

## 鉬单晶临界切应力的温度依赖关系\* 1)

龍期威 何青 周敬

(中国科学院)

### 提 要

本文研究了鉬单晶临界切应力和温度的依赖关系。数据指出：临界切应力的对数值在一定温度范围内，随绝对温度近似线性变化。这个结果和 Cottrell-Bilby 的位错气团模型不符合。假设温度升高，使杂质原子和位错中心原子的键合作用减弱，利用 Morse 势函数可以解释  $\ln\sigma-T$  的线性关系，并且所估计的斜率在数量级上和实验符合。

### 一、引 言

体心立方金属的屈服应力和温度的依赖关系，一直是引人注意的重要问题；它在实际应用方面和难熔金属的脆性密切相关，在理论方面涉及屈服现象的具体模型和机制。

自从 1947 年 Cottrell<sup>[1]</sup> 利用溶质原子和位错的交互作用来说明低碳钢的屈服现象以来，这方面的工作一直没有间断过。此后，随着实验和理论的发展，人们对屈服现象的认识逐步深入。1949 年 Cottrell 和 Bilby<sup>[2]</sup> 利用位错气团模型具体计算出屈服强度和温度的关系曲线；1955 年 Fisher<sup>[3]</sup> 进一步得到简化的绝对温度倒数依赖关系。但是，另一方面，从 Petch<sup>[4]</sup> 开始以及后来的 Conrad<sup>[5,6]</sup> 与 Schoek<sup>[7]</sup> 等提出了另一些看法，认为屈服应力和温度的强依赖关系，是由于和杂质无关的体心立方结构本身的因素：如派-纳力、双交滑移或螺型位错割阶的运动等等。前一派理论的主要特点是，考虑屈服应力和杂质密切相关，后一派理论则着重在晶体结构本身。从这两个基本不同派别的观点出发，又提出了各式各样的屈服强度和温度的依赖关系。

本文报导作者在鉬单晶方面的实验结果，将所得到的临界切应力的温度依赖关系，和已有的理论规律比较，以验证其正确与否和偏离情形；对这些差异进行了初步讨论。

### 二、实验方法和步骤

1. 实验方法的两点考虑 过去一些单晶体临界切应力和温度依赖关系的实验数据比较分散，很难总结出规律，我们在这方面作了以下两点改进，使实验点分散的情形有了很大的减小。

(1) 根据周邦新<sup>[8]</sup>最近的实验报导：一定取向的鉬单晶，在不同温度拉伸时，外观滑移面可能改变，也可能不改变，这要由样品的取向来决定，而实际滑移面则可能不变。为了避免这种复杂情形，我们选择样品取向满足这样的条件：在所测量的温度，其外观和实

\* 1964 年 2 月 24 日收到。

1) 这篇报告曾在中国物理学会 1963 年 8 月举行的学术会议上报告过，并曾在“中国科学”以简报形式发表<sup>[8]</sup>，后来又于 1964 年 8 月中国科学院金属电子论学习讨论会上作过报告。

实际的滑移系统均为(110)[111]。最近有些作者<sup>[9]</sup>把包含[111]方向并受到最大分解切应力的晶面上的分力,当作临界切应力是不合适的;因为它和实际滑移面的位置也许有偏差,这会增加实验数据的误差;另一方面,在不同温度下比较不同滑移系统的临界切应力,也缺乏明确的物理意义。

(2) 根据 Allen 等<sup>[10]</sup>过去的铁单晶实验,在室温以下,临界切应力和  $\cos\phi\cos\lambda$  数值有明显的依赖关系,温度越低,依赖关系越大。我们的鉍单晶初步实验,也指出类似的依赖关系(图1)。(我们的取向因子范围较大,看起来依赖关系是肯定的,但并不象 Allen 所说那样简单,进一步的实验是必要的。)为了减小系统误差,在低温必须把  $\cos\phi\cos\lambda$  值控制在很窄的范围内。我们实际上是把它们之间的差值控制在  $\pm 0.008$  之间(由于劳厄法测定取向的准确度所限,控制在更窄的范围已不必要)。在这方面,最近有些工作似乎也还注意得不够。

