

# B2结构的铝-镧金属间化合物位错性质的研究

李绍蓉<sup>1,2</sup>, 王呈岳<sup>1</sup>, 李树刚<sup>2</sup>, 夏志广<sup>1</sup>, 赵鹏翔<sup>2</sup>, 孔祥国<sup>2</sup>, 林海飞<sup>2</sup>, 严敏<sup>2</sup>

(1. 西安科技大学 理学院, 陕西 西安 710054)

(2. 西安科技大学 安全科学与工程学院, 陕西 西安 710054)

**摘要:** 采用截断近似法, 研究了 B2 结构的铝-镧(B2-AlDy)金属间化合物{110}面的位错性质。结果表明, 伯格矢量量为<110>方向的螺位错、刃位错和混合位错的芯宽度都要比<100>方向窄。它们相应的不稳定层错能存在  $\gamma_{us}<110>$  大于  $\gamma_{us}<001>$  的关系, 可见, 不稳定层错能是影响具有 B2 结构的金属间化合物位错性质的重要因素之一。B2-AlDy 滑移系为<111>{110}的位错, 除了位错角为 54.7°的位错以外, 其他位错角的弹性应变能都要大于失配能, 而且在相同周期内看, 它们的相位总是相反; 位错角为 54.7°的位错, 失配能比弹性应变能大, 而且两者在相同周期内同相位。总体来说, B2-AlDy 的 {110}面上<100>、<110>和<111>方向的位错, 随着位错角的减小(<111>方向的 54.7°的位错角除外), 总能量以及相应的应力都依次增大。

**关键词:** AlDy; 不稳定层错能; 位错芯结构; Peierls 应力

**中图分类号:** TG146.21; O469

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1002-185X(2021)03-0867-09

铝及其合金由于其具有密度小、耐高温等特性在航天航空领域被广泛应用。人们对铝合金的理论和实验研究也从未间断<sup>[1-7]</sup>。具有 CsCl 结构(也就是 B2 结构)的铝基金属间化合物构成的一系列密度小、具有良好的抗氧化性和抗腐蚀性、耐高温、高度有序的铝合金<sup>[8-16]</sup>, 更是引起了人们的广泛关注。以往的研究发现, 加入稀土元素之后合金的很多性质会得到很大的改善, 而我国拥有丰富的稀土矿产资源, 这为发展相关稀土工业提供了坚实的基础。近年来, 铝-稀土金属间化合物(AIRE)的一些性质, 比如机械性质、电子性质、晶体结构、弹性性质以及热力学性质等都得到了广泛的研究<sup>[17-22]</sup>。其中, B2-铝镧(AlDy)作为铝-稀土金属间化合物中的一员也有其独特的性质。Ouyang 等人<sup>[1]</sup>计算了 AlDy 的形成焓。1961 年 Baenziger 和 Moriarty<sup>[23]</sup>给出了 B2-AlDy 的晶格常数, 即 0.3754 nm。另一方面, Gschneidner 等人<sup>[24]</sup>在 1988 年给出了 AlDy 的相图。陶小马等人<sup>[20, 21, 24]</sup>用第一性原理计算了 AlDy 的总能量、弹性常数、热力学和动力学性质, 并给出了相图, 结果表明 B2-AlDy 属于高温稳定相。2012 年, Wang 等人<sup>[25]</sup>用第一性原理计算了 AlDy 在有限温度下的弹性性质。

位错是决定材料的塑性性质的关键因素, 但是到目前为止, 还未见与 B2-AlDy 的位错性质研究的相关报

道。因此, 其位错及其相关性质的研究对进一步探索 B2 结构的铝-镧土金属间化合物的延展性、新的材料设计以及其他的科学研究非常有帮助。本工作主要研究 B2-AlDy 在其密排面{110}面上, 几个滑移方向的不同位错角的位错芯结构以及相关的 Peierls 应力。

## 1 AlDy 的位错芯结构

### 1.1 位错方程及其截断位错解

通常情况下, 经典的位错理论在描述位错时, 基本都是使用的自然标架, 即选取一个坐标轴为位错线方向, 另外一个坐标轴为垂直于位错线方向, 伯格矢量在滑移面内。实际上, 用一个坐标轴为伯格矢量  $\mathbf{b}$  的内禀标架是更为合理的。在自然坐标中, 位错线的方向定义为  $y$ -轴,  $x$ -轴垂直于位错线方向,  $x$ - $y$  平面(也叫滑移面或者失配面)是由位错线和伯格矢量  $\mathbf{b}$  2 个量确定。内禀标架则是由一组正交的单位向量( $e_{\perp}, e_{\parallel}$ )确定的, 是由自然标架坐标沿着  $y$  轴旋转而得到的。如图 1 所示,  $\alpha$  是伯格矢量和位错线之间的夹角也称之为位错角。

在内禀标架下, 位移场可以写成  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\perp} + \mathbf{u}_{\parallel}$ , 其中  $\mathbf{u}_{\parallel}$  是伯格矢量的平行分量,  $\mathbf{u}_{\perp}$  是伯格矢量的垂直分量。2 种框架下的位移的坐标变换可以写成矩阵的形式:

收稿日期: 2020-03-15

基金项目: 国家自然科学基金(51734007, 51874236, 51974237); 中国博士后基金(2017M623329XB)

作者简介: 李绍蓉, 女, 1985 年生, 博士后, 讲师, 西安科技大学理学院, 陕西 西安 710054, E-mail: lishaorong@cqu.edu.cn

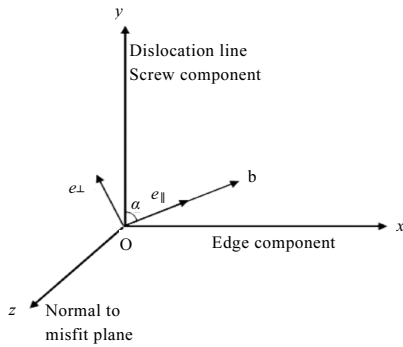


图 1 内禀标架

Fig.1 Schematic of intrinsic frame

$$\begin{pmatrix} u_{\parallel} \\ u_{\perp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \alpha & \cos \alpha \\ -\cos \alpha & \sin \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} \quad (1)$$

位错方程右边的回复力也有相似的变换关系:

$$\begin{pmatrix} f_{\parallel} \\ f_{\perp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \alpha & \cos \alpha \\ -\cos \alpha & \sin \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_x \\ f_y \end{pmatrix} \quad (2)$$

