

非线性滞弹性——一门新的学科领域

葛庭燧

(中国科学院固体物理研究所内耗与固体缺陷开放研究实验室,合肥 230031)

固体的力学性质包括弹性、范性和断裂。由于实际应用上的重要性,关于断裂的研究已经受到相当重视。但是范性形变是断裂过程的前奏,因此在解决固体材料破坏问题的整个环节中,必须研究范性形变的机制。另一方面,弹性形变是范性形变的先导,而目前作为阐明范性形变机制的基础的位错理论还不能与研究弹性形变的弹性理论衔接起来,所以需要重视从弹性到范性的过渡的研究。该文介绍的非线性滞弹性是关于这方面的一种初步尝试。

Abstract

The mechanical properties of solids include elasticity, plasticity and fracture. Because of its practical significance, research on fracture has drawn much attention. However, since plastic deformation is the prelude to the fracture process, research on the mechanism of plastic deformation is necessary to the whole chain of solving the problem of failure of solid materials. On the other hand, plastic deformation is preceded by elastic deformation, but the dislocation theory which is the foundation for the elucidation of the mechanism of plastic deformation cannot yet be linked with the theory of elastic deformation. Hence, investigations on the transition from elasticity to plasticity must be emphasized. The study of nonlinear anelasticity described in this paper is an attempt in this direction.

一、从弹性到滞弹性

理想的弹性行为要求应变对于每个应力水平的响应是可以完全回复的。另外还要求这种响应是线性的,是瞬时达到的,而且应变和应力互为单值函数。1841年发现的弹性后效现象是偏离弹性理论的最早例子。其他的例子有内耗,模量亏损,在恒应力下的微蠕变,在恒应变下的应力弛豫。这些效应都是应力与应变之间的关系不是单值函数的不同表现形式。1948年,甄纳(C. Zener)提出“滞弹性”(anelasticity)这一概念来说明固体在不发生永久变形的低应力范围内所表现的一种“特殊的非弹性”性质。对于滞弹性形变,应力与应变之间的关系仍然是线性的,但它们彼此间并不是单值函数,即应变落后于应力。

物理

为了说明应变落后于应力的机制,必须讨论应力所引起的内部变化的微观过程,这就引出了滞弹性弛豫的概念。

一个热力学系统的内部变量在响应外部变量的变化时,会发生自调整(self-adjustment)的过程,从而随着时间的变化而趋向一种新的平衡状态。这种自调整的过程叫做弛豫(relaxation)。如果这外部变量是力学的(应力或应变),这种过程就叫做滞弹性弛豫或力学弛豫。现在考虑只有一个内部变量的情形,这个变量可以与短程序或长程序参数有关,或者与描述试样中的原子状态、电子分布有关,或与磁畴和电畴排列的状态有关。在外加应力的作用下,这些内部变量通过自调整而引起一种附加的应变或滞弹性应变。因此,应力不但通过弹性耦合而直接与应变关联,而且还通过内部变量而间接与应变关联。对于输运过程来说,内部变量并不

是瞬间就达到它的新的平衡值,而是以一定的速率进行的,因而所引起的附加应变也不是瞬时完成的。这就导致了应变落后于应力,而应变落后于应力的情况决定了所引起的滞弹性效应的类型和特点。另一方面,应变落后于应力的情况又决定于应力或应变状态,并且遵循着一定的方程。出现在这些方程中的参量与应力-应变方程中的有关参量的关系就把滞弹性的唯象理论与物理本质联系了起来,因而可以应用滞弹性测量来探测物质内部的分子、原子、声子、电子等的存在状态及其运动变化。弛豫过程的两个重要微观参数是弛豫时间和弛豫强度,可通过滞弹性效应的测量而测定出来。

按照经典的滞弹性理论的要求,应力与应变之间的关系是线性的,从而使滞弹性的宏观响应参数(例如内耗、模量亏损、微蠕变和应力弛豫)以及微观参数(例如弛豫时间和弛豫强度)都与应力(或应变振幅)无关。因此,这样的滞弹性可以叫做线性滞弹性。