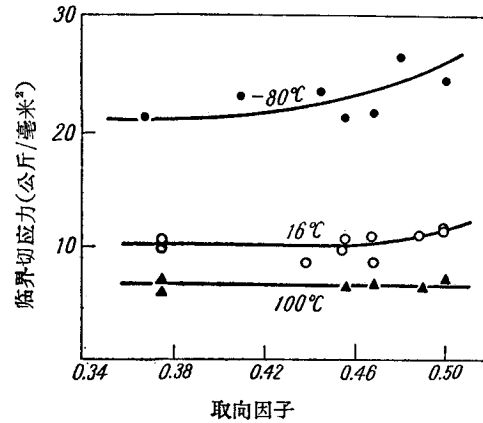


图1 临界切应力和取向因子的依赖关系

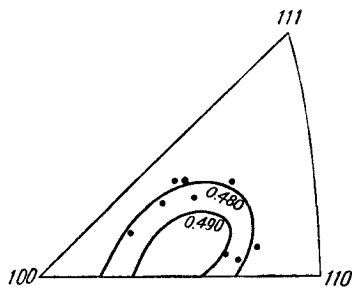


图2 MI 样品取向

基于上述两点考虑,在我们做出的三批共 100 个鉍单晶中,只有一部分样品满足上述两个条件。例如第一批样品的取向如图 2 所示。

2. 实验步骤 我们一共进行了三批样品的试验,具体步骤如下:用形变再结晶方法<sup>[8]</sup>将工业纯鉍制成直径为 0.8 毫米的单晶,将长度 35 毫米以上的单晶样品在 1800°C 真空保温 1.5 小时<sup>1)</sup>(真空度约为  $10^{-4}$  毫米水银柱),再用电解磨光表面。拉伸试验是在瑞士阿姆斯特勒制造的 MI 44 型小拉伸机上进行的。样品标

距为 20 毫米。从 -140°C 到室温用液态空气加入酒精作冷却剂;从室温到 300°C 用电阻丝炉加热。在测量应力-应变曲线的时间里,温度波动不超过  $\pm 2^\circ\text{C}$ ,拉伸速度约  $5 \times 10^{-3}$  秒<sup>-1</sup>。当所测量温度在 -80°C 到 200°C 之间时,出现明显的屈服现象;温度再高,屈服现象变得不明显。屈服应力取的是  $\sigma_{0.05}$ ,它实际上接近比例极限。从屈服应力求出在(110)[111]方向的分解切应力当作我们的临界切应力。

### 三、实验结果及分析

我们知道,以往提出的屈服应力和温度的依赖关系有:

1. Cottrell-Bilby 的复杂函数关系<sup>[2]</sup>;
2. Fisher 简化了的  $\sigma \propto T^{-1}$ <sup>[3]</sup>;
3. Cottrell 后来提出的  $\sigma(T) = \sigma(0) - kT^{1/3}$ <sup>[11]</sup>;

1) 真空退火的目的是希望去掉一部分氧,但后来发觉效果不大,第二、第三批便没有真空退火。

4. Haasen 根据 Cottrell 模型提出的  $\sigma \propto k/T^{3/2}$ <sup>[12]</sup>;
5. Seeger 关于切割位错林的  $\sigma = A - BT$ <sup>[13]</sup>;
6. Petch 等关于派-纳力的  $\sigma(T) = \sigma(0)e^{-BT}$ <sup>[14]</sup>.