在内禀标架下, 平行于伯格矢量方向的位移是位移的主要部分, 在求解位移的平行分量时将垂直分量视为微扰, 束缚路径近似下的一维方程:

$$-\frac{1}{2}\beta_{\parallel}\sigma\frac{d^2u_{\parallel}}{dx^2} - \frac{K_{\parallel}\sigma}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dx'}{x'-x}\left(\frac{du_{\parallel}}{dx}\right)\Bigg|_{x'=x} = f_{\parallel} \quad (3)$$

这是一个二阶积分微分方程, 很难得到解析解。

为了将位错芯部分从总的位移场中分离出来, 将位移场分解成两部分:

$$u = u^0 + u^c \quad (4)$$

其中,  $u^0$  表示描述位错形状的部分, 也就是远离位错中心的部分,  $u^c$  表示位错中心部分的结构, 影响位错性质的关键部分。在内禀标架下:

$$u_{\parallel}^0 = \frac{b}{\pi}\arctan q + \frac{b}{2}, u_{\perp}^0 = 0, q = \kappa x \quad (5)$$

式中,  $\kappa$  是由位错的渐近性质确定的结构因子。位错芯部分  $u^c$  由如下形式给出:

$$u_{\parallel}^c = \frac{bq}{\pi}[C_1^{\parallel}W_1(Y) + C_2^{\parallel}W_2(Y) + \dots] \quad (6)$$

式中,  $W$  是在文献[26]中给出的一组定义在区间 (0, 1) 之间的正交多项式:

$$W_n(Y) = \sum_{l=1}^n b_l^n Y^l \quad (7)$$

$$b_l^n = \frac{(-1)^{n+l}(n+l)!}{(l+1)!(l-1)!(n-l)!} \quad (8)$$

$C_n^{\parallel}, C_n^{\perp}, (n=1, 2, \dots)$  是芯结构参数。回复力:

$$f_{\parallel} = -\frac{d\gamma_{\parallel}}{du_{\parallel}}\sigma = -\frac{\mu_{\gamma}\sigma b}{2\pi d}\sin\left(\frac{2\pi u_{\parallel}}{b}\right)(1+2\Delta_1\sin^2\frac{\pi u_{\parallel}}{b}) \quad (9)$$

完整的试探解可以写成:

$$u_{\parallel} = \frac{b}{\pi}[\arctan q + C_1^{\parallel}qW_1(Y) + C_2^{\parallel}qW_2(Y) + \dots] + \frac{b}{2} \quad (10)$$

只要代入材料的相关参数, 求解出试探解里面的芯结构参数  $C_n$  就可以确定出相应的位错芯结构。

### 1.2 AIDy 的位错芯结构

由于 B2-AIDy 存在各向异性, 因此其各向异性有必要考虑, 其切变模量和泊松比可以近似由 Voigt 平均给出<sup>[27]</sup>:

$$\mu = C_{44} - \frac{1}{5}H, \nu = \frac{\lambda}{2(\bar{\mu} + \lambda)} \quad (11)$$

其中 Lamé 常数:

$$\lambda = C_{12} - \frac{1}{5}H \quad (12)$$

$H$  为各向异性因子:

$$H = 2C_{44} + C_{12} - C_{11} \quad (13)$$

能量因子:

$$K_e = \frac{\mu}{1-\nu}, K_s = \mu \quad (14)$$

晶格离散效应修正系数为:

$$\beta_s\sigma = \frac{3}{4}\Omega\mu[1 - \tan^2\theta\sin^2\phi] \quad (15)$$

$$\beta_e\sigma = \frac{3}{4}\Omega\mu\left[\frac{2(1-\nu)}{(1-2\nu)} - \tan^2\theta\cos^2\phi\right] \quad (16)$$

其中:  $K_{\parallel} = K_e\sin^2\alpha + K_s\cos^2\alpha$ ,

$$\beta_{\parallel} = \beta_e\sin^2\alpha + \beta_s\cos^2\alpha \quad (17)$$

这里方程(3)右边的回复力由文献[28]计算广义层错能曲线的表达式求导得到:

$$f_{\parallel} = -\frac{d\gamma_{\parallel}}{du_{\parallel}}\sigma = -\frac{\mu_{\gamma}\sigma b}{2\pi d}\sin\left(\frac{2\pi u_{\parallel}}{b}\right). \quad (18)$$

$$(1 + 2\Delta_1\sin^2\frac{\pi u_{\parallel}}{b} + 3\Delta_2\sin^4\frac{\pi u_{\parallel}}{b})$$

其中, 等效切变模量  $\mu_{\gamma}$  是由  $\gamma$  面得到,  $\sigma$  是原胞面积,  $d$  是密排面上下两层原子的层间距,  $b$  是相应的伯格矢量。  $\Delta$  为正弦力律的修正系数, 广义层错能的形状不同, 正弦力律所取的修正阶数也不同, 即广义层错能形状越复杂, 正弦函数取的阶数就越高,  $\Delta$  的个数也就取的越多。

在 B2-AIDy 的 {110} 失配面上,  $\tan\theta=1$ ,  $\sin\Phi=1/\sqrt{3}$ ;  $\alpha$  是位错线和伯格矢量之间的夹角。表 1 和表 2 是材料其他的相关的参数。

表 1 B2-AIDy 的相关参数

Table 1 Related parameters of B2-AIDy

Parameter	<i>a</i> /nm	$\mu$ /GPa	$\nu$	$C_{11}$ /GPa	$C_{12}$ /GPa	$C_{44}$ /GPa
Value	0.3579	41.928	0.233	78.28	57.73 <sup>[21]</sup>	63.06 <sup>[21]</sup>

表 2 B2-AIDy 的 {110} 面上的广义层错能曲线的拟合参数

Table 2 Fitting parameters of {110} plane GSFE of B2-AIDy

Burgers vector	$\mu_y$ /GPa	$\gamma$ /J·m <sup>-2</sup>	$\Delta_1$	$\Delta_2$
<100>{110}	32.238	1.2846	0.1416	0
<110>{110}	21.114	0.8413	1.4480	0
<111>{110}	48.215	2.0390	-2.435	-0.3965

表 1 中,  $\mu$  代表的切变模量的平均值。表 2 中,  $\gamma$  是广义层错能曲线的表达式前面系数  $\mu_y b^2 / (4\pi^2 d)$  的等效值,  $\Delta_1$  和  $\Delta_2$  是曲线正弦力律的修正系数。从广义层错能曲线图像可以看出, <100>{110} 和 <110>{110} 方向上的曲线不存在反向边界能, 所以只需用一个修正系数  $\Delta$  就能够很好地拟合出广义层错能曲线。而 <111>{110} 方向的不同滑移方向的曲线都存在反向边界, 则都需要 2 个修正系数才可以很好地描述图像的性质。