二、从线性滞弹性到非线性滞弹性

Zener 的经典滞弹性理论从玻耳兹曼的线性叠加原理出发,推导出各种滞弹性效应之间的定量关系。笔者在1947年发表的关于晶粒间界研究的一系列实验结果完全证实了这种定量关系,从而成为 Zener 提出滞弹性这个概念的实验基础。但是,事物总是不断发展的,1947年关于晶粒间界的工作一直被认为是最典型的线性滞弹性现象,然而到80年代,通过我国科学工作者的深入研究,却发现了晶粒间界弛豫强度随着测量温度的降低而减小并且最后变为零的实验事实,这是一种明显的非线性弛豫现象。这个发现把晶界弛豫的微观过程与晶界重位点阵的分子动力学模拟所得的结果联系了起来。最近还观测到双晶晶界出现反常振幅效应的温度内耗峰,更加肯定了双晶晶界的非线性滞弹性行为,突破了线性滞弹性弛豫的理论框架,指出了系统深入研究非线性滞弹性现象的迫切性和重要性。

• 578 •

上述这种非线性滞弹性现象也由笔者在1950年关于位错与点缺陷的交互作用的研究中首次发现,随后在我国进行了大量的研究。这种非线性弛豫现象的特点是:一方面具有滞弹性弛豫的特征,另一方面又有非线性的表现,即在极低应力或应变振幅的作用下出现强烈的振幅效应,表现为滞弹性效应随着应变振幅的增加而增加(正常振幅效应),随后又随着应变振幅的增加而减小(反常振幅效应)。关于晶粒间界的非线性弛豫行为的发现和笔者在1950年关于非线性内耗的发现以及我国科学工作者近年来关于位错与点缺陷的交互作用的大量的非线性滞弹性现象的发现,基本上奠定了非线性滞弹性理论的实验基础,形成了非线性滞弹性这一门新的学科领域。

三、非线性滞弹性现象的发现

下面我们将介绍近年来关于点缺陷与位错的交互作用所引起的非线性滞弹性现象的发现和进展,着重介绍非线性反常内耗。内耗是滞弹性效应的一种主要的宏观表现。振动着的固体即使与外界完全隔绝,其机械振动也会逐渐衰减下来。这种使机械振动能量不可逆地耗散为热能的现象称为内耗,即由于内部原因而引起能量损耗^[1,2]。物体中存在着大量的内耗源,每个内耗源在一定条件下可以产生一条机械振动能量吸收谱线,它叫做内耗峰。如果测量内耗作为温度的函数,在一定条件下可以得到温度内耗峰。

晶体中的位错的位移能够引起切应变,反过来,在共轭切应力的作用下,位错就要开始运动。因此,位错的位移可以满足作为一个能够引起内耗和滞弹性行为的内部变量的条件。但是,位错的运动必须受到限制,才能使它落后于应力。当有阻碍位错运动的位垒或障碍物(例如点缺陷)存在时,就会出现这种限制。

1950年,笔者在经过冷加工的 Al-Cu 合金试样经过部分退火后,在室温附近首次观测到与振幅有关的温度内耗峰。这个内耗峰随后被

称为室温内耗峰或 P_1 峰。在这个峰的温度范围内，尽管用很小的应变振幅进行测量，内耗仍然反常地与振幅有关。在温度内耗峰出现的温度范围内的某一温度下，把内耗表示为应变振幅的函数时，得到一个振幅内耗峰。因此，这种新发现的内耗是一种非线性的反常内耗。另外，把内耗表示为在某一温度下进行时效的时间的函数时，得到一个时效内耗峰，这表示这种新型内耗还表现弛豫行为。我们在1950年首次把点缺陷（溶质原子）与位错的交互作用的概念引入内耗研究领域，提出了位错周围的溶质原子（这里指的是 Cu）气团在位错周围形成，随后达到饱和并被位错拖曳，而后又被甩脱的“跟、拖、甩”模型，解释了时效内耗峰和振幅内耗峰的出现过程。

60年代以来，我国的科学工作者关于溶质原子与位错的交互作用做了大量的实验工作。中国科学院金属研究所的科研人员在冷加工的 Al-Cu 和 Al-Mg 合金试样中都观测到三种内耗峰：温度内耗峰、振幅内耗峰和时效内耗峰。另外，为了定量地解释所观测到的一系列反常内耗现象，他们又进一步提出了错弯结气团模型。这个模型的基本假设是：为了能够观测到反常内耗现象，位错线上必须存在一定数量的能够作侧向运动（徙动）的弯结（几何弯结）。在经过冷加工不久的试样中的“新鲜”位错上，是存在着这样一些弯结的。现在需要进一步解决的问题有：(1) 这种非线性的反常内耗是否具有弛豫性能，即是否存在一个激活能？(2) 与位错发生交互作用的溶质原子或溶质原子气团是在位错芯区以内还是分布在位错附近？(3) 溶质原子在外加应力和位错的应力场中的扩散是长程扩散还是短程扩散？(4) 溶质原子的扩散方式是纵向的还是横向的？(5) 组成气团的点缺陷是单一的还是复合的？等等。这些基本问题以及反常内耗峰的机制和数学处理都需要进行系统的实验和深入的理论分析才能得到解决。