我們的实验数据不符合关系 5 是明显的。再者,如果符合关系 3, 則在  $\sigma-T^{1/2}$  图上应

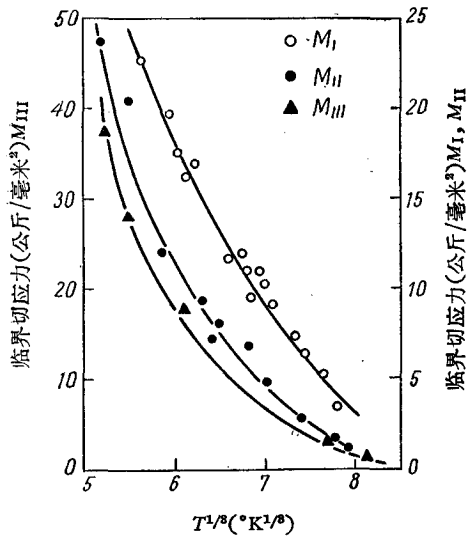


图 3  $\sigma-T^{1/2}$  关系

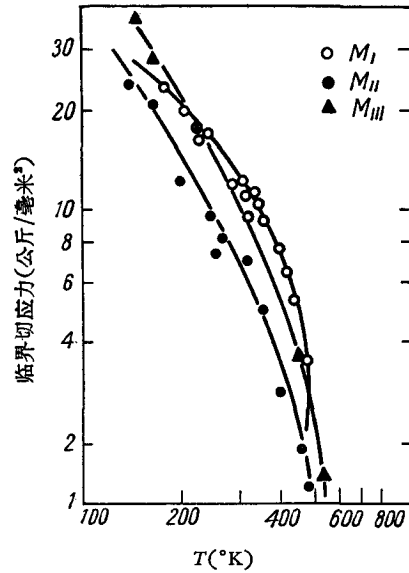


图 4  $\ln \sigma - \ln T$  关系

得到直線关系, 但从图 3 可以看出, 实验点显著偏离直線。又若符合关系 4 和关系 2, 則在  $\ln \sigma - \ln T$  双对数图上应当得到直線关系, 而且斜率应分别为 -3 或 -1。但是图 4 指出, 它們显著偏离直線(参看附录三)。

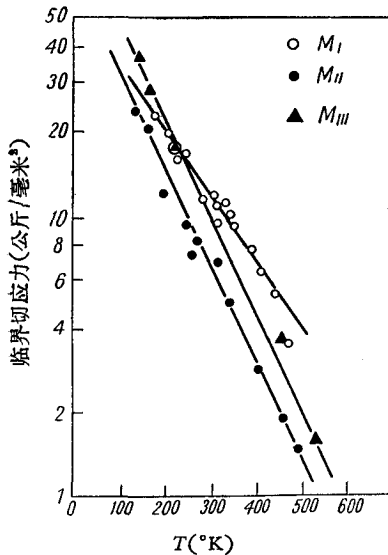
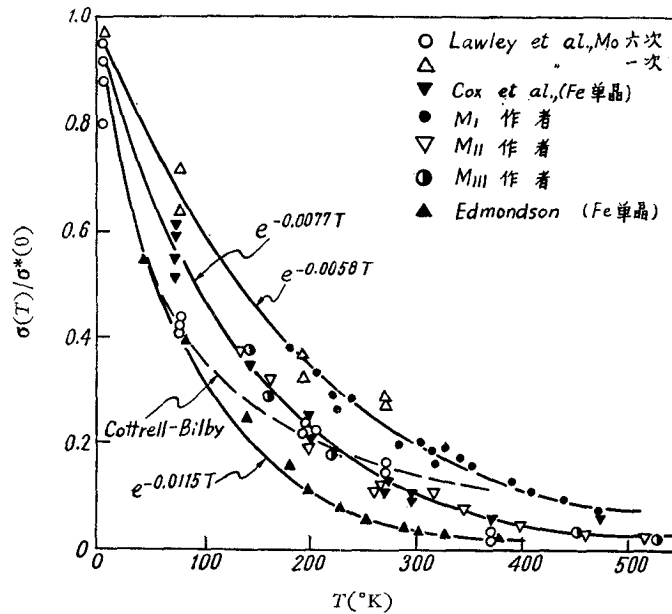


