

金属弹性常数,状态方程和理论强度的物理力学计算¹⁾

赵 伊 君 张 志 杰

(国防科学技术大学)

提要 对利用 Morse 势计算立方金属弹性常数, 状态方程和拉伸与压缩理论强度的方法进行了讨论。其中 Morse 势参数由内聚能和体积弹性模量的实验值确定。给出对多种金属的计算结果。

一、引 言

从固体材料的微观结构出发, 通过理论计算, 求出其本构关系与强度, 是物理力学中的重要课题, 但当前尚未解决^[1]。作为朝此方向的探索, 我们尝试计算了多种立方金属的弹性常数, 状态方程和拉伸与压缩理论强度。

金属原子间的相互作用势, 常用 Morse 势

$$V(r) = D_e [e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)}] \quad (1)$$

近似描述^[2-6], 其中 D_e , α , r_0 是三个势参数, 可由适当的实验数据确定。式(1)是有心势, 未将传导电子的作用分开计算, 有一定缺欠, 例如求出的弹性常数要受 Cauchy 条件的限制, 但却比较简单。在我们的计算中, 就采用了 Morse 势。

二、弹性常数与平衡条件

晶体中第 q 个原子的平衡位置, 可表示成

$$r_{0q} = l_{\alpha q} a_\alpha + l_{\beta q} a_\beta + l_{\gamma q} a_\gamma \quad (2)$$

其中 $a_\alpha, a_\beta, a_\gamma$ 是晶胞的基矢, $l_{\alpha q}, l_{\beta q}, l_{\gamma q}$ 是满足点阵结构要求的正负整数。若晶体形变后 r_{0q} 变为 r'_q , 形变不大时将有

$$r_q'^2 = r_{0q}^2 + 2\rho_q \quad (3)$$

$$\rho_q = \sum_{ij} \epsilon_{ij} (l_{\alpha q}^2 a_{\alpha i} a_{\alpha j} + l_{\alpha q} l_{\beta q} a_{\alpha i} a_{\beta j} + l_{\alpha q} l_{\gamma q} a_{\alpha i} a_{\gamma j} + l_{\beta q} l_{\alpha q} a_{\beta i} a_{\alpha j} + l_{\beta q}^2 a_{\beta i} a_{\beta j} + l_{\beta q} l_{\gamma q} a_{\beta i} a_{\gamma j} + l_{\gamma q} l_{\alpha q} a_{\gamma i} a_{\alpha j} + l_{\gamma q} l_{\beta q} a_{\gamma i} a_{\beta j} + l_{\gamma q}^2 a_{\gamma i} a_{\gamma j}) \quad (4)$$

其中下标 i, j 表示矢量的直角分量, ϵ_{ij} 是应变张量的分量。

原子间相互作用势为

$$V(r) = \phi(r^2) \quad (5)$$

时, 将 $\phi(r_q'^2)$ 在 r_{0q}^2 处展开, 近似得出

1) 本文内容曾在杭州全国第一次材料力学性能学术交流会上交流。

本文于 1981 年 5 月收到。

$$V(r'_q) = V(r_{0q}) + \rho_q DV(r_{0q}) + \frac{1}{2} \rho_q^2 D^2 V(r_{0q}) \quad (6)$$

其中 $D = (1/r)(d/dr)$. 对于由 N 个原子构成的晶体, 形变后的势能为

$$U = \frac{N}{2} \sum_q' V(r'_q) \quad (7)$$

因而单位体积晶体的形变势能为

$$W = U/NQ_0 = W_0 + W_1 + W_2 \quad (8)$$

$$W_0 = \frac{1}{2Q_0} \sum_q' V(r_{0q}) \quad (9)$$

$$W_1 = \frac{1}{2Q_0} \sum_q' \rho_q DV(r_{0q}) \quad (10)$$

$$W_2 = \frac{1}{2Q_0} \sum_q' \rho_q^2 D^2 V(r_{0q}) \quad (11)$$

其中 Q_0 是一个原子所占的体积.

