

表面层与基体材料中位错的交互作用

陶春虎

(北京航空材料研究所)

T. MAGNIN

(Université des Sciences et Techniques de Lille, FRANCE)

本文提出了材料表面层与基体材料中刃型位错的交互作用模型。

关键词: 表面层, 位错, 交互作用力

Interaction of an Edge Dislocation in the Substrate with a Surface Layer

Tao Chunhu

(Institut of Aeronautical Materials, Beijing)

T. MAGNIN

(Université des Science et Techniques de Lille, FRANCE)

A mathematical model for the interaction force of an edge dislocation in the substrate near a surface layer is developed.

一、前言

一些研究结果^[1~6]表明, 表面氧化层的存在能显著改变基体材料的疲劳行为, 提高材料的循环应力。同时, 表面层的存在导致在真空-空气介质交变试验中循环应力的变化出现可逆性^[8]。一般认为, 表面层与基体的界面相当于一位错源^[2,3], 导致在循环过程中发生位错在界面的交互作用。这一模型能够解释具有预氧化层试样的循环应力增加。然而, 对于循环应力在空气-真空介质交变试验中出现的可逆性变化, 这一解释是不够的。

因此, 早先提出的“影像力”^[7,8]概念对于分析氧化层的作用显得非常重要。图1示出了Head^[7,8]等人对“影像力”的定义: 处于A(0, -t)的位错, 受到了与表面状态有关的应力 σ 的作用。表面层施加于位错A的作用力如同一个以界面(表面层与基体)为镜面、且距界面距离为t的“影像位错”B(0, t)施加于位错A的力, 该力也相应称为“影像力”。我们将运用这一概念来分析这种表面层与基体位错的交互作用力。

为了分析这种交互作用力, 必然用到涉及各向同性弹性体的位错弹性理论。因此, 氧化层与基体位错交互作用力的计算集中为确定一个应力场, 该应力场作用于基体中的位错且符合边界条件(试样表面应力为零)。我们可以认为, 均匀分布的氧化层与基体有很好的结合。

因此, 应力与应变在氧化层与基体界面是连续的。

固态表面层与基体位错交互作用力的分析应同时涉及位错的堆积机制以及应力达到临界值时位错堆积的崩塌机制。本文仅涉及表面层对基体位错施加的作用力, 该力决定表面层对基体位错施加引力或斥力。为方便计, 我们在此仅讨论表面层与基体中刃型位错的交互作用。当然这种分析同样适用于螺型位错。

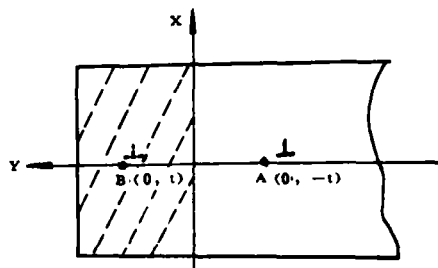


图1 “影像位错”及“影像力”的示意图

二、数学力学基础

对于无穷大平面X-Y, 选取直角坐标系如图2所示, 刃型位错A处于(0, -t), 我们可得到位错A施加于位错圈之外相应的位移场 u_0^* 与应力场 τ_0^* 。

对于厚度h表面层的平面X-Y(图3), 基体中的应

力场为 τ_{ij}^0 与 τ_{ij}^1 的叠加, 并满足一定的边界条件。

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}^0 + \tau_{ij}^1 \quad (1)$$

τ_{ij}^0 为固态表层施加于基体中位错的应力场, 应力边界条件^[8]为:

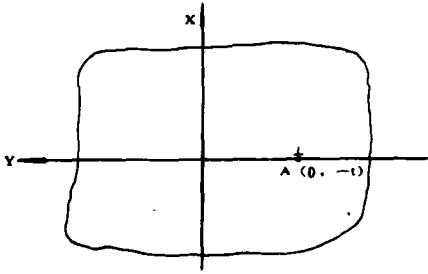


图2 刃型位错A处在无穷大平面(0, -t)处

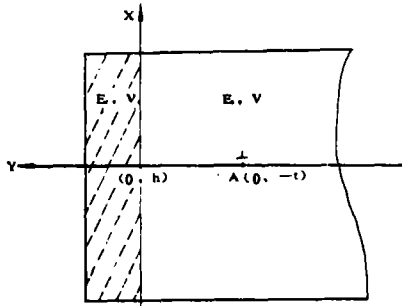


图3 厚度为h的表面层覆盖的半平面

$$[\tau_{yy}]_{y=h} = N(x) \text{ 和 } [\tau_{xy}]_{y=h} = T(x)$$

对均匀的各向同性半平面 $Y < 0$, 表面层施加于基体中任意一点 (x, y) 的应力场可用下式表达^[10]:

$$\tau_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} K_{ij} (X-s, Y-r) N(s) ds + \int_{-\infty}^{\infty} L_{ij} (X-s, Y-r) T(s) ds \quad (2)$$