图 5  $\ln \sigma - T$  关系

图 5、图 6 指出, 实验数据約在 100°K 到 500°K 之間近似符合  $\sigma(T) = \sigma^*(0)e^{-BT}$  的关系<sup>1)</sup>(极低温 Lawley 等的实验点較分散, 而且很稀, 在图 6 中画出只作参考对比用), 而不符合 Cottrell-Bilby 的理論曲綫。尽管三批样品的成分差别可能影响临界切应力的绝对数值和直綫斜率, 但是  $\ln \sigma - T$  的直綫关系沒有变(图 5)。从半对数图上外推到 0°K 可以得到  $\sigma^*(0)$ (这个  $\sigma^*(0)$  不一定是真正的绝对零度的临界切应力  $\sigma(0)$ , 后面将看到, 在  $B$  值很小时它和  $\sigma(0)$  接近;  $\sigma$  除此数后可以不同金属的温度依赖关系規律性作比較, 更可以明确  $B$  值的物理意义), 求出各个温度的  $\sigma(T)/\sigma^*(0)$  和 Lawley 等<sup>[9]</sup> 的数据一起作温度依赖关系图(图 6)。可以看出, 我們的第一批样品 ( $M_I$ ) 和 Lawley 等的一次区域提

1) 也试验过  $\sigma_{0.8}$  算出的临界切应力结果, 其对数值和  $\sigma_{0.08}$  一样, 和绝对温度呈线性关系。

图6  $\sigma(T)/\sigma(0)-T$  关系

純样品都很好符合  $\sigma(T)/\sigma^*(0) = \exp[-0.0058T]$  的关系, 而第二批 ( $M_{II}$ ) 和第三批样品 ( $M_{III}$ ) 与 Lawley 等的六次区域提純样品符合  $\sigma(T)/\sigma^*(0) = \exp[-0.0077T]$  的关系。我們的  $B$  值和 Lawley 等的接近是偶然的, 画在一起的目的也仅是为了說明都符合半对数近似規律性。Lawley 等的数据显得少一点, 而且也較分散; 但除开六次提純样品在  $77^\circ\text{K}$  的實驗点以外, 其他各實驗点也可以近似地說都落在指数曲綫的附近。由于分析技术准确度的限制, Lawley 等和我們自己均不能准确地說出这两条曲綫所代表的杂质含量的确切差別。但是, 我們知道, Lawley 等的杂质含量已低于鉬中最大溶解度, 如果我們相信六次区域提純的样品純度总比一次提純的高, 則可以初步定性地認為, 固溶体中杂质原子越少,  $B$  值越大(这一点在后面將說明它在理論上的可能)。我們的工业純鉬杂质較多, 但从鉬-杂质 (O, N, C) 的平衡图知道, 鉬对这些杂质的溶解度很低, 因此, 如果样品制备的最后冷却过程进行得很慢, 則固溶体中保留的杂质也会很少,  $B$  值和 Lawley 等的偶然接近也是可能的。

Lawley 等的實驗里曾經出現过这样的現象: 在較高温度范围内, 純度越高, 屈服应力和温度的依賴关系越小; 但在极低温出现了相反的情况, 高純样品的屈服应力急剧升高。这个現象正好可以用指数的特点來說明。因为

$$\sigma(T) = \sigma^*(0)e^{-BT}, \quad (1)$$

則

$$\sigma'_1(T)/\sigma'_2(T) = (B_1\sigma_1^*(0)/B_2\sigma_2^*(0))e^{-(B_1-B_2)T}. \quad (2)$$

在 Lawley 等的实际情形, 令 1 代表一次提純样品, 2 代表六次提純样品, 从其試驗結果看出, 他們的  $\sigma_1(0) \sim \sigma_2(0)$ , 故(2)可以簡化为

$$\sigma'_1(T)/\sigma'_2(T) = (B_1/B_2)e^{-(B_1-B_2)T}. \quad (2')$$

利用实验的  $B_1, B_2$  数值可以求出当  $T = 144^\circ\text{K}$  时  $\sigma'_1(T) = \sigma'_2(T)$ , 但在下列情况: (1)

$T < 144^\circ\text{K}$  时,  $\sigma'_1(T) < \sigma'_2(T)$ ; (2)  $T > 144^\circ\text{K}$  时,  $\sigma'_1(T) > \sigma'_2(T)$ ; 也就是 Lawley 等

