

与位错和点缺陷交互作用有关的 非线性滞弹性内耗的研究*

方前锋, 葛庭燧

(中国科学院固体物理研究所内耗与固体缺陷开放研究实验室, 合肥 230031)

摘 要: 综述非线性滞弹性内耗的主要实验规律和物理模型. 结合中国科学院固体物理研究所内耗与固体缺陷开放研究实验室对 Al-Mg 合金中出现在室温附近的非线性滞弹性内耗峰的理论 and 实验研究结果, 对产生这些内耗峰的微观机制进行了较深入的阐述. 结果表明, 其微观过程是点缺陷(溶质原子)在位错拖曳下在位错芯区内的扩散过程. 由于位错拖曳溶质原子的力与外加应力是非线性的, 所以导致了非线性内耗峰的出现. 分子动力学模拟计算所得到的溶质原子在位错芯区的扩散激活能与内耗峰的激活能一致. 这些结果使我们对非线性滞弹性内耗峰产生的微观机理有了比较全面的理解.

关键词: 位错; 点缺陷; 非线性; 滞弹性内耗

中图分类号: TG111.2; TG115.24 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2001) S1-0203-05

在与位错和点缺陷的交互作用有关的内耗研究领域, 在较大的应变振幅下, 内耗的非线性或与振幅有关性是一个普遍的现象, 这是由位错与点缺陷的非线性交互作用本质所决定的. 在非常低的应变振幅下, 内耗与振幅无关, 这是线性滞弹性的情况. 在较高的应变振幅下 ($\sim 10^{-5}$), 内耗一般是与振幅有关的, 它所反映的实际上是在远远低于弹性极限的应力和应变范围内, 动态应力与应变的非线性关系. 与振幅有关的内耗一般有两种类型: 一种是内耗随应变振幅的增加而单调增加 (在很大应变振幅下也会缓慢下降)^[1,2], 这种内耗可以用 G-L 模型来较好地解释^[3]; 另一种是内耗随应变振幅的增加先是增加, 经过一个极大值后又很快下降, 因此在内耗-振幅曲线上出现峰值^[4]. 这种内耗的特点是既表现出振幅内耗峰 (当内耗作为振幅的函数时), 同时也表现温度内耗峰 (当内耗作为温度的函数时), 且温度内耗峰随频率的降低向低温移动, 表现弛豫的特性, 所以这种内耗现象被葛庭燧冠名为“非线性滞弹性内耗”^[5]. 经过几十年来我国科学工作者在 Al-Mg, Al-Cu 固溶体中的大量工作, 基本上奠定了非线性滞弹性这门新学科的实验基础 (有关这方面的实验工作的总结, 可参阅文 [6] 及其中的参考文献). 特别是对位于室

温附近的内耗峰 (由 2 个支峰组成: P_1' 峰和 P_1'' 峰) 研究得更加详细, 已经证实了它们牵涉到点缺陷 (溶质原子) 沿着位错芯的管道扩散, 因此使得从实验上直接测定溶质原子沿着位错管道的扩散系数成为可能. 本文将首先综述非线性滞弹性内耗的主要实验规律, 特别是最近本实验室对 Al-Mg 合金中出现在室温附近的非线性滞弹性内耗峰的实验研究结果; 其次对产生这些内耗峰的微观机制进行了较深入的阐述, 并在理论上进行了解析的和数值的分析, 所得的理论计算结果与实验结果一致; 最后, 采用分子动力学模拟计算得到了空位在位错芯区的扩散激活能, 并与内耗峰的激活能进行了比较和讨论. 这些结果使我们对与位错和点缺陷交互作用有关的非线性滞弹性内耗峰产生的微观机理有了比较全面的理解.