将试探解和回复力以及相关参数代入位错方程 (3), 得到由正交多项式表示的相应表达式, 方程的左右两边相减可以得到一组与芯结构参数  $C_n, n=1, 2, \dots$  相关的代数方程。求解代数方程就可以得到相应的位错解, 从而得到相应的芯结构参数。

根据位错线为高对称线和密排线的位错易滑动的原则, 在 B2 结构的铝-镉的密排面 {110} 面上, 伯格矢量  $b=<100>$  时, 可能有  $\alpha=0^\circ$ 、 $\alpha=54.7^\circ$  和  $\alpha=90^\circ$  的位错; 伯格矢量  $b=<110>$  时, 可能有  $\alpha=0^\circ$ 、 $\alpha=35.3^\circ$  和  $\alpha=90^\circ$  的位错; 伯格矢量  $b=<111>$  时, 可能产生  $\alpha=0^\circ$ 、 $\alpha=35.3^\circ$ 、 $\alpha=54.7^\circ$  和  $\alpha=90^\circ$  的位错。角度表示的是位错线与伯格矢量的夹角。表 3~表 4 列出 B2-AIDy 的芯结构参数  $C_n(n=1, 2, \dots)$ , 芯宽度, 分解宽度  $d_{eq}$  (位错密度 2 个峰的位置表示超部分位错芯的位置, 2 个峰之间的距离表示超位错的分解宽度, 也可以说是 2 个部分位错之间的平衡距离) 和形状因子  $S$ 。根据观察广义层错能曲线, 发现 AIDy 的位错芯结构不是特别复杂, 所以在试探解的表达式中只保留了芯结构参数的前四项。

计算所需要的相关参数在表 1 和 2 中已经给出。计算位错性质所用的方程、方程试探解以及位错方程的回复力由式(3)、(9)、(10)给出。表 3、4 分别列出了  $C$  保留到前 4 项, 计算得到 B2-AIDy 的 {110} 面上伯格

表 3 AIDy{110} 面上伯格矢量为 <100> 和 <110> 的位错的芯结构参数  $C_n(n=1, 2, 3, 4)$  和芯宽度  $\zeta$

Table 3 Core parameters  $C_n(n=1, 2, 3, 4)$  and core width  $\zeta$  with the Burgers vector  $b=<100>$  and  $b=<110>$  on {110} plane of AIDy

Burgers vector AIDy	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$\zeta(b)$
$0^\circ$	1.172	0.214	0.052	0.052	0.882
<100>{110} $54.7^\circ$	1.190	0.193	0.043	0.020	1.258
$90^\circ$	1.192	0.189	0.042	0.0197	1.410
$0^\circ$	0.077	0.032	-0.0090	0.003	0.854
<110>{110} $35.3^\circ$	-0.194	0.021	-0.0067	0.0029	1.038
$90^\circ$	-0.535	0.075	-0.015	0.0028	1.313

斯矢量为 <100>、<110>、<111> 时可能存在的位错的芯结构参数以及计算出位错宽度、分解宽度和描述分解位错形状的形状因子。根据计算结果就可以预测 B2-AIDy 相应的位错性, 为了解其塑性性质提供理论基础。

因为本研究所选取的坐标是以伯格矢量为基的内禀标架, 在后面的计算中都是以伯格矢量为参考单位。从表 3 可以看出: AIDy 的 {110} 面上伯格矢量为 <100> 和 <110> 的位错, 对于可能存在的任意一条位错线,  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$  的数值依次减小, 说明越高阶的位错芯参数对位错性质的影响越小; 对于不同位错线, 随着位错角的增大,  $C_1$  逐渐增大,  $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$  逐渐减小; 在伯格矢量为 <100> 方向上, 位错芯宽度的大小在  $0.882b \sim 1.410b$  范围内; <110> 方向上, 位错芯宽度的大小在  $0.854b \sim 1.313b$  范围内。总的来说, 刃位错的芯宽度最大, 混合位错居中, 螺位错最小, 这符合位错性质的基本规律。

AIDy 的 <111>{110} 方向的广义层错能曲线存在反向边界能, 位错可能分解成 2 个部分超位错。B2 结构中 <111>{110} 超位错的分解方式如下<sup>[29]</sup>:

$$b<111> \rightarrow b/2<111> + APB + b/2<111>$$

其中, APB 表示 2 个超部分位错之间的反向边界。表 4 中给出了本研究计算得到的 AIDy <111>{110} 超位错的相关性质,  $|S|$  为形状因子的绝对值,  $d_{eq}$  为位错的分解宽度。 $S$  定义为部分超位错峰值点的位错密度的二阶导数<sup>[30]</sup>:

$$S = a^2 \left. \frac{d^2 \rho}{dx^2} \right|_{\text{peak}} \quad (19)$$

其中,  $a$  是晶格常数,  $\rho = du/dx$  是位错密度。形状因子  $S$  和位错宽度相似, 描述的是分解超位错的部分位错的宽度。如果  $S$  的值比较大, 那么部分位错密度图像的峰比较尖锐, 位错较窄, 所以它在晶体中很难被移动。反之, 若  $S$  的值比较小, 部分位错密度图像的峰比较平滑, 位错较宽, 也就是说它在固体中比较容易移动。

表 4 AlDy{110}面上伯格斯矢量为<111>的位错的芯结构参数  $C_n(n=1, 2, 3, 4)$ 形状因子 $|S|$ 和分解宽度  $d_{eq}$

Table 4 Core parameters  $C_n(n=1, 2, 3, 4)$ , sharp-factor  $|S|$  and dissociated width  $d_{eq}$  with the Burgers vector  $b=<111>$  on {110} plane of AlDy

AlDy	0°	35.3°	54.7°	90°
$C_1$	-0.1635	-0.1188	-0.096	-0.083
$C_2$	-0.3319	-0.2239	-0.320	-0.318
$C_3$	0.056	0.048	0.045	0.043
$C_4$	0.035	0.032	0.300	0.029
$d_{eq}(b)$	1.381	1.592	1.785	1.967
$ S $	0.1098	0.0634	0.0422	0.0304