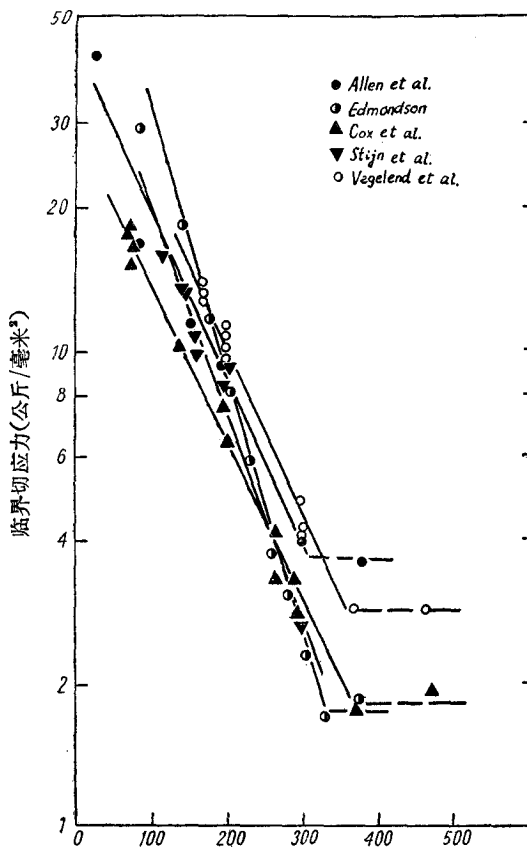


图7 铁单晶的  $\ln\sigma-T$  关系

也 和 铜 单 晶 一 样, 和 温 度 的 依 赖 关 系 是 近 似 指 数 规 律 的。

总 结 上 述 实 验 结 果, 可 以 得 到 下 列 几 点 结 论:

1. 铜单晶和铁单晶的临界切应力和温度的依赖关系, 约在  $100^\circ\text{K}$  到  $500^\circ\text{K}$  之间近似遵循  $\sigma(T) = \sigma^*(0) \exp(-BT)$  的规律。

2. 常数  $B$  的数值对铜单晶和铁单晶而言, 数量级均在  $10^{-2} - 10^{-3} (^\circ\text{K}^{-1})$  之间, 反映出体心立方金属屈服应力和温度的强依赖关系的特点。

3. 从铜单晶一次区域提纯样品和六次区域提纯样品的实验数据, 似乎可以初步看出一个定性的倾向: 固溶体内杂质原子浓度越低,  $B$  值越大。由于分析技术准确度的限制, 我们在比较上述铁单晶不同作者实验曲线的  $B$  值和成分的关系时有一定的困难。虽然如此, 我们仍看到  $B$  值最大的是 Edmondson 的数据, 而他的样品的纯度是比其他作者的高 (杂质也大大低于最大溶解度)。关于这一点, 应该说系统的实验数据还是很不够的。

应该指出: 这种近似指数规律在金属单晶临界切应力方面, 还没有人得到过; 在金属多晶体方面, 1963 年 Horne 等<sup>[19]</sup>才指出 Michalak 的高纯铁屈服应力数据符合这种关系。他们在实验规律方面不曾指出上述 2, 3 两个重要特点, 在理论观点方面则支持 Petch<sup>[11]</sup>提出的派-纳力模型, 而派-纳力则应当是和杂质无关的; 前面我们已经指出, 纯度对  $B$  值却

得到的实验现象。在另一些情形下, 当  $B_1 < B_2$ , 而  $\sigma_1^*(0) \gg \sigma_2^*(0)$  时, 则在整个温度范围内,  $\sigma'_1(T) > \sigma'_2(T)$ 。

Lawley 等指出, 他们的六次区域提纯样品是符合 Cottrell-Bilby 的理论曲线的。但是, 根据和我们三批铜单晶实验结果的比较(图 6), 可以看出: 除  $77^\circ\text{K}$  这一个温度的实验点以外, 其他实验点均可以概括到指数规律上去。因此, 我们初步认为这个温度的实验数据的偏离, 可能是由于某些实验条件(如前面考虑的两个取向因素, 或其他实验条件等)所致。

