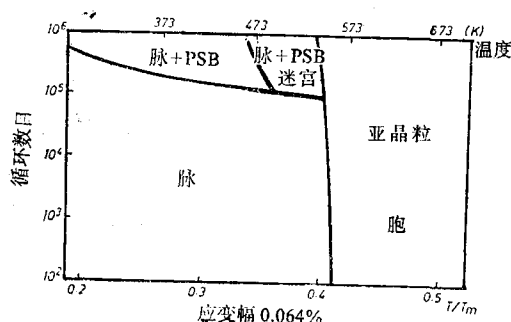


图9 疲劳多晶铜位错花样分布^[12]

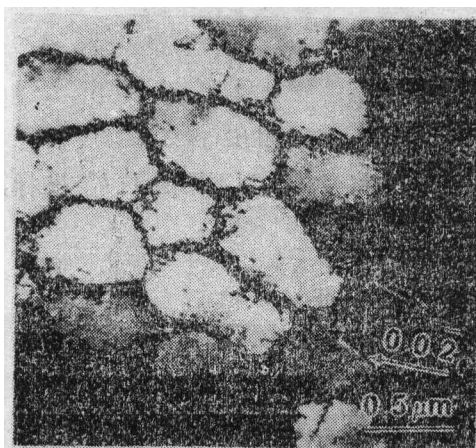


图10 304不锈钢拉扭非比例循环形成的胞结构^[13]

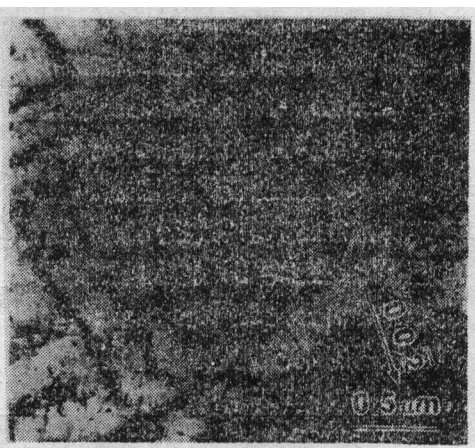


图11 304不锈钢拉扭非比例循环形成的迷宫结构^[13]

详细的研究表明，不同的非比例变形路径能诱发不同的滑移模式，激活不同的滑移系，从而导致不同的位错花样。另一个试验发现是，比例与非比例加载可能出现不同的位错花样。例如，像不锈钢等平面滑移材料，比例循环加载时主要产生单滑移控制的位错花样，如墙结构，而非比例循环加载则导致多滑移控制，产生迷宫和胞结构，从而产生强烈的附加强化效应。相反，对铝材（波状滑移材料），比例和非比例循环加载都只形成胞结构，因此，非比例循环附加强化的效应并不明显^[13]。

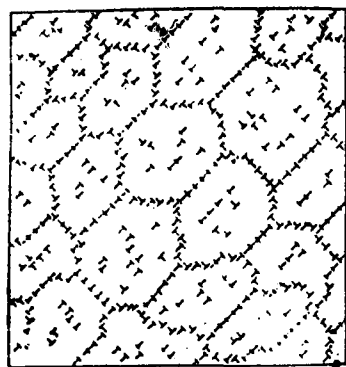


图12 稳态蠕变时亚晶粒位错排列示意图^[14]

例如，像不锈钢等平面滑移材料，比例循环加载时主要产生单滑移控制的位错花样，如墙结构，而非比例循环加载则导致多滑移控制，产生迷宫和胞结构，从而产生强烈的附加强化效应。相反，对铝材（波状滑移材料），比例和非比例循环加载都只形成胞结构，因此，非比例循环附加强化的效应并不明显^[13]。

2.3 蠕变位错花样

高温蠕变一直是工程领域中的重要课题。由于高温条件下位错获得了附加的自由度，所以它能够进行非保守的攀移运动。因此，在蠕变稳态阶段形成亚晶粒位错花样已是非常普遍的现象，对应的基本特征是

蠕变速率等于常数。亚晶界由非常规则的位错排列而成，这样的组态处于低能状态，因而其结构非常稳定。图 12 即为稳态蠕变时亚晶粒的示意图^[14]。工程中非常重要的蠕变-疲劳交互作用现象也能从位错花样的形成演化得到深入理解，而位错胞和亚晶粒的演化特性也能成功地解释它的交互作用机理，即蠕变-塑性交互作用现象^[15]。例如，304 不锈钢在蠕变-疲劳条件下形成的胞比纯疲劳加载下的胞大，且胞壁发育不全，有破碎现象发生^[16]。

2.4 裂纹和剪切带位错花样

众所周知，裂纹前缘存在局部高应力集中区，并由此产生大量的位错。它们的群体运动和协同作用亦能形成位错花样。图 13 即是 Fe-3%Si 单晶体疲劳中裂纹区的位错胞结构，图 14 表明沿裂纹扩展方向胞的分布状况^[17]。图中清楚地表明，裂纹附近胞壁较厚，胞尺寸

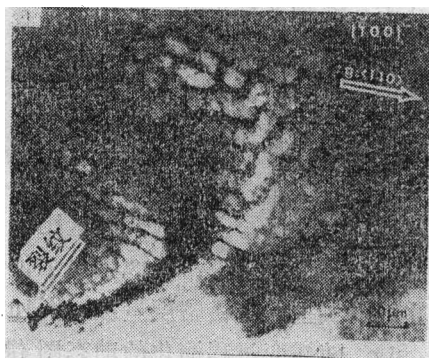


图 13 Fe-3%Si 单晶疲劳裂纹区的位错胞^[17]