分析表 4 可得：AlDy 的 {110} 面上伯格斯矢量为 <111> 的位错，对于可能存在的任意一条位错线  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$  的值依次减小，同样说明越高阶的位错芯参数对位错性质的影响越小；对于不同位错线，随着位错角的增大， $C_1$  逐渐增大， $C_3$  和  $C_4$  逐渐减小， $C_2$  没有明显的变化规律；描述位错密度图像的形状因子  $|S|$  的值随着位错角的增大依次减小，后面用图形表示的结果也显示了  $|S|$  的值越大，位错密度图形的峰越尖锐，部分位错宽度越窄；刃位错的分解宽度最大，混合位错居中，螺位错最小。

图 2~图 4 分别画出了 AlDy 的 {110} 面上伯格斯矢量为 <100>、<110> 和 <111> 的位错位移和位错密度图，直观地显示了本研究计算出的数值结果。

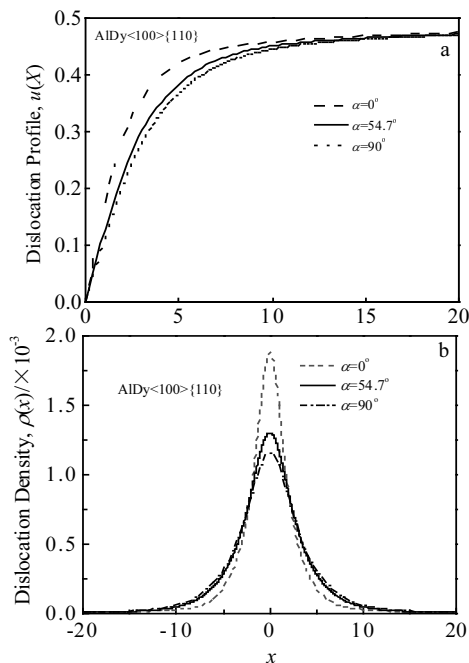


图 2 金属间化合物 AlDy 的 {110} 面上 <100> 方向的位错位移和位错密度

Fig.2 Dislocation profile  $u(x)$  (a) and density  $\rho(x)$  (b) in AlDy along the <100> direction on {110} plane

由图 2~图 4 可以看出，在同一个伯格斯矢量的方向上，位错角越大，位错芯宽度或者分解宽度越宽。伯格斯矢量 <100> 和 <110> 的螺位错的位错密度图形明显比其他位错尖锐，证明螺位错的芯宽度和分解宽度比其他位错窄很多，与表 2~表 4 给出的数值结果相符合。对比 <100> 和 <110> 的位错芯宽度不难发现，伯格斯矢量为 <100> 的螺位错和刃位错的芯宽度都要比 <110> 方向的要宽。同时，它们的不稳定层错能也存在  $\gamma_{us}<110>$  大于  $\gamma_{us}<001>$  的关系，可见，B2-AlDy 的不稳定层错能也是影响其位错芯宽度的重要因素。

## 2 Peierls 能量以及 Peierls 应力

### 2.1 B2 结构的材料的 Peierls 能量和 Peierls 应力的计算方法

Peierls 能量和 Peierls 应力是表征位错可动性的 2 个关键量，位错的可动性决定了材料的塑性性能。位错的存在使得含有位错的晶体能量升高，这部分能量称为位错能量。位错的 Peierls 能量由两部分组成：(1) 上下两半无限弹性体的弹性应变能；(2) 滑移面上、下 2 层原子的相互作用能，常称为失配(错排)能<sup>[31]</sup>。自从 Peierls 和 Nabarro 首次估算了 Peierls 能量和 Peierls 应力以来，理论上进行了各方面的改进工作<sup>[31,32]</sup>。

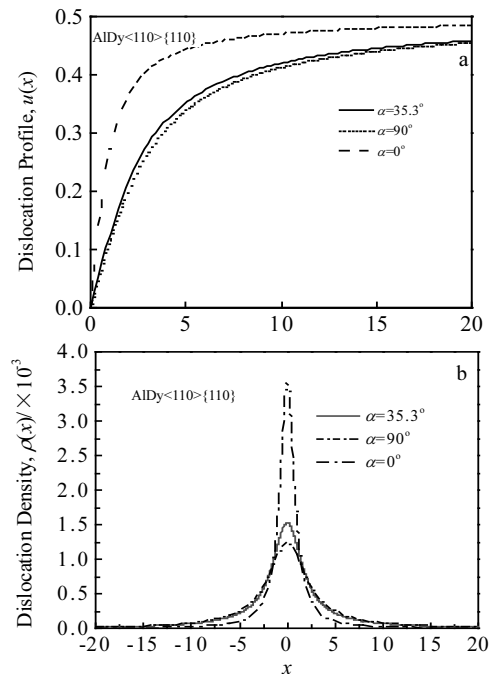


图 3 金属间化合物 AlDy 的 {110} 面上 <110> 方向的位错位移和位错密度

Fig.3 Dislocation profile  $u(x)$  (a) and density  $\rho(x)$  (b) in AlDy along <110> direction on {110} plane

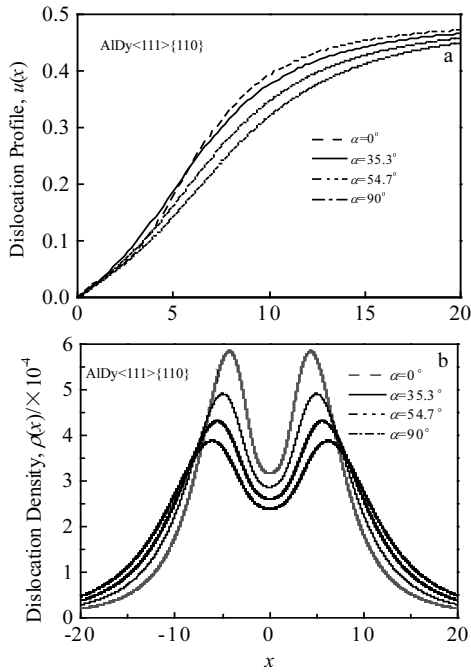


图 4 金属间化合物 AlDy 的 {110} 面上 <111> 方向的位错位移和位错密度  
Fig.4 Dislocation profile  $u(x)$  (a) and density  $\rho(x)$  (b) in AlDy along <111>direction on {110} plane

Foreman 计算了改进正弦力律下的 Peierls 应力<sup>[33]</sup>。但是仍存在 2 个明显的矛盾: 1 个是 Peierls 应力的周期是伯格矢量的一半而不是伯格矢量; 另 1 个是滑移面两侧原子由不同的方式滑移会得到不同的 Peierls 应力<sup>[34,35]</sup>。Wang 认为矛盾来自于错误地表示了滑移面两侧原子的位置<sup>[36]</sup>。Joós 和 Duesbery<sup>[37]</sup>认为 Peierls 应力的不同主要是由于在半无限晶体中处理的回复力律不同。Lu<sup>[38]</sup>则认为后面 1 个矛盾是由于计算失配能时所采用的不同计算方式导致的。

