第 33 卷 第 11 期 物 理 学 报 Vol. 33, No. 11
1984 年 11 月 ACTA PHYSICA SINICA Nov., 1984

简单金属在[100]单轴应力下的理论强度

李 树 山
(中国科学院力学研究所)

1983 年 8 月 8 日收到

提 要

本文讨论了利用赝势理论，按照 Born 稳定性判据，计算简单金属理论强度的方法．然后计算了六种简单金属(Li, Na, K, Rb, Cs 和 Pb)在 0 K 和[100]单轴应力下的理论拉伸与压缩强度．

一、引 言

自五十年代中期，人们就从实验中发现，某些极细的晶体细须的强度远远大于其大晶体的强度．表 1 列出了几种晶体材料的实测强度[1-3]．可以看到，晶须的拉伸强度要比大晶体的拉伸强度大几十到几千倍．人们认为，由于在晶须中晶体缺陷和杂质等的影响已经很微小，因而可以把它近似看作为理想晶体，所以晶须的实测强度也就很可能接近于理想晶体的理论强度．

表 1 晶须与大晶体强度的比较

	大晶体拉伸强度 (10^9dyn/cm^2)	晶须拉伸强度 (10^9dyn/cm^2)	晶须最大弹性应变(%)
Fe	0.276	131	4.9
Cu	0.0138	29.4	2.8
Ag	0.0138	17.3	4.0
Si	0.345	37.9	2.0
石墨	2.76	207	2.0
NaCl	0.0069	11.0	2.6
Al_2O_3	5.52	124	3.0

理想晶体的理论强度代表了晶体材料的实际强度的上限．自六十年代中期起，由于研究高强度固体材料的需要，人们对理论强度进一步发生了兴趣，发现材料裂缝尖端处的应力分布与理论强度有关，并可由此判断材料的断裂性质[4,5]．此外，理论强度与位错核心半径等许多固体性质也都有关[6-8]．因此，理论强度的计算问题具有重要的意义．

七十年代初，Milstein[9,10] 按照 Born 稳定性判据[11]，用 Morse 势计算了 Fe 和 Ni 在单轴应力下的理论强度．后来赵伊君等人[12]用类似的方法对多种立方金属元素进行了计

算．众所周知，有心力近似（如 Morse 势等）由于受到 Cauchy 关系的限制，在计算金属的弹性常数上误差有时是相当大的[13,14]，因而用它来计算金属的理论强度自然也会带来很大偏差．我们在文献[15]中用赝势方法计算了简单金属的弹性常数，结果与实验值符合得比较好．本文按照 Born 稳定性判据，用赝势方法计算了六种简单金属在 0 K 和[100]单轴应力下的理论强度．

二、用 Milstein 变量给出晶体能量的赝势表达式

我们在文献[15]和[16]中，已经导出了用赝势方法和 Milstein 变量 $(a_1, a_2, \cdots, a_6)$ 表示的晶体能量，这里只列出主要结果．采用原子单位 $\hbar = 2m = e^2/2 = 1$，单位未形变体积的晶体能量 E 可写成

$$E = E_{cg} + E_0 + E_{cw} + E_{bs} = E_v(r_s) + E_{cw} + \frac{1}{\Omega_0}\sum_x{}' F(x, r_s), \tag{1}$$

其中 E_{cg} 是自由电子气的能量，E_0 是电子-离子相互作用能的平均值．这两项仅仅与体积直接相关，用 E_v 表示，称为体积相关能．E_{cw} 是 Ewald 能，E_{bs} 是带结构能．F 称为能量-波数特性，其表达式见文献[15]，求和对所有非零的倒易点阵矢量进行．

E_v 的表达式为

$$E_v = \frac{Z}{\Omega_0}\left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} - 0.115 + 0.031\ln r_s + \frac{3Hr_c^2}{r_s^3}\right), \tag{2}$$

其中 r_c 是赝势参数，H 是 E_0 的修正系数．形变后的晶胞体积 V 和原子体积 Ω 的关系为

$$V = a_1a_2a_3\sqrt{Q} = 2\alpha\Omega = \frac{8\pi Z\alpha}{3} r_s^3, \tag{3}$$