从宏观上看, 将晶体视为弹性连续介质, 有

$$W = W_0 + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} c_{pqrs} \epsilon_{pq} \epsilon_{rs} \quad (12)$$

其中 c_{pqrs} 是弹性常数. 由上式可见

$$\left. \frac{\partial W}{\partial \epsilon_{pq}} \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad (13)$$

$$c_{pqrs} = \left. \frac{\partial^2 W}{\partial \epsilon_{pq} \partial \epsilon_{rs}} \right|_{\epsilon=0} \quad (14)$$

式(13)是晶体的平衡条件, 式(14)是弹性常数的表达式.

对于立方晶体, 取 a_x, a_y, a_z 与三个直角坐标轴平行, 其大小均等于点阵常数 a_0 , 则平衡条件成为

$$\sum_{l_1 l_2 l_3}' (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) D^2 V[(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0] = 0 \quad (15)$$

非零的独立弹性常数表达式成为

$$c_{1111} = \frac{a_0^4}{4Q_0} \sum_{l_1 l_2 l_3}' l_1^4 D^2 V[(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0] \quad (16)$$

$$c_{1122} = \frac{a_0^4}{4Q_0} \sum_{l_1 l_2 l_3}' l_1^2 l_2^2 D^2 V[(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0] \quad (17)$$

其中 l_1, l_2, l_3 就是 $l_{\alpha q}, l_{\beta q}, l_{\gamma q}$. 对于 bcc 点阵, 三者必须同时均为奇或偶数; 对于 fcc 点阵, 三者之和必须为偶数.

三、Morse 势参数

令 $\beta = \exp \alpha r_0$, 由平衡条件(15)有

$$\sum_{l_1 l_2 l_3}' (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0} = \beta \sum_{l_1 l_2 l_3}' (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} e^{-2\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0} \quad (18)$$

因而独立的势参数只有两个.

用 U_{∞} 表示零温零压下的势能, 根据式(7)得出

$$U_{\infty} = \frac{N}{2} D_e \beta^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} e^{-2\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0} - N D_e \beta \sum'_{l_1 l_2 l_3} e^{-\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0} \quad (19)$$

将上式中的 N 改为 Avogadro 数, 就是 1 摩尔晶体的内聚能 L . L 值可由实验得出, 它是确定两个独立势参数所需的第一个关系.

固体的状态方程可表示成

$$P(T, V) = P_0(T) + P_1(T) \left(\frac{V_0 - V}{V_0} \right) + P_2(T) \left(\frac{V_0 - V}{V_0} \right)^2 + \dots \quad (20)$$

其中 $V_0 = N\Omega_0$ 是零温零压下的体积, $P_1(0)$ 是零温下的体积弹性模量 K_0 . 根据热力学关系

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \quad (21)$$

从式(20)得出零温下的内能为

$$U_0 = U_{\infty} + V_0 \left[\frac{1}{2} P_1(0) \left(\frac{V_0 - V}{V_0} \right)^2 + \frac{1}{3} P_2(0) \left(\frac{V_0 - V}{V_0} \right)^3 + \dots \right] \quad (22)$$

假定在流体静压力 P 的作用下, 点阵常数从 a_0 变为 a , 则由式(22)有

$$U_0(a) = U_{\infty} + V_0 \left\{ \frac{1}{2} P_1(0) \left(\frac{a_0 - a}{a_0} \right)^2 + \frac{1}{3} [P_2(0) - P_1(0)] \left(\frac{a_0 - a}{a_0} \right)^3 + \dots \right\} \quad (23)$$

于是得出

$$K_0 = P_1(0) = \frac{a_0^2}{9N\Omega_0} \frac{d^2 U_0(a)}{da^2} \Big|_{a=a_0} \quad (24)$$

另一方面, 从式(19)可见有

$$U_0(a) = \frac{N}{2} D_e \beta^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} e^{-2\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a} - N D_e \beta \sum'_{l_1 l_2 l_3} e^{-\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a} \quad (25)$$

因而从式(24)得出

$$K_0 = \frac{2}{9\Omega_0} D_e a_0^2 \alpha^2 \beta^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) e^{-2\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0} - \frac{1}{9\Omega_0} D_e a_0^2 \alpha^2 \beta \sum'_{l_1 l_2 l_3} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) e^{-\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} a_0} \quad (26)$$

K_0 值可由实验测出, 式(26)是确定两个独立势参数所需的另一个关系式.