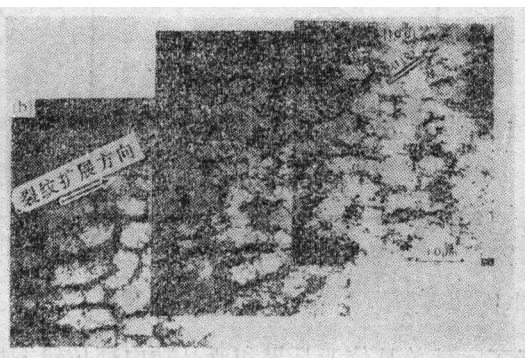


图 14 Fe-3%Si 单晶疲劳裂纹扩展方向错位分布^[17]

较小，而离裂纹较远处胞尺寸较大；在远处几乎没有胞结构。

在宏观剪切带中也发现了几乎平行的位错墙^[18]，有关绝热剪切带微结构演化参见 [19]。因此，研究位错花样形成的动力学演化有助于深入理解剪切带的成核和发展。

2.5 位错花样共存

在实际变形过程中，在一定的外部控制状态变量范围内，往往出现一些位错花样的混合

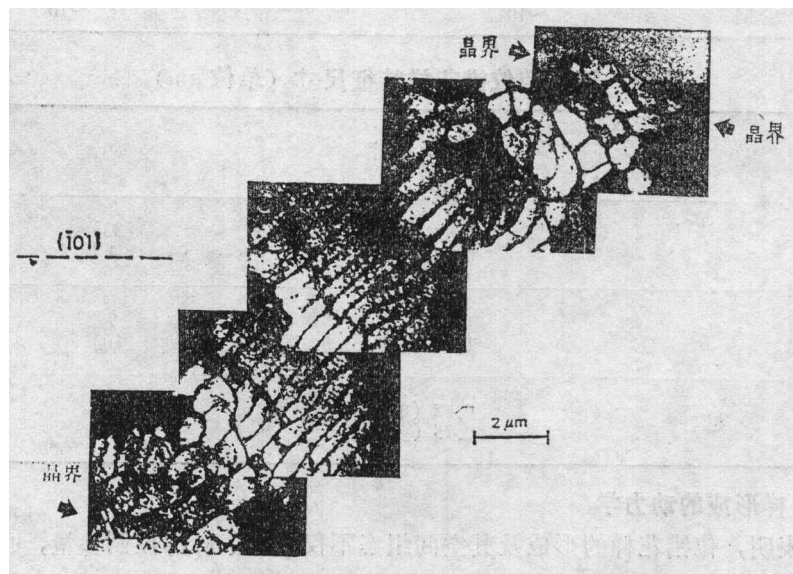


图 15 铜多晶单个晶粒内位错花样共存^[19]

(共存)区(如图9所示),位错墙与迷宫结构共存区图参见[5]。在多晶材料单个晶粒内,由于变形不均匀,并存在应力梯度,因而在晶界附近和晶粒中部形成了不同的位错花样。图15即是铜多晶的一个晶粒中的位错花样^[5]。从图15可见,晶界附近是多滑移控制的小尺寸胞结构,晶界中部几乎是单滑移控制的较长的墙结构,它们之间是双滑移控制的胞。这是多晶体晶粒内部不同滑移系激活及内应力不均匀分布的有力证据。因此,位错花样的空间分布提供给我们很多有用的材料微观信息。

2.6 位错花样的分布特征

位错花样空间分布的基本特征是高度规则性和高度不均匀性。从上述各种透射电镜照片中,我们总结出其一般规律:在各种花样的骨架中(墙壁,胞壁,亚晶界)是高位错密度区,主要由刃型位错组成;而在花样的通道区,即骨架之间,是低位错密度区,主要为螺型位错。我们可把骨架称为硬区,把通道称为软区。一般地,硬区比软区位错密度高2个量级以上。表3列出了位错花样硬软区中典型的位错密度量级。图16清楚地

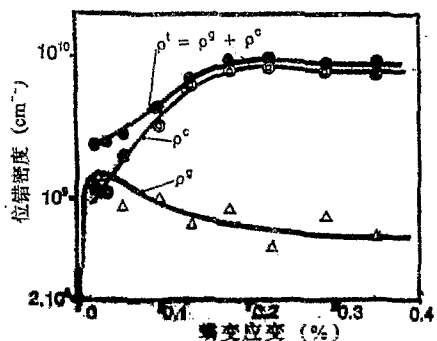


图16 α 铁蠕变时亚晶界和亚晶内位错密度演化^[14]

展示了 α 铁单晶体亚晶界和亚晶粒内部位错密度 ρ^c 和 ρ^g 随蠕变过程演化的动态图像^[14],代表了典型的硬软区的形成过程。另一方面,位错花样空间平均尺寸 \bar{d} ,即这些空间周期结构的平均波长,总结在表4中,它们均在1 μ m的量级。

表3 位错花样密度量级(单位 cm^{-2})

墙 ^[4]		亚晶粒 ^[14]	
墙中	$\sim 10^{11}$	亚晶界	$\sim 10^{10}$
墙间	$\sim 10^9$	亚晶内	$\sim 10^8$

表4 铜疲劳位错花样特征尺寸(单位 μm)