其中 Z 是原子价，α 是结构常数（bcc 晶格，$\alpha = 1$，fcc 晶格，$\alpha = 2$），

$$Q = 1 - \cos^2 a_4 - \cos^2 a_5 - \cos^2 a_6 + 2\cos a_4 \cos a_5 \cos a_6, \tag{4}$$

$$r_s = \left(\frac{3}{8\pi Z\alpha}\right)^{1/3} a_1^{1/3} a_2^{1/3} a_3^{1/3} Q^{1/6}, \tag{5}$$

$$\begin{aligned} x = \left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{1/3} Q^{-1/3}\Big[& \frac{(a_2a_3)^{2/3}}{a_1^{4/3}} m_1^2 \sin^2 a_4 + \frac{(a_1a_3)^{2/3}}{a_2^{4/3}} m_2^2 \sin^2 a_5 \\ & + \frac{(a_1a_2)^{2/3}}{a_3^{4/3}} m_3^2 \sin^2 a_6 + \frac{2a_3^{2/3}}{(a_1a_2)^{1/3}} m_1m_2(\cos a_4 \cos a_5 - \cos a_6) \\ & + \frac{2a_2^{2/3}}{(a_1a_3)^{1/3}} m_1m_3(\cos a_4 \cos a_6 - \cos a_5) \\ & + \frac{2a_1^{2/3}}{(a_2a_3)^{1/3}} m_2m_3(\cos a_5 \cos a_6 - \cos a_4)\Big]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{6}$$

Ewald 能的表达式为

$$E_{cw} = \frac{Z^2}{\Omega_0}\left[\sum_l{}' \frac{1}{(\boldsymbol{r}_l^2)^{1/2}} - \frac{1}{\Omega_0}\iiint \frac{d\boldsymbol{r}}{(\boldsymbol{r}^2)^{1/2}}\right], \tag{7}$$

其中

$$r_l^2=\frac{1}{4}(l_1^2a_1^2+l_2^2a_2^2+l_3^2a_3^2+2l_1l_2a_1a_2\cos\alpha_6+2l_1l_3a_1a_3\cos\alpha_5+2l_2l_3a_2a_3\cos\alpha_4),\tag{8}$$

$$r^2=\frac{1}{4}(u_1^2a_1^2+u_2^2a_2^2+u_3^2a_3^2+2u_1u_2a_1a_2\cos\alpha_6+2u_1u_3a_1a_3\cos\alpha_5+2u_2u_3a_2a_3\cos\alpha_4).\tag{9}$$

三、Born 稳定性判据

假定 $a_i(i=1,2,\cdots,6)$ 变为 $a_i+\delta a_i$ 时，E变为 $E+\delta E$. 将E进行 Taylor 展开，只取到二阶小项，

$$\delta E=\sum_i\left(\frac{\partial E}{\partial a_i}\right)_0\delta a_i+\frac{1}{2}\sum_{ij}\left(\frac{\partial^2E}{\partial a_i\partial a_j}\right)_0\delta a_i\delta a_j=\sum_i P_i\delta a_i+\frac{1}{2}\sum_{ij}B_{ij}\delta a_i\delta a_j.\tag{10}$$

如果上式中的二次型是正定的，即

$$\sum_{ij}B_{ij}\delta a_i\delta a_j>0,\tag{11}$$

则晶体就是稳定的. (11) 式称为 Born 稳定性判据. 根据判断二次型正定性的方法，(11) 式成立的充要条件是行列式

$$[B_{ij}]=\begin{vmatrix}B_{11}&B_{12}&B_{13}&B_{14}&B_{15}&B_{16}\\B_{12}&B_{22}&B_{23}&B_{24}&B_{25}&B_{26}\\B_{13}&B_{23}&B_{33}&B_{34}&B_{35}&B_{36}\\B_{14}&B_{24}&B_{34}&B_{44}&B_{45}&B_{46}\\B_{15}&B_{25}&B_{35}&B_{45}&B_{55}&B_{56}\\B_{16}&B_{26}&B_{36}&B_{46}&B_{56}&B_{66}\end{vmatrix}\tag{12}$$

及其各主子行列式均大于零.

四、在单轴应力下的理论强度

假定晶体在沿 [100] 方向施加的单轴应力 σ 作用下形变，则

$$P_1=\left(\frac{\partial E}{\partial a_1}\right)_0=\frac{\sigma}{a_1},\tag{13}$$

$$P_2=P_3=P_4=P_5=P_6=0.\tag{14}$$

这时必然有

$$a_2=a_3,\tag{15}$$

$$\alpha_4=\alpha_5=\alpha_6=\pi/2.\tag{16}$$

我们用下标 0 表示在 0 K 和恒定单轴负载下的状态，于是

$$V_0 = a_1 a_2^2 = 2\alpha\Omega_0 = \frac{8\pi Z\alpha}{3} r_{s0}^3. \tag{17}$$

P_i 和 B_{ij} 亦均可表示为 a_1 和 a_2 的函数. a_1, a_2 与 σ 的关系由方程组

$$a_1 P_1(a_1, a_2) = \sigma, \qquad P_2(a_1, a_2) = 0 \tag{18}$$

确定,任意给定其中一个量的值,可由 (18) 式求出另外两个量的值. 沿[100]方向的正应变为

$$\varepsilon = \frac{a_1 - a_0}{a_0}, \tag{19}$$

其中 a_0 是在 0 K 和零负载下的晶格常数. 当 $\sigma > 0$ 时, $\varepsilon > 0$, 称为拉伸应变. 当 $\sigma < 0$ 时, $\varepsilon < 0$, 称为压缩应变.