四、非线性反常内耗研究的新进展

1. 找到了有把握地观测这种反常内耗现象的实验

验程序

1950年，我们首次发现反常位错内耗峰(P_1 峰)时所采用的实验程序是把高度冷加工的试样进行退火处理，退火的温度是刚刚低于试样的“再结晶温度”。在60年代，我们又采用了把高度冷加工的试样完全退火使它达到完全再结晶以后，再把试样进行轻度的冷加工，使它刚刚超过屈服极限。这些处理程序虽然在降温或升温测量中能够得到表现反常振幅效应的温度内耗峰和应变时效内耗峰，但是重复性和再现性都不理想。另外，温度内耗峰的峰位经常发生变动。这些情况都给人们了解内耗峰的机制造成困难。

1985年，方前峰和葛庭燧采用了一种综合方法，把上述两种程序结合到一起，即把高度冷加工试样进行较高温度的退火，然后对它进行微量的冷加工，再在一个适当的中等温度下退火，然后进行测量。由于可在扭摆装置内对试样进行扭转加工，所以选择了扭转加工方式。这个程序可使试样中的形变较为均匀。用这种方法扭转后，在一个中等温度下进行退火，在降温测量时可以有把握地得到极高的温度内耗峰，内耗值可以高达0.11。电镜观察指出，扭转变形可以得到较均匀的位错网络结构，而拉伸变形得到的是胞状结构。显然，位错网络结构有利于由于溶质原子与位错的交互作用而引起的反常内耗峰。

1987年，葛庭燧、谭启、方前锋用 Al-Mg 合金做的一系列的实验指出， P_1 峰出现的实验条件依赖于试样所受的力学处理和热处理的全部历史以及在各次处理之间的停留时间。选择根据大量实验所总结出来的实验条件，总是能够成功地得到 P_1 峰。

2. 找到了反常内耗峰的峰位发生移动（向低温移动或向高温移动）的规律

1990年，葛庭燧和方前锋用各种 Al-Mg 试样进一步研究 P_1 峰的行为时发现，如在 P_1 峰出现以后再对试样连续进行扭转加工，则 P_1 峰可向低温移动90℃之多，最后达到一个饱和值。在中等温度下退火或在室温下进行较长时间的时

效,可使 P_1 峰向高温移动。我们认为这种移动与扭转加工时试样中所引入的内应力有关。这种内应力是冷加工所产生的位错长程应力场的平均效应。当试样在冷加工后进行退火时,内应力将被部分地消除。因此,试样所受处理的每一个阶段都会改变内应力的分布和存在状态。这就揭示了反常内耗峰的峰位不稳定的原因,指出了为什么早期实验工作的重复性和再现性不好的原因。我们近期所做的大量的条件实验(是指为寻找某一现象的出现条件所做的实验)指出,参考第一节所述的实验程序和掌握本节所述的实验规律,早期工作所遇到的困难是完全可以克服的。

3. 测出了反常位错内耗峰的激活能

在线性滞弹性内耗的情形,内耗随着测量频率的增加而向高温移动,内耗与温度的关系满足 Arrhenius 公式,这就能够用改变频率的方法和根据温度内耗峰的移动来测定相关的激活能。一个根本性的问题是,上面所讨论的反常内耗峰既然是非线性的,是否也具有弛豫的行为?它是否也具有激活能?这一点非常重要,因为从激活能的大小可以判定内耗峰的微观机制。因此,从 1950 年发现了这个反常内耗峰以来,我们一直考虑测量它的激活能,但是由于它的重复性和再现性都不理想,出现条件也很难控制,就难以用改变测量频率的办法来测定它的激活能。这个极端困难的问题经过十年来的不断探索和大量的条件实验终于得到了解决,这就为测定反常内耗峰(P_1 峰)的激活能铺平了道路。