式中: s, r 分别为在 X, Y 方向上的无穷小增量, K_{ij} 与 L_{ij} 为核函数:

$$\begin{aligned} K_{yy} &= -\frac{2(Y-r)^3}{\pi\theta^4} \\ K_{xy} &= -\frac{2(X-s)(Y-r)^2}{\pi\theta^4} = L_{yy} \\ K_{xx} &= -\frac{2(X-s)^2(Y-r)}{\pi\theta^4} = L_{xy} \\ L_{xx} &= -\frac{2(X-s)^3}{\pi\theta^4} \end{aligned}$$

$$\text{式中: } \theta^2 = (X-s)^2 + (Y-r)^2$$

只需找出应力边界函数 $N(x)$ 与 $T(x)$, 就可计算出表面层施加于基体的应力场及施加于单位位错线上的力 F 。根据 Peach-Koehler^[11]公式, 可求出该力分别在 X, Y 方向上的分力 F_x, F_y :

$$\begin{aligned} F_x &= -b_1 [\tau_{xy}^0]_{x=0, y=-t} - b_2 [\tau_{yy}^0]_{x=0, y=-t} \\ F_y &= b_1 [\tau_{xx}^0]_{x=0, y=-t} + b_2 [\tau_{xy}^0]_{x=0, y=-t} \end{aligned} \quad (3)$$

令人感兴趣的是作用于 Burgers 矢量方向上的力 F_s 。如果该力为正, 表面层吸引位错。反之, 则表面层对基体位错施加斥力。

$$F_s = \frac{1}{b} [b_1 F_x + b_2 F_y] \quad (4)$$

$$\text{式中 } b = [b_1^2 + b_2^2]^{\frac{1}{2}}$$

为求出表面层与基体位错的交互作用力 F , 我们先考虑两种极限情况下的表面对基体位错的作用力: (1) 自由表面; (2) 刚性表面层。

三、自由表面对基体中刃位错的作用力

对于自由表面, 根据公式 (1)

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}^0 + \tau_{ij}^1$$

τ_{ij}^1 即为自由表面与基体中刃型位错的交互作用力。该作用力必然满足下述边界条件:

$$[\tau_{yy}^1]_{y=0} = -[\tau_{yy}^0]_{y=0} = N_v(x)$$

$$[\tau_{xy}^1]_{y=0} = -[\tau_{xy}^0]_{y=0} = T_v(x)$$

根据公式 (2), 可求出 τ_{ij}^1 , 并根据式 (3) 计算出 F_x, F_y , 进而求出 F_s :

$$F_s = \frac{bD_2}{2t}$$

式中: b 为 Burgers 矢量;

$$D_2 = \frac{Gb_2}{2\pi(1-\nu)}$$

G : 剪切模量;

b_2 : Burgers 矢量在 y 方向上的分量;

ν : 泊松比。

F_s 总是大于零, 可见自由表面对基体中的位错施加吸引力, 导致位错逸出表面。

四、刚性表面层对基体中刃位错的作用力

对于具有刚性表面层的材料, 表面层施加于基体材料的位移场为 U^R 及 V^R , 其应力边界条件为:

$$[U^R + U^0]_{y=0} = 0 \text{ 和 } [V^R + V^0]_{y=0} = 0$$

为方便计, 上式可写成如下形式:

$$\begin{aligned} [\frac{\partial U^R}{\partial X}]_{y=0} &= -[\frac{\partial U^0}{\partial X}]_{y=0} \\ [\frac{\partial V^R}{\partial X}]_{y=0} &= -[\frac{\partial V^0}{\partial X}]_{y=0} \end{aligned} \quad (5)$$

相应的应力边界函数 $N_R(x)$ 和 $T_R(x)$ 分别为:

$$[\tau_{yy}^R]_{y=0} = N_R(x)$$

$$[\tau_{xy}^R]_{y=0} = T_R(x)$$

假定 N_R 及 T_R 具有通常位错应力场的形式:

$$N_R(x) = \frac{A_0 t^3 + A_1 t^2 x + A_2 t x^2 + A_3 x^3}{(x^2 + t^2)^2}$$

$$T_R(x) = \frac{B_0 t^3 + B_1 t^2 x + B_2 t x^2 + B_3 x^3}{(x^2 + t^2)^2}$$

式中: A_n 及 B_n 为待定常数。根据 Hooke 定律^[12]:

$$\frac{\partial U^R}{\partial X} = \frac{1}{E} [\tau_{xx}^R - \nu(\tau_{yy}^R + \tau_{zz}^R)]$$

