

金属缺陷与力学性质理论研究的进展

龙期威

(中国科学院金属研究所)

金属缺陷和金属力学行为研究的主要对象是结构材料。结构材料在生产和技术发展中的需要量大,而且面广。所以,缺陷和力学行为研究有广泛的社会需要。随着生产技术水平的提高,对结构材料提出了新的要求,同时也需要从更高水平来认识。然而,近二十年来,物理学科中的这个分支领域的发展却远赶不上生产技术发展的实际需要。

从生产技术发展的需要上看,有两类性质不同的研究问题:一类是高强度高韧性特轻的高性能结构材料的物理研究,或者叫做新材料物理研究;另一类是常规材料(如钢等)的力学行为的现代物理研究。无论是前者或是后者,其重大进展都将对新的技术革命或当前生产技术间接地或直接地起推动作用。过去是以“提高强度”和“合金的理论设计”为主要目标来研究金属的结构和性能的关系。七十年代又从充分发挥材料的潜力和节约材料为着眼点,开展了力学行为的研究,如断裂和形变的微观机制和动力学过程等。

一、物理学的新进展丰富了金属物理的现代内容

金属缺陷与力学性质是金属物理学的主要研究内容之一。近代物理的发展日新月异。场论、统计物理与凝聚态物理的发展给传统的金属物理提供了新的理论基础。但人们很少看到近代物理的前沿知识在此领域中应用;另一方面,现代物理冶金的发展又几乎把传统金属物理的内容都包括进去。这样,在两个邻近学科领域的迅速发展过程中,形成了一个空白领域——凝聚态物理的金属分支(金属物理的现代

内容)。它的内容应当是近代物理的前沿知识在金属中的应用,是物理学的邻近学科——冶金学的边缘领域。

这个发展趋势,早在1964年在我国东北召开的“金属电子论”和“位错理论”两个学术会上就有预料,国外的一些科学家也早就看到了这一点。然而,社会需要和现实之间还有一定的差距,学科的发展有它自己相对独立的规律。随着近代场论、统计物理与凝聚态理论向缺陷、合金、扩散和相变等问题的渗透,国外有些固体物理学家和理论物理学家认为,填补这个空白领域的条件具备了^[1]。

1974年和1981年在意大利召开了第61次和第82次费米国际物理讨论会^[2,3]。1982年又在梯里亚斯特国际理论物理中心举办了为期一个月的“固体的力学行为”研究班。自此以后,国际理论物理中心认为很有必要每隔三年左右组织一次有关力学行为的讨论班。1985年将举办第二次。下面,仅就近年参加这方面学术活动所了解到的和本人接触到的一些工作做一简单介绍以反映这方面的研究动向。

二、场论、位错和断裂理论

位错理论和其它认识过程的发展一样,正在向广度和深度两个方向发展。位错理论向广度方向发展主要探讨共性和特性之间的关系。把位错的普遍概念当做共性和东西,可以推广应用到各种具体物质(如金属、超导体、半导体、绝缘体等)的具体物理过程(如形变、断裂、相变、导电、导热及发光等)。把位错当做特性的东西,则可以探讨位错应力场和更普适的物质场的理论的联系。

1. 位错理论向实际应用发展的方向之一是用位错模型探讨固体的断裂过程。这方面的内容文献[4]已略有介绍,这里不再重复。较详细和全面的介绍参见文献[5]。这个方向的工作可以直接结合生产需要^[6,7],应当大力加强。值得提出的是,1983年11月北京国际断裂力学学术讨论会上反映出一个正在兴起的动向,即裂纹顶端无位错区的实验观测现象发现之后^[8],对这一现象的理论解释和对弹塑性断裂力学分析的影响问题。有的人认为无位错区的形成主要是由于位错在裂纹顶端的象力所造成的^[9]。有的人讨论了裂纹顶端正位错对局域应力强度因子的屏蔽作用和无位错区的反屏蔽作用^[10]。人们早就知道,材料的断裂韧性在很大程度上决定于裂端范性功耗。现在发现范性区中有细致的缺陷结构,材料局部性质不均匀,应力分析自然会复杂一些。我们曾改进BCS位错模型,计算出裂纹顶端范性区中位错密度分布有一个负位错区。负位错可以被正号裂纹位错所吸引使之向裂纹顶端运动,部分或全部(视能量条件而定)和正号裂纹位错相消,创造新表面,形成裂纹钝化,留下低位错密度区或无位错区^[11]。