花样	特征尺寸 \bar{d}	文献
胞	0.87(单晶) 0.86(多晶)	[33] [4]
墙	1.36(单晶) 1.28(多晶)	[9] [10]
迷宫	0.52(单晶) 0.75(多晶)	[11] [10]

3 位错花样形成的动力学

试验研究表明,位错花样的形成及其空间组态不仅依赖于外部控制参量,也依赖于内部特征参量,总结如表5。

表 5 位错花样控制参量

外部	加载方式、变形路径、应力、应变(率)、温度等
内部	滑移模式、控制滑移系数目、内应力、扩散系数等

在这些参量作用下,位错群如何协同作用而形成特定的位错花样,以及这些花样又如何进一步演化都是重要而困难,又非常富有挑战性的课题,对它们的深入研究将有助于理解宏观唯象学试验中观察到的许多力学现象。

位错花样形成的理论分析由 Holt^[20] 在 1970 年开创。他基于 Gibbs 最小自由能原理和化学反应动力学中应用的线性稳定性分析方法,模拟了位错胞的动态形成,成功地预言了胞尺寸反比于作用应力的试验结论。近年,材料研究学者再次从 Gibbs 最小自由能原理出发,提出位错花样是一种低能位错结构^[2],从低能构形考察位错花样的组态及其稳定性,本文称之为静力学方法。突破性的进展来自动力学方法。Walgraef 和 Aifantis^[21] 在 1985 年开创了这一领域,并发展成为梯度相关的动力学理论。他们利用 Prigogine 的自组织理论^[22],从均匀位错态的失稳、分叉到形成规则的时空有序结构来模拟位错花样形成的动力学过程。Kratochvil^[23] 等又从非局部硬化理论进一步发展,建立了所谓的协同学模型。目前,借助于非线性科学的丰富理论成果,这方面的研究正在加速发展,并已扩展到材料失稳和剪切带形成等领域^[24]。

3.1. Holt 模型^[20]

1970 年 Holt 的开创性工作即位错花样动力学分析的典范。假设初始均匀分布的位错状态 ρ_0 受到一个小扰动 $\delta\rho(x,y,t)$, 则位错密度 ρ 为

$$\rho(x,y,t) = \rho_0 + \delta\rho(x,y,t) \quad (1)$$

由于扰动,位错密度产生了梯度。因此,Holt 认为均匀态失稳的根源是位错胞形成过程中由于位错聚集而造成位错总弹性相互作用能的减少。他假设位错流密度矢量 \mathbf{J} 正比于位错弹性相互作用能变化 δE_I 的梯度,即

$$E_I = - \iint f(x,y,\rho) \frac{Gb^2}{2\pi} \ln\left(\frac{R_0}{r}\right) dx dy \quad (2a)$$

$$\mathbf{J} = -\rho D \nabla(\delta E_I), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (2b)$$

式中 G 为剪切模量, b 为柏氏矢量幅值, R_0 为晶体半径, r 为坐标 x, y 处的矢径, D 为位错可动性因子, $f(x,y,\rho)$ 为位错密度分布函数。展开 δE_I 并略去高阶项,得

$$\delta E_I = -F_1 \delta\rho - F_2 \nabla^2 \delta\rho \quad (3)$$

Holt 采用的位错密度连续性方程为

$$\frac{\partial \delta\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (4)$$

类似于线性稳定性分析,设上述方程的小扰动解为

$$\delta\rho = A(\beta) \exp[B(\beta)t] \cos(\beta R) \quad (5)$$

在 $B(\beta)$ 由负变正时,小扰动解被放大而均匀态位错分布失稳,随后,位错花样形成的选择原理是对应于最大 $B(\beta)$ 的频率 β_m 及波长 λ_m 的扰动生长最快,并由 λ_m 决定位错胞的尺寸。

经详细的分析, Holt 求得 λ_m 的表达式为

$$\lambda_m = 2\pi/\beta_m = 2.5 K_c / \sqrt{\rho} \quad (6a)$$

而位错胞平均尺寸 d 为

$$d \approx \lambda_m \approx \alpha K_c Gb/\sigma \quad (6b)$$

式中 σ 为作用应力, α 常数值范围为 0.5—1.0. 式 (6) 和大量的试验观察结果一致^[14]. Gittus^[25] 关联了大量试验结果, 发现常数 $K_c = 5—20$ 时位错胞尺寸对应的位错组态自由能最小.

3.2 低能位错结构^[2]

基于一般的自由能最小化原理, 术语低能位错结构指位错花样形成的驱动力是位错系统自由能的减小, 而位错花样是一种稳定的低能位错结构.

作为 1 阶近似, 位错单位长度的线能量 U_D^* 为

$$U_D^* = \frac{Gb^2 f(\nu)}{4\pi} \ln\left(\frac{R_0}{b}\right), \quad f(\nu) = \begin{cases} 1, & \text{螺位错} \\ 1/(1-\nu), & \text{刃位错} \\ (2-\nu)/[2(1-\nu)], & \text{平均位错群} \end{cases} \quad (7)$$

式中 R_0 为位错应力场的有效范围, 即所谓的上切割半径, ν 为泊松比. 位错密度为 ρ 的系统单位体积中位错储存的能量是^[26]

$$U_V = \rho U_D^* = \rho \frac{Gb^2 f(\nu)}{4\pi} \ln\left(\frac{R_0}{b}\right) \quad (8)$$

式 (8) 中没有计及位错核的能量, 也没有弹性各向异性对能量的贡献, 尤其是非常重要的位错 (群) 间的相互作用能量 (包括长程作用) 也没有计及. 材料研究学者从方程 (8) 出发, 认为随着变形的增大, 位错密度增加, 导致位错 (群) 间相互作用增大, 而各个位错 (群) 的应力场发生“屏蔽”, 从而使 R_0 值下降, 由此渐渐形成各种低能位错结构. 经半定量研究得出, 低能位错构形的顺序是^[26]: 位错堆积 \rightarrow 偶极子丛 \rightarrow Taylor 晶格 \rightarrow 偶极子墙 \rightarrow 位错胞结构. 其中, 位错堆积 R_0 最大, 属高能结构, 因而不稳定; 胞结构 R_0 最小, 因此也最稳定. 目前, 这方面的研究还基本上停留在定性和半定量估计阶段, 似乎难以深入.