式中: E 为弹性模量。对于界面附近的基体, 即 $y \rightarrow 0$ 时,

$$\lim_{y \rightarrow 0} [\frac{\partial U^R}{\partial X}] = \frac{(1-2\nu)(1+\nu)}{E} N_R$$

$$\lim_{y \rightarrow 0} [\frac{\partial V^R}{\partial X}] = \frac{(1+\nu)(2-\nu)}{E} T_R$$

将上述二式与 (5) 式结合, 可得出待定常数 A_n 及 B_n 。利用 (2) 式可计算出相应的 τ_{ij}^1 , 并用 (3) 式求出相应的 F_x, F_y 。因此可得到刚性表面层施加于基体中刃位

错的作用力:

$$F_s = \frac{-D_2}{2bt} \left\{ \left[-2 + \frac{1-v}{1-2v} - \frac{2-3v}{2-v} \right] b_1^2 + \left[\frac{v}{1-v} - \frac{1-v}{2-v} \right] b_2^2 \right\}$$

令人感兴趣的是施加于垂直于界面的平面上的作用力, 此时 $b_1 = 0$, $b = b_2$, $D = D_2$:

$$F_s = \frac{-Dbk}{2t} \quad K = \frac{v}{1-2v} - \frac{1-v}{2-v}$$

一般材料的 v 约在 0.3 左右, 即 $K > 0$, $F_s < 0$ 。这说明刚性表面对基体中的位错施加斥力, 以阻止位错逸出表面。

五、固态表面层对基体位错的作用力

对于存在厚度 h 的表面层的基体材料 (图 3), 其弹性模量 E_s , 其表面层的弹性模量 E_c , 假定基体与表面层泊松比 v 相同。其弹性问题的应力解^[9]为:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= (\tau_{ij}^0 + \tau_{ij}^T) \left[1 + \frac{\beta}{1-\beta} H(y) \right] + \tau_{ij}^H H(y) \\ \tau_{ij}^T &= \int_{-\infty}^{\infty} K_{ij}(x-s, y-r) f(s) ds + \\ &\quad \int_{-\infty}^{\infty} K_{ij}(x-s, y-r) g(s) ds \end{aligned} \quad (6)$$

$$\text{式中: } H(y) = \begin{cases} 1 & y > 0 \\ 0 & y < 0 \end{cases}$$

$$\beta = E_c / (E_c + E_s)$$

τ_{ij}^0 为基体施加于表面层的应力场。如果求出 τ_{ij}^0 , 就可计算出固态表面层施加于基体中位错的作用力 τ_{ij}^T 。 τ_{ij}^0 可用下述方法求得:

考虑应变场 $U = U^* H(y)$ 及 $V = V^* H(y)$ 可用下述函数表达:

$$U^* = [U^*]_{y=0} + Y \left[\frac{\partial U^*}{\partial Y} \right]_{y=0} + \frac{Y^2}{2} \left[\frac{\partial^2 U^*}{\partial Y^2} \right]_{y=0} + \dots$$

$$V^* = [V^*]_{y=0} + Y \left[\frac{\partial V^*}{\partial Y} \right]_{y=0} + \frac{Y^2}{2} \left[\frac{\partial^2 V^*}{\partial Y^2} \right]_{y=0} + \dots$$

根据 Hooke 定律的普遍形式:

$$\tau_{ij} = 2G \cdot e_{ij} + \lambda \cdot \delta \cdot \delta_{ij}$$

式中: $\delta = \Sigma e_{ii}$ 相当于固体的膨胀;

δ_{ij} 为 Kroneker 符号;

$G \cdot \lambda$ 为 Lamé 应力;

$G = E/2(1+v)$ 为剪切模量;