2. 位错理论向基础理论发展的方向之一是探讨它和更普适的理论物理中场论的联系。位错弹性理论相对地说是比较成熟一些。传统的弹性力学是在牛顿的质点力学基础上发展起来的。比较彻底的办法是把弹性场当做物质场中的一种具体场来处理。弹性力学的基本方程可由作用量(拉氏密度在整个时空上的积分)对场函数变分求极值的条件得到。物质场论和位错弹性理论是共性和特性的关系。场论的发展对位错弹性理论的推进起重要作用。场论中的Noether定理是1918年就已证明了的。1951年,Eshelby在位错中应用了Noether定理,得到作用在弹性奇点的力为弹性能量动量张量的积分^[12]。1968年,Rice导出了弹塑性断裂判据 J 积分^[13],其数学形式和Eshelby的二维弹性能量动量张量积分相同。这个例子典型地说明了场论、位错和断裂理论三者之间的联系。六

十多年来,场论又有了许多新的发展。人们自然要问,这些新发展能否移植到位错和断裂问题上来?如果人们更自觉地去努力加强这种联系,无疑会加速这种认识过程。这需要场论工作者和缺陷理论工作者的密切合作。

把缺陷理论(特性)提高到场论(共性)的高度来认识并不单纯有学术性的意义。譬如人们认识到了 J 积分和弹性能量、动量、张量的关系和区别,人们在某些情况下就可以“甩掉” J 积分推导过程中的一些“清规戒律”,直接把弹性能量、动量、张量的方法应用到弹塑性裂纹扩展的小孔机制分析^[14],使难于解决的问题有一个新的探索途径。

规范场是一种古老而又不断创新的理论,近二十年来取得了重大的发展。尤其是非阿贝尔规范场(杨-Mills场)理论在理论物理各个领域的广泛应用,显示出它的生命力。Kadic,Edelen所著《位错与旋错的规范理论》(1983)综述了它在位错理论方面的应用^[15]。何祚庠提出,缺陷可否看成是声子场真空态的对称性破缺。我们知道,点缺陷是零维缺陷,在三维方向上对称性破缺。位错是线缺陷,在二维方向上对称性破缺。层错是面缺陷,在一维方向上对称性破缺。按照戈氏定理,它们的形成或增殖必定会有相应的无质量玻色子(声子)放出来。现代声发射检测技术灵敏度可以反映 10^{-14} m的畸变。固体中位错增殖引起的真空态连续对称性的破缺放出来的无质量玻色子(声子)也许可能从声发射的实验观测到。目前声发射实验技术还主要用于监测材料的宏观开裂过程。还没有人针对这些问题进行过实验,但屈服和范性形变能测出声发射信号则已是熟知的事实。

Wadati与Umezawa等用量子场论方法处理过晶体及其缺陷问题。他令场函数决定的密度算子的基态期望值为 $\nu(\mathbf{x})$,以 $\nu(\mathbf{x})$ 对空间平均值的偏离当作序参量。在拉格朗日密度上加上一个小的非平移不变项,得到平移不变性的自发破缺,最后又令此小项等于零。作者把他的数学处理方法类比晶体生长需要一个小晶体诱发一样。平移不变性的自发破缺即意味着

晶体形成。利用 Ward-Takahashi 关系还证明了至少有三个戈氏玻色子(声子)产生。他利用所谓“玻色子变换”可以产生晶体缺陷,把晶体缺陷看成是局域玻色子凝聚产生了一个时空有关的基态。利用这个方法得到的螺型位错、刃型位错在各向同性介质中的位移场表达式和以往的位错弹性理论完全一致。对于各向异性介质,也得到了和 Eshelby, Read, Shockley 一致的结果^[6]。

场论方法在缺陷理论中的应用仅仅是基于两者在数学形式上类似呢,还是有其更深刻的物理原因?经典物质场和位错场的共性和特性关系从物理的角度是比较好理解的。有些深刻的物理联系有待以后才能看得出来。

