

简单金属在流体静负载下的力学稳定性 与理论拉伸强度

李 树 山

(中国科学院力学研究所)

提要 本文根据经典力学的稳定性条件, 用膺势方法导出了立方晶体在流体静负载下的经典稳定性判据: $B(P) > 0$, $C'(P) > 0$ 和 $C(P) > 0$. 然后计算了七种简单金属 (Li, Na, K, Rb, Cs, Al 和 Pb) 在零温和流体静负载下的稳定性范围与理论拉伸强度.

一、引 言

晶体的稳定性概念最早是 Born^[1] 在 1940 年提出的. 将晶体能量 E 对广义变量 q_i ($i = 1, \dots, 6$) 展开成 Taylor 级数, 取到二阶项

$$\begin{aligned} \delta E &= \sum_i \left(\frac{\partial E}{\partial q_i} \right)_0 \delta q_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 \delta q_i \delta q_j \\ &= \sum_i P_i \delta q_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} \delta q_i \delta q_j \end{aligned} \quad (1)$$

如果上式中的二次型是正定的, 即

$$\sum_{ij} C_{ij} \delta q_i \delta q_j > 0 \quad (2)$$

则晶体就是稳定的. 式 (2) 称为 Born 稳定性判据. 后来 Fürth^[2] 利用这个判据研究了立方晶体在流体静压下的稳定性. 这时, Born 稳定性判据简化为

$$C_{11} + 2C_{12} > 0, \quad C_{11} - C_{12} > 0, \quad C_{44} > 0 \quad (3)$$

近几年, Milstein 等人^[3,4] 详细研究了立方晶体在流体静负载 P 下的稳定性问题. 他们根据经典力学的稳定性条件, 利用有心力近似 $E = \frac{1}{2} \sum \phi(r^i)$ 导出了经典稳定性判据

$$k(P) > 0, \quad \mu(P) > 0, \quad \mu'(P) > 0 \quad (4)$$

其中 k 是体积模量, μ 和 μ' 是通常的剪切模量, 三者都用 Morse 势进行计算^[5,6]. 为方便起见, 本文中这三个量将改用 Fuchs 定义的符号 B , C' 和 C . Milstein 等人^[7] 还比较了两种稳定性判据的区别. 他们指出, 当 $P = 0$ 时, 式 (3) 和式 (4) 是等价的, 但当 $P \neq 0$ 时, 二者将给出不同的稳定性范围. 而且由于 Born 稳定性判据在负载下依赖于广义坐标的选取, 所以它给出的稳定性范围是不确定的. 而经典稳定性判据在负载下是坐标不变的, 因而它给出的稳定性范围是完全确定的.

本文于 1982 年 3 月 20 日收到.

众所周知,有心力近似(如 Morse 势等)由于受到 Cauchy 关系的限制,在计算晶体的弹性常数上误差是相当大的^[8,9],因而用它来计算晶体的稳定性范围自然也会带来很大偏差. 我们在文献[10]中用膺势方法计算了简单金属的弹性常数,结果与实验值符合得还比较好. 本文根据经典力学的稳定性条件,用膺势方法导出了和式(4)相同的经典稳定性判据

$$B(P) > 0, \quad C'(P) > 0, \quad C(P) > 0 \quad (5)$$

其中 B , C' 和 C 用膺势方法进行计算^[10], 这就克服了有心力近似的缺点, 不再受 Cauchy 关系的限制, 因而将会大大改善晶体稳定性范围的计算.

Milstein 等人^[11-13] 和赵伊君等人^[16] 利用 Born 稳定性判据与 Morse 势计算了若干种金属在单轴负载下的理论强度, 本文则试图利用经典稳定性判据与膺势方法考察简单金属在流体静负载下的理论强度. 本文共计算了七种简单金属在零温和流体静负载下的稳定性范围和理论拉伸强度.

二、经典稳定性条件与晶体的理论强度

在经典力学中,所谓一块晶体是稳定的,就是说对于所选择的一组广义变量任意微小的变化,晶体内能的增加减去外力所做的功都是正的. 这里只需要假定: 外力是保守的, 外力所做的功仅仅是广义变量的函数.

