

# 碱金属在 [110] 单轴应力下的理论强度

李 树 山

(中国科学院力学研究所)

我们知道,晶须的强度远远大于大晶体的强度<sup>[1]</sup>,很可能接近于理想晶体的理论强度。而晶须的轴线则通常平行于晶体的三个主要方向 [100], [110] 或 [111]<sup>[2]</sup>。因此当计算理想晶体在单轴应力下的理论强度时,也必须考虑不同的应力方向。七十年代, Milstein 等人<sup>[3-6]</sup>利用 Morse 势和 Born 稳定性判据计算了立方晶体分别在 [100], [110] 和 [111] 单轴应力下的理论强度。由于有心力近似受到 Cauchy 关系的限制,我们在文献 [7] 中按照 Born 稳定性判据,采用赝势方法计算了简单金属在 [100] 单轴应力下的理论强度。本文则进一步计算碱金属在 [110] 单轴应力下的理论强度。

## 1. 弹性常数的坐标变换

通常的体心立方 (bcc) 晶体 (晶格常数为  $a$ ), 当坐标系在  $xy$  平面上绕  $z$  轴旋转  $\frac{\pi}{4}$  时,我们可以把它看作面心四方 (fct) 晶体 ( $b_1 = b_2 = \sqrt{2} b_3, b_3 = a$ )。图 1 画出了四个 bcc 晶胞和一个 fct 晶胞。 $b_1, b_2, \dots, b_6$  是 fct 晶胞的 Milstein 变量。由图 1 显

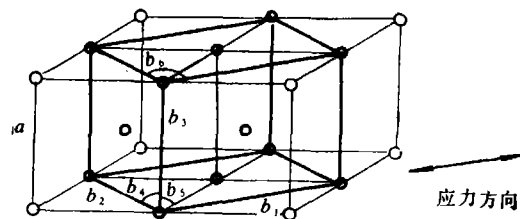


图 1 四个 bcc 晶胞和一个 fct 晶胞

然可以看出, bcc 晶胞的 [110] 方向就是 fct 晶胞的  $b_1$  轴方向。当 fct 晶胞在  $b_1$  轴方向施加单轴应力时,尽管  $b_1, b_2$  和  $b_3$  的长度改变了,但三个晶轴始终是保持正交的。考虑一个在  $xy$  平面上绕  $z$  轴旋转  $\frac{\pi}{4}$  的坐标变换,其变换矩阵为

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

本文于 1984 年 11 月 19 日收到。

固体中一点的应力状态和应变可以用应力张量 ( $\sigma_{ij}$ ) 和 Lagrange 应变张量 ( $\eta_{ij}$ ) 表示。令上标  $i$  和  $c$  分别表示四方晶体和立方晶体, 亦即新老坐标系, 则利用张量的坐标变换公式以及四方晶体与立方晶体的广义 Hooke 定律, 就可以得到两种晶格弹性常数之间的关系式。

一阶弹性常数:

$$C_i^i = C_i^c = C_i^f$$

二阶弹性常数:

$$C_{11}^i = \frac{1}{2} (C_{11}^c + C_{12}^c) + C_{44}^c,$$

$$C_{12}^i = \frac{1}{2} (C_{11}^c + C_{12}^c) - C_{44}^c,$$

$$C_{66}^i = \frac{1}{2} (C_{11}^c - C_{12}^c),$$

$$C_{33}^i = C_{11}^c, C_{13}^i = C_{12}^c, C_{23}^i = C_{44}^c$$

三阶和四阶弹性常数从略。

## 2. 在单轴应力下的理论强度

对于在  $b_1$  轴方向单轴负载下的正交晶体, Born 稳定性条件可以化简为

$$B_{66} > 0, \quad B_{55} > 0$$

$$B_{44} > 0, \quad B_{33} > 0$$

$$B_{22}B_{33} - B_{23}^2 > 0$$

$$B_{11}B_{22}B_{33} + 2B_{12}B_{13}B_{23} - B_{11}B_{23}^2 - B_{22}B_{13}^2 - B_{33}B_{12}^2 > 0$$

其中  $B_{ij}$  是二阶 Milstein 弹性常数。假定 fct 晶体在沿  $b_1$  轴方向施加的单轴应力  $\sigma$  作用下形变,  $P_i$  是一阶 Milstein 弹性常数, 则