1 非线性滞弹性内耗的主要实验规律及其物理模型

由于室温非线性滞弹性内耗峰 (P_1 峰) 只在冷加工的固溶体中出现, 而在冷加工的纯金属中或在完全退火的固溶体中不出现, 因此直观地认为非线性滞弹性内耗峰来源于位错与点缺陷 (溶质原子) 的共同作用. 但对其具体的微观过程的认识, 则是在对该内耗峰的不断深入研究中

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (59601008)

收稿日期: 2000-12-30;

作者简介: 方前锋 (1962-), 男, 研究员, 博士生导师; E-mail: qffang@mail.issp.ac.cn

逐步完善的. 20 世纪 60 年代, 通过对溶质原子的扩散系数以及位错的运动距离的估计, 发现溶质原子的扩散系数要比其体扩散系数大出好几个数量级, 因而排除了位错拖曳 Cottrell 气团运动的物理模型^[4], 而认为溶质原子的扩散过程为位错芯区的管道扩散. 另外发现位错的运动距离不到一个 Burgers 矢量的距离, 因而认为位错的运动不是整根位错跨越 Peierls 能垒, 而是通过弯结沿位错线的侧向运动来实现的. 最后确定了对应 P_1 峰的物理模型为位错弯结拖曳位错芯区的溶质原子沿位错管道扩散的过程^[7,8]. 因此, P_1 峰的弛豫强度来源于位错弯结的侧向运动(位错的弓出运动), 而弛豫时间由溶质原子的位错芯区扩散所决定. 自从 1950 年葛庭燧在高度冷加工, 部分退火的 Al-Cu 固溶体中发现 P_1 峰以来, 试图找到一种合适的实验方法使 P_1 峰能够稳定重复出现的努力一直持续到最近几年. 先后采用了对试样进行处理的不同方法, 如“部分退火法”^[4], “轻度拉伸和扭转法”^[7,8], “综合方法”^[9,10], 以及最近发展起来的“中度冷加工法”^[11]. 随着实验方法的不断改进, P_1 峰的重复出现率大大提高, 使得我们能够对 P_1 峰进行深入的研究, 发现了一些新的现象. 到目前为止, 有关 P_1 峰的主要实验规律有以下几点:

(1) 位于室温附近(当测量频率约为 1Hz 时)的 P_1 峰有精细结构, 它是由两个分立的内耗峰组成(较低温的为 P_1' 峰, 较高温的为 P_1'' 峰)^[10]. 在适当的退火条件下还会在更低的温度(仍在室温附近)出现第 3 个内耗峰(P_0 峰)^[12,13].

(2) P_1' 峰所对应的模量随温度的升高而降低, 属正常变化; 而 P_1'' 峰对应的模量随温度的升高而增加, 属反常变化^[10,11], 如图 1 所示.

(3) P_1' 峰所对应的振幅内耗峰随温度的升高而向低振幅移动, 属正常变化; 而 P_1'' 峰对应的振幅内耗峰随温度的升高而移向高振幅, 属反常变化^[9,10], 如图 2 所示.

(4) P_1' 峰和 P_1'' 峰对试样的状态或微观结构非常敏感. 主要表现在: ① P_1' 峰和 P_1'' 峰的出现重复性强烈依赖于试样的处理条件; ② P_1' 峰和 P_1'' 峰的峰高和峰位在升降温测量过程中有较大差别, 一般地, 升温过程中的峰温高于降温过程中的峰温^[10,14]; ③ P_1' 峰和 P_1'' 峰随退火(或多次

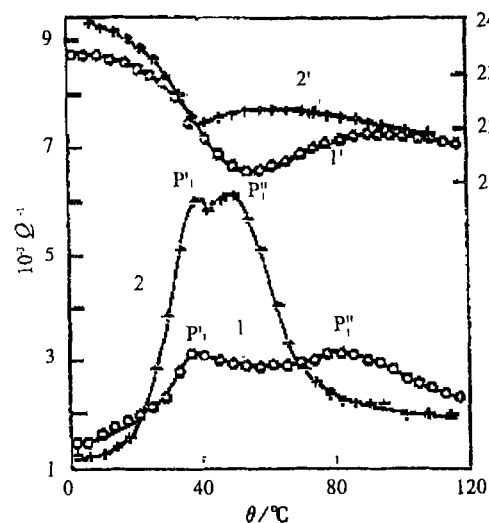


图 1 一根 Al-Mg ($w = 0.12\%$) 试样经“综合方法”处理后, 在升温(曲线 1, 1')和降温(曲线 2, 2')过程中的内耗和模量(频率平方)与温度的关系曲线^[10]