众所周知, Peierls 能量和 Peierls 应力是和点阵的离散性有关的。所有这些问题的关键在于计算 Peierls 能量和 Peierls 应力时所采用的离散位移场的不同方式。此外, P-N 模型仅仅考虑了和离散性无关的失配能, 而忽略了弹性应变能。在晶格理论中, 在计算 Peierls 能量和 Peierls 应力时, 若包含弹性应变能的贡献, 那么上述争论自动地消除<sup>[26]</sup>。研究表明, 弹性应变能对材料的 Peierls 势垒和 Peierls 应力的贡献要比失配能的贡献大<sup>[39]</sup>。因此, 为了使计算结果更为准确, 在计算时材料的弹性应变能是不能被忽略的。那么, Peierls 势垒总能量应该是失配能和弹性应变能之和。在 P-N 理论中, 哈密顿量可以写为以下 3 项之和<sup>[29]</sup>:

$$H = H_a + H_b + H_{ab} \quad (20)$$

其中,  $H_a(H_b)$ 为位于切割面以上(以下)的半晶体哈

密顿量,  $H_{ab}$ 为被切割面分开的两半晶体之间相互作用的哈密顿量。每个半晶体都可以近似地认为其原子是通过简谐力相互作用联系起来的。由于形变使半晶体产生的势能称为弹性应变能; 由于 2 个半晶体之间相互作用而产生的能量称为失配能。在受到  $f$  大小的力作用时, 简谐半晶体平衡态的势能为:

$$H_a = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n \cdot u_n \quad (21)$$

相互作用能为:

$$H_{ab} = \sum_{n \rightarrow \infty} \gamma_n(u) \quad (22)$$

在求和时, 需要计算所有受力不为零的原子的能量。因此, 长度为  $l$  的位错, 单位长度位错线的弹性应变能  $E_c(x_0)$ 和失配能  $E_m(x_0)$ 分别为:

$$E_c(x_0) = \frac{1}{l}(H_a + H_b) = \frac{2H_a}{l} \quad (23)$$

$$E_m(x_0) = \frac{H_{ab}}{l}$$

由于上下 2 块半晶体是完全等价的, 所以  $H_a=H_b$ 。失配能与广义层错能有关。对于不同的位错线和失配面, 材料的结构不同, 弹性应变能和失配能的表达式有所不同。

可以通过 B2 结构的密排面上的原子的投影图, 来观察需要和原子的具体坐标位置。

图 5 画出了 B2-AlDy 原子在 {110} 面的投影图, 空心点表示下面一层原子, 实心点表示上面一层原子投影, 不同的大小表示不同种原子。以 B2 结构的金属间化合物 <110>{110} 为例, 如图 5 所示, 位错线为 <110> 方向设为  $y$  轴, 垂直于位错线方向为  $x$  轴, 那么 {110} 面上的原子所处的位置为:

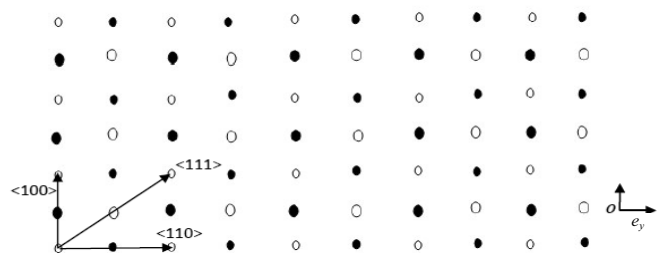


图 5 B2-AIRE 原子在 {110} 面的投影图  
Fig.5 B2-AIRE atom projection in the {110} plane (hollow points stand for bottom layer atoms, solid points stand for upper layer atom projection, and different sizes means different kinds of atoms)

$$\mathbf{R}_{mn} = (m+n)\frac{\sqrt{2}a}{2}\mathbf{e}_y + (m-n)\frac{a}{2}\mathbf{e}_x \quad (24)$$

式中,  $\mathbf{e}_y$  和  $\mathbf{e}_x$  分别为  $y$  和  $x$  方向的单位向量,  $m$  和  $n$  为整数。位错总能量为所受外力不为零的所有原子的能量之和, 可以表示成如下形式:

$$E = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E[u(\mathbf{R}_{mn} - x_0)] \quad (25)$$

式中,  $x_0$  为位错中心位置, 令  $m+n=n'$ ,  $m-n=m'$ , 由于在平行于位错线上的位移相同, 求和可以只在  $x$  方向进行,  $y$  方向变为整数倍:

$$E = N \sum_{m'=-\infty}^{+\infty} E[u(\mathbf{R}_{m'} - x_0)] \quad (26)$$

因为最后需要的是单位位错线上的位错能量, 那么有:

$$E = \frac{1}{l} \sum_{m'=-\infty}^{+\infty} E[u(\mathbf{R}_{m'} - x_0)] \quad (27)$$

其中,  $l$  为位错线方向的周期。由于沿  $\langle 110 \rangle$  方向的近邻两排原子的坐标不同, 基于对称性原理,  $E_c(x_0)$  和  $E_m(x_0)$  在 B2 结构的金属间化合物  $\langle 110 \rangle \{110\}$  滑移系的表达式具有如下形式:

$$E_c(x_0) = \frac{\sigma}{\sqrt{2}a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{f[u(n+\frac{1}{2})a-x_0]u(n+\frac{1}{2})a-x_0\} + f[u(na-x_0)]u(na-x_0) \quad (28)$$

$$E_m(x_0) = \frac{\sigma}{\sqrt{2}a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{\gamma[u(n+\frac{1}{2})a-x_0]\} + \gamma[u(na-x_0)] \quad (29)$$

其中,  $u$  为相对于位错中心  $x_0$  的相对位移,  $a$  为原胞基矢的长度, 对覆盖失配面内宽度为  $a$  的水平带内所有原子求和。单位长度的位错能量为<sup>[26]</sup>

$$E_t(x_0) = E_m(x_0) + E_s(x_0) \quad (30)$$

其中,  $E_t$  为总能量。用同样的方法可以得出, B2 结构的金属间化合物的  $\langle 100 \rangle \{110\}$  滑移系的表达式具有如下形式:

$$E_c(x_0) = \frac{\sigma}{a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{f[u(n+\frac{1}{2})\sqrt{2}a-x_0]u(n+\frac{1}{2})\sqrt{2}a-x_0\} + f[u(\sqrt{2}na-x_0)]u(\sqrt{2}na-x_0) \quad (31)$$

$$E_m(x_0) = \frac{\sigma}{a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{\gamma[u(n+\frac{1}{2})\sqrt{2}a-x_0]\} + \gamma[u(\sqrt{2}na-x_0)] \quad (32)$$

