

科学技术简报和经验交流

关于面心立方体合金中间隙原子内耗机构的探讨*

顧 世 清
(内蒙古大学)

关于面心立方体锰钢中的内耗机构,程开甲、张杏奎曾作过研究^[1],但该文第三节中对锰钢的内耗机构的假设和相应的计算是错误的。实际上锰钢的内耗不是如该文第三节中所示的内耗机构,即二个间隙原子落在同一空穴中形成一对间隙原子所引起的,而是由已占有一个间隙原子的空穴和近旁间隙位置上的间隙原子成对而引起的,现讨论如下。

程开甲、张杏奎的文章中对面心立方体锰钢中内耗的机构作了这样的说明:“当间隙原子加入金属中,则有一部分是落入空穴之内而其余部分分布在点阵的间隙中,而且已被间隙原子占有的空穴有可能落入第二原子,或者在已占有间隙原子空穴近旁间隙位置上有间隙原子”。然而从该文中自由能表达式的几项可以看出,在该文中所用的机构是考虑了已被间隙原子占有的空穴有可能落入第二原子的机构,即图1所示的机构,其自由能为

$$F(n, x) = -kT \ln C_n^N C_x^{N-n} C_C^{N_0-N-n-x} + n\varepsilon_1 + x\varepsilon_2 \quad (1)$$

$$+ -kT \ln \frac{N!(N_0 - N)!}{n! x! (N - n - x)! (C - n - x)! (N_0 - N - C + n + x)!} + n\varepsilon_1 + x\varepsilon_2, \quad (2)$$

其中 N 为单位体积内含有的空穴总数, n 为单位体积内含有的已被落入第一个间隙原子的空穴总数, N_0 为单位体积内含有的八面体间隙位置总数, C 为单位体积内含有的间隙

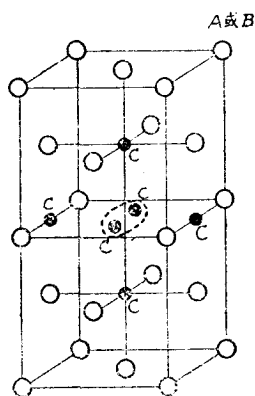


图1 空穴中有两个碳原子的内耗机构

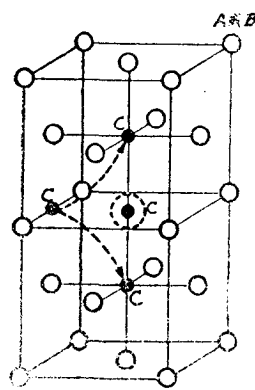


图2 代位碳原子间隙碳原子的内耗机构

* 1961年1月17日收到。

原子总数, ϵ_1 是一个间隙原子落入空穴中放出的能量, ϵ_2 是一对间隙原子落入空穴而放出的能量. 然而, 按所设机构, 在 (1) 式中第一个因子 C_n^N 为 n 个间隙原子分别落入 N 个空穴中的组合数, 第二个因子 C_x^{N-n} 为剩下的未被填入间隙原子的空穴: 分别落入 x 对间隙原子对时的组合数. 值得注意的是, 一个间隙原子对有两个原子, 因此在 C 个间隙中剩下的 $C - n - 2x$ 个间隙原子, 就填在 N_0 间隙位置上, 因为没有考虑代位碳原子与间隙碳原子对的机构, 因此要减去在 N 个空穴附近 $6N$ 个间隙位置, 故剩余的碳原子在间隙位置上的组合数为 $C_{C-n-2x}^{N_0-6N}$. 同时碳原子落入空穴中或碳原子对落入空穴中放出能量后, 晶体之能量降低. 故实际上按图 1 所示的机构, 晶体的自由能为

$$F(n, x) = -kT \ln C_n^N C_x^{N-n} C_{C-n-2x}^{N_0-6N} + n\epsilon_1 + x\epsilon_2 \quad (3)$$

$$= -kT \ln \frac{N!(N_0 - 6N)!}{n! x! (N - n - x)! (C - n - 2x)! (N_0 - 6N - C + n + 2x)!} + n\epsilon_1 + x\epsilon_2, \quad (4)$$

由此得到的平衡条件 $\partial F / \partial n = \partial F / \partial x = 0$ 为

$$\frac{n(N_0 - 6N - C + n + 2x)}{(N - n - x)(C - n - 2x)} = e^{-\epsilon_1/kT} = f > 1, \quad (5)$$

$$\frac{x(N_0 - 6N - C + n + 2x)^2}{n(C - n - 2x)^2} = e^{-\epsilon_2/kT} = g > 1. \quad (6)$$

这两个平衡条件与程开甲、张杏奎文中的平衡条件

$$\frac{n(N_0 - N - C + n + x)}{(N - n - x)(C - n - x)} = f \quad (7)$$

$$\frac{x(N_0 - N - C + n + x)}{n(C - n - x)} = g \quad (8)$$

大不相同, 因此在該文中图 4 所画的曲线, 虽然指的是图 1 中所述的内耗机构的内耗, 但实际上由于计算的错误, 它并不代表空穴中的碳原子对所产生的内耗.