$$P_1 = \left( \frac{\partial E}{\partial b_1} \right)_0 = \frac{\sigma}{b_1}$$

$$P_2 = P_3 = P_4 = P_5 = P_6 = 0$$

于是  $P_i$  和  $B_{ij}$  均可表示为  $b_1, b_2$  和  $b_3$  的函数。应力  $\sigma$  与  $b_1, b_2$  和  $b_3$  的关系由方程组

$$b_1 P_1(b_1, b_2, b_3) = \sigma$$

$$P_2(b_1, b_2, b_3) = 0$$

$$P_3(b_1, b_2, b_3) = 0$$

确定。沿  $b_1$  轴方向的正应变为

$$\varepsilon = \frac{b_1 - b_{10}}{b_{10}}$$

将应变  $\varepsilon$  的绝对值逐渐增大, 直到稳定性判据的六个不等式中有一个变为等式。与此临界应变  $\varepsilon$  相对应的临界应力  $\sigma$ , 我们称之为在单轴应力下的理论强度。当  $\sigma > 0$  时, 称之为理论拉伸强度, 当  $\sigma < 0$  时, 称之为理论压缩强度。

## 3. 四方晶体的晶格和

我们知道, 立方晶体的 Ewald 能及其各阶导数均可用文献 [8] 中定义的晶格和  $S_0^{(m)}$ ,

$S_n^{(l,m)}$  与  $S_n^{(k,l,m)}$  表示出来<sup>[7]</sup>, 而四方晶体的这些 Ewald 项则可以用本文定义的晶格和  $T_n^{(k,l,m)}$  表示出来.

$$T_n^{(k,l,m)} = \sum' \frac{(\lambda l_1)^{2k} (\lambda l_2)^{2l} l_3^{2m}}{(\lambda^2 l_1^2 + \lambda^2 l_2^2 + l_3^2)^{n/2}} - \frac{\beta}{4} \iiint \frac{(\lambda u_1)^{2k} (\lambda u_2)^{2l} u_3^{2m} du_1 du_2 du_3}{(\lambda^2 u_1^2 + \lambda^2 u_2^2 + u_3^2)^{n/2}}$$

该晶格和按 fct 结构计算, 其中  $\lambda = \sqrt{2}$ ,  $\beta = 2$ . 利用各阶弹性常数的坐标变换关系式, 可以得到未知晶格和  $T_n^{(k,l,m)}$  与已知晶格和的关系.

$$T_1^{(0,0,0)} = S_1^{(0)}, T_3^{(1,0,0)} = T_3^{(0,0,1)} = \frac{1}{3} S_1^{(0)}$$

$$T_5^{(2,0,0)} = \frac{1}{2} (S_5^{(2)} + 3S_5^{(1,1)}), T_5^{(1,1,0)} = \frac{1}{2} (S_5^{(2)} - S_5^{(1,1)})$$

$$T_5^{(0,0,2)} = S_5^{(2)}, T_5^{(1,0,1)} = S_5^{(1,1)}$$

$$T_7^{(3,0,0)} = \frac{1}{4} (S_7^{(3)} + 15S_7^{(2,1)}), T_7^{(2,1,0)} = \frac{1}{4} (S_7^{(3)} - S_7^{(2,1)})$$

$$T_7^{(2,0,1)} = \frac{1}{2} (S_7^{(2,1)} + 3S_7^{(1,1,1)}), T_7^{(1,1,1)} = \frac{1}{2} (S_7^{(2,1)} - S_7^{(1,1,1)})$$

$$T_7^{(0,0,3)} = S_7^{(3)}, T_7^{(1,0,2)} = S_7^{(2,1)}$$

$$T_9^{(4,0,0)} = \frac{1}{8} (S_9^{(4)} + 35S_9^{(3,2)} + 28S_9^{(2,2)})$$

$$T_9^{(3,1,0)} = \frac{1}{8} (S_9^{(4)} - 5S_9^{(2,2)} + 4S_9^{(3,1)})$$

$$T_9^{(2,2,0)} = \frac{1}{8} (S_9^{(4)} + 3S_9^{(2,2)} - 4S_9^{(3,1)})$$

$$T_9^{(3,0,1)} = \frac{1}{4} (S_9^{(3,1)} + 15S_9^{(2,1,1)}), T_9^{(2,1,1)} = \frac{1}{4} (S_9^{(3,1)} - S_9^{(2,1,1)})$$