根据 L 和 K_0 值, 即可求出 Morse 势参数. 具体方法和计算程序见文献[7].

四、状态方程

温度 T 不过分高时, 只考虑点阵的谐振动, 则晶体的配分函数为

$$Z = e^{-U_0(a)/kT} \prod_i (1 - e^{-h\nu_i/kT})^{-1} \quad (27)$$

其中 ν_i ($i = 1, 2, \dots, 3N$) 是简正频率. 由此可推导出状态方程为

$$P = P_K + P_T \quad (28)$$

$$P_K = -dU_0(a)/dV \quad (29)$$

$$P_T = \frac{\Gamma}{V} \sum_i h\nu_i (e^{h\nu_i/kT} - 1)^{-1} \quad (30)$$

其中 P_K 是冷压, P_T 是热压,

$$\Gamma = -d \ln \nu_i / d \ln V \quad (31)$$

是 Grüneisen 系数.

对于立方晶体有

$$V = 8Na^3/n \quad (32)$$

$$n = \begin{cases} 2, & bcc \text{ 点阵} \\ 4, & fcc \text{ 点阵} \end{cases} \quad (33)$$

由式(29)和(25)得出

$$P_K = -\frac{n}{24a^2} D_c \alpha \beta^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} e^{-2\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}}} \\ - \frac{n}{24a^2} D_c \alpha \beta^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}}} \quad (34)$$

它是冷压的表达式.

在 Debye 近似下, 可将热压表示成

$$P_T = \frac{9TNkT}{V} (T/\Theta_D)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (35)$$

其中

$$\Theta_D = h\nu_{\max}/k \quad (36)$$

是 Debye 温度, 而 $\nu_{\max}$ 由条件

$$\int_0^{\nu_{\max}} 4\pi V \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \nu^2 d\nu = 3N \quad (37)$$

确定. 其中 c_l 是将晶体视为弹性连续介质时的纵弹性波速, c_t 是横弹性波速. 根据弹性波速与体积弹性模量和密度间关系, 可推导出

$$\Theta_D = \frac{h}{k} \left(\frac{9N}{4\pi V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\left(\frac{9K_0}{5\rho_0} \right)^{-\frac{1}{2}} + 2 \left(\frac{3K_0}{5\rho_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \right]^{-\frac{1}{3}} \quad (38)$$

其中 ρ_0 是零温零压下的密度.

把 Grüneisen 系数表示成

$$\Gamma = -d \ln \nu_{\max} / d \ln V \quad (39)$$

可推导出

$$\Gamma = - (2/3) + [P_2(0)/P_1(0)] \quad (40)$$

把 Morse 势 $V(r)$ 在 r_0 点展开, 得出

$$V(r) = -D_c + D_c \left[(\alpha r_0)^2 \left(\frac{r_0 - r}{r_0} \right)^2 + (\alpha r_0)^3 \left(\frac{r_0 - r}{r_0} \right)^3 + \dots \right] \quad (41)$$

计及 r/r_0 与 a/a_0 成比例以及内能与相互作用势成比例, 由式(41)得出

$$U_0(a) = U_{00} - U_{00} \left[(\alpha r_0)^2 \left(\frac{a_0 - a}{a_0} \right)^2 + (\alpha r_0)^3 \left(\frac{a_0 - a}{a_0} \right)^3 + \dots \right] \quad (42)$$

通过比较式(23)和(42),可见

$$P_2(0)/P_1(0) = 1 + (\alpha r_0/2) \quad (43)$$

因而有

$$\Gamma = (1/3) + (\alpha r_0/2) \quad (44)$$

利用式(38)和(44)求出 Debye 温度和 Grüneisen 系数后,即可再由式(35)求出热压.