令 δE 和 δu 分别表示单位未形变体积的晶体内能的增加和外力所做的功, 则稳定性判据的代数表达式为

$$\delta E - \delta u > 0 \quad (6)$$

当 $\delta E - \delta u < 0$ 时,晶体的稳定性就破坏了. 在流体静负载下,晶体所受到的压力或者拉力是恒定的. 当 $\delta E - \delta u = 0$ 时,晶体所受到的这个恒定外力的大小就是晶体的理论强度,如果是压力,称之为理论压缩强度,如果是拉力,则称之为理论拉伸强度.

三、用 Milstein 变量表示晶体的体积与能量

Milstein^[11] 用六个独立变量 $a_i (i = 1, \dots, 6)$ 来描述立方晶格的晶胞, 其中 a_1, a_2 和 a_3 是晶胞的三个边, a_4, a_5 和 a_6 是这些边之间的夹角, 如图 1 所示. 对于形变前的晶胞, $a_1 = a_2 = a_3 = a_0$, $a_4 = a_5 = a_6 = \frac{\pi}{2}$, a_0 是形变前的晶格常数. 形变前的晶胞体积 $V_0 = a_0^3$. 如果晶体发生了一个微小的均匀形变, 那末在一般情况下, a_i 就变成

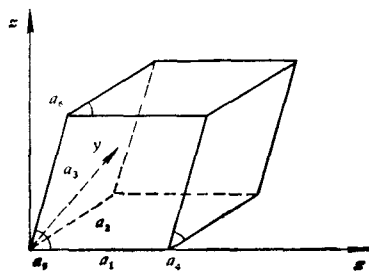


图 1 立方晶格的晶胞

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a_0 + \delta a_1 \\ a_2 &= a_0 + \delta a_2 \\ a_3 &= a_0 + \delta a_3 \\ a_4 &= \frac{\pi}{2} + \delta a_4 \\ a_5 &= \frac{\pi}{2} + \delta a_5 \\ a_6 &= \frac{\pi}{2} + \delta a_6 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

为了得到 Milstein 形变张量,我们取直角坐标系的 x 轴与 a_1 边重合, xy 平面与 a_1a_2 平面重合,而坐标原点与晶胞的一个顶点重合,如图 1 所示. 由解析几何可以得到晶胞三个边的矢量表示式

$$\mathbf{a}_1 = a_1 \mathbf{i} \quad (8)$$

$$\mathbf{a}_2 = a_2 \cos a_6 \mathbf{i} + a_2 \sin a_6 \mathbf{j} \quad (9)$$

$$\mathbf{a}_3 = a_3 \cos a_6 \mathbf{i} + \frac{a_3(\cos a_4 - \cos a_5 \cos a_6)}{\sin a_6} \mathbf{j} + \frac{a_3 \sqrt{Q}}{\sin a_6} \mathbf{k} \quad (10)$$

其中

$$Q = 1 - \cos^2 a_4 - \cos^2 a_5 - \cos^2 a_6 + 2 \cos a_4 \cos a_5 \cos a_6 \quad (11)$$

于是立刻可以得到 Milstein 形变张量 (α_{ij}) 和晶胞体积 V

$$(\alpha_{ij}) = \begin{bmatrix} \frac{a_1}{a_0} & \frac{a_2}{a_0} \cos a_6 & \frac{a_3}{a_0} \cos a_5 \\ 0 & \frac{a_2}{a_0} \sin a_6 & \frac{a_3(\cos a_4 - \cos a_5 \cos a_6)}{a_0 \sin a_6} \\ 0 & 0 & \frac{a_3 \sqrt{Q}}{a_0 \sin a_6} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$V = \mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) = a_1 a_2 a_3 \sqrt{Q} \quad (13)$$

利用形变张量,可以得到立方晶格中任一晶格点与原点之间距离的平方

$$r_l^2 = \frac{1}{4} (l_1^2 a_1^2 + l_2^2 a_2^2 + l_3^2 a_3^2 + 2l_1 l_2 a_1 a_2 \cos a_6 + 2l_1 l_3 a_1 a_3 \cos a_5 + 2l_2 l_3 a_2 a_3 \cos a_4) \quad (14)$$