3.3 反应扩散动力学模型

3.3.1 Walgraef-Aifantis 模型. Walgraef 和 Aifantis^[21] 首次利用 Prigogine 的自组织理论来模拟位错花样的形成. 他们把失稳、分叉、高次分叉、稳定性分析、时空有序结构 (耗散结构)、对称性破缺等一系列非线性动力学概念和方法引入位错花样形成的动力学中, 开创了一片新天地. 而他们并没有直接运用自由能最小化原理. Aifantis 早期的一个重要贡献是完善了位错群连续性方程, 即所谓的位错群密度演化的完全守恒律^[27]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = \hat{C}(\rho, t) \quad (9)$$

式中, \mathbf{J} 为位错流密度矢量. 比较式 (4) 和 (9) 可见, Aifantis 加进了重要的 \hat{C} 项, 它表征位错的增殖、销毁、相互反应等作用, 一般为 ρ 的非线性函数. 由于位错在滑移和交滑移过程中的运动都是扩散控制的热激活过程, 因而具有扩散性质. Aifantis 用类似于 Fick 第一定律的半经验唯象学方法, 假设位错流密度正比于位错空间分布的梯度, 即

$$\mathbf{J} = -D\nabla\rho \quad (10)$$

式中 D 为扩散系数。这样，联合式 (9) 及式 (10)，则不同位错群的动力学方程成为非线性科学中最著名的反应-扩散方程组。由此，Aifantis 发展成“梯度位错动力学”框架。在此框架下，位错系统动力学失稳、分叉形成位错花样。失稳的根源在于位错群间输运/相互作用梯度项同位错群增殖、聚集、销毁的非线性反应/聚集项之间的竞争^[8]。

Walgraef 和 Aifantis 提出的描述疲劳过程中驻留滑移带形成的一个简单的反应-扩散模型为

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 \rho_i + g(\rho_i) - b\rho_i + c\rho_m \rho_i^2 \quad (11a)$$

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} = D_m \nabla^2 \rho_m + b\rho_i - c\rho_m \rho_i^2 \quad (11b)$$

式中 ρ_i 为不可动位错群密度， ρ_m 为可动位错群密度。位错源（汇） \hat{O}_i ， \hat{O}_m 项由下述基本过程决定，即由于驻留滑移带从脉基结构中成核，故已存在大量的位错团（偶极子和多极子团），位错一旦增殖，很快地被它们钉扎而成为不可动位错的源项 $g(\rho_i)$ ； $b\rho_i$ 项则表征在热激活等机理作用下，位错从不可动群中逃出获得自由而成为可动位错，故此项成为可动位错之源，不可动位错之汇；可动位错群与不可动位错群发生非线性反应，由立方项 $\rho_m \rho_i^2$ 表征，它成为可动位错之汇，不可动位错之源。式 (11) 中参量 b 集中特征化了位错可动率，作为系统的分叉参量，它依赖于应变率、温度、内部特征参量。对式 (11) 进行线性稳定性分析得到的分叉图见图 17^[28]。图中，0 表示均匀定态，1 表示脉结构，2 表示周期分布的驻留滑移带。上述模型的推广包括了温度效应，也已推广到双滑移控制情况迷宫结构的形成动力学模拟（参见 [8]）。

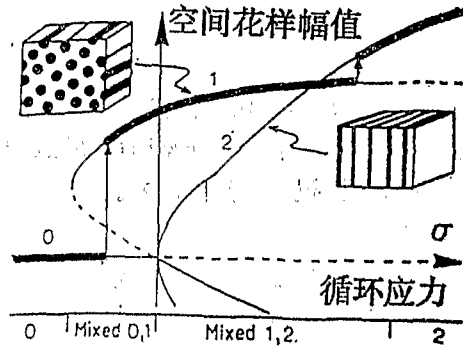


图 17 疲劳中位错花样形成的分叉图^[28]

3.3.2 Kratochvil 模型^[23] Kratochvil^[23] 对单调及循环加载过程中偶极子形成脉结构的机理进行了详细考察，并进一步引进非局部应变硬化的概念来考虑位错群间的相互作用，从而进一步发展了反应-扩散模型，建立了所谓的协同学模型，成功地预言了疲劳早期阶段脉结构的形成。Kratochvil 提出刃型位错偶极子运动的主要控制机理是偶极子净漂移到局部应力集中的位置。由此假设偶极子流密度 J_x 正比于局部应力 σ_{xy} 的梯度，即

$$J_x = D \partial \sigma_{xy} / \partial x \quad (12)$$

式中 x 代表主滑移面中主滑移方向的空间坐标。他进一步假设位错源（汇）项 \hat{O} 正比于非弹性应变率 \dot{p} ，即

$$\hat{O} = A |\dot{p}| \quad (13a)$$

$$A = A_0 + A_1 \rho^k \quad (13b)$$

位错偶极子群密度 ρ 的演化满足守恒律 (9)，代入式 (13) 得

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + D \frac{\partial^2 \sigma_{xy}}{\partial x^2} = (A_0 + A_1 \rho^k) |\dot{\rho}| \quad (14)$$