我们还收集了近年来铁单晶的实验数据。Edmondson<sup>[15]</sup>, Cox 等<sup>[16]</sup>, Allen 等<sup>[10]</sup>, Vogel 等<sup>[17]</sup>及 Steijn 等<sup>[18]</sup>的临界切应力数据也近似半对数关系, 不过他们的数据一般分散一些: 高温一端由于 Snoek 气团的作用, 临界切应力不再继续下降(参看图 7)。我们将 Edmondson 和 Cox 等的实验数据画在图 6 中和铜单晶比较, 可以看出: 铁单晶临界切应力

有明显的影晌。

从鉬单晶实验中我們体会到: 选择样品时考虑前面指出的两个取向因素是有帮助的。一方面我們认为这种选择较为合理, 另一方面, 就临界切应力的数值而言, 如果不考虑或者考虑上述两个因素不够, 则可能数据分散(如鉬单晶一次区域提纯样品<sup>[9]</sup>及其他鉄单晶样品), 也可能少数实验点离奇地偏离(如鉬单晶六次区域提纯样品<sup>[9]</sup>及某些鉄单晶样品)。这两种现象的出现, 对于总结实验规律都是不利的。

#### 四、討 論

单纯从指数关系来看, 似乎我們的实验结果支持 Petch<sup>[14]</sup> 的派-納力模型, 但如果进一步全面分析一下上述其他两点实验结论, 则发现仍有困难。

Petch 认为  $\alpha$ -鉄屈服应力和温度的依赖关系由位错的派-納力所支配。在温度范围不太宽的情形, 可以近似假设位错宽度随温度线性变化, 则派-納力是温度的指数函数。他对于位错宽度和温度的线性依赖关系没有更深入的物理解释, 因此还不能从理论上估计出  $B$  值, 以便和实验结果相比。按照他的说法, 这种指数关系只能在很窄的温度范围实现(如  $50^\circ$  以内), 但是我們得到的近似指数关系却在宽得多的温度范围内保持。

1960 年 Kuhlman-Wilsdorf<sup>[20]</sup> 考虑原子的不相关热运动使位错中心位置不能确切定出, 对派-納力随温度升高而指数降低的现象, 提出了较为普遍适用的物理解释。在这里我們引用对比, 作为分析问题的参考。根据作者(17)式,  $B_{P-N}$  值的数量级可以作如下估计:

$$B_{P-N} = -\frac{\partial}{\partial T} [\ln \sigma(T)] = -\left(\frac{4\pi\bar{u}}{p}\right)^2 \frac{r_0}{p} \frac{1}{T}, \quad (3)$$

其中  $\bar{u}$  为原子热振幅均方根值, 可以利用爱因斯坦模型估计;  $p$  为派-納能量峰间宽度, 近似  $p \sim b$ ,  $r_0 \sim 1.4b$ ; 并令  $b \sim 2.8 \times 10^{-8}$  厘米, 则估计出鉬的  $B_{P-N} = 0.8 \times 10^{-4}$ , 鉄的  $B_{P-N} = 1.2 \times 10^{-4}$ 。这个数值比实验结果小了一个到两个数量级(实验值在  $10^{-2}$ — $10^{-3}$  之间)。这说明由于派-納力产生的温度依赖关系很小。特别还应当指出的是派-納力不能说明第 3 点实验现象: 杂质含量对  $B$  值影响很大, 杂质含量增多,  $B$  值下降。

我們有一个初步的看法, 可以粗略地解释前面的三点实验现象<sup>[21]</sup>。目前, 关于产生屈服现象的具体机构还在争论中。我们认为, 解决屈服现象的具体机构和明了什么是屈服过程的控制因素, 这两个问题是相互联系和相互促进的。但是, 这两个问题也还有它相互区别的一面。譬如 Conrad<sup>[6]</sup> 曾经提出位错增殖的双交滑移机构来解释屈服现象, 但是他又认为, 对这些过程的速率起控制作用的仍是克服派-納力。下面我們将从对屈服过程起控制作用的因素方面来讨论前述实验事实, 它并不排斥和它不相矛盾的其他具体机构。