其中 l_1 、 l_2 和 l_3 是确定晶格点的整数. 由晶胞体积可以求得原子体积

$$Q = Z \frac{4\pi}{3} r_s^3 = \frac{V}{2\alpha} \quad (15)$$

其中 Z 是原子价, α 是结构常数, 对于 bcc 晶格, $\alpha = 1$, 对于 fcc 晶格, $\alpha = 2$. 于是得到

$$r_s = \left(\frac{3}{8\pi\alpha} \right)^{1/3} a_1^{1/3} a_2^{1/3} a_3^{1/3} Q^{1/6} \quad (16)$$

在文献 [10] 中,我们已经给出了用赝势方法得到的晶体能量的表达式,这部分细节不再重述,有关符号的意义可参看文献 [10]. 需要强调指出的一点是,本文和文献 [10]

中的下标 0 虽然均指微小形变前的状态,但在文献[10]中指的是零温零压状态,而本文指的是零温恒定负载下的状态。例如,本文中 a_0 指的是零温恒定负载下的晶格常数,因而它是负载 P 的函数。单位未形变体积的晶体能量的膺势表达式为

$$E = E_{cg} + E_0 + E_{cw} + E_{bs} = E_v(r_s) + E_{cw} + \frac{1}{Q_0} \sum_x F(x, r_s) \quad (17)$$

其中

$$\mathbf{x} = \left(\frac{\pi}{6\alpha z} \right)^{1/3} \left(\frac{Q}{Q_0} \right)^{1/3} (\beta_{ij}) \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix} \quad (18)$$

倒易空间的 Milstein 形变张量 (β_{ij}) 为

$$(\beta_{ij}) = (\alpha_{ij}^*)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{a_0}{a_1} & 0 & 0 \\ -\frac{a_0}{a_1} \frac{\cos a_4 \cos a_5 - \cos a_6}{\sin a_6 \sqrt{Q}} & \frac{a_0}{a_2} \frac{1}{\sin a_6} & 0 \\ \frac{a_0(\cos a_4 \cos a_6 - \cos a_5)}{a_1 \sin a_6 \sqrt{Q}} & \frac{a_0(\cos a_5 \cos a_6 - \cos a_4)}{a_2 \sin a_6 \sqrt{Q}} & \frac{a_0 \sin a_6}{a_3 \sqrt{Q}} \end{bmatrix} \quad (19)$$

将(15)和(19)式代入(18)式,得到

$$\begin{aligned} \mathbf{x} = & \left(\frac{\pi}{6\alpha z} \right)^{1/3} Q^{-1/3} \left[\frac{(a_2 a_3)^{2/3}}{a_1^{4/3}} m_1^2 \sin^2 a_4 + \frac{(a_1 a_3)^{2/3}}{a_2^{4/3}} m_2^2 \sin^2 a_5 + \frac{(a_1 a_2)^{2/3}}{a_3^{4/3}} m_3^2 \sin^2 a_6 \right. \\ & + \frac{2a_3^{2/3}}{(a_1 a_2)^{1/3}} m_1 m_2 (\cos a_4 \cos a_5 - \cos a_6) + \frac{2a_2^{2/3}}{(a_1 a_3)^{1/3}} m_1 m_3 (\cos a_4 \cos a_6 - \cos a_5) \\ & \left. + \frac{2a_1^{2/3}}{(a_2 a_3)^{1/3}} m_2 m_3 (\cos a_5 \cos a_6 - \cos a_4) \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (20)$$

E_{cw} 的表达式为

$$E_{cw} = \frac{z^2}{Q_0} \left(\sum_i \frac{1}{(r_i^2)^{1/2}} - \frac{2\alpha}{a_0^3} \iiint \frac{d\mathbf{r}}{(r^2)^{1/2}} \right) \quad (21)$$