1991 年,朱爱武和葛庭燧对 Al-Cu 试样在 P_1 峰已处于稳定的状态下用变换测量频率的办法测得的激活能是 $(0.8 \pm 0.1)\text{eV}$, 试探频率 $\gamma_0 = 10^{12} - 10^{14}\text{s}^{-1}$ 。这个激活能远低于 Cu 在 Al 中扩散的激活能 (1.40eV) 。这说明 P_1 峰的控制因素并不是 Cu 溶质原子在 Al 点阵中的长程扩散。另一方面说,理论研究工作指出,沿位错管道扩散的激活能是点阵扩散激活能的 0.5—0.6 倍,即 $0.70 - 0.84\text{eV}$ 。这个数值与我们测得的 P_1 峰的激活能相近。这种吻合强烈地支持了

我们提出的位错弯结气团模型,即 P_1 峰来源于溶质原子(Cu 或 Mg)在外加振动应力的诱导下在位错弯结中(或者沿着位错弯结)的短程扩散。

4. 高温反常内耗峰(P_3 峰)的发现进一步说明了室温反常内耗峰(P_1 峰)来源于短程扩散

1991 年,谭启和葛庭燧在冷加工后部分退火的 Al-Mg 试样中在约 265°C ($f = 1\text{Hz}$) 观测到一个表现反常行为的温度内耗峰(P_3 峰)。用变换频率法测得的激活能是 $(1.3 \pm 0.1)\text{eV}$, $\gamma_0 = 10^{13}\text{s}^{-1}$ 。这个激活能很接近于 Mg 原子在 Al 点阵中宏观扩散的激活能 (1.354eV) 。另外, γ_0 也接近于 Mg 原子的体扩散的试探频率。这说明引起 P_3 峰的过程是组成 Cottrell 气团的溶质原子的长程的体扩散,也就进一步说明了在室温附近出现的 P_1 峰不能归因于长程扩散。

1992 年,朱爱武和葛庭燧在 Al-Cu 试样也观测到 P_3 峰。

5. 低温反常内耗峰(P_{L1} 峰)的发现说明与 P_1 峰相联系的气团是单一的溶质原子气团

1980 年,中国科学院金属研究所对冷加工的 Al-Mg 合金试样,观测到在室温以下低于 P_1 峰出现的温度还有另外一个反常内耗峰(P_{L1} 峰)。1982 年张进修、葛庭燧等及 1987 年葛庭燧、杨世卿和朱震刚在 Al-Cu 合金试样中也观测到这样一个内耗峰。1992 年,葛庭燧和朱爱武用 Al-Cu 试样详细地研究了这个内耗峰,并且分析了它与 P_1 峰的互补的关系。实验指出,当试样在 150°C 左右退火后,这个低温内耗峰大大降低,而 P_1 峰却升高。用变换频率法测得这个低温内耗峰的激活能是 $(0.61 \pm 0.10)\text{eV}$, $\gamma_0 = 5 \times 10^{13}\text{s}^{-1}$, 这个激活能远低于 Cu 在 Al 点阵中扩散的激活能 (1.40eV) , 因此这个低温内耗峰不能归因于 Cu 原子单独扩散的过程。如果假定 Cu 原子与一个空位形成一个复合组元,则由于这个组元在 152°C 就要离解,它的结合能应约为 0.04eV 。已知 Cu 在 Al 中扩散的激活能是 1.40eV , 空位的形成能是 0.76eV , 所以 Cu 原子-空位对在 Al 中的徙动激活能应该是 $1.40 - 0.76 + 0.04 = 0.68\text{eV}$, 与实验测得的值 $(0.61$

±0.10)eV 相近。这就强烈地支持了低温内耗峰是由于 Cu 原子-空位对与 Al 中的位错(弯结)的交互作用所引起来的观点。这种 Cu 原子-空位对在150°C退火发生离解后,所释放出来的 Cu 原子就单独与位错发生交互作用,从而使 P_1 峰大大增高。这就进一步证明了 P_1 峰是由于 Cu 原子单独与位错(弯结)的交互作用所引起的。