五、理论强度

立方晶体在外力 F 作用下发生形变时,设晶胞的三个边长从均等于 $2a_0$ 变为 $2a_1, 2a_2, 2a_3$; 面间夹角从均等于 $\pi/2$ 变为 a_4, a_5, a_6 , 则形变后一个晶胞的势能为

$$w = n \sum_{l_1 l_2 l_3} \phi(r'^2) \quad (45)$$

$$r'^2 = l_1^2 a_1^2 + l_2^2 a_2^2 + l_3^2 a_3^2 + 2l_2 l_3 a_2 a_3 \cos a_4 + 2l_3 l_1 a_3 a_1 \cos a_5 + 2l_1 l_2 a_1 a_2 \cos a_6 \quad (46)$$

静力平衡条件为

$$F_i = (1/2) (\partial w / \partial a_i), \quad i = 1, 2, 3 \quad (47)$$

其中 F_i 是 F 的分量.

如果在沿 $\langle 100 \rangle$ 方向施加的单轴应力 σ 作用下形变,则由式(47)有

$$\sigma = \frac{n a_1}{4 a_2^2} D_e \alpha \beta \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 [l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{-\frac{1}{2}} e^{-a[l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{\frac{1}{2}}} \\ - \frac{n a_1}{4 a_2^2} D_e \alpha \beta^2 \sum_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 [l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{-\frac{1}{2}} e^{-2a[l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (48)$$

$$\sum_{l_1 l_2 l_3} l_2^2 [l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{-\frac{1}{2}} e^{-a[l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{\frac{1}{2}}} \\ = \beta \sum_{l_1 l_2 l_3} l_2^2 [l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{-\frac{1}{2}} e^{-2a[l_1^2 a_1^2 + (l_2^2 + l_3^2) a_2^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (49)$$

任意给定一个 a_1 值,由式(49)求出对应的 a_2 值,再由式(48)和应变 $\epsilon = (a_1 - a_0)/a_0$ 可求出 σ 和 ϵ .

假定 $a_i (i = 1, 2, \dots, 6)$ 变为 $a_i + \delta a_i$ 时, w 变为 $w + \delta w$. 将 w 展开到二阶小项有

$$\delta w = \sum_i \frac{\partial w}{\partial a_i} \delta a_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 w}{\partial a_i \partial a_j} \delta a_i \delta a_j \quad (50)$$

其中右边第一项是外力作的功,第二项是晶胞形变势能的增量. 显然如果二次型

$$\sum_{ij} \frac{\partial^2 w}{\partial a_i \partial a_j} \delta a_i \delta a_j$$

是正定的,则不会自发地地形变,晶体是稳定的. 这称之为 Born 稳定性判据^[3,8]. 根据判断二次型正定性的方法(例如参见文献[9]第六章§4),只要 $\det[B_{ij}]$ 及其各主子行列式均大于零,晶体就是稳定的. 其中

$$B_{ij} = B_{ji} = \partial^2 w / \partial a_i \partial a_j \quad (51)$$

对于沿〈100〉方向单轴应力作用下的立方晶体, 有

$$B_{11} = na_1^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 \phi''(r'^2) + \frac{n}{2} \sum'_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 \phi'(r'^2) \quad (52)$$

$$B_{12} = B_{13} = na_1 a_2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} l_1^2 l_2^2 \phi''(r'^2) \quad (53)$$

$$B_{22} = B_{33} = na_2^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} l_2^2 \phi''(r'^2) \quad (54)$$

$$B_{23} = na_2^2 \sum'_{l_1 l_2 l_3} l_2^2 l_3^2 \phi''(r'^2) \quad (55)$$

$$B_{44} = a_2^2 B_{23} \quad (56)$$

$$B_{55} = B_{66} = a_1 a_2 B_{12} \quad (57)$$

$$B_{14} = B_{15} = B_{16} = B_{24} = B_{25} = B_{26} = B_{34} = B_{35} = B_{36} = B_{45} \\ = B_{46} = B_{56} = 0 \quad (58)$$

因之稳定性判据成为

$$B_{12} > 0, B_{23} > 0, B_{22} > B_{23}, B_{11}(B_{12} + B_{23}) > 2B_{12} \quad (59)$$

用 σ_1 和 ϵ_1 表示 $a_1 > a_0$ 时求出的处于稳定性边界的临界应力和应变. 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 就是拉伸理论强度, ϵ_1 是与之对应的应变; σ_2 就是压缩理论强度, ϵ_2 是与之对应的应变.