式(14)已给出 r_i^2 的表达式,类似可得

$$r^2 = \frac{1}{4} (u_1^2 a_1^2 + u_2^2 a_2^2 + u_3^2 a_3^2 + 2u_1 u_2 a_1 a_2 \cos a_6 + 2u_1 u_3 a_1 a_3 \cos a_5 + 2u_2 u_3 a_2 a_3 \cos a_4) \quad (22)$$

$$d\mathbf{r} = \left(\frac{a_0}{2} \right)^3 du_1 du_2 du_3$$

至此,能量 E 的各项均已表示为 Milstein 变量的复合函数。

四、稳定性判据的推导

将式(13)展开成 Taylor 级数,取到二阶项

$$\begin{aligned} \delta v = & a_0^3 (\delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3) + \frac{1}{2} \{ 2a_0 (\delta a_1 \delta a_2 + \delta a_1 \delta a_3 + \delta a_2 \delta a_3) \\ & - a_0^3 [(\delta a_4)^2 + (\delta a_5)^2 + (\delta a_6)^2] \} \end{aligned} \quad (23)$$

令 P 表示晶体所受到的恒定外力, $P > 0$ 表示压力, $P < 0$ 表示拉力。于是在微小形变

下,单位未形变体积中外力所做的功为

$$\begin{aligned}\delta u &= -\frac{P\delta V}{V_0} = -\frac{P}{a_0}(\delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3) + \frac{1}{2}\left\{-\frac{2P}{a_0^2}(\delta a_1\delta a_2 + \delta a_1\delta a_3\right. \\ &\quad \left.+ \delta a_2\delta a_3) + P[(\delta a_4)^2 + (\delta a_5)^2 + (\delta a_6)^2]\right\} \\ &= -\frac{P}{a_0}(\delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3) + \frac{1}{2}\left\{-\frac{2P}{3a_0^2}(\delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3)^2 + \frac{P}{3a_0^2}[(\delta a_1\right. \\ &\quad \left.- \delta a_2)^2 + (\delta a_1 - \delta a_3)^2 + (\delta a_2 - \delta a_3)^2] + P[(\delta a_4)^2 + (\delta a_5)^2 + (\delta a_6)^2]\right\}\end{aligned}\quad (24)$$

将晶体能量 E 也展开成 Taylor 级数,取到二阶项

$$\begin{aligned}\delta E &= \sum_i \left(\frac{\partial E}{\partial a_i}\right)_0 \delta a_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j}\right)_0 \delta a_i \delta a_j \\ &= \sum_i P_i \delta a_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} B_{ij} \delta a_i \delta a_j\end{aligned}\quad (25)$$

根据立方晶体的对称性,只有三个独立的二阶系数 B_{11} , B_{22} 和 B_{44} , 所以 δE 可以写为

$$\begin{aligned}\delta E &= \sum_i P_i \delta a_i + \frac{1}{2} \{B_{11}[(\delta a_1)^2 + (\delta a_2)^2 + (\delta a_3)^2] + 2B_{12}(\delta a_1\delta a_2 + \delta a_1\delta a_3 \\ &\quad + \delta a_2\delta a_3) + B_{44}[(\delta a_4)^2 + (\delta a_5)^2 + (\delta a_6)^2]\} \\ &= \sum_i P_i \delta a_i + \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{3} (B_{11} + 2B_{12})(\delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3)^2 + \frac{1}{3} (B_{11} \right. \\ &\quad \left. - B_{12})[(\delta a_1 - \delta a_2)^2 + (\delta a_1 - \delta a_3)^2 + (\delta a_2 - \delta a_3)^2] + B_{44}[(\delta a_4)^2 \right. \\ &\quad \left. + (\delta a_5)^2 + (\delta a_6)^2] \right\}\end{aligned}\quad (26)$$

根据复合函数微分法则,将式(17)中各项对 Milstein 变量求导,可得到 P_i 和 B_{ij} . 在文献[10]中,我们已经用三种形变参数(ν , γ_i 和 ϵ_i)给出了晶体的压力 P 及 Fuchs 二阶弹性常数的表达式,这里用下标 0 表示微小形变前具有恒定负载 P 的状态.

$$\begin{aligned}P &= -\left(\frac{\partial E}{\partial \nu}\right)_0 = -\frac{1}{3} r_{s0} \left(\frac{\partial E}{\partial r_s}\right)_0 \\ B(P) &= \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \nu^2}\right)_0 = \frac{1}{9} r_{s0}^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial r_s^2}\right)_0 - \frac{2}{9} r_{s0} \left(\frac{\partial E}{\partial r_s}\right)_0 \\ C'(P) &= \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon_1^2}\right)_0, \quad C(P) = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial r_1^2}\right)_0\end{aligned}\quad (27)$$