对于在 [100] 单轴负载下的立方晶体, 可以证明

$$B_{14} = B_{15} = B_{16} = B_{24} = B_{25} = B_{26} = B_{34}$$
$$= B_{35} = B_{36} = B_{45} = B_{46} = B_{56} = 0, \tag{20}$$
$$B_{12} = B_{13}, B_{22} = B_{33}, B_{55} = B_{66}. \tag{21}$$

于是行列式 $[B_{ij}]$ 化简为

$$[B_{ij}] = \begin{vmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{12} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{22} & B_{23} & 0 & 0 & 0 \\ B_{12} & B_{23} & B_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{55} \end{vmatrix}. \tag{22}$$

由 $[B_{ij}]$ 及其各主子行列式均大于零得到

$$B_{55} > 0, \tag{23}$$
$$B_{44} > 0, \tag{24}$$
$$B_{22} > 0, \tag{25}$$
$$B_{22}^2 - B_{23}^2 > 0, \tag{26}$$
$$[B_{11}(B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2](B_{22} - B_{23}) > 0. \tag{27}$$

由(25)和(26)式可得到

$$B_{22} - B_{23} > 0. \tag{28}$$

于是(27)式化简为

$$B_{11}(B_{22} + B_{23}) - 2B_{12}^2 > 0. \tag{29}$$

(23)—(26) 式和 (29) 式就是我们在计算中实际采用的稳定性判据.

当应变 ε 的绝对值逐渐增大,直到稳定性判据开始不满足时(五个不等式中有一个变为等式), 我们就说晶体的稳定性开始破坏了. 与此临界应变相对应的临界应力, 我们称之为在单轴应力下的理论强度. 用 σ_1 和 ε_1 表示 $a_1 > a_0$ 时求出的临界应力和应变,用 σ_2 和 ε_2 表示 $a_1 < a_0$ 时求出的临界应力和应变,则 σ_1 就是理论拉伸强度, σ_2 就是理论压缩强度.

五、计 算 公 式

令
$$P_i = P_i^v + P_i^{ew} + P_i^{bs}, \tag{30}$$
$$B_{ij} = B_{ij}^v + B_{ij}^{ew} + B_{ij}^{bs}, \tag{31}$$
其中上标 v，ew 和 bs 分别表示体积相关能，Ewald 能和带结构能的贡献．

1. 体积相关能的导数

$$a_1 P_1^v = a_2 P_2^v = \frac{1}{3} r_{s0} \left(\frac{\partial E_v}{\partial r_s}\right)_0, \tag{32}$$
$$a_1^2 B_{11}^v = a_2^2 B_{22}^v = \frac{1}{9}\left[r_{s0}^2 \left(\frac{\partial^2 E_v}{\partial r_s^2}\right)_0 - 2 r_{s0} \left(\frac{\partial E_v}{\partial r_s}\right)_0 \right], \tag{33}$$
$$a_1 a_2 B_{12}^v = a_2^2 B_{23}^v = \frac{1}{9}\left[r_{s0}^2 \left(\frac{\partial^2 E_v}{\partial r_s^2}\right)_0 + r_{s0} \left(\frac{\partial E_v}{\partial r_s}\right)_0 \right], \tag{34}$$
$$B_{44}^v = B_{55}^v = -\frac{1}{3} r_{s0} \left(\frac{\partial E_v}{\partial r_s}\right)_0, \tag{35}$$
其中
$$r_{s0} = \left(\frac{3}{8\pi Z\alpha}\right)^{1/3} a_1^{1/3} a_2^{2/3}. \tag{36}$$