1990年,方前锋和葛庭燧用 Al-Mg 试样进行了低温内耗测量,在低于上述的低温内耗峰的温度下观测到另一个表现弛豫行为的内耗峰。我们把这个峰分别叫做 P_{L1} 和 P_{L2} 峰。曾用在室温扭转或弯曲不同程度的 Al-Mg 试样进行试验,结果只有 P_{L1} 峰出现。 P_{L2} 峰只在冷拉试样中出现,而 P_{L1} 峰也能在扭转和弯曲试样中出现,这可能表明 P_{L2} 峰的出现要求较高的空位密度。在冷拉试样中能够产生复杂的位错位形和大量的空位,因而加工硬化率较高。对试样进行退火试验指出,随着退火温度的提高, P_{L2} 峰先于 P_{L1} 峰消逝。与退火使冷加工试样电阻的增高所得到的回复作对比,我们认为 P_{L2} 和 P_{L1} 峰在退火和时效处理中的增高或降低与点缺陷的运动有关,因而 P_{L2} 与 P_{L1} 峰的机制的主要区别在于点缺陷的位形不同而与位错无关。一个合乎道理的考虑是 P_{L2} 峰对应于位错与“Mg 原子-双空位对”的交互作用, P_{L1} 峰对应于位错与“Mg 原子-空位对”的交互作用。这个看法也与上面所说的 P_{L2} 峰的出现要求有较高的空位密度的实验事实相合。

用变频法测定了 P_{L1} 和 P_{L2} 峰的激活能,其中 P_{L2} 峰的是 0.8eV, P_{L1} 峰的是 1.2eV。这两个激活能都分别大于双空位的扩散激活能 0.46eV 和单空位的扩散激活能 0.65eV。这表示与 P_{L2} 和 P_{L1} 峰相联系的弛豫过程分别包含着“Mg 原子-双空位对”和“Mg 原子-空位对”作为一个组元集体的扩散。

在适当的条件下,我们曾经在一条内耗-温度曲线上观测到 P_{L2} 峰、 P_{L1} 峰和 P_1 峰同时存在,这表示它们是机制不同的内耗峰。肯定了 P_{L2} 和 P_{L1} 峰分别与双空位和单空位有关,这就进一步

物理

支持了 P_1 峰是与单独的溶质原子有关的看法。

6. 室温反常内耗峰(P_1 峰)的精细结构

1987年,葛庭燧、谭启、方前锋在对 Al-Mg 合金试样的 P_1 峰作更细微的检查时,发现这个内耗峰是由两个支峰组成的。我们把其中低温方面的峰叫做 P'_1 峰,高温方面的峰叫做 P''_1 峰。值得注意的是,在 P'_1 峰出现的温度范围内,随着温度的降低,振幅内耗峰向高振幅移动,而模量增加。与此相反,在 P''_1 峰出现的温度范围内,随着温度的降低,振幅内耗峰向低振幅移动,而模量降低。一般的情况是,在升温测量时, P'_1 峰与 P''_1 峰相隔较远,而在 200°C 仅仅停留 10min 后进行降温测量时,两峰就相隔很近以至于刚刚能分开。这表明 P'_1 和 P''_1 峰的位置对在测量以前试样所受的处理情况极为敏感,这也说明了为什么在以前的实验里所观测到的 P_1 峰只是一个单一的峰。

测得 P'_1 峰的激活能约为 0.49eV, P''_1 峰的约为 0.56eV。两个峰的 γ_0 都小于 10^9 s^{-1} 。这里所测得的激活能都远小于 Mg 原子在 Al 点阵中长程扩散的激活能 (1.354eV)。另外,理论计算表明,对应于几何弯结的试样频率 γ_0 约为 10^8 — 10^9 s^{-1} , 这与 P'_1 和 P''_1 峰的测量值相近。这些都支持了把 P_1 峰(包括 P'_1 和 P''_1 峰)归因于 Mg 原子沿着几何弯结的短程扩散的看法。

在 P'_1 峰由于对试样进一步的扭转而向低温移动以后,如在中等温度下进行退火, P'_1 峰又向高温移动。在这期间,在 P'_1 峰的低温侧出现一个新内耗峰(被命名为 P_0 峰)。在一定的条件下, P_0 、 P'_1 和 P''_1 峰可以同时出现。为解释这三个峰的机制,我们提出了一个综合的位错弯结气团模型,认为 P''_1 峰和 P_0 峰分别是由处于位错的水平部分(即躺在 Peierls 能谷里的位错)的溶质原子的横向和纵向管道扩散所引起,而 P'_1 峰则是由处于弯结上的溶质原子的纵向管道扩散所引起的。