B2 结构的金属间化合物  $\langle 111 \rangle \{110\}$  滑移系的表达式具有如下形式:

$$E_c(x_0) = \frac{\sigma}{\sqrt{3}a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{f[u(n+\frac{1}{3})\sqrt{6}a-x_0]u(n+\frac{1}{3})\sqrt{6}a-x_0\} + f[u(n+\frac{2}{3})\sqrt{6}a-x_0]u(n+\frac{2}{3})\sqrt{6}a-x_0\} + f[u(\sqrt{6}na-x_0)]u(\sqrt{6}na-x_0) \quad (33)$$

$$E_m(x_0) = \frac{\sigma}{\sqrt{3}a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{\gamma[u(n+\frac{1}{3})\sqrt{6}a-x_0]\} + \gamma[u(n+\frac{2}{3})\sqrt{6}a-x_0] + \gamma[u(\sqrt{6}na-x_0)] \quad (34)$$

对于不同的滑移系统, 位移不同, 将具体的数值代入表达式就可以得到相应的 Peierls 势垒。由于晶格具有对称性, 所以当位错在晶体中滑移时位错能量会周期性地变化<sup>[39]</sup>:

$$E(x_0 + b) = E(x_0) \quad (35)$$

其中,  $x$  轴平行于滑移方向,  $b$  是沿着滑移方向的周期。作为周期函数, 位错能量展开成傅里叶级数的形式。通常, 级数保留如下形式:

$$E(x_0) = E_0 + \frac{1}{2}E_p \cos \frac{2\pi x_0}{b} \quad (36)$$

其中,  $E_0$  是和无限晶体有关的发散常数,  $E_p$  则为 Peierls 势垒, 即位错移动时所要翻越的势垒。弹性应变能和失配能也可以用同样的方式表达。由于晶格具有离散性, 只有所加的力超过 Peierls 应力时位错才会运动。所以 Peierls 应力定义为克服 Peierls 势垒所需要的最大应力, 或者说是移动位错所需要的最小外加应力<sup>[26]</sup>

$$\sigma_p = \max \left| \frac{1}{b} \cdot \frac{dE_p(x_0)}{dx} \right| \quad (37)$$

位错能量中包括失配能和应变能的贡献。接下来, 对具体的 B2 结构铝-稀土金属间化合物 AlDy 的失配能、弹性应变能和总能量进行了计算, 同时也计算了它们所对应的应力。

### 2.2 AlDy 的 Peierls 能量和 Peierls 应力

B2 结构的金属间化合物 AlDy 的晶格常数  $a=0.3596 \text{ nm}$ <sup>[21]</sup>,  $\mu=41.928 \text{ GPa}$ <sup>[21]</sup>,  $\nu=0.233$ ;  $\{110\}$  面的面间距  $d=\sqrt{2}a/2$ , 不同伯格矢量的不同位错角的核心结构参数  $C_n$  在表 4 已经详细给出。将具体的参数和表达式代入方程得到相应伯格矢量的不同位错角的失配能、弹性应变能、总能量以及由它们决定的相应的应力。具体的滑移系为  $\langle 100 \rangle \{110\}$ 、 $\langle 110 \rangle \{110\}$  和  $\langle 111 \rangle \{110\}$  的不同位错角结果由表 5~表 7 给出。

从表 5 和表 6 中给出了 B2 结构的金属间化合物 AlDy 的伯格矢量为  $\langle 100 \rangle \{110\}$  和  $\langle 110 \rangle \{110\}$  的不同位错角的失配能、弹性应变能、总能量以及由它们决定的相应的应力。从计算结果可以看出, 对于同一个位错, 失配能总是比弹性应变能要小, 而且它们的相位总是相反; 对于同一个滑移系, 随着位错角的增大, 失配能、弹性应变能、总能量以及由它们决定的相应的应力都依次减小; 在相同的位错角的情况下, 滑移系为  $\langle 100 \rangle \{110\}$  比  $\langle 110 \rangle \{110\}$  的能量和应力都要大。

表 7 给出了 B2 结构的金属间化合物 AlDy 的伯格矢量为  $\langle 111 \rangle \{110\}$  的不同位错线方向的失配能、弹性应变能、总能量以及由它们决定的相应的应力。观察结果可以看出: AlDy 的滑移系为  $\langle 111 \rangle \{110\}$  的位错, 位错失配能总是比弹性应变能要小, 而且它们的相位总是相反; 除了位错角为  $54.7^\circ$  的位错以外, 随着位错角的增大, 失配能、弹性应变能、总能量以及由它们决定的相应的应力都依次减小。而位错角为  $54.7^\circ$  位错的所有能量和应力都要比  $35.3^\circ$  的要大, 出现了与其他几种位错相反的规律。

图 6 给出了 B2-AlDy 滑移系为  $\langle 100 \rangle \{110\}$ 、

$\langle 110 \rangle \{110\}$  和  $\langle 111 \rangle \{110\}$  的不同位错角的位错 Peierls 能量的函数图像。

图 6 是 B2 结构的金属间化合物 AlDy 的总能量 (Peierls 势垒)。作为位错位移函数的图像,  $x$  轴的单位是  $0.1 \text{ nm}$ ,  $y$  轴的单位是  $E_m (10^{-19} \text{ J/nm})$ 。从整个图像来看滑移系为  $\langle 100 \rangle \{110\}$ 、 $\langle 110 \rangle \{110\}$  和  $\langle 111 \rangle \{110\}$  的不同的位错角的位错都有一个共同的规律, 就是随着位错角的增大, Peierls 势垒逐渐减小 (滑移系为  $\langle 111 \rangle \{110\}$  的  $54.7^\circ$  位错除外, 它的势垒要比  $35.3^\circ$  的位错大, 出现反常), 螺位错的势垒比刃位错的高出 1 到 2 个数量级, 说明了螺位错很难被移动。

表 5 B2 结构的金属间化合物 AlDy 滑移方向为  $\langle 100 \rangle \{110\}$  的不同的位错线方向的 Peierls 势垒和 Peierls 应力