重复测量)也有较大变化, 一般地, P_1' 峰先出现, 随着退火的进行(或测量次数的增加), P_1'' 峰的峰高增加, 同时在较低温度出现 P_1' 峰, 最后两个峰的高度达到饱和^[11~13]; ④ P_1' 峰和 P_1'' 峰随进一步的冷加工而向低温移动, 且最后达到饱和^[13], 这种现象可以用位错的几何弯结链的塞积来解释^[15].

(5) 室温附近的 P_1' 峰和 P_1'' 峰的激活能为溶质原子在位错芯区的扩散激活能: 对 Al-Mg 试样, P_1' 峰和 P_1'' 峰的激活能分别为 0.5 eV 和 0.6 eV^[16], 而对 Al-Cu 试样, P_1 峰(未观察到精细结构)的激活能为 0.8 eV^[17]. 另外, 当由于试样处理及退火等原因而使 P_1' 峰处于较低的温度时, P_1' 峰的激活能反常增大^[18].

以上这些实验结果尽管能够在位错弯结拖曳溶质原子进行管道扩散的物理模型基础上得到定性的解释, 但对其进行定量解释却存在一定的困难. 本实验室近几年在此模型基础上, 通过引进位错和溶质原子组态分布几率的概念, 对溶质原子的芯区管道扩散进行了定量的处理, 得到了与实验一致的理论曲线. 以下是这些工作的简单介绍.

2 非线性滞弹性内耗的理论分析结果

图 3 给出了一个溶质原子座落在在一根两端被强钉扎长为 $2L$ 的斜位错线上的一种可能组态,

位错上存在一系列几何弯结。

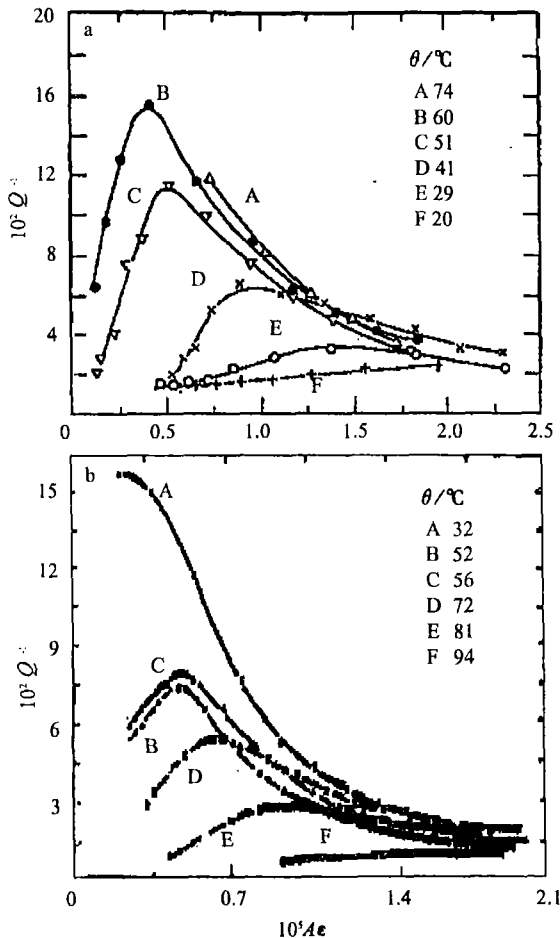


图2 一根 Al-Mg ($w = 0.12\%$) 试样经“综合方法”处理后, 对应于 P_1' 峰 (较低温, a) 和 P_1'' 峰 (较高温, b) 在不同温度下的内耗与应变振幅的关系曲线^[9]