“场论、位错和断裂”是一条线索,联系着理论物理、固体物理和工程力学,体现出基础、应用和发展研究之间的联系。只有不同领域的交流和合作,才能促进它们的发展。

三、非平衡统计、缺陷和固体的力学行为

统计物理近年来的重要发展之一是非平衡态统计理论。Prigogine 等提出耗散结构及有关的热力学理论,讨论远离平衡的定态的突变,指出对称性的破缺和自然界自发出现的有序是相联系的,这一工作引起了各领域研究工作者的重视。Haken 创造了一个名词“Synergetics”(协同学)。由于讨论过程中各宏观变量的变化,引入了非平衡热力学函数、熵产生等概念。按照最小熵产生原理,在线性非平衡区,定态的熵产生将达到极小值,也就是系统最后又会回到定态,所以系统是稳定的,不可能形成有序结构。在非线性区即远离平衡态,系统可以是稳定的,也可以是不稳定的,要看具体的条件而定。当过剩熵产生 $\delta_r P > 0$ 时,系统是稳定的;当 $\delta_r P < 0$ 时,系统是不稳定的;当 $\delta_r P(\lambda_c) = 0$ 时,系统是临界情况。在不稳定情况可以呈现出新的结构,即所谓耗散结构^[7]。

1. Caglioti 等^[3]人倡导将协同学思想和物理

方法应用到固体的力学行为的研究中。他们把固体受力从弹性到范性的过渡看成是相变过程,以非平衡热力学的观点分析固体的热弹性失稳。Boffi 等人^[3]把固体自由能视为温度和应变的函数,考虑非线性项,得到熵平衡方程及线性动量平衡方程,再通过较复杂的计算找出热弹性稳定性条件,得到临界应变 ϵ_i^* 。对于 α -Ti, Caglioti 等人得出 $\epsilon_i^* \cong 0.21 \times 10^{-2}$ 。

初看起来,这个临界应变值和一般屈服点应变的 0.2% 很近。但是仔细推敲也还有问题。因为在所分析的自由能表达式中,缺乏缺陷的自由度。所谓固体热弹性失稳代表什么含义是不明确的。它既可能导致屈服,也可能导致脆断,还可能导致结构的变化。看来只分析固体的宏观热力学行为是不够的,必须结合分析缺陷才行。

2. 涨落和固体的力学弛豫:在应力作用下,缺陷在固体中可以移动。过去,人们习惯于将缺陷动力学过程当作确定论过程来处理,然而从微观水平上看,缺陷的运动过程是由大量自由度的微观运动所组成,涨落必然存在。从另一方面看,一般描述缺陷的行为往往只用了一组有限个变量。它远远小于缺陷组态各组分自由度总数。因此,除了用以描述缺陷的那些自由度以外,其余的自由度就以涨落的特征表现出来。一个给定的缺陷状态(确定值)实际上总是与一批微观原子状态不断互相转变相联系(涨落),结果描述缺陷的变量就发生某些偏离。这些偏离从观察的角度看是一些随机事件,这就是所观察到的涨落。在很多情况下,涨落是小的;但一旦涨落达到一个描述缺陷状态的量级,则缺陷相应地会产生一个性质上的突变。

Balakrishnan 等人把涨落的随机理论应用到 Snoek 弛豫问题上得出的结果与 Nowick, Berry 通过时率方程得到的结果一致^[8]。用这种方法还可进一步分析 Gorsky 弛豫和 Bordoni 弛豫。

研究涨落如何触发耗散结构,是非平衡统计的一个重要问题。Balakrishnan 等人还没有做到这一点。如何把协同学思想和方法应用

上去,尚待进一步的努力。

闭路格林函数对于非平衡统计的物理问题是有效的方法,在超导、激光等领域中已有应用。闭路 S 矩阵和物理的平均值可以直接联系。序参量的闭路格林函数可以讨论相变的稳定性问题。这个方法在缺陷方面的应用也许比 Wadati 和 Umezawa^[16] 等人的方法讨论热平衡态和非热平衡态方面更为有效^[19]。