2. Ewald 能的导数

$$P_2^{ew} = \left(\frac{\partial E_{ew}}{\partial a_2}\right)_0 = -\frac{2Z^2}{\Omega_0}\left[\sum_l{}' \frac{a_2 l_2^2}{(l_1^2 a_1^2 + l_2^2 a_2^2 + l_3^2 a_2^2)^{3/2}} - \frac{\alpha}{4} \iiint \frac{a_2 u_2^2 du_1 du_2 du_3}{(u_1^2 a_1^2 + u_2^2 a_2^2 + u_3^2 a_3^2)^{3/2}} \right]$$
$$= -\frac{2Z^2}{\Omega_0} \frac{1}{a_2^2}\left[\sum_l{}' \frac{l_2^2}{[(1+\delta) l_1^2 + l_2^2 + l_3^2]^{3/2}} - \frac{\alpha}{4} \iiint \frac{u_2^2 du_1 du_2 du_3}{[(1+\delta) u_1^2 + u_2^2 + u_3^2]^{3/2}} \right], \tag{37}$$
其中
$$\delta = \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^2 - 1. \tag{38}$$
当 δ 的绝对值很小时，我们可以对 (37) 式进行 Taylor 展开，取到 δ^2 项，再利用文献[15]中晶格和 $S_n^{(m)}$，$S_n^{(l,m)}$ 和 $S_n^{(k,l,m)}$ 的定义，得到
$$P_2^{ew} = -\frac{2Z^2}{\Omega_0} \frac{1}{a_2^2}\left(\frac{1}{3} S_1^{(0)} - \frac{3}{2} \delta S_5^{(1,1)} + \frac{15}{8} \delta^2 S_7^{(2,1)} \right). \tag{39}$$
用同样方法可以得到
$$P_1^{ew} = -\frac{2Z^2}{\Omega_0} \frac{1}{a_1 a_2}\left[\frac{1}{3} S_1^{(0)} + \frac{1}{6} \delta (2 S_1^{(0)} - 9 S_5^{(2)}) + \frac{3}{8} \delta^2 (5 S_7^{(3)} - 4 S_5^{(2)}) \right], \tag{40}$$
$$B_{11}^{ew} = \frac{2Z^2}{\Omega_0} \frac{1}{a_1^2 a_2}\left[3 S_5^{(2)} - \frac{1}{3} S_1^{(0)} + \delta \left(15 S_7^{(2,1)} - \frac{1}{3} S_1^{(0)} \right) + \frac{3}{4} \delta^2 (6 S_5^{(2)} - 5 S_7^{(3)} - 35 S_9^{(3,1)}) \right], \tag{41}$$

$$B_{22}^{\mathrm{cw}}=\frac{2Z^2}{\Omega_0}\frac{1}{a_2^3}\Big[3S_5^{(2)}-\frac{1}{3}S_1^{(0)}+\frac{3}{2}\delta(S_5^{(1,1)}-5S_7^{(2,1)})$$
$$-\frac{15}{8}\delta^2(S_7^{(2,1)}-7S_9^{(2,2)})\Big], \quad (42)$$

$$a_1a_2B_{12}^{\mathrm{cw}}=B_{55}^{\mathrm{cw}}=\frac{2Z^2}{\Omega_0}\frac{1}{a_2}\Big[3S_5^{(1,1)}+\frac{3}{2}\delta(2S_5^{(1,1)}-5S_7^{(2,1)})$$
$$-\frac{15}{8}\delta^2(4S_7^{(2,1)}-7S_9^{(3,1)})\Big], \quad (43)$$

$$a_2^2B_{23}^{\mathrm{cw}}=B_{44}^{\mathrm{cw}}=\frac{2Z^2}{\Omega_0}\frac{1}{a_2}\Big(3S_5^{(1,1)}-\frac{15}{2}\delta S_7^{(1,1,1)}+\frac{105}{8}\delta^2S_9^{(2,1,1)}\Big). \quad (44)$$

3. 带结构能的导数

$$P_1^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{3a_1}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{2/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{4/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_1(x)}{x}\frac{\partial F}{\partial x}\right]+\sum_x{}'\left[A_0(x)r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}, \quad (45)$$

$$P_2^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{3a_2}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{2/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{4/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_2(x)}{x}\frac{\partial F}{\partial x}\right]+\sum_x{}'\left[A_0(x)r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}, \quad (46)$$

$$B_{11}^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{9a_1^2}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{4/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{8/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_3(x)}{x^2}\frac{\partial^2F}{\partial x^2}+\frac{A_4(x)}{x^3}\frac{\partial F}{\partial x}\right]\right.$$
$$\left.+\sum_x{}'\left[A_0(x)\left(r_s^2\frac{\partial^2F}{\partial r_s^2}-2r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right)\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}, \quad (47)$$