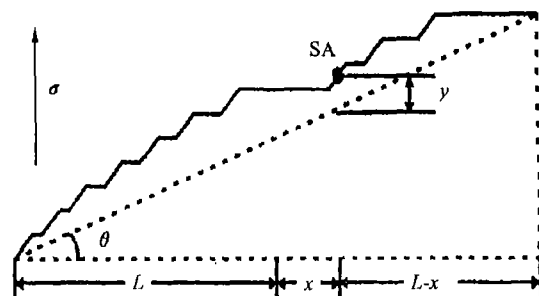


图3 位错弯结—溶质原子芯气团模型的示意图。在外力作用下, 弯结链侧向运动, 位错弓出, 但处于位错芯处的溶质原子要通过芯区扩散才能改变其位置。

设晶体中含有一个溶质原子的长为 $2L$ 的斜位错数共有 N 个, 而其中溶质原子的坐标在 $x - x + dx$ 和 $y - y + dy$ 之间的位错数为 n , 则 $\rho = n/N$ 为溶质原子处于坐标 (x, y) 的几率密度。在外加

切应力的作用下, 位错将通过几何弯结的侧向运动而弓出, 但由于在 (x, y) 处被溶质原子钉扎住, 所以这一点是不能自由运动的。

由于位错的弓出, 位错将施加于溶质原子一个拖曳力, 其横向分量和纵向分量分别为^[19,20]

$$F_L = -\frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x} = -\frac{2(\sigma b h)^2 L x}{P} - \frac{\beta x y^2}{L^2 - x^2} + \beta(y - y_0) \tan \theta$$

$$F_T = -\frac{\partial W}{\partial y} = -\beta(y - y_0) \quad (1)$$

其中, $y_0 = \frac{\sigma b h^2 (L^2 - x^2)}{2P}$, $\beta = \frac{2PL}{h^2 (L^2 - x^2)}$, $P = \frac{Gb^2 h^2}{4\pi} \gamma$, $\gamma \approx 1$. G 为切变模量, b 为柏氏矢量的大小, h 为弯结的高度。在此拖曳力的作用下, 如果溶质原子具有适当的动性 (如在室温附近并沿位错芯区扩散), 溶质原子将通过扩散而改变位置坐标, 从而改变 $\rho(x, y)$ 的大小。因此 $\rho(x, y)$ 随时间的变化是由溶质原子的扩散所决定的。

设溶质原子在 (x, y) 位置出现的几率密度或分布函数可写为

$$\rho(x, y, t) = \rho_L(x, t) \rho_T(x, y, t) \quad (2)$$

其中, $\rho_L(x, t)$ 和 $\rho_T(x, y, t)$ 分别是纵向和横向分布函数。

如果将纵向和横向扩散系数分别表示为 D_L 和 D_T , 并设 $t = 0$ 时外力 $\sigma = 0$, $t > 0$ 时 $\sigma > 0$, 则溶质原子的漂移扩散方程 (或 ρ 的变化主方程) 为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_T \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} - \frac{F_T}{kT\rho} \right) + D_L \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{F_L}{kT\rho} \right) \quad (3)$$

其中括号中的第一项来源于组态熵 (或化学势) 的变化, 第二项来源于位错的拖曳。

P_1' 峰处于较低的温度, 对应于溶质原子的纵向芯区扩散过程, 此时横向扩散的影响较小。而 P_1'' 峰处于较高的温度, 主要由溶质原子的横芯区向扩散所控制, 但受纵向芯区扩散的影响较大。对 P_1' 峰的纯纵向扩散过程, 在准静态条件下 (即 $t = 0$ 时外力 $\rho = 0$, $t > 0$ 时 ρ 为一常数), 可以计算出对应 P_1' 峰的弛豫强度和弛豫时间, 它们都是应变振幅的非线性函数^[21,22]。但对于 P_1'' 峰, 由于对应于纵向和横向扩散过程, 即使在准静态条件下也很难得到方程 (3) 的解析解。

图4给出了在 $T = 360\text{K}$ 的温度下 P_1' 峰的弛豫强度 Δ 和弛豫时间 τ/τ_0 随应变振幅 $\epsilon = \sigma/G$ 的变化规律,其中 τ_0 是 $\epsilon = 0$ 时的弛豫时间.