$\lambda = vE(1+v)(1-2v)$

函数 $[1 + \frac{\beta}{1-\beta} H(y)]$ 保证了位移场在界面的连续性, 我们有:

$$[U^*]_{y=0} = [V^*]_{y=0} = 0$$

$$\left[\frac{\partial U^*}{\partial y} \right]_{y=0} = -\frac{(1+v)\beta}{E_s} \left[[\tau_{xy}^0]_{y=0} + [\tau_{xy}^T]_{y=0} \right]$$

$$T_1 = [\tau_{xy}^T]_{y=0}$$

$$\left[\frac{\partial V^*}{\partial y} \right]_{y=0} = -\frac{(1+v)(1-2v)}{(1-v)E_s} \left[[\tau_{yy}^0]_{y=0} + [\tau_{yy}^T]_{y=0} \right]$$

$$N_1 = [\tau_{yy}^T]_{y=0}$$

连续性条件使得 U^* 、 V^* 及其高阶导数在界面连续, 且符合 Navier^[12] 方程, 可求出在 $y=h$ 时的应力场 τ_{ij}^0 :

$$\begin{aligned} [\tau_{xy}^0]_{y=h} &= -\frac{1}{1-\beta} \left\{ [\tau_{xy}^0]_{y=0} + N_1(x) - \frac{2(1-v)h}{(1-2v)^2} \frac{d}{dx} \right. \\ &\quad \left. [[\tau_{xy}^0]_{y=0} + T_1(x)] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\tau_{xy}^0]_{y=h} &= \frac{1}{1-\beta} \left\{ [\tau_{xy}^0]_{y=0} + T_1(x) - \frac{h}{2(1-v)} \frac{d}{dx} \right. \\ &\quad \left. [[\tau_{yy}^0]_{y=0} + N_1(x)] \right\} \end{aligned}$$

在 $y=h$ 处, $\tau_{ij} = 0$ 及 $f(x) = [\tau_{xy}^T]_{y=h}$

$$g(x) = [\tau_{yy}^T]_{y=h}$$

可求出相应的 $f(x)$ 、 $g(x)$ 的表达式。其应力边界函数 $T_1(x)$ 、 $N(x)$ 可以看作是前两种极限情况下的线性叠加:

$$N_1(x) = (1-\beta) N_v + \beta N_k$$

$$T_1(x) = (1-\beta) T_v + \beta T_k$$

在垂直于界面的平面上, $D_2 = D$, $b_2 = b$, $F_y = F_s = F$, 利用 (6) 式、(3) 式及 (4) 式, 可计算出表面层对基体中位错的作用力为:

$$F = \frac{Db}{2} \left[\frac{1}{H} - \frac{\beta}{t} (K_1 + \frac{h}{t} K_2) \right]$$

引入无量纲参数: $F^* = 2F/D$, 上式变为:

$$F^* = b \left[\frac{1}{H} - \frac{\beta}{t} (K_1 + \frac{h}{t} K_2) \right] \quad (7)$$

式中: $H = h + t$

$$K_1 = \frac{3-2v}{2-v} - \frac{v}{1-2v}$$

$$K_2 = \frac{3(1-v)}{2(1-2v)^2} - \frac{(5-2v)(1-v)}{2(1-2v)^2(2-v)} + \frac{1}{4(1-2v)}$$

可见表面层对基体中位错的作用力是位错所处位置 t 的函数; 对于给定的氧化层, 作用力的大小取决于参数 $\beta = [E_c / (E_c + E_s)]$ 。

以 316L 合金为例, 作者在本刊前文 (p9) 给出了给定厚度下作用力随不同 E_c/E_s 值的变化曲线, 并以此模型对试验结果进行了成功的解释。同时, 该模型同样适用于其它的固态表面层, 如离子注入层^[6]。下一步感兴趣的工作将是建立在外力作用下位错堆积及崩塌的模型, 并研究疲劳试样在各种环境下经不同循环次数后的表面层与基体界面附近的位错结构^[13]。

六、结 论

表面层与基体材料中的位错存在一交互作用力。对给定的材料, 其作用力大小取决于表面层厚度以及表面层弹性模量与基体的弹性模量之比。上述模型能够成功解释材料表面层在不同环境下对材料循环行为的影响。

参 考 文 献

1. C. BELAMRI, Thesis poitiers, 1986
2. K. J. BOWAN and R. GIBALA, *Fatigue* 87, R. O. Ritchie and E. A. Stakro Ed. EMAS, 1 (1987), 6
3. K. J. BOWAN, V. K. SETHI, I. RUSAKOVA and R. GIBALA, ICSMAG, P. O. KETTUNEN, T. K. LEPIST and M. E. LEHTO NEN Ed. pergamon, 1 (1989), 199
4. J. C. GROSSKREUTZ, *Surf. Sci.*, 8 (1967), 173
5. V. K. SETHI and R. GIBALA, *Acta Met.* 25 (1977), 321
6. C. H. TAO, Thesis, Lille, 1992
7. A. K. HEAD, *Phil. Mag.*, 44 (1953), 92
8. A. H. COTTRELL, *Phil. Mag.*, 44 (1953), 829
9. G. H. CONNERS, *Int. J. Engng. Sci.*, 5 (1967), 26