1991年,葛庭燧和杨世卿发现 Al-Cu 合金也同时出现 P_0 、 P'_1 、 P''_1 峰。

另外,葛庭燧和谭启还在 P_1 峰与 P_3 峰之间的温度发现了另一个反常位错内耗峰 P_2 , 激活

能是 $(0.7 \pm 0.1)\text{eV}$, $\gamma_0 \sim 10^8 \text{s}^{-1}$. 它可以与 P_1 和 P_2 峰同时出现, 所以它不是来源于纵向或横向的位错管道的短程扩散, 也不是长程扩散. 又由于它的 γ 值很低, 所以它所牵涉的弛豫过程不包含一个单独原子. 前面已经把 P_{11} 和 P_{12} 峰分别归因于“Mg-空位对”和“Mg-双空位对”与位错的交互作用, 所以可加以考虑的“复合缺陷”只剩下“Mg-Mg”对. 因此, 我们认为 P_2 峰的出现是由于 Mg-Mg 原子哑铃对在应力诱导下的重新取向. 这种重新取向与运动中的位错发生交互作用, 从而引起内耗峰.

1992年, 朱爱武和葛庭燧在 Al-Cu 合金也观测到 P_2 峰.

7. 发现并肯定了由于溶质原子(Cu, Mg)与位错(弯结)交互作用所引起的七个温度内耗峰

近十年以来, 我们不但对于出现在室温附近的反常内耗峰(P_1 峰)的机制及其精细结构作了详细的阐明, 还发现并肯定了与 P_1 峰有联系的七个内耗峰, 对它们作了统一的说明, 因而对它们的解释是互相支持的和自洽的. 从低温到高温排列, 它们分别被命名为 P_{12} , P_{11} , P_0 , P_1 (包括 P'_1 和 P''_1), P_2 和 P_3 峰. 它们分别归因于“溶质原子双空位对”和“溶质原子单空位对”与位错的交互作用, “溶质原子本身”与位错弯结的短程交互作用(通过沿位错管道或沿位错弯结的纵向扩散和横向扩散), “溶质原子哑铃对”在位错应力场中的重新取向(通过 Snoek 型弛豫), 以及溶质原子与位错的长程作用(通过 Cottrell 气团), 这就把替代式溶质原子(Cu, Mg)在面心立方结构的 Al 中的位错(弯结)的交互作用所可能引起的各种类型的弛豫谱完整地揭示了出来, 并且已经提出了各个弛豫谱的微观机制. 这一系列的工作大大展宽了反常的非线性位错弛豫研究的突破口.

8. 对于“跟、拖、甩”模型进行了理论处理

1950年笔者首次把 Cottrell 在1949年提出的溶质原子与位错交互作用的概念引用到内耗研究领域, 提出了“跟、拖、甩”模型, 明确指出钉扎位错的溶质原子是可动的, 能够在位错(弯结)运动的速度逐步增加时通过“重新调整”、

“被位错(弯结)拖曳”, 而最后“被位错(弯结)甩脱”. Simpson 和 Sosin 在1977年所提出线性“拖曳”只是我们在1950年提出的“跟、拖、甩”模型中的“跟”这一部分. 这一部分只能引起与振幅无关的内耗, 而非线性的拖曳过程才能引起内耗的正常振幅效应. 当“甩脱”的过程起主要作用时, 内耗就呈现明显的反常振幅效应, 从而使内耗随着振幅的增加而明显地下降, 出现振幅内耗峰.

国外关于溶质原子与位错的交互作用的研究思路分为两大派. 一派以 Koehler-Granato-Lücke 提出的弦模型为基础, 认为钉扎点是不动的, 只考虑雪崩式的机械脱钉. 后来考虑了位错的热激活脱钉, 但仍然认为钉扎点是不动的. 1973年 Schlipf 以及 Granato 和 Lücke 在1981年发表的文章里考虑了钉扎点的动性, 在基本的物理思想上向我们的观点靠拢了一大步. 另一派是以 Seeger 等所提出的弯结模型为基础, 但考虑的只是线性交互作用, 即内耗与振幅无关. Seeger 和 Oğurtanı 在近期发表的用位错弯结的观点来讨论体心立方结构的间隙式溶质原子与位错的交互作用的文章里, 也考虑了振幅效应. 由此可见, 这两派都吸取了我们在1950年和1966年提出的观点.