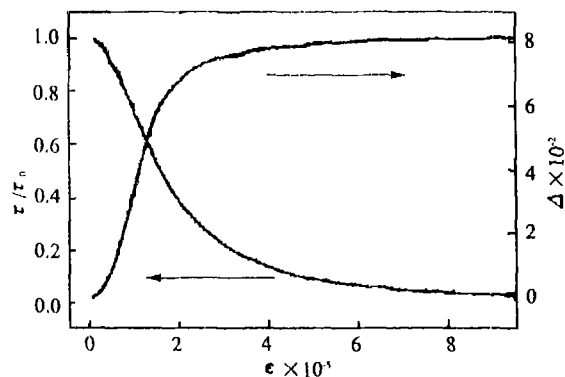


图4 解析计算得到的 P_1' 峰的弛豫强度和弛豫时间与应变振幅的关系曲线

由图可见,随着 ϵ 的增加, τ/τ_0 单调下降,而 Δ 却单调上升,最后二者都达到一饱和值. 这与文献^[23]关于 Al-Cu 试样中的 P_1 峰所做的滞弹性蠕变实验结果基本一致.

在交变应力的情况下,方程(3)无解析解,只能用数值方法求解. 采用差分方法数值求解了对应于 P_1' 峰的纵向芯区扩散方程,计算出了内耗和模量对于温度和振幅的函数曲线^[24,25],如图5所示.

由图可见,在较低的振幅下,温度内耗峰为一标准 Debye 峰,在较高的振幅下,内耗峰明显宽化,模量亏损(模量)随温度的增加而增加(下降),为正常变化. 在温度内耗峰峰温附近,在内耗振幅曲线上出现了振幅内耗峰,其变化趋势及移动规律与实验曲线(图2)极其相似. 对 P_1' 峰和 P_1'' 峰两峰共存的情形也进行了数值求解^[26],结果如图6所示.

可见,在内耗温度曲线上确实出现了2个温度内耗峰,且对应于低温内耗峰(P_1' 峰)的模量亏损(或模量)随温度的增加而增加(或下降),而对应于高温内耗峰(P_1'' 峰)的模量亏损(或模量)随温度的增加而下降(或增加),为反常变化.