四、凝聚态理论、缺陷电子态及范性形变

人的思想由现象到本质,由所谓初级的本质到二级的本质,这样不断加深下去以至于无穷。晶体位错的运动是材料宏观范性形变的原子组态本质;缺陷电子态又是晶体位错原子组态更深入一层的本质。碳原子和氮原子对位错的钉扎能力是不一样的。按弹性相互作用看,似乎碳原子应大于氮原子,但实验指出,氮原子反而大于碳原子。这使人设想这种情况可能同碳原子和氮原子在位错中心引起的电子状态改变不同有关。

金属缺陷中心的电子结构是一个老大难问题。金属具有良导电性。缺陷中心原子的局部重排会使电荷分布偏离常态。由于金属导电电子易于流动,这个偏离被屏蔽而限制在单位晶胞半径量级的长度之内。缺陷电子结构很难完全以局域波函数来描述。由于缺陷原子组态失掉了三维点阵对称性,真正要定量计算起来,计算量也是很大的。

各种形式的紧束缚概念或者以推广 Wannier 函数为基础的有关方法均应用过。这些方法虽然对 d 或 f 带很合适,但只要含有适量的 sp 型电子,要得到真正的自洽解就会遇到困难。

利用经验的原子间势函数可以对缺陷进行原子模拟,但其定量结果和所选择什么形式的原子间势函数关系很大。原子间势函数的参数则是由测得的完整晶体实验数据来定的。至于在缺陷状态下原子间势函数的形式和参数会怎样改变,这更是没有解决的问题了。原子间势

函数的方法还不能给出电子在缺陷中心区怎样重新分布的信息。

赝势方法对于简单金属应当是很有用的,但是,它的线性假设对于缺陷中心来说则过于简单。如果引入非线性考虑,则在对称性差的缺陷中心,计算会变得极为困难。

KKR-格林函数方法曾经用来计算金属的替代式杂质态。假设理想晶体的格林函数是已知的,缺陷引起的势能差的因素考虑进去之后,整个系统的总格林函数可以通过解 Dyson 方程得到。对于单个缺陷,这类方法所用的计算机工作量还可以;对于较大的缺陷集团,工作量就太大了^[20]。

近来用密度泛函方法通过简化的凝胶基体模型对于简单金属缺陷中心的电子重新分布和位势进行了一些计算,并将计算结果和正电子湮没实验进行了比较。这种方法把系统的基态能量写成电子数密度 $n(\mathbf{r})$ 的泛函 $E[n(\mathbf{r})]$ 。密度泛函理论中的单电子 Kohn-Sham 波函数满足一个自治薛定谔方程。求它的自洽解即可得到电子密度分布。然而交换与相关项 $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ 并不准确知道,只能取近似。缺陷组态则表现在模拟的离子数函数 $n_+(\mathbf{r})$ 中。例如三维空位集团可以近似为

$$n_+(\mathbf{r}) = n_0\theta(\mathbf{r} - \mathbf{R}),$$

其中 n_0 是平均离子数密度, R 是空洞半径,

$$R = \sqrt[3]{NR_{ws}},$$

N 是空洞包含的空位数, R_{ws} 是 Wigner-Seitz 原胞半径, $\theta(\mathbf{r})$ 为阶跃函数。有人用此法计算过铝及一些简单金属 (Li, Na, K, Cs, Be, Mg, Al, Tl 等) 空位中心的电子密度分布^[21]。有人还把凝胶模型当做起点,用分立点阵势当做一级微扰,企图使结果更精确化。结果指出,对碱金属改正数值很小,对多价金属改正值又太大(如 Al 增加了 3 电子伏)。这说明此法对多价金属空位问题的处理并不很好。

位错中心的问题更为复杂,其对称性比空位差。如果把密度泛函方法的思想 and 探讨有方向性的动量空间的电子密度分布^[22]结合起来,也许是联系范性形变的一个可能途径。