$$T_9^{(2,0,2)} = \frac{1}{2} (S_9^{(2,2)} + 3S_9^{(2,1,1)}), T_9^{(1,1,2)} = \frac{1}{2} (S_9^{(2,2)} - S_9^{(2,1,1)})$$

$$T_9^{(0,0,4)} = S_9^{(4)}, T_9^{(1,0,3)} = S_9^{(3,1)}$$

#### 4. 计算结果与讨论

本文计算了五种碱金属 (Li, Na, K, Rb 和 Cs) 在零温和 [110] 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 1 中. 计算中使用的赝势模

表 1 理论强度计算结果

	[110] 单轴拉伸		[110] 单轴压缩	
	$\sigma$ ( $10^9 \text{dyn/cm}^2$ )	$\epsilon$ (%)	$\sigma$ ( $10^9 \text{dyn/cm}^2$ )	$\epsilon$ (%)
Li	4.020	3.09	-1.192	-2.53
Na	2.627	3.59	-0.7530	-2.91
K	1.359	3.87	-0.3667	-3.11
Rb	1.046	3.89	-0.2684	-3.11
Cs	0.7364	3.88	-0.1703	-3.07

型及其势参数的确定方法同文献 [8]。fcc 晶胞在临界应变下的晶格常数列于表 2 中。与零负载下的晶格常数比较表明, 当  $b_1$  轴拉伸时,  $b_2$  也随着有少许伸长, 而  $b_3$  则收缩较多。当  $b_1$  轴压缩时,  $b_2$  也随着少许缩短, 而  $b_3$  则伸长较多。与在 [100] 单轴应力下的理论强度计算结果<sup>[7]</sup>比较表明, 碱金属在 [110] 单轴应力下的理论拉伸强度大约提高 13~40 倍, 而其理论压缩强度仅减小 50% 左右。尽管现在尚未见到测量碱金属晶须拉伸强度的报道, 但本文的计算结果或许可以定性地表明, 如果控制晶须的生长条件, 使之沿着 [110] 方向生长, 则有可能得到强度比较大的晶须。

表 2 fcc 晶胞在临界应变下的晶格常数 (Å)

	零 负 载			临界拉伸应变			临界压缩应变		
	$b_{10}$	$b_{20}$	$b_{30}$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_1$	$b_2$	$b_3$
Li	4.921	4.921	3.480	5.073	4.992	3.363	4.797	4.827	3.632
Na	5.975	5.975	4.225	6.189	6.068	4.071	5.801	5.847	4.435
K	7.389	7.389	5.225	7.675	7.509	5.025	7.160	7.219	5.506
Rb	7.898	7.898	5.585	8.206	8.027	5.369	7.653	7.713	5.889
Cs	8.549	8.549	6.045	8.881	8.692	5.808	8.287	8.345	6.378

## 考 文 献

- [1] Brenner, S. S., *J. Appl. Phys.*, 27(1956), 1484.  
 [2] Brenner, S. S., *J. Appl. Phys.*, 28(1957), 1023.  
 [3] Milstein, F., *Phys. Rev.*, B3(1971), 1130.  
 [4] Milstein, F., *J. Appl. Phys.*, 44(1973), 3833.  
 [5] Milstein, F., K. Huang, *Phys. Rev.*, B18(1978), 2529.  
 [6] Milstein, F., R. Hill, K. Huang, *Phys. Rev.*, B21(1980), 4282.  
 [7] 李树山, 物理学报, 33(1984), 1501.  
 [8] 李树山、林光海, 物理学报, 31(1982), 38.

## THEORETICAL STRENGTHS FOR ALKALI METALS UNDER [110] UNIAXIAL STRESS

Li Shushan

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

### Abstract

The theoretical tensile and compressive strengths for five alkali metals (Li, Na, K, Rb and Cs) at 0 K and under [110] uniaxial stress are calculated using the pseudopotential method and the Born stability criteria.