表 1

原子 序数	元素	点阵 结构	a_0 (Å)	K_0 (10^{11} dyn/ cm ²)	L (10^{11} erg/ mol)	D_e (10^{-13} erg)	α (Å ⁻¹)	r_0 (Å)
11	Na	bcc	2.1453	0.662	-10.9	1.062	0.6127	5.204
13	Al	fcc	2.0248	7.21	-32.4	4.396	1.048	3.406
19	K	bcc	2.6720	0.275	-9.00	0.8566	0.4836	6.553
20	Ca	fcc	2.7910	1.72	-19.3	2.705	0.7819	4.637
23	V	bcc	1.5199	16.2	-51.6	7.914	1.223	3.093
24	Cr	bcc	1.4422	19.0	-39.7	7.143	1.491	2.799
26	Fe	bcc	1.4332	16.8	-39.9	6.591	1.385	2.849
28	Ni	fcc	1.7619	18.7	-43.0	6.879	1.386	2.804
29	Cu	fcc	1.8075	13.8	-34.1	5.464	1.351	2.876
38	Sr	fcc	3.0424	1.21	-17.7	2.469	0.7128	5.069
41	Nb	bcc	1.6504	17.2	-72.2	10.88	1.109	3.378
42	Mo	bcc	1.5736	27.4	-66.5	12.66	1.451	3.007
45	Rh	fcc	1.9021	27.2	-55.6	10.72	1.550	2.872
47	Ag	fcc	2.0432	10.2	-27.5	5.130	1.392	3.110
56	Ba	bcc	2.5125	0.962	-19.2	2.337	0.6151	5.550
73	Ta	bcc	2.6529	20.1	-78.3	21.69	1.534	4.720
74	W	bcc	1.5826	31.3	-84.8	15.37	1.370	3.064
79	Au	fcc	2.0393	17.3	-37.9	7.765	1.558	3.033
90	Th	fcc	2.5423	5.41	-57.6	6.848	0.7534	4.496

六、计算结果

按照上述方法,我们对多种立方金属进行了计算.

计算时所用的实验数据以及对 Morse 势参数的计算结果见表 1. 其中点阵结构和 a_0 值引自文献 [10] 中表 9a-2, K_0 值用的是 Birch^[11] 给出的室温下数据, L 值用的是文献 [12] 186 页给出的 25℃ 下升华潜热的负值.

弹性常数的具体算法与计算程序见文献 [13], 计算结果见表 2. 表 2 同时列出实验

表 2

原子序数	13	26	28	29	42	47	74	79
元 素	Al	Fe	Ni	Cu	Mo	Ag	W	Au
c_{1111} (10^{11} dyn/ cm ²)	计算值	8.74	17.7	23.2	17.1	27.8	13.0	32.2
	实验值	10.8—11.2	23.7—24.2	24.7—25.0	16.8—17.0	46.0—47.0	11.9—12.4	50.1—50.2
c_{1122} (10^{11} dyn/ cm ²)	计算值	6.44	16.4	16.4	12.1	27.2	8.73	30.8
	实验值	6.13—6.60	14.1—14.7	14.7—16.0	12.1—12.3	16.8—17.6	8.94—9.34	19.8—19.9

表 3

原子序数	13	19	20	23	24	28	29	41	42	47	73	79	90
元 素	Al	K	Ca	V	Cr	Ni	Cu	Nb	Mo	Ag	Ta	Au	Th
$\Theta_L(K)$	552	109	245	553	578	531	443	440	533	311	432	300	173
Γ	2.12	1.92	2.15	2.22	2.42	2.28	2.28	2.21	2.51	2.50	3.95	2.70	2.03