近十年来, 我们的实验结果进一步支持了采用位错弯结观点所提出的“跟、拖、甩”模型. 两种类型的振幅内耗峰的发现, 振幅内耗峰随着温度的改变而出现两种不同方向的移动, 模量-温度曲线在温度内耗峰出现的范围内所呈现的正规的和不正规的变化, 两个振幅峰的同时存在以及内耗峰所联系的弛豫过程的弛豫时间和弛豫强度的振幅效应(朱爱武、袁立曦、葛庭燧, 1992年)等等实验现象给阐明非线性内耗和非线性滞弹性的机制及其基本过程提供了极其重要的信息. 这使我们认识到, “坐落”在位错的水平部分(即与 Peierls 能谷平行的部分)上的溶质原子与位错的交互作用的基本过程主要是应力激活的, 而“坐落”在位错弯结上的溶质原子与位错弯结的交互作用主要是热激活的.

前者与位错的刚度有关;而后者与位错弯结的动性有关。当前的工作是把描述位错的刚度和动性的非线性表达式分别代入应力-应变方程和运动方程,并把所推导出的结果与实验的结果作定量的比较,从而系统地建立和发展了非线性滞弹性的统一理论,取得突破性的成果。

[1] 葛庭燧,物理,16,(1987),547.

[2] 葛庭燧,物理,17(1988),1.

全碳分子固体研究进展

解思深 李荫远

(中国科学院物理研究所,北京 100080)

简要地评述了 C_{60} 和相关的全碳分子固体的实验研究现状和进展,介绍了它们的结构、相变、能带结构和物理性质,同时还叙述了它们的衍生物及掺杂全碳分子固体的能带结构和物理性质。

Abstract

The status and progress of studies on C_{60} and other all-carbon molecular (Fullerene) solids are reviewed. The structure, phase transitions energy band structure and physical properties of C_{60} and related fullerenes are described, as well as those of the derivations and doped fullerenes.

全碳分子固体是由碳原子单一元素组成的、不同于石墨和金刚石结构的另一种同素异构体。全碳分子固体的基本组成单元是由60个或更多的碳原子组成的球形或椭球形分子。它可溶于甲苯、苯等有机溶剂,而保持这些球形分子的基本特性。因此,可以认为它是一种有机分子固体。全碳分子固体包括由60个碳原子组成的 C_{60} 球状分子所组成的 C_{60} 固体,或70个碳原子组成的 C_{70} 椭球分子所组成的 C_{70} 固体,同样也包括 C_{74}, C_{86} 固体。本文将集中介绍 C_{60} 和 C_{70} 固体的发现、发展和重要的物理、化学性质。

一、研究原子团簇(cluster)却意外地发现了崭新的有机分子

80年代初期,人们为了更好地理解来自宇宙中星际物质的某些辐射,开始在地面上人工地合成一些原子团簇,并从碱金属、贵金属等一价元素的团簇(如 Na 簇)开始进行研究,接着又研究了二价、三价、四价元素的团簇。团簇的物理

研究告诉人们,团簇中所能包含的原子数目应满足一定的规则——幻数规则,而这些团簇的尺寸一般都很小,约为1nm 到几 nm 左右。原子团簇一般是很不稳定的,多数只存在于飞行时间质谱之中。开始阶段合成的原子团簇的幻数一般都小于30,即组成原子团簇的原子数目(n)小于30;而从已有的原子团簇的研究中也无法直接解释来自星际物质的辐射。但是这一阶段的研究却给了人们十分重要的启迪。作为由微观的原子向宏观的固体过渡的重要环节中,团簇起什么作用?是否存在具有更大幻数的团簇?如果存在具有更大幻数的团簇,那么是否可由它们的存在来解释来自宇宙的神秘辐射。因此,经过一段时间的研究之后,人们开始注意合成和发现中簇或大簇。1984年,Rohlfing 等人用短脉冲、高功率的激光束(波长为530nm)蒸发石墨时,在飞行时间质谱上发现在幻数 $n > 30$ 处,存在着 $n = 60$ 和 70 的峰,换句话说存在 $n = 60$ 和 70 的 C 原子团簇。第二年,Kroto 等人仔细地调整了实验条件,证实了在幻数(n)处于40和120