我们认为, 在锰钢中的内耗为代位碳原子间隙碳原子对的转动所产生的, 按图 2 所示的机构计算结果如下. 以 N_c 代表单位体积内格点的总数, N 代表单位体积内含有的间隙位置的总数, n_v 代表单位体积内含有的空穴总数, C 代表单位体积内含有的碳原子总数, n_0 代表单位体积内填入空穴的碳原子数, n_p 代表单位体积内代位碳原子间隙碳原子对的总数, ϵ_1 为单独一个碳原子填入空穴时所放出的能量, ϵ_2 为代位碳原子近邻的间隙位置上填入一个碳原子而组成代位碳原子间隙碳原子对时所放出的能量. 因为 n_v 个空穴在 N_c 个格点上的组合数为 $C_{n_v}^{N_c}$, n_0 个碳原子填入空穴中成为代位式碳原子的组合数为 $C_{n_0}^{n_v}$, 然而, n_p 个代位碳原子间隙碳原子对形成时是通过在代位碳原子的近邻位置上填入一个碳原子而形成的, 因此在形成 n_p 个代位碳原子间隙碳原子对的组合数为 $6C_{n_p}^{n_0}$, 而剩下的 $C - n_0 - n_p$ 个碳原子就可以任意排列在与空穴不相邻的间隙位置上, 其组合数为 $C_{C-n_0-n_p}^{N-6n_0}$ 由此得到自由能以及相应的平衡条件为

$$\begin{aligned} F(n_0, n_p) &= -kT \ln g(n_0, n_p) + W(n_0, n_p) = \\ &= -kT \ln \frac{6N_c!(N - 6n_0)!}{(N_c - n_v)!(n_v - n_0)! n_p! (n_0 - n_p)! (C - n_0 - n_p)! (N - 6n_0 - C + n_0 + n_p)!} \\ &\quad - n_0\epsilon_1 - n_p\epsilon_2, \end{aligned}$$

$$\frac{(n_0 - n_s)(N - 6n_c - C + n_0 + n_p)}{(n_0 - n_0)(C - n_0 - n_p)} = e^{\epsilon_1/kT} = \alpha,$$

$$\frac{n_p(N - 6n_c - C + n_0 + n_p)}{(n_0 - n_p)(C - n_0 - n_p)} = e^{\epsilon_2/kT} = \beta.$$

最后計算得到的內耗值与程、张文第三节中所得的結果相同。

因此，在面心立方体的錳鋼中的內耗，并不是由于空穴中两个碳原子所形成的碳原子对所引起的。由这短文的計算可以看出，在錳鋼中的內耗是由于空穴中的碳原子与間隙碳原子所組成的碳原子对的轉动所引起的。

关于錳鋼中內耗是由于代位碳原子間隙碳原子对所引起以及它也不是由合金原子近旁的間隙碳原子所起的討論，将另行发表在內蒙古大学学报上。

参 考 文 献

- [1] 程开甲、张杏奎，物理学报，14 (1958)。

关于面心立方体金屬中間隙原子內耗理論一文的更正

張 杏 奎

(南京大学物理系)

物理学报 1958 年 14 卷第 1 期发表的“关于面心立方体金屬中間隙原子內耗理論”一文第三节 (p.77—88)，經內蒙古大学顧世清同志指出确有如下錯誤，需加更正。

該文中关于間隙原子在空穴中扩散的內耗一节，开始时即提出二种可能的机构：一是間隙原子加入金屬后可能有一对碳原子落入空穴而引起的內耗；另一是在已占有碳原子的空穴的近旁間隙位置上又落入一个間隙原子而形成的間隙原子对所引起的內耗。这二种机构是不同的，文中把它們等同看待是錯誤的，因此文中(17)、(18)两式有如下更改。

設 N_0 , N , C ，仍分別代表单位体积内含有的八面体間隙位置总数、空穴的总数和間隙原子的总数。而原文中的 n 应改为代表单位体积內已經落入間隙原子的空穴数。 x 应代表单位体积內落在已落入間隙原子的空穴近旁間隙位置上的間隙原子数目 (即形成間隙原子对的対数)， ϵ_1 仍代表一个間隙原子落入空穴时放出的能量， ϵ_2 則应改为代表一个間隙原子落在已被落入間隙原子的空穴近旁間隙位置上时放出的能量。故在一定的温度和一定的 n , x 分布下的自由能(17)式应改写为

$$F(n, x) = -kT \ln C_n^N C_x^n C_{C-n-x}^{N_0-6N} + n\epsilon_1 + x\epsilon_2$$

$$= -kT \ln \frac{N!(N_0 - 6N)!}{(N-n)!x!(n-x)!(C-n-x)!(N_0-6N-C+n+x)!} +$$

$$+ n\epsilon_1 + x\epsilon_2, \quad (17)$$

从(17)式微分，可以得到平衡方程：