3 分子动力学模拟计算空位在位错芯区的扩散

分子动力学方法在研究晶体的缺陷结构及扩散方面是一种非常有用的工具,特别是研究高温下在缺陷区域如晶界和位错芯的原子或空位扩

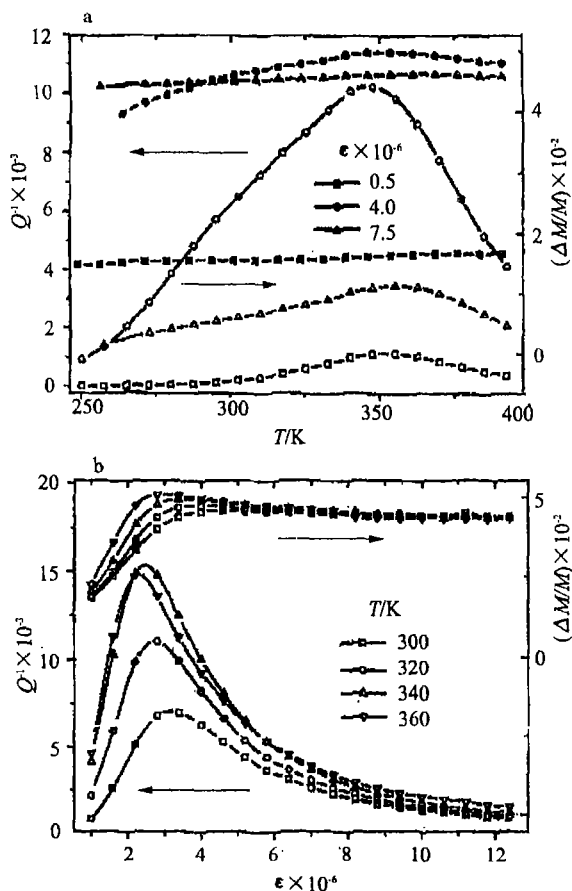


图5 数值计算得到的 P_1' 峰的内耗和模量亏损与温度(a)和应变振幅(b)的关系曲线

散. 但在较低温度下(室温或以下),由于计算时间较长,传统的分子动力学方法相对于 Monte-Carlo 方法效率不高. 新近发展起来的超快分子动力学方法(Hyper MD)基本解决了这一问^[27-29]. Hyper MD 方法的主要思想是在非鞍点区域叠加一个与原子位置有关的附加势,使得原子的势能谷变浅,从而缩短原子在势能谷底的时间,加快原子的跃迁速率. 其加快的倍数可达几千甚至上万倍,效果是很显著的.

我们采用分子动力学方法(Hyper-MD 方法)模拟了位错芯区的原子结构以及空位在位错芯区的扩散^[29,30],得出垂直于位错线方向的芯区扩散(横向)的空位迁移能为 0.53 eV ,沿位错线方向的芯区扩散(纵向)的空位迁移能为 0.45 eV . 证实了位错芯区附近的扩散比完整晶体中的体扩散容易发生,并且纵向芯区扩散系数大于横向芯区扩散系数. 这些结果表明,处于低温的 P_1' 峰对应于溶质原子的纵向芯区扩散,而 P_1'' 峰对应于溶质原子的横向芯区扩散.

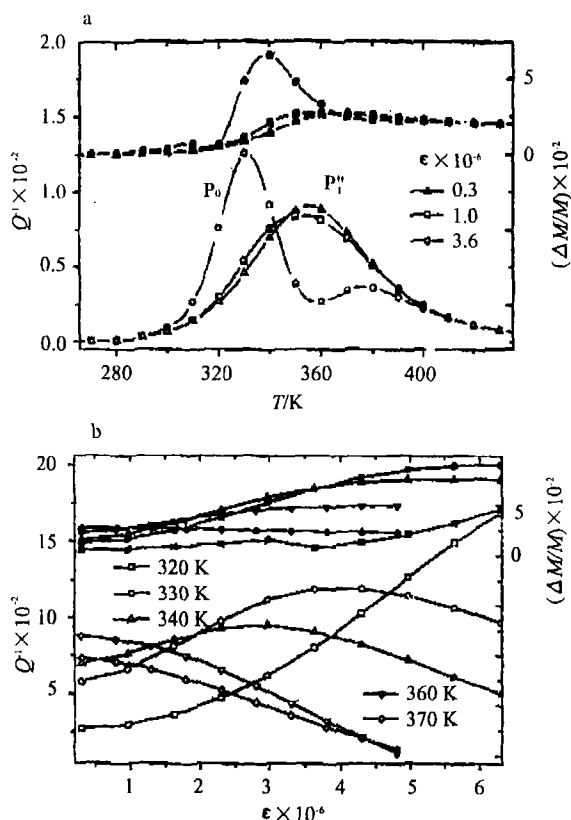


图6 数值计算得到的 P_1' 峰和 P_1'' 峰的内耗和模量亏损与温度 (a) 和应变振幅 (b) 的关系曲线

与 Al-Mg 中的内耗峰激活能比较 (P_1' 峰为 0.5 eV 和 P_1'' 峰为 0.6 eV), 说明 Al-Mg 中有足够的空位存在于位错芯区, 溶质原子的位错芯区扩散等同于空位的扩散, 不需要新形成空位; 而 Al-Cu 中的内耗峰激活能为 0.8 eV, 明显大于空位的芯区扩散激活能, 因此 Al-Cu 中溶质原子的位错芯区扩散需要空位的形成, 其扩散激活能等于位错芯区的空位形成能加上空位的迁移能。