表 4

原 子 序 数	元 素	σ_1 (10^9 dyn/cm ²)	ϵ_1 (%)	σ_2 (10^9 dyn/cm ²)	ϵ_2 (%)
11	Na	0.405	4.44	-1.22	-3.92
13	Al	7.20	6.13	-2.55	-6.64
20	Ca	1.80	6.28	-0.640	-6.77
23	V	2.75	2.30	-8.40	-2.12
24	Cr	0.695	1.02	-2.03	-0.980
26	Fe	1.66	1.75	-5.08	-1.64
28	Ni	23.2	6.93	-8.38	-7.32
29	Cu	17.1	6.93	-6.10	-7.31
38	Sr	1.25	6.25	-0.444	-6.74
41	Nb	3.34	2.42	-9.70	-2.22
42	Mo	0.198	0.444	-0.545	-0.445
45	Rh	43.8	8.12	-16.4	-8.17
47	Ag	15.7	7.89	-5.80	-8.02
56	Ba	0.385	3.60	-1.17	-3.22
74	W	0.905	0.950	-2.92	-0.910
79	Au	30.5	8.63	-11.7	-8.48
90	Th	4.61	5.62	-1.62	-6.16

值(引自文献 [10] 表 2e-1, 3f-3 和文献 [11])以便比较。

状态方程的具体算法与计算程序见文献 [14], 表 3 给出对 Debye 温度和 Grüneisen 系数的计算结果, 附图给出求得的 25℃ 时等温压缩曲线 (实线), 其中 η 是压缩比。图中同