$$B_{22}^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{9a_2^2}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{4/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{8/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_5(x)}{x^2}\frac{\partial^2F}{\partial x^2}+\frac{A_6(x)}{x^3}\frac{\partial F}{\partial x}\right]\right.$$
$$\left.+\sum_x{}'\left[A_0(x)\left(r_s^2\frac{\partial^2F}{\partial r_s^2}-2r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right)\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}, \quad (48)$$

$$B_{12}^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{9a_1a_2}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{4/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{8/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_7(x)}{x^2}\frac{\partial^2F}{\partial x^2}+\frac{A_8(x)}{x^3}\frac{\partial F}{\partial x}\right]\right.$$
$$\left.+\sum_x{}'\left[A_0(x)\left(r_s^2\frac{\partial^2F}{\partial r_s^2}+r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right)\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}, \quad (49)$$

$$B_{23}^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{9a_2^2}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{4/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{8/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_9(x)}{x^2}\frac{\partial^2F}{\partial x^2}+\frac{A_{10}(x)}{x^3}\frac{\partial F}{\partial x}\right]\right.$$
$$\left.+\sum_x{}'\left[A_0(x)\left(r_s^2\frac{\partial^2F}{\partial r_s^2}+r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right)\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}, \quad (50)$$

$$B_{44}^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{3}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{4/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{8/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_{11}(x)}{x^2}\frac{\partial^2F}{\partial x^2}+\frac{A_{12}(x)}{x^3}\frac{\partial F}{\partial x}\right]\right.$$
$$\left.-\sum_x{}'\left[A_0(x)r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}, \quad (51)$$

$$B_{55}^{\mathrm{bs}}=\frac{1}{\Omega_0}\frac{1}{3}\left\{\left(\frac{\pi}{6\alpha Z}\right)^{4/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{8/3}\sum_x{}'\left[\frac{A_{13}(x)}{x^2}\frac{\partial^2F}{\partial x^2}+\frac{A_{14}(x)}{x^3}\frac{\partial F}{\partial x}\right]\right.$$
$$\left.-\sum_x{}'\left[A_0(x)r_s\frac{\partial F}{\partial r_s}\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x=x_0\\ r_s=r_{s0}}}. \quad (52)$$

这里

$$x_0 = \left(\frac{\pi}{6\,\alpha Z}\right)^{1/3}\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{2/3}[m_1^2 + (1+\delta)(m_2^2 + m_3^2)]^{1/2}, \tag{53}$$

$$A_0(x_0) = \sum 1, \tag{54}$$

$$A_1(x_0) = -2A_2(x_0) = -2\sum m_1^2 + 2(1+\delta)\sum m_2^2, \tag{55}$$

$$A_3(x_0) = -2A_7(x_0) = 4\sum m_1^4 - 8(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 + 2(1+\delta)^2\sum(m_2^4 + m_2^2 m_3^2), \tag{56}$$

$$A_4(x_0) = 10\sum m_1^4 + 34(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 - 4(1+\delta)^2\sum(m_2^4 + m_2^2 m_3^2), \tag{57}$$

$$A_5(x_0) = \sum m_1^4 - 2(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 + (1+\delta)^2\sum(5m_2^4 - 4m_2^2 m_3^2), \tag{58}$$

$$A_6(x_0) = -2\sum m_1^4 + 13(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 + (1+\delta)^2\sum(8m_2^4 + 17m_2^2 m_3^2), \tag{59}$$

$$A_8(x_0) = -2\sum m_1^4 - 14(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 - (1+\delta)^2\sum(m_2^4 + m_2^2 m_3^2), \tag{60}$$

$$A_9(x_0) = \sum m_1^4 - 2(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 - (1+\delta)^2\sum(4m_2^4 - 5m_2^2 m_3^2), \tag{61}$$

$$A_{10}(x_0) = \sum m_1^4 - 2(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 - (1+\delta)^2\sum(4m_2^4 + 13m_2^2 m_3^2), \tag{62}$$

$$A_{11}(x_0) = 3(1+\delta)^2\sum m_2^2 m_3^2, \tag{63}$$

$$A_{12}(x_0) = -\sum m_1^4 + 2(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 + (1+\delta)^2\sum(4m_2^4 + m_2^2 m_3^2), \tag{64}$$

$$A_{13}(x_0) = 3(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2, \tag{65}$$

$$A_{14}(x_0) = 2\sum m_1^4 + 2(1+\delta)\sum m_1^2 m_2^2 + (1+\delta)^2\sum(m_2^4 + m_2^2 m_3^2). \tag{66}$$