4 结 论

本文综述了迄今为止有关位于室温附近的非线性滞弹性内耗峰的实验和理论工作。应用位错弯结气团模型并引入溶质原子在位置 (x, y) 出现的几率密度或分布函数的概念, 讨论了溶质原子在位错芯区的扩散情况。从弯结链在外力作用下的重新分布算出所导致的能量变化, 进而求出施加于溶质原子上的横向力和纵向力, 列出了溶质原子的包括横向漂移和纵向漂移的扩散方程。通过求解在准静态外力作用下溶质原子的扩散方程, 得出了这种扩散过程所对应的弛豫强度和弛豫时间, 它们和外力的关系是非线性的。通过数

值差分方法对溶质原子在位错芯区内的扩散方程进行了数值求解, 较准确地计算出了交变应力下与 2 个室温内耗峰 (P_1' 峰和 P_1'' 峰) 相应的内耗和模量亏损随温度和振幅的变化曲线。数值计算得到的内耗曲线与以前的实验曲线无论在外观形态上还是在移动规律上都完全一样。这样就从定量上解释了室温内耗峰。

参考文献:

- [1] READ T A. Phys Rev, 1940, 58: 371; Trans AIME, 1941, 143: 30.
- [2] NOWICK A S. Phys Rev, 1950, 80: 249.
- [3] GRANATO A, LÜCKE K. J Appl Phys, 1956, 27: 583; 1981, 52: 7141.
- [4] Kê S T. Phys Rev, 1950, 78: 420.
- [5] Kê S T. J Alloys Comp, 1994, 211/212: 90.
- [6] 葛庭燧. 自然科学进展, 1993(3): 289; 395; 489.
- [7] 葛庭燧, 张进修. 物理学报, 1965, 21: 1711; 1966, 22: 71.
- [8] 葛庭燧, 张志舜, 张进修. 物理学报, 1966, 22: 270.
- [9] FANG Q F, Kê T S. J de Physique, 1985, 46: C10-227.
- [10] Kê T S, TAN Q, FANG Q F. Phys Stat Sol(a), 1987, 103: 421.
- [11] WANG C C, FANG Q F. Phys Stat Sol(a), 1997, 162: 587.
- [12] FANG Q F, Kê T S. Proc ICIFUAS-9[A]. In: Kê T S ed. Proc. ICIF UAS-9[C]. Beijing: International Academic Publishers, Pergamon Press, 1989. 37-40.
- [13] Kê T S, FANG Q F. Phys Stat Sol(a), 1990, 121: 139.
- [14] 邹其东, 方前锋, 汪春昌. 内耗与超声衰减[A]. 见: 朱震刚, 方前锋. 第五届全国内耗与超声衰减学术会议论文集[C]. 合肥: 原子能出版社, 1998. 43.
- [15] FANG Q F. Chinese Phys Lett, 1993(10): 107.
- [16] TAN Q, Kê T S. Phys Stat Sol(a), 1990, 122: K25.
- [17] ZHU A W, Kê T S. Phys Stat Sol(a), 1991, 128: 95.
- [18] 方前锋, 汪春昌. 材料研究学报, 1997, 11(增刊): 63; J Alloys Comp, 2000, 310: 72.
- [19] Kê T S, FANG Q F. Phys Stat Sol(a), 1996, 158: 57.
- [20] 葛庭燧, 方前锋. 自然科学进展, 1997(7): 397.
- [21] 方前锋, 葛庭燧. 自然科学进展, 1997(7): 528; 1998(8): 204.
- [22] FANG Q F, Kê T S. Phys Stat Sol(a), 1996, 158: 405.
- [23] ZHU A W, YUAN L X, Kê T S. Phys Stat Sol(a), 1993, 135: 151.
- [24] FANG Q F, Kê T S. J de Physique IV, 1996(6): C8-273.
- [25] 方前锋. 物理学报, 1997, 46: 536.
- [26] FANG Q F. Phys Rev(B), 1997, 56: 12.
- [27] VOTER A V. J Chem Phys, 1997, 106: 665; Phys Rev Lett, 1997, 78: 3908.
- [28] GONG X G, WIKINS J W. Phys Rev(B), 1999, 59: 4.
- [29] FANG Q F, WANG R. Phys Rev(B), 2000, 62: 9317.
- [30] WANG R, FANG Q F. J Alloys Comp, 2000, 310: 80.