Table 5 Peierls barriers and Peierls stress for various dislocations of the  $\langle 100 \rangle \{110\}$  direction in B2-structure AlDy

Dislocation angle/(°)	$E_m / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$E_e / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$E_t / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$\sigma_m (\mu)$	$\sigma_e (\mu)$	$\sigma_t (\mu)$
0	0.3262	0.9406	0.6144	0.0220	0.0620	0.0400
54.7	0.0347	0.1111	0.0764	$2.30 \times 10^{-3}$	$7.38 \times 10^{-3}$	$5.08 \times 10^{-3}$
90	0.0115	0.0340	0.0225	$7.67 \times 10^{-4}$	$2.25 \times 10^{-3}$	$1.49 \times 10^{-3}$

表 6 B2 结构的金属间化合物 AlDy 的滑移方向为  $\langle 110 \rangle \{110\}$  的不同的位错线方向的 Peierls 势垒和 Peierls 应力

Table 6 Peierls barriers and Peierls stress for various dislocations of the  $\langle 110 \rangle \{110\}$  direction in B2-structure AlDy

Dislocation angle/(°)	$E_m / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$E_e / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$E_t / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$\sigma_m (\mu)$	$\sigma_e (\mu)$	$\sigma_t (\mu)$
0	0.0285	0.1416	0.1130	$2.68 \times 10^{-2}$	$1.33 \times 10^{-2}$	$1.06 \times 10^{-2}$
35.3	0.0123	0.0623	0.0500	$1.15 \times 10^{-3}$	$5.85 \times 10^{-3}$	$4.69 \times 10^{-3}$
90	0.0028	0.0125	0.0097	$2.66 \times 10^{-4}$	$1.18 \times 10^{-3}$	$9.12 \times 10^{-4}$

表 7 B2 结构的金属间化合物 AlDy 的滑移方向为  $\langle 111 \rangle \{110\}$  的不同的位错线方向的 Peierls 势垒和 Peierls 应力

Table 7 Peierls barriers and Peierls stress for various dislocations of the  $\langle 111 \rangle \{110\}$  direction in B2-structure AlDy

Dislocation angle	$E_m / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$E_e / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$E_t / \times 10^{-19} \text{ J}\cdot\text{nm}^{-1}$	$\sigma_m (\mu)$	$\sigma_e (\mu)$	$\sigma_t (\mu)$
$0^\circ$	0.0317	0.1715	0.1397	$1.30 \times 10^{-3}$	$7.03 \times 10^{-3}$	$5.72 \times 10^{-3}$
$35.3^\circ$	0.0042	0.0226	0.0183	$1.74 \times 10^{-4}$	$9.24 \times 10^{-4}$	$7.51 \times 10^{-4}$
$54.7^\circ$	0.0170	0.1282	0.1112	$6.95 \times 10^{-4}$	$5.25 \times 10^{-3}$	$4.56 \times 10^{-3}$
$90^\circ$	$1.26 \times 10^{-4}$	$3.04 \times 10^{-4}$	$4.3 \times 10^{-4}$	$5.51 \times 10^{-6}$	$1.25 \times 10^{-5}$	$1.76 \times 10^{-5}$

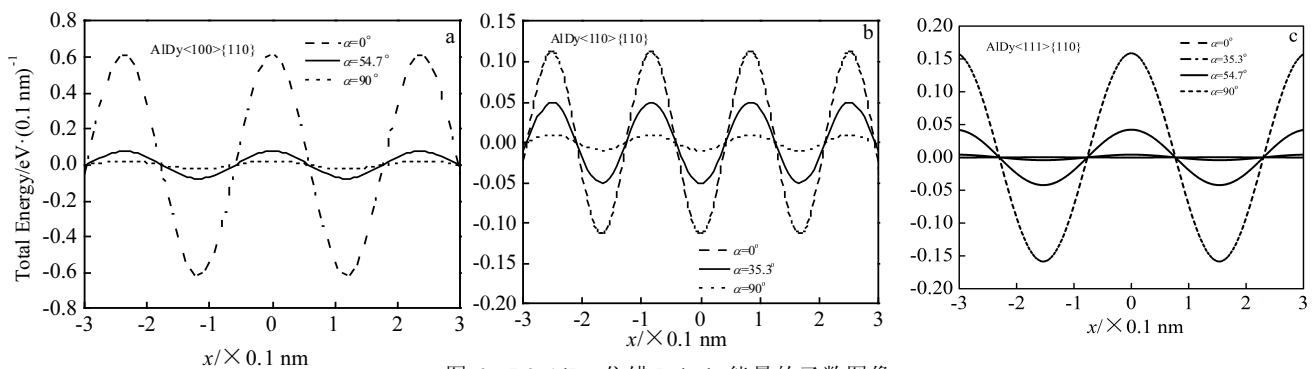


图 6 B2-AlDy 位错 Peierls 能量的函数图像

Fig.6 Total energy (Peierls barrier) as a function of dislocation position in B2-structure AlDy; the Burgers vector:

(a)  $\langle 100 \rangle \{110\}$ , (b)  $\langle 110 \rangle \{110\}$ , and (c)  $\langle 111 \rangle \{110\}$

### 3 结 论

1) 用截断近似法研究了 B2 结构的金属间化合物 AlDy 的位错性质。伯格矢量 $\langle 100 \rangle$ 的螺位错和刃位错的芯宽度都要比 $\langle 110 \rangle$ 方向宽。同时,它们的不稳定层错能也存在 $\gamma_{us} \langle 100 \rangle$ 小于 $\gamma_{us} \langle 110 \rangle$ 的关系,可见 B2-AlDy 的不稳定层错能是影响其位错芯宽度的重要因素。

2) AlDy 的滑移系为 $\langle 111 \rangle \{110\}$ 的位错,除了位错角为 $54.7^\circ$ 的位错以外,失配能总是比弹性应变能要小,而且它们的相位总是相反;而位错角为 $54.7^\circ$ 的位错,失配能比弹性应变能大,而且两者同相位;随着位错角的增大,失配能、弹性应变能、总能量以及由它们决定的相应的应力都依次减小。

3) 滑移系为 $\langle 100 \rangle \{110\}$ 、 $\langle 110 \rangle \{110\}$ 和 $\langle 111 \rangle \{110\}$ 的不同位错角的位错都有一个共同的规律,就是随着位错角的增大,Peierls 势垒逐渐减小,螺位错的势垒比其他位错的势垒要高出很多,说明了螺位错很难被移动。从几个方向的 Peierls 应力均小于 $10^{-2}$ 的数量级可以看出,AlDy 的延展性是非常好的。