以上求和均为在倒易点阵中对绝对值相等的所有矢量 $\boldsymbol{x}_0$ 进行，所以结果是 x_0 的函数．例如，$A_0(x_0)$ 即是 x_0 值相等的矢量 $\boldsymbol{x}_0$ 的数目．

六、计算结果与讨论

本文计算了六种简单金属 (Li, Na, K, Rb, Cs 和 Pb) 在 0K 和 [100] 单轴应力下的理论拉伸与压缩强度以及与之相对应的临界应变，结果列于表 2 中．计算中使用的具体赝势模型及其势参数的确定方法同文献[15]．

表 2 中 δ_1 和 δ_2 分别为在临界拉伸与压缩应变下的 δ 值．从计算结果可以看到，δ_1 和 δ_2 的绝对值确实都比较小，因此我们在求 Ewald 能的导数时，略去展开式中的 δ^3 项是不会带来很大误差的．比较之下，Pb 的 δ_1 值稍大一些，所以 Pb 的理论拉伸强度的计算误差也会比其他结果稍大一些．

赝势形式对金属内能的影响主要体现在带结构项中．E_v 中的 E_0 项虽也包含赝势参数 r_c，但该项还有一个可调的修正系数 H．在金属内能中，E_v，E_{ew} 和 E_{bs} 各项所占的比

表 2　计算结果

	σ_1 (10^9dyn/cm^2)	ε_1(%)	δ_1	σ_2 (10^9dyn/cm^2)	ε_2(%)	δ_2
Li	0.2779	4.37	0.136	−2.204	−4.46	−0.124
Na	0.1642	4.97	0.156	−1.475	−5.00	−0.137
K	0.0713	5.35	0.168	−0.7718	−5.31	−0.145
Rb	0.0453	5.41	0.170	−0.5931	−5.36	−0.146
Cs	0.0185	5.46	0.172	−0.4141	−5.38	−0.147
Pb	37.32	9.40	0.274	−10.33	−4.68	−0.131

表 3　金属内能各项对二阶弹性常数的贡献

		E	B_{11}	B_{12}	B_{44}
单　位		(Ry/electron)	(10^{11}dyn/cm^2)		
Li	体积相关项	0.0151	4.4471	2.3599	2.08721
	Ewald 项	−0.5534	−2.3360	−0.7405	−0.74050
	带结构项	−0.0081	−0.6163	−0.4137	−0.18871
	总　计	−0.5464	1.4948	1.2057	1.15800
Na	体积相关项	0.008	2.232	1.204	1.028
	Ewald 项	−0.456	−1.075	−0.341	−0.341
	带结构项	−0.013	−0.367	−0.247	−0.077
	总　计	−0.461	0.790	0.616	0.610
K	体积相关项	0.003	1.032	0.564	0.468
	Ewald 项	−0.369	−0.460	−0.146	−0.146
	带结构项	−0.016	−0.194	−0.127	−0.036
	总　计	−0.382	0.378	0.291	0.286
Rb	体积相关项	0.001	0.803	0.440	0.362
	Ewald 项	−0.345	−0.352	−0.111	−0.111
	带结构项	−0.016	−0.158	−0.103	−0.030
	总　计	−0.360	0.293	0.226	0.221
Cs	体积相关项	−0.002	0.591	0.326	0.265
	Ewald 项	−0.318	−0.256	−0.081	−0.081
	带结构项	−0.015	−0.122	−0.080	−0.024
	总　计	−0.335	0.213	0.165	0.160
Pb	体积相关项	0.6825	52.3457	26.2522	26.09344
	Ewald 项	−1.9749	−24.0153	−7.3424	−7.34243
	带结构项	−0.1759	−19.1550	−13.8932	−16.80901
	总　计	−1.4683	9.1754	5.0166	1.94200

例以及它们对二阶弹性常数的贡献列于表 3 中．从表 3 可以看到，在内能中，E_{bs} 所占的比例是不大的；对碱金属，大约占 1.5—4.5%；对于 Pb，大约占 12%．然而对于二阶弹性常数，情况就完全不同了．除了在碱金属的 B_{44} 中，带结构项只占 14% 左右外，在其它的二阶弹性常数中，带结构项均起着十分重要的作用．

计算表明，在临界拉伸应变时，对碱金属，判据(29)式变为等式；对于 Pb，判据(23)式变为等式．而在临界压缩应变时，对碱金属，判据(26)式变为等式；对于 Pb，判据(24)式变为等式．由前面的分析可以看到，赝势在这些判据里的二阶弹性常数中都起着很大作用．Pb 与碱金属的区别是很明显的．这不仅是由于它们的晶格结构和原子价不同，而且由表 3 可以看到，带结构项在 Pb 的能量和二阶弹性常数中所起的作用也远比在碱金属中大得多．