进一步, 取常用的幂律本构关系

$$\dot{\rho} = c \left| \frac{\sigma_{xy}}{\tau} \right|^{m-1} \frac{\sigma_{xy}}{\tau} \quad (15)$$

在关联 ρ 与应变硬化参量 τ 时, Kratochvil 采用了唯象学非局部硬化关系

$$\tau = \tau_0 + \int_{-\infty}^{\infty} M(x-x') \rho(x') dx' \quad (16a)$$

对空间均匀解, 即 $\rho = \bar{\rho}(t)$, 由 (16a) 得到通常的线性硬化关系为

$$\tau = \tau_0 + H_0 \bar{\rho}, \quad H_0 = \int_{-\infty}^{\infty} M(x-x') dx' \quad (16b)$$

为了封闭方程组, 还需通常的平衡方程、几何方程和弹性虎克定律及相容方程 (参见 [23])。在式 (16) 中函数 M 的形式决定于位错源的统计特性, Kratochvil 采用了“钟形函数”, 即

$$M(x) = \frac{M_0}{1 + (x/a)^2} \quad (17)$$

式中 a, M_0 为常数。由线性稳定性分析得到了脉基体的理论分布, 它与 Fe-0.9%Si 单晶体疲劳的试验结果非常一致 (见图18和图19)。Kratochvil 也已经把他的模型用于位错胞结构形成的动力学模拟 (参见 [29])。

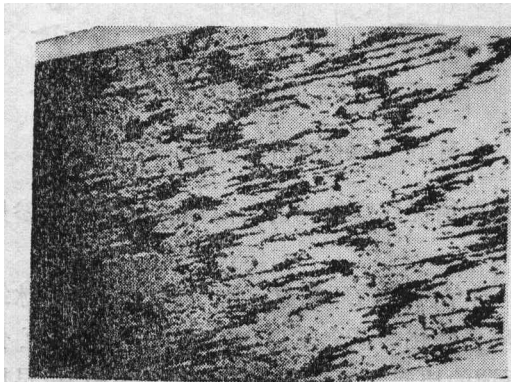


图 18 Fe-0.9%Si 单晶疲劳脉基体电镜照片 [23]

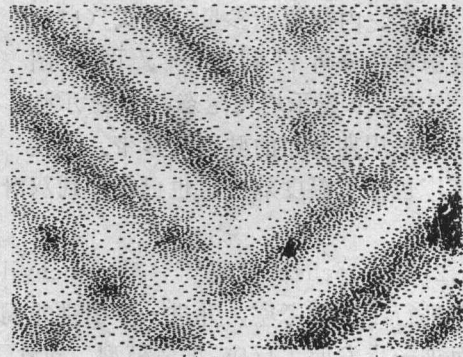


图 19 Fe-0.9%Si 单晶疲劳脉基体理论分布 [23]

4 位错花样动力学的计算机模拟

超级计算机为模拟各种复杂的细观物理过程提供了强有力的手段, 计算机模拟已与传统的理论分析和试验研究并驾齐驱, 谓之“计算机实验”。目前, 主要有 3 种位错花样形成动力学的计算机模拟方法, 即分子动力学、元胞自动机和位错动力学方法。位错系统与一般的粒子系统相比有其自身的特殊性。首先, 位错仅有位置和有限速度而无质量, 因此, 并不是一个实体; 其次, 位错偶极子也不是分子。因而, 位错系统的计算机模拟并不能直接应用传统的分子动力学模拟方法, 而需加以适当改进。Lepinoux 和 Kubin [30] 成功地应用元胞自动机方法模拟了 2 维位错系统中驻留滑移带的形成过程。元胞自动机模拟的主要优点是能有效

地模拟位错间的短程作用，例如位错销毁、增殖、偶极子形成等，其缺点是不能有效地模拟位错间的长程作用。Amodeo^[31]最近发展的位错动力学方法能有效地模拟位错花样形成的动态过程，使短程和长程作用相结合。他把矢量粒子动力学应用到位错系统，并利用现有位错动力学的理论成果，成功地模拟了2维位错系统中驻留滑移带、平面位错列阵(dislocation planar arrays)、高温下位错胞的形成过程。

Amodeo用以模拟平面位错列阵的参量及条件见表6。模拟构形为 $2\mu\text{m} \times 4\mu\text{m}$ 的方框，水

表6 平面位错列阵计算机模拟条件^[31]

材料	铜
温度	25°C
模拟时间	<1s
偶极子形成宽度	130b
螺位错销毁宽度	65b
速度/应力标度比	112/15
作用应力	30MPa
摩擦应力	5MPa
初始位错密度	$5 \times 10^9/\text{cm}^2$