#### 参考文献 References

- [1] Ouyang Y, Zhong X, Du Y *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2006, 416(1): 148
- [2] Farkas D, Mutasa B, Vailhe C *et al.* *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 1995, 3(2): 201
- [3] Vailhe C, Farkas D. *Acta Materialia*[J], 1997, 45(11): 4463
- [4] Shastry V, Farkas D. *Intermetallics*[J], 1998, 6(2): 95
- [5] Vailhe C, Farkas D. *Journal of Materials Research*[J], 1997, 12: 2559
- [6] Pasianot R, Zie Z, Farkas D *et al.* *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 1994, 2(3): 383
- [7] Schroll R, Finnis M W, Gumbsch P. *Acta Materialia*[J], 1998, 46(3): 919
- [8] Vitek V. *Intermetallics*[J], 1998, 6(7-8): 579
- [9] Ludwig M, Gumbsch P. *Acta Materialia*[J], 1998, 46(9): 3135
- [10] Schroll R, Vitek V, Gumbsch P. *Acta Materialia*[J], 1998, 46(3): 903
- [11] Gumbsch P, Schroll R. *Intermetallics*[J], 1999, 7(3-4): 447
- [12] Davidson D L. *Materials Science & Engineering A*[J], 2000, 293(1-2): 281
- [13] Medvedeva N I, Mryasov O N, Gornostyrev Y N *et al.* *Physical Review B Condensed Matter*[J], 1996, 54(19): 13 506
- [14] Mryasov O N, Gornostyrev Y N, Schilfgaarde M V *et al.* *Acta Materialia*[J], 2002, 50(18): 4545
- [15] Li T, Morris J W, Chrzan D C. *Physical Review B*[J], 2006, 73: 024 105
- [16] Lazar P, Podlucky R. *Physical Review B*[J], 2007, 5(2): 024 112
- [17] Gschneidner K A, Russell A M, Pecharsky A O *et al.* *Nature Materials*[J], 2003, 2(9): 587
- [18] Tao X, Ouyang Y, Liu H *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2007, 40(2): 226
- [19] Tao X, Ouyang Y, Liu H *et al.* *Physica B: condensed Matter*[J], 2007, 399(1): 27
- [20] Morris J R, Ye Y, Lee Y *et al.* *Acta Materialia*[J], 2004, 52(16): 4849
- [21] Tao Xiaoma(陶小马). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Changsha: Central South University, 2008
- [22] Pagare G, Srivastava V, Sanyal S P *et al.* *Physica B: Condensed Matter*[J], 2011, 406(3): 449
- [23] Baenziger N C, Moriarty J L. *Acta Crystallographica*[J], 1961, 14(9): 948
- [24] Gschneidner K A, Calderwood F W. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*[J], 1988, 9(6): 673
- [25] Wang R, Wang S F, Wu X Z. *Intermetallics*[J], 2012, 26: 57
- [26] Wang S F. *Chinese Physics*[J], 2006, 15(6): 1301
- [27] Hirth J P. *Dislocation in Physical Metallurgy*[M]. New York: John Wiley & Sons, Wiley, 1983
- [28] Li S R, Wang S R, Wang R. *Physica B: Condensed Matter*[J], 2011, 406(23): 4529
- [29] Wu Xiaozhi(吴小志). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Chongqing: Chongqing University, 2009
- [30] Wang S F, Li S R, Wang R. *European Physical Journal B*[J], 2011, 83(1): 15
- [31] Peierls R. *Proceedings of the Physical Society*[J], 1940, 52(1): 34
- [32] Nabarro F R N. *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*[J], 1968, 24: 581
- [33] Foreman A J, Jaswon M A, Wood J K. *Proceedings of the Physical Society*[J], 1951, 64(2): 156
- [34] Kroupa F, Lejcek L. *Czechoslovak Journal of Physics*[J], 1972, 22(9): 813
- [35] Ohsawa K, Koizumi H, Kirchner H O K *et al.* *Philosophical Magazine A*[J], 1994, 69(1): 171
- [36] Wang J N. *Acta Materialia*[J], 1996, 44(4): 1541
- [37] Joós B, Duesbery M S. *Physical Review Letters*[J], 1997, 78(2): 266
- [38] Lu G, Kioussisy N, Bulatov V V *et al.* *Philosophical Magazine Letters*[J], 2000, 80(10): 675
- [39] Li S R, Wu X Z, Zhang T *et al.* *Journal of Electronic Materials*[J], 2016, 45(10): 1



## Dislocation Properties of B2-AlDy Intermetallics Compound

Li Shaorong<sup>1,2</sup>, Wang Chengyue<sup>1</sup>, Li Shugang<sup>2</sup>, Xia Zhiguang<sup>1</sup>, Zhao Pengxiang<sup>2</sup>, Kong Xiangguo<sup>2</sup>,  
Lin Haifei<sup>2</sup>, Yan Min<sup>2</sup>

(1. College of Science, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, China)

(2. College of Safety Science and Engineering, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, China)

**Abstract:** Dislocation properties of {110} in B2-structure AlDy intermetallic compound were studied by truncation approximation. The results show that when the Burgess vector is  $\langle 110 \rangle$ , the core width of the screw, edge and mixed dislocation should be smaller than that of  $\langle 100 \rangle$  direction. Their corresponding unstable stacking fault energy has the relationship that  $\gamma_{us}\langle 110 \rangle$  is greater than  $\gamma_{us}\langle 001 \rangle$ . It can be seen that the unstable stacking fault energy is one of the important factors affecting the dislocation properties of intermetallic compounds with B2 structure. The slip system of B2-AlDy is  $\langle 111 \rangle\{110\}$ ; except for the dislocation with a dislocation angle of  $54.7^\circ$ , all the elastic strain energy of other dislocation angles is greater than the misfit energy, and their phases are always opposite in the same period. When the dislocation angle is  $54.7^\circ$ , the misfit energy is greater than the elastic strain energy, and both of them have the same phase when in the same period. In general, for the  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  and  $\langle 111 \rangle$  dislocation on {110} plane of B2-AlDy, with the reduction of dislocation angle (except for the  $54.7^\circ$  dislocation angle of  $\langle 111 \rangle$  direction), the total energy and the corresponding stress increase in turn.

**Key words:** AlDy; unstable stacking fault energy; dislocation core structure; Peierls stress

---

Corresponding author: Li Shugang, Ph. D., Professor, College of Safety Science and Engineering, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, P. R. China, E-mail: lishg@xust.edu.cn