在引言中已经提到，晶须的实测强度远远大于其大晶体的实测强度，很可能接近于理想晶体的理论强度．因此要验证理论拉伸强度的计算值，目前只能与晶须拉伸强度的实测值进行比较．但遗憾的是，虽然有关于K和 Pb 等简单金属晶须生长的报道[17,18]，但尚未见到测量其晶须拉伸强度的报道．不过与表 1 所列的其它材料的实测值相比，本文所计算的理论拉伸强度的量级和临界应变的范围看来是合理的．

关于简单金属大晶体的拉伸强度，目前尚未见到碱金属的实测值，Pb 的实测值是 $1.77\times10^{8}\,\mathrm{dyn/cm^2}$[19]．本文计算的 Pb 的理论拉伸强度与大晶体拉伸强度的比值是 211．这与表 1 所列其它材料晶须拉伸强度与大晶体拉伸强度的比值也是大体相符的．

本文采用的赝势方法是一种半经验方法，其中两个待定参数 r_c 和 H 由 0 K 和零负载下的晶格常数 a_0 和二阶弹性常数 B_{44} 的实验值确定[15]．因此有必要讨论一下原始实验数据的微小变化对所定出的参数的影响以及理论计算结果对参数的敏感程度．下面以六种金属中最轻的 Li 和最重的 Pb 为例作一些分析讨论．我们分两种情况（a_0 不变，B_{44} 改变 1%；a_0 改变 1%，B_{44} 不变）计算了原始数据的偏差对势参数、内能、二阶弹性常数以及理论强度的影响，结果列于表 4 和表 5 中．从表 4 可以看到，势参数及理论强度对 a_0 的改变比对 B_{44} 的改变更为敏感．例如，B_{44} 改变 1%，Li 的 r_c 改变 0.6%，σ_1 改变 4.7%；而 a_0 改变 1%，Li 的 r_c 改变 3.3%，σ_1 改变 13.2%．事实上，本文引用的实验数据的相对误差是远小于 1% 的，所以由此而带来的计算误差也是不大的．Li 和 Pb 比较而言，Li 的计算结果对原始数据的偏差要比 Pb 敏感得多．

表 4　原始数据的偏差对势参数和理论强度的影响

	a_0	B_{44}	r_c		H		σ_1		ε_1	σ_2		ε_2
单位	(Å)	(10^{11}dyn/cm^2)		相对偏差(%)		相对偏差(%)	(10^9dyn/cm^2)	相对偏差(%)	%	(10^9dyn/cm^2)	相对偏差(%)	%
Li	3.480	1.158	1.3040		1.1035		0.2779		4.37	−2.204		−4.46
	3.480	1.158×1.01	1.3113	0.6	1.0958	−0.7	0.2911	4.7	4.41	−2.279	−3.4	−4.50
	3.480×1.01	1.158	1.3473	3.3	1.0830	−1.9	0.3145	13.2	4.54	−2.408	−9.3	−4.62
Pb	4.914	1.942	1.4512		1.4178		37.32		9.40	−10.33		−4.68
	4.914	1.942×1.01	1.4521	0.06	1.4176	−0.01	37.83	1.4	9.46	−10.45	−1.2	−4.71
	4.914×1.01	1.942	1.4726	1.5	1.4251	0.5	37.41	0.2	9.48	−10.57	−2.3	−4.74

表 5 列出了原始数据的偏差（亦即势参数的改变）对金属内能和二阶弹性常数的影响，其中也给出了体积相关项、Ewald 项和带结构项分别所作的贡献．（表中的相对偏差是对于表 3 所列的相应数据计算的．）由此我们可以看到各项影响的主次程度以及对参数的敏感程度．当 B_{44} 改变 1% 时，内能及二阶弹性常数的相对偏差均不超过 1%．当 a_0 改