下面将把 P_i 和 B_{ij} 与 (27) 式联系起来. P_i 很容易求,只给出最后结果.

$$\begin{aligned}P_1 &= P_2 = P_3 = \frac{1}{a_0} \left(\frac{\partial E}{\partial \nu}\right)_0 = -\frac{P}{a_0} \\ P_4 &= P_5 = P_6 = 0 \\ \sum_i P_i \delta a_i &= -\frac{P}{a_0} (\delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3)\end{aligned}\quad (28)$$

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial a_1^2}\right)_0 = \frac{1}{a_0^2} \left[\frac{1}{9} r_{s0}^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial r_s^2}\right)_0 - \frac{2}{9} r_{s0} \left(\frac{\partial E}{\partial r_s}\right)_0 \right] = \frac{1}{a_0^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \nu^2}\right)_0 \quad (29)$$

$$\left(\frac{\partial^3 E_v}{\partial a_1 \partial a_2}\right)_0 = \frac{1}{a_0^2} \left[\frac{1}{9} r_{s0}^2 \left(\frac{\partial^3 E_v}{\partial r_s^2}\right)_0 + \frac{1}{9} r_{s0} \left(\frac{\partial E_v}{\partial r_s}\right)_0 \right] = \frac{1}{a_0^2} \left[\left(\frac{\partial^3 E_v}{\partial v^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial E_v}{\partial v}\right)_0 \right] \quad (30)$$

$$\left(\frac{\partial^2 E_v}{\partial a_4^2}\right)_0 = -\frac{1}{3} r_{s0} \left(\frac{\partial E_v}{\partial r_s}\right)_0 = -\left(\frac{\partial E_v}{\partial v}\right)_0 \quad (31)$$

$$\left(\frac{\partial^3 E_{cw}}{\partial a_1^2}\right)_0 = \frac{2z^2}{a_0^3 Q_0} \left(3S_3^{(2)} - \frac{1}{3} S_1^{(0)} \right) = \frac{1}{a_0^2} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\partial^2 E_{cw}}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2 E_{cw}}{\partial v^2}\right)_0 \right] \quad (32)$$

$$\left(\frac{\partial^3 E_{cw}}{\partial a_1 \partial a_2}\right)_0 = \frac{2z^2}{a_0^3 Q_0} 3S_3^{(1,1)} = \frac{1}{a_0^2} \left[-\frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 E_{cw}}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2 E_{cw}}{\partial v^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial E_{cw}}{\partial v}\right)_0 \right] \quad (33)$$

$$\left(\frac{\partial^3 E_{cw}}{\partial a_4^2}\right)_0 = \frac{2z^2}{a_0^3 Q_0} 3S_3^{(1,1)} = \left(\frac{\partial^3 E_{cw}}{\partial r_1^2}\right)_0 - \left(\frac{\partial E_{cw}}{\partial v}\right)_0 \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 E_{bs}}{\partial a_1^2}\right)_0 &= \frac{1}{a_0^3 Q_0} \sum_x \left\{ \frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{6\alpha z}\right)^{4/3} \left[\frac{A_3(x)}{x^2} \frac{\partial^3 F}{\partial x^2} + \frac{A_4(x)}{x^3} \frac{\partial F}{\partial x} \right]_0 \right. \\ &\quad \left. + A_0(x) \left[\frac{1}{9} r_{s0}^2 \left(\frac{\partial^3 F}{\partial r_s^2}\right)_0 - \frac{2}{9} r_{s0} \left(\frac{\partial F}{\partial r_s}\right)_0 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{a_0^2} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 E_{bs}}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^3 E_{bs}}{\partial v^2}\right)_0 \right] \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 E_{bs}}{\partial a_1 \partial a_2}\right)_0 &= \frac{1}{a_0^3 Q_0} \sum_x \left\{ -\frac{1}{6} \left(\frac{\pi}{6\alpha z}\right)^{4/3} \left[\frac{A_3(x)}{x^2} \frac{\partial^3 F}{\partial x^2} + \frac{A_4(x)}{x^3} \frac{\partial F}{\partial x} \right]_0 \right. \\ &\quad \left. + A_0(x) \left[\frac{1}{9} r_{s0}^2 \left(\frac{\partial^3 F}{\partial r_s^2}\right)_0 + \frac{1}{9} r_{s0} \left(\frac{\partial F}{\partial r_s}\right)_0 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{a_0^2} \left[-\frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 E_{bs}}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2 E_{bs}}{\partial v^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial E_{bs}}{\partial v}\right)_0 \right] \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 E_{bs}}{\partial a_4^2}\right)_0 &= \frac{1}{Q_0} \sum_x \left\{ \left(\frac{\pi}{6\alpha z}\right)^{4/3} \left[\frac{A_1(x)}{x^2} \frac{\partial^3 F}{\partial x^2} + \frac{A_2(x)}{x^3} \frac{\partial F}{\partial x} \right]_0 \right. \\ &\quad \left. - \frac{A_0(x)}{3} r_{s0} \left(\frac{\partial F}{\partial r_s}\right)_0 \right\} = \left(\frac{\partial^2 E_{bs}}{\partial r_1^2}\right)_0 - \left(\frac{\partial E_{bs}}{\partial v}\right)_0 \end{aligned} \quad (37)$$