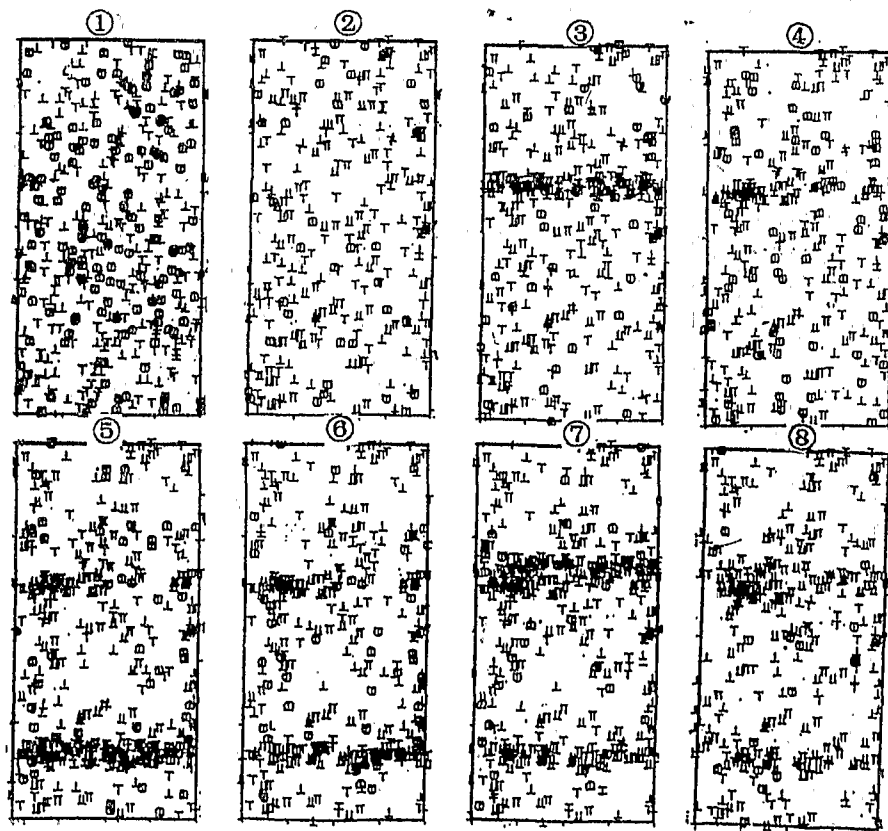


图20 平面位错列阵时间振荡现象^[31]

平代轴表滑移面的主滑移方向，因此，整个构形即前述的 $(1\bar{2}1)$ 平面。循环作用剪应力平行于水平轴，因此，采用周期边界条件，进一步把垂直方向分成 100 份，相当于 100 个平行滑移面，其间距为 $0.04\mu\text{m}$ 。在这些滑移面中，位错增殖满足 Orowan 准则

$$\sigma_0 = 2Gb/\lambda \quad (18)$$

式中 λ 为内部障碍空间， G 为剪切模量。一旦作用于位错的总应力超过 σ_0 ，则 Orowan 准则得到满足，位错开始增殖；相反，当作用于位错的力小于 σ_0 时，增殖过程又自动停止。

首先，在初始构形①中随机地投进 400 个正、负号的刃型位错，此时，没有外部作用应力，因此，位错运动到各自的平衡位置，大部分为不可动位错和位错偶极子（见图 20）。接着，沿水平方向开始施加循环作用应力，在大约 10 个时间迭代步后到达构形②。由于循环应力作用，位错开始来回运动，促使大量异号位错销毁，因此，构形②有较低的位错密度，在构形②位错密度最低区，局部有效应力最高，而 Orowan 准则得到满足。随之在此区滑移层中发生位错增殖伴随着第一个位错带成核。在经过大约 10 个迭代时间步到构形③时，第 1 个位错偶极子带在构形图上三分之二处已经出现。在构形④中，带中的高位错密度使 Orowan 增殖截止，随着位错的运动，带中发生了位错销毁。在构形⑤下部，第 2 个带成核并生长。在构形⑥中，两个带中都继续发生位错销毁。令人感兴趣的现象发生在构形⑦，此时，下方的第 2 个带继续发生位错销毁，而早先形成的第一个带再次产生位错增殖，使增殖-销毁交替出现。这证明了位错花样形成过程中时间振荡行为的存在。图 21 与图 20 模拟条