表 5 原始数据的偏差对内能和二阶弹性常数的影响

	a_0	B_{44}		E		B_{11}		B_{12}		B_{44}	
单 位	(Å)	(10^{11}dyn/cm^2)		(Ry/electron)	相对偏差(%)	(10^{11}dyn/cm^2)	相对偏差(%)	(10^{11}dyn/cm^2)	相对偏差(%)	(10^{11}dyn/cm^2)	相对偏差(%)
Li	3.480	1.158×1.01	体积相关项	0.0158	4.64	4.4611	0.31	2.3669	0.30	2.09424	0.34
			Ewald 项	−0.5534	0	−2.3360	0	−0.7405	0	−0.74050	0
			带结构项	−0.0084	−3.70	−0.6210	−0.76	−0.4177	−0.97	−0.18416	2.41
			总 计	−0.5460	0.07	1.5041	0.62	1.2087	0.25	1.16958	1
	3.480×1.01	1.158	体积相关项	0.0169	11.9	4.3385	−2.44	2.3031	−2.41	2.03543	−2.48
			Ewald 项	−0.5480	0.98	−2.2448	3.90	−0.7116	3.90	−0.71160	3.90
			带结构项	−0.0093	−14.8	−0.6160	0.05	−0.4161	−0.58	−0.16583	12.1
			总 计	−0.5404	1.10	1.4777	−1.14	1.1754	−2.51	1.15800	0
Pb	4.914	1.942×1.01	体积相关项	0.6833	0.12	52.3938	0.09	26.2763	0.09	26.11752	0.09
			Ewald 项	−1.9749	0	−24.0153	0	−7.3424	0	−7.34243	0
			带结构项	−0.1763	−0.23	−19.1736	−0.10	−13.9021	−0.06	−16.81367	−0.03
			总 计	−1.4679	0.03	9.2049	0.32	5.0318	0.30	1.96142	1
	4.914×1.01	1.942	体积相关项	0.6820	−0.07	50.7929	−2.97	25.4873	−2.91	25.30554	−3.02
			Ewald 项	−1.9554	0.99	−23.0783	3.90	−7.0559	3.90	−7.05593	3.90
			带结构项	−0.1790	−1.76	−18.6662	2.55	−13.4941	2.87	−16.30761	2.98
			总 计	−1.4524	1.08	9.0484	−1.38	4.9373	−1.58	1.94200	0

变 1% 时，内能及二阶弹性常数的相对偏差大致在 ±2% 之间．Ewald 项仅仅是 a_0 的函数，所以当只改变 B_{44} 时，这一项数值不变．在 Li 的 E 和 B_{44} 栏里，体积相关项和带结构项的相对偏差比较大，在 −15% 到 12% 之间．这说明这两项对参数的改变比 Ewald 项要敏感得多．但由于它们的绝对值较小，对总和的改变并不起太大作用．

参 考 文 献

[1] S. S. Brenner, *J. Appl. Phys.*, **27**(1956), 1484.

[2] S. S. Brenner, Growth and Perfection of Crystals, ed. R. H. Doremus *et al.*, John Wiley and Sons Inc., New York, (1958), p. 157.

[3] S. S. Brenner, *Scientific American,* **203** (1960), 65.

[4] A. Kelly, Strong Solids, Clarendon, Oxford, England, (1966).

[5] A. Kelly *et al., Phil. Mag.*, **15**(1967), 567.

[6] P. C. Gehlen *et al., J. Appl. Phys.*, 39(1968), 5246.

[7] Z. S. Basinski *et al., Phil. Mag.*, **21**(1970), 1201.

[8] N. H. Macmillan, *J. Mater. Sci.*, **7**(1972), 239.

[9] F. Milstein, *Phys. Rev., B,* **3**(1971), 1130.

[10] F. Milstein, *J. Appl. Phys.* **44**(1973), 3833.

[11] M. Born, *Proc. Cambridge Phil. Soc.,* **36**(1940), 160.

[12] 赵伊君、张志杰，国防科技大学学报，**4**(1980)，43.

[13] L. A. Girifalco, V. G. Weizer, *Phys. Rev.*, **114**(1959), 687.

[14] 赵伊君、张志杰，国防科技大学学报，**3**(1980)，51.

[15] 李树山、林光海，物理学报，**31**(1982)，38.

[16] 李树山，力学学报，**4**(1983)，396.

[17] W. Dittmar, K. Neumann, Growth and Perfection of Crystals, ed. R. H. Doremus *et al.*, John Wiley and Sons Inc., New York, (1958), p. 121.

[18] W. A. Thompson, *J. Chem. Phys.*, **68**(1978), 1854.

[19] D. E. Gray, American Institute of Physics Handbook, McGraw-Hill Book Co., New York, (1972).

THEORETICAL STRENGTH FOR SIMPLE METALS UNDER[100]UNIAXIAL STRESS

LI SHU-SHAN

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

ABSTRACT

A method of calculating the theoretical strength of simple methls by applicatlon of the pseudopotential theory and the Born stability criteria is presented. The theoretical tensile and compressive strength for six simple metals (Li, Na, K, Rb, Cs and Pb) at 0K and under [100] uniaxial stress are evaluated.