将 (29)–(37) 式代入 B_{ij} 表达式, 并利用 (27) 式, 得到

$$B_{11} = \left(\frac{\partial^3 E}{\partial a_1^2}\right)_0 = \frac{1}{a_0^2} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 E}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^3 E}{\partial v^2}\right)_0 \right] = \frac{1}{a_0^2} \left[\frac{4}{3} C'(P) + B(P) \right] \quad (38)$$

$$\begin{aligned} B_{12} &= \left(\frac{\partial^3 E}{\partial a_1 \partial a_2}\right)_0 = \frac{1}{a_0^2} \left[-\frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 E}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial v^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial E}{\partial v}\right)_0 \right] \\ &= \frac{1}{a_0^2} \left[-\frac{2}{3} C'(P) + B(P) - P \right] \end{aligned} \quad (39)$$

$$B_{44} = \left(\frac{\partial^3 E}{\partial a_4^2}\right)_0 = \left(\frac{\partial^3 E}{\partial r_1^2}\right)_0 - \left(\frac{\partial E}{\partial v}\right)_0 = C(P) + P \quad (40)$$

于是,

$$\frac{1}{3} (B_{11} + 2B_{12}) = \frac{1}{a_0^2} \left[B(P) - \frac{2}{3} P \right] \quad (41)$$

$$\frac{1}{3} (B_{11} - B_{12}) = \frac{1}{3a_0^2} [2C'(P) + P] \quad (42)$$

将 (40)–(42) 式和 (28) 式代入 (26) 式, 再将 (26) 式和 (24) 式代入 (6) 式, 得到

$$\delta E - \delta u = \frac{1}{2} \left\{ \frac{B(P)}{a_0^2} (\delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3)^2 + \frac{2C'(P)}{3a_0^2} [(\delta a_1 - \delta a_2)^2 + (\delta a_1 - \delta a_3)^2 + (\delta a_2 - \delta a_3)^2] + C(P)[(\delta a_4)^2 + (\delta a_5)^2 + (\delta a_6)^2] \right\} > 0 \quad (43)$$

于是,上式立刻简化为

$$B(P) > 0, \quad C'(P) > 0, \quad C(P) > 0 \quad (44)$$

这就是在流体静负载下立方晶体的经典稳定性判据。

五、计算结果与讨论

本文根据(44)式计算了七种简单金属(Li, Na, K, Rb, Cs, Al 和 Pb)在零温和流体静负载下的稳定性范围与理论拉伸强度,结果列于表1中。表中 λ 为晶体在零温恒定