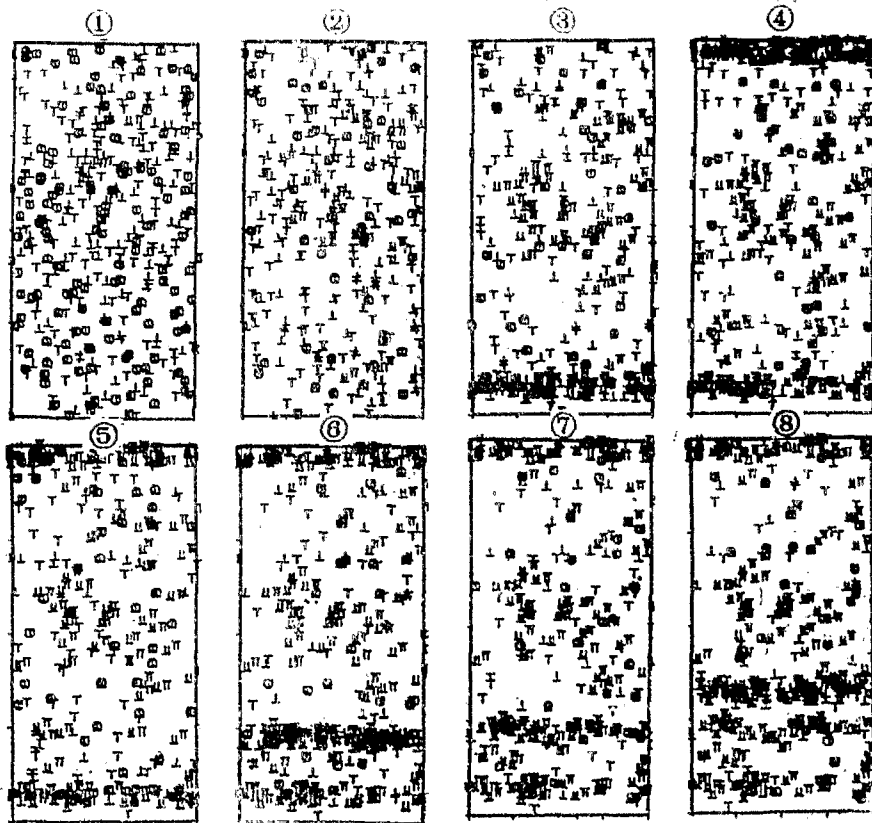


图 21 平面位错阵列成核和扩展的计算机模拟^[11]

件相同，所不同的是，第1个带首先在构形下部成核和出现（见构形③），而第2个带则出现在构形上部（见构形④）。此后，第3及第4个带紧邻着第1个带出现，并向内部扩展（见构形⑥和构形⑧）。这个模拟与实际变形过程中滑移带首先在单晶体试件表面的两端成核，并向内部扩展的现象是一致的（见图22^[7]）。从上述计算机模拟中我们可以看到，滑移带的成核和生长是位错增殖、消毁、形成偶极子的动态竞争过程；带的成核和形成取决于材料中形成的随机成核点；而后继带的成核和形成受到已形成带中位错成团集聚的影响，并在其邻近成核和发展。

Walgraef 根据简单的反应-扩散模型导得的微分方程组 (11)，用数值解法得到了与计算机模拟类似的结果^[32]。图23(a)–(f)为中间扰动成核向两边扩展的位错带。端部扰动成核向内部扩展的位错带见^[32]。



图22 平面位错阵列（滑移带）电镜照片^[7]

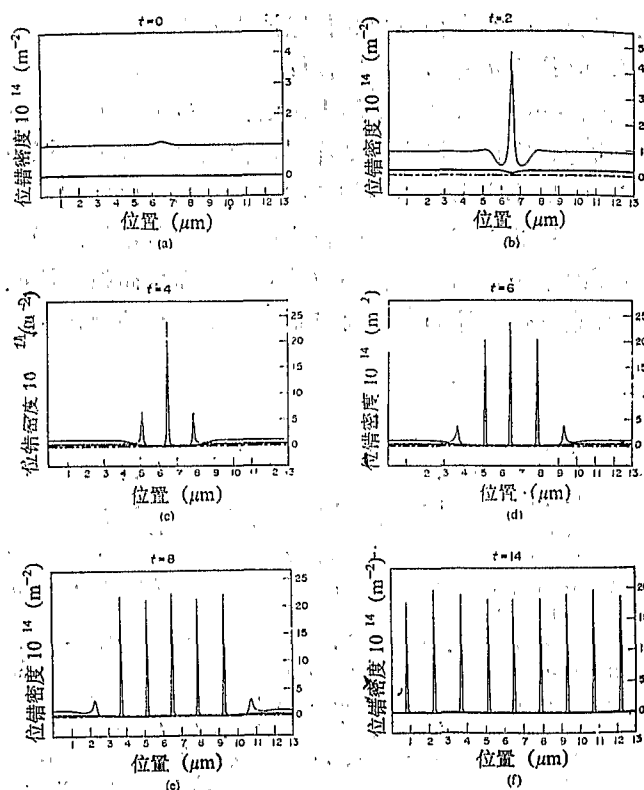


图23 (a)–(f)平面位错阵列（滑移带）成核扩展的数值模拟^[32]

5 结论和建议

试验研究表明，不同的材料和不同的力学过程仅产生4种基本的位错花样，它们是典型的耗散结构。其形成受外部宏观力学参量和内部特征参量控制，由大量的位错群间的强烈的非线性耦合和协同作用完成，包括失稳、分叉、对称性破缺、花样形成等一系列非线性动力学现象。位错花样形成及演化的深入研究与很多宏观唯象学的力学性能密切相关，是十分迷人而又极富挑战性的课题。

疲劳位错花样的形成及其特性的研究将会促进对疲劳性能和机理的透彻理解，驻留滑移带的成核和扩展规律的研究尤为重要，因为它是导致宏观裂纹起裂的关键因素^[33]。裂纹尖

端位错分布状态的失稳与花样形成也必然与裂纹的失稳扩展有内在的联系。另一方面,循环非比例加载中的幅值效应和附加强化效应也能从位错花样的特性中得到深入理解。Drucker^[84,85]曾在1984和1988年的两篇论文中反复强调了位错花样(胞结构)在材料应变硬化和本构理论中的作用。而位错花样(亚晶粒)及其特性也已成功地用于蠕变-塑性交互作用现象的本构描述^[86]。

用位错花样的特性来增强和设计材料则是我们研究的目的。例如,可进行适当的表面处理以阻止剪切带在表面成核而提高构件疲劳寿命,也可进行预变形工艺形成有利的位错花样来增强材料。