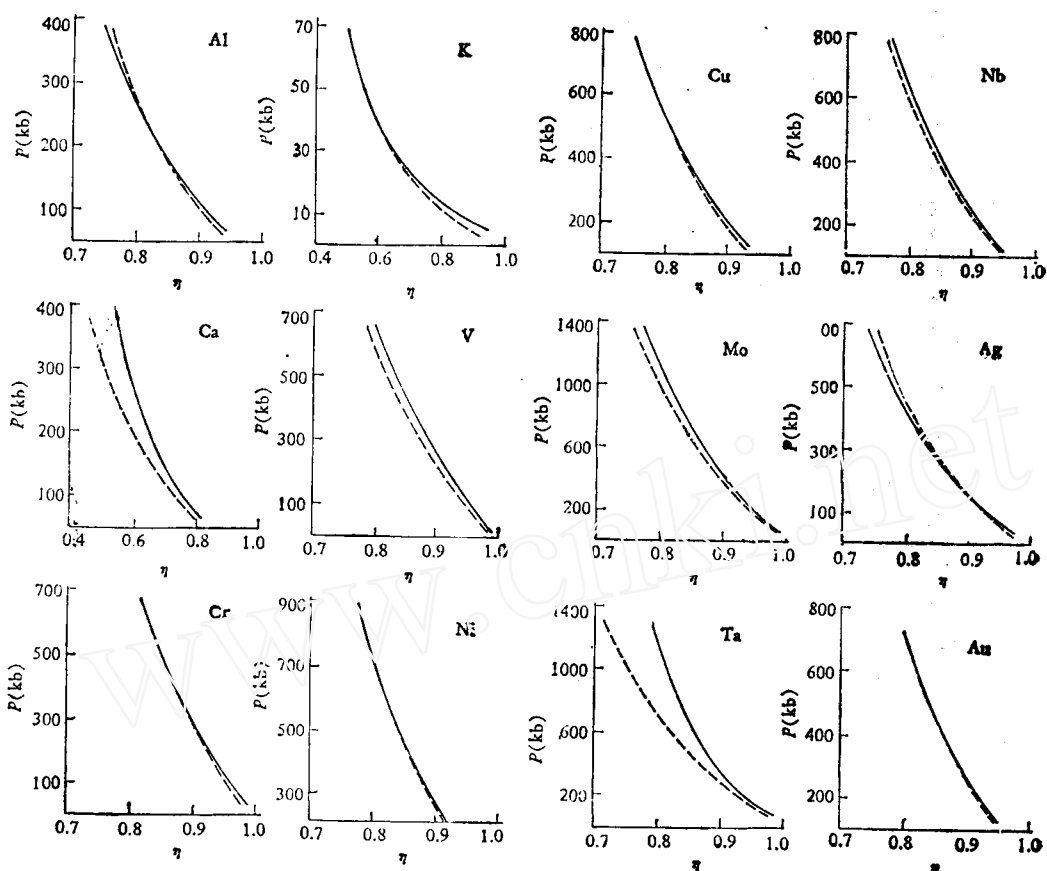


图 1

图 2

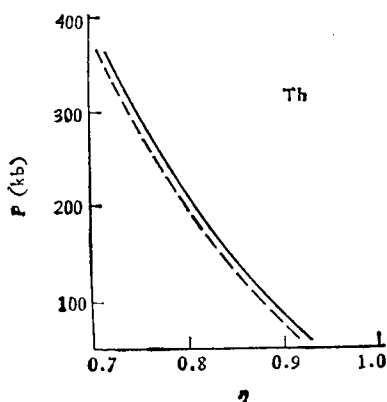


图 3

时绘出实验结果(虚线,引自文献[10]表 4d-12),以便比较.

理论强度的具体算法与计算程序见文献[15],计算结果见表 4. Milstein 曾对 $\text{Fe}^{[6]}$ 和 $\text{Ni}^{[6]}$ 也进行过计算. 我们对 Fe 的计算结果与文献[6]非常符合,但对 Ni 的计算结果则与文献[16]差别相当大.

参 考 文 献

- [1] 钱学森, 物理力学讲义, 科学出版社 (1962).
- [2] Slater, J. C., Introduction to Chemical Physics, McGraw-Hill (1939).
- [3] Born, M., *Proc. Camb. Philos. Soc.*, 36(1940), 160.
- [4] Girifalco, L. A. and Weizer, V. G., *Phys. Rev.*, 114(1950), 687.
- [5] Lincoln, R. C., Koliwod, K. M. and Ghate, P. B., *Phys. Rev.*, 157(1967), 463.
- [6] Milstein, F., *Phys. Rev.*, B3(1971), 1130.
- [7] 赵伊君和张志杰, 金属的弹性常数及其计算, 国防科技大学 (1979).
- [8] Misra, R. D., *Proc. Camb. Philos. Soc.*, 36(1940), 173.
- [9] 南京大学数学系计算数学专业, 线性代数, 科学出版社 (1978).
- [10] American Institute of Physics Handbook, 3rd Ed., McGraw-Hill (1972).
- [11] Birch, F., Compressibility, Elastic Constants, 载于 Clark Jr., S. P. Ed., Handbook of Physical Constants. Rev. Ed., Geological Society of America Inc. (1966), 97.
- [12] Smithills, C. J. Ed., Metals Reference Book, 5th Ed., Bittenworths (1976).
- [13] 赵伊君和张志杰, 国防科技大学学报, 3 (1980), 51.
- [14] 赵伊君和张志杰, 国防科技大学学报, 3 (1980), 31.
- [15] 赵伊君和张志杰, 国防科技大学学报, 4 (1980), 43.
- [16] Milstein, F., *J. Appl. Phys.*, 44(1973), 3333.

THE PHYSICO-MECHANICAL CALCULATION OF ELASTIC CONSTANTS, EQUATION OF STATE AND THEORETICAL STRENGTHS OF METALS

Zhao Yijun Zhang Zhijie

(National University of Defense Technology)

Abstract

Methods to calculate elastic constants, equation of state and theoretical tensile and compressive strengths of cubic metals by using Morse potential are discussed. The parameters of Morse potential are evaluated according to observed values of cohesive energy and bulk modulus. Calculated results of several metals are presented.