表1 计算结果

	λ	P kbar	$B(P)$	$C'(P)$	$C(P)$	稳定性范围	理论拉伸强度 10^9dyn/cm^2
			10^{11}dyn/cm^2				
Li	1.142	-26.20	0.2182	0	0.3820	$\lambda < 1.142$	26.20
	1	0	1.302	0.1446	1.158		
	0.64	1927	49.80	1.004	6.981		
Na	1.184	-13.80	0.03348	0	0.1544	$\lambda < 1.184$	13.80
	1	0	0.6740	0.0868	0.6100		
	0.64	1082	28.24	0.4420	3.004		
K	1.206	-6.338	0	0.00028	0.06259	$\lambda < 1.206$	6.338
	1	0	0.3200	0.0434	0.2860		
	0.64	545.7	14.28	0.1782	1.175		
Rb	1.202	-4.884	0.00095	0	0.04753	$\lambda < 1.202$	4.884
	1	0	0.2483	0.0336	0.2210		
	0.64	429.0	11.27	0.1362	0.8942		
Cs	1.187	-3.531	0.00510	0	0.03613	$\lambda < 1.187$	3.531
	1	0	0.1806	0.0241	0.1600		
	0.64	316.1	8.361	0.1006	0.6610		
Al	1.039	-53.55	3.595	1.861	0	$\lambda < 1.039$	53.55
	1	0	5.973	2.677	3.162		
	0.64	15378	464.4	20.24	110.4		
Pb	1.027	-37.54	4.255	1.632	0	$\lambda < 1.027$	37.54
	1	0	6.404	2.081	1.942		
	0.64	19643	599.1	15.70	100.9		

负载 P 下的晶格常数与零温零压下的晶格常数之比。 $B(P)$, $C'(P)$ 和 $C(P)$ 的计算见文献[10], 只要将其中的 r_{j0} 看作是 P 的函数即可。但计算中的可调参数仍用零温零压下二阶弹性常数 C_{44} 和晶格常数的实验值来确定。

计算结果表明,在膺势理论的适用范围内,这七种简单金属对流体静压缩($\lambda < 1$)是稳定的。当 $\lambda > 1$ 时,存在一个拉伸极限值,超过这一限度,晶体的稳定性就破坏了。由此可得到晶体在零温下的理论拉伸强度。由表 1 可以看到这七种金属理论拉伸强度的一个简单规律,即随着金属弹性常数 C_{44} (零温零压下)的增大,其理论拉伸强度也增大,Cs 为最小,Al 为最大。

参 考 文 献

- [1] Born, M., Proc. Cambridge Philos. Soc., 36(1940), 160.
- [2] Fürth, R., Proc. Cambridge Philos. Soc., 37(1941), 177.
- [3] Hill, R., Milstein, F., Phys. Rev., B15(1977), 3087.
- [4] Milstein, F., Hill, R., J. Mech. Phys. Solids, 27(1979), 255.
- [5] Milstein, F., Hill, R., J. Mech. Phys. Solids, 25(1977), 457.
- [6] Milstein, F., Hill, R., J. Mech. Phys. Solids, 26(1978), 213.
- [7] Milstein, F., Hill, R., Phys. Rev. Lett., 43(1979), 1411.
- [8] Girifalco, L. A., Weizer, V. G., Phys. Rev., 114(1959), 687.
- [9] 赵伊君、张志杰,国防科技大学学报,3(1980),51.
- [10] 李树山、林光海,物理学报,31(1982),38.
- [11] Milstein, F., Phys. Rev., B5(1971), 1130.
- [12] Milstein, F., J. Appl. Phys., 44(1973), 3833.
- [13] Huang, K., Milstein, F., Baldwin, J. A., Jr., Phys. Rev., B10(1974), 3635.
- [14] Milstein, F., Huang, K., Phys. Rev., B18(1978), 2529.
- [15] Milstein, F., Hill, R., Huang, K., Phys. Rev., B21(1980), 4282.
- [16] 赵伊君、张志杰,国防科技大学学报,4(1980),43.

MECHANICAL STABILITY AND THEORETICAL TENSILE STRENGTH FOR SIMPLE METALS UNDER HYDROSTATIC LOADING

Li Shushan

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

Abstract

Based on the condition of classical mechanical Stability the stability criterion for cubic crystals under hydrostatic loading is derived by means of the pseudopotential method. It is as follows: $B(P) > 0$, $C'(P) > 0$ and $C(P) > 0$. Then the ranges of stability and theoretical tensile strength of seven simple metals (Li, Na, K, Rb, Cs, Al and Pb) at 0°K and under hydrostatic loading are calculated.