尽管位错花样的研究已经取得了一些进展,但还存在许多问题和不足,需要加以解决和完善:①在理论分析、数值计算和计算机模拟中,位错群的长程作用都没有得到足够考虑或被忽视了;②本构方程和位错演化并没有耦合,严格地说,现有分析所用的方程组并不封闭;③位错花样与材料特性间的定量关系还未建立;④位错花样形成的控制参量研究还很不完善;⑤高次分叉及解的大范围特性讨论极少;⑥位错花样形成演化多为静态电镜观察,原位动态观察报道极少;⑦计算机模拟仍然处于模拟构形小、模拟时间短、计算量巨大的状态;⑧最小自由能原理与动力学演化结合研究甚少。

近年获得充分发展的位错连续统和位错规范场理论^[87],在位错花样的研究中可望发挥重要的作用,当然,在动力学演化方面也面临着挑战^[88]。理论分析、计算机模拟和动态电镜观察三位一体的深入研究将为位错花样的现代研究开创一片新的天地。

参 考 文 献

- 1 尼科里斯,普利高津. 探索复杂性. 四川教育出版社(1986): 245—250
- 2 Wildorf D K, Starke E A. *Mat. Sci. Eng.*, **81** (1986): 7—9
- 3 Laird C, Charsley P, Mughrabi H. *ibid.*, **81** (1986): 433—450
- 4 Woods P J. *Phil. Mag.*, **28** (1973): 155—191
- 5 Laird C, et al. *Mat. Sci. Eng.*, **A113** (1989): 245—257
- 6 Mughrabi H. *Dislocations & Properties of Real Materials*. The Institute of Metals, London (1985): 244—262
- 7 Neuhauser H. *Res. Mechanica*, **23** (1988): 113—135
- 8 Walgraef D, Aifantis E. *Micromechanics & Inhomogeneity*. Springer-Verlag (1990): 511—533
- 9 Winter A T. *Phil. Mag.*, **30** (1974): 719—738
- 10 ———, Pedersen O B. *Acta Metall.*, **29** (1981): 735—748
- 11 Jin N Y, Winter A T. *ibid.*, **32** (1984): 1173—1176
- 12 Shirai H, Weertman J R. *Scripta Metall.*, **17** (1983): 1253—1258
- 13 Doong S H, Socie D F, Robertson I M. *J. Eng. Mat. Tech.*, **112** (1990): 456—464
- 14 Takeuchi S, Argon A S. *J. Mat. Sci.*, **11** (1976): 1542—1566
- 15 钱正芳. 重庆大学工学博士论文(1991年4月)
- 16 Ermi A M, Moteff J. *Metall. Trans.*, **13A** (1982): 1577—1588
- 17 Lii M, et al. *Mat. Sci. Eng.*, **A113** (1989): 327—338
- 18 Luft A. *Prog. in Mat. Sci.*, **35** (1991): 97—204
- 19 Bai Yi-long (白以龙). *Res. Mechanica*, **31** (1990): 133—203
- 20 Holt D L. *J. Appl. Phys.*, **41** (1970): 3197—3201
- 21 Walgraef D, Aifantis E C. *Int. J. Eng. Sci.*, **23** (1985): 1351—1372
- 22 Nicolis G, Prigogine I. *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*. Wiley, New York (1977)
- 23 Kratochvil J. *Rev. Phys. Appl.*, **23** (1988): 419—429
- 24 Kubin L P, Estrin Y, Canova G. *Patterns, Defects & Materials Instabilities*. Kluwer Acad. Pub. (1990): 277—301

- 25 Gittus J H. *Phil. Mag.*, **39** (1979) : 829—832
- 26 Hansen N, Wilsdorf D K. *Mat. Sci. Eng.*, **81** (1986) : 141—161
- 27 Bammann D J, Aifantis E C. *Acta Mech.*, **45** (1982) : 91—121
- 28 Walgraef D, Aifantis E C. *J. Appl. Phys.*, **58** (1985) : 688—591
- 29 Kratochvíl J. *Scripta Metall.*, **24** (1990) : 891—894
- 30 Kubin L P, Lepinoux J. *Strength of Metals & Alloys*, ICSMA-8 (1988) : 35—59
- 31 Amodeo R J. *Res. Mechanica*, **30** (1990) : 5—142
- 32 Schiller C, Walgraef D. *Acta Metall.*, **36** (1988) : 563—574
- 33 Basinski Z S, Basinski S J. *ibid.*, **33** (1985) : 1307—1327
- 34 Drucker D C. *J. Eng. Mat. Tech.*, **106** (1984) : 286—289
- 35 ——. *Appl. Mech. Rev.*, **41** (1988) : 151—167
- 36 Qian Zheng-fang (钱正芳), Duan Zhu-ping (段祝平), Fan Jing-hong (范镜泓). *Acta Mechanica Sinica*, **9** (1993) : 45—52
- 37 段祝平, 黄迎雷, 王文标. *力学进展*, **18** (1988) : 433—456; **19** (1989) : 172—192
- 38 Kroner E, Lagoudas D C. *Int. J. Eng. Sci.*, **30** (1992) : 47—53

ADVANCES IN DISLOCATION PATTERNS FORMATION

Qian Zheng-fang Duan Zhu-ping Wang Wen-biao

Laboratory for Nonlinear Mechanics of Continuous Media (LNM),
Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences

Abstract A comprehensive survey of recent advances in dislocation pattern dynamics, including their experimental (TEM) observation, modelling of nonlinear dynamics, and dynamic simulation by super-computer, is presented in this paper. The future research trends are also outlined.

Keywords *dislocation patterns; defect dynamics; computer simulation; meso-mechanics*