科学的发展往往是实验和理论的相互促进。缺陷电子态的研究,长期以来缺乏灵敏的实验方法来促进。理论计算无法用实验结果来验证,认识的发展不是很快的。六十年代发展起来的用正电子湮没技术研究缺陷电子态是一个较大的推进^[20,23]。这种实验技术灵敏度高,空位浓度仅 10^{-7} 原子比就会有所反应。现在已经有一些工作和正电子湮没的实验数据或曲线进行对比,检验理论设计的空位和位错原子组态模型和计算出的电子密度分布的合理程度。正如 Seeger 所指出的,正电子湮没技术是了解缺陷中心电子结构的一个好的实验工具^[24]。这方面的实验已在我国开展起来,有些成果已反映在 1982 年美国召开的第六届国际正电子湮没会议文集中^[25]。不过,工作多偏重在定性的应用,和缺陷中心电子态有关的定量结果则较少。

从以上所述可以看出,近代物理前沿知识已渗透到金属缺陷和力学性质的研究领域中来,使这一领域面貌一新。如果考虑到相变、扩散、合金、液态理论等的最新进展,我们可以看到金属物理的现代内容正在酝酿形成。

“理论”是相对于“实验”而言的,它既可以针对一般自然现象进行基础性研究,也可以针对应用的目的和背景进行应用理论研究。希望有更多的理论工作者关心和从事这方面的研究工作,加强这个需要量大而面又广的应用理论研究。

参 考 文 献

- [1] G. Caglioti, Introduction to the Workshop on the Mechanical Behavior of Solids, Trieste, ICTP Preprint, (1982).
- [2] G. Caglioti, Atomic Structure and Mechanical Properties of Metals, Proc. Int. Sch. Phys., Course LXI, “E. Fermi”, (1974), 1.
- [3] G. Caglioti and A. Ferro, Mechanical and Thermal Behavior of Materials, Proc. Int. Sch. Phys., Course LXXXII, “E. Fermi” (1981).
- [4] 龙期威,物理, **11-3**(1982), 145.
- [5] M. F. Ashby et al., Dislocation Modelling of Physical Systems, Pergamon Press, (1981).
- [6] Lung Chi-wei (龙期威), *Scientia Sinica*, **23-4** (1980), 441.
- [7] 龙期威、高桦,金属学报, **19-3**(1983), A 225.
- [8] S. Kobayashi and S. M. Ohr, *Phil. Mag. A*, **42** (1980), 763.
- [9] S. Chang and S. M. Ohr, *J. Appl. Phys.*, **52** (1981), 7174.
- [10] R. Thomson, 北京国际断裂力学学术讨论会论文集, Science Press, (1983), 1019.
- [11] C. W. Lung (龙期威) and L. Y. Xiong (熊良钺), *Phys. Stat. Sol. (a)* **77**, (1983), 81.
- [12] J. D. Eshelby, in Solid Stat Physics, Vol. 3, Eds. Seitz and Turnbull, Academic Press, New York and London, (1956), 100.
- [13] J. R. Rice, *J. Appl. Mech.*, **35** (1968), 379.
- [14] H. Miyamoto and M. Kikuchi, 北京国际断裂力学学术讨论会论文集, Science Press, (1983), 970.
- [15] A. Kadic and D. G. B. Edelen, *A. Gauge Theory of Dislocations and Disclinations*, Springer-Verlag, (1983).
- [16] M. Wadati, *Phys. Reports*, **50-2** (1979), 87.
- [17] 霍裕平、方福康等,统计物理学进展,郝柏林、于淦等编著,科学出版社, (1981), 165-489.
- [18] V. Balakrishnan, S. Dattaguptes and G. Venkataraman, *Phil. Mag. A*, **37-1**(1978), 65.
- [19] 周光召、苏肇冰,同 [17] 268-371.
- [20] R. M. Nieminen, in Positron Solid State Physics, Eds. Brandt and Dupasquier, Proc. Int. Sch. Phys. Course LXXXIII “E. Fermi”. (1981).
- [21] M. J. Stott, *J. Nuclear Materials*, **69-70** (1978), 157.
- [22] 龙期威、王桂琴,物理学报, **17**(1961), 263.
- [23] P. Hautojärvi, Positron in Solids, (1979).
- [24] A. Seeger, in Frontiers in Materials Science, (1976), 177.
- [25] 见 Positron Annihilation, Proc. 6th Int. Conf. PA, Eds P. G. Coleman et al., (1982).