Stein 及 Low<sup>[22]</sup> 观察到在 Fe-Si 合金单晶中, 自由位错的能动性和温度的依赖关系是与屈服应力和温度的依赖关系相类似的。克服位错运动的摩擦力可能是控制性的因素。但是, 我们不赞同派-納力的说法, 理由已如前述。实验事实促使我們重视自由位错和杂质原子的交互作用<sup>[21, 23]</sup>。

1. Van Bueren<sup>[24]</sup> 分析半导体中的杂质原子和位错的交互作用时, 认为杂质原子可能与位错中心原子的未配对电子形成化学键, 这种键合的能量是很大的, 他估计会有 2—3

电子伏特。如果我们把杂质原子和金属晶体位错中心原子之间的作用，也看成是共价键或部分共价键的，那么它们的键能虽然不象典型的共价键晶体那么大，但比起小一个数量级的弹性交互作用能(0.2~0.5 电子伏特)来说还应该大的。成键的假说近年来在过渡族金属里有更多的应用<sup>[25,26]</sup>。大多数体心立方过渡族金属都是  $d$  电子成分较大的金属<sup>[27]</sup>，因此它的成键能力很强，特别是铬、钼、钨，杂质原子更易在缺陷附近成键<sup>[28]</sup>。杂质原子和运动位错中心原子成键的形成和破坏过程，对运动位错产生一个障碍，克服这个障碍需要一定的应力，考虑杂质原子在刃型位错中心的情况，尽管位错中心附近的其他原子，相对于完整晶体而言，其周围状况有所改变，但近邻的数目未变。只有位错中心原子的近邻才是少了一个，因而有一悬键使得这个原子和杂质原子的成键作用最突出。再因为键合作用力是短程的，作为初步近似，在位错线上，其他较远的位错中心原子和杂质原子的键合作用也可以不考虑。初步的近似可以当作异类双原子分子情形来处理<sup>1)</sup>。可以证明：当共价键合力稍大于弹性作用力时，共价键合力和温度的指数关系，即近似地反映了整个临界切应力和温度的指数依赖关系(见附录一)。

异类双原子分子电子结构的量子力学处理是比较复杂的，因为需要知道原子解析波函数和进行大量的计算。这里我们只采用 Morse 近似势函数近似代表键合作用的表达式：

$$U_c = De^{-2\alpha(r-r_0)} - 2De^{-\alpha(r-r_0)}, \quad (4)$$

其中  $r_0$  表示平衡状态下杂质原子和位错中心原子的距离，受切应力作用后变为  $r$ ； $-D$  表示平衡状态下的  $U_c$  值； $\alpha$  为 Morse 势函数参数。在绝对零度受切应力作用时，位错中心原子相对于杂质原子位移  $x$ 。在有温度的情况下，位错中心原子相对于平衡位置还作热振动，振幅为  $u$ 。这种热振动包括两部分：一部分为个别杂乱热振动部分，其振幅很小，不起主要作用；另一部分为位错中心原子作为位错组态中集体的一员(考虑杂质应力场的影响)参加集体效应，即位错线段的振动<sup>[29]</sup>，这部分振幅很大，起主要作用。如果温度足够高、 $u$  足够大，则有可能达到某一临界状态，越过位垒，即位错线克服了杂质原子的摩擦力，继续运动。为了用 Morse 势找出越过势垒的条件，求出摩擦力，先将  $U_c$  表示为  $x$  及  $\bar{u}^2$  的函数。在某个温度受切应力作用时，位错中心原子相对于杂质原子位移，使二者之间距离改变的平均值为

$$\bar{r} = \overline{[r_0^2 + (x + u)^2]^{\frac{1}{2}}} \cong r_0 \left[ 1 + \frac{1}{2r_0^2} (x^2 + \bar{u}^2) \right], \quad (5)$$

其中我们用了： $x + u < r_0$  (位错中心原子移动一临界位移即可克服摩擦阻力，此临界位移小于  $r_0$ ) 在合适的温度范围内(约在 100°K—500°K 之间)。第(4)式可以近似为(见附录二)

$$U_c(x, \bar{u}^2) \cong D_1(x) \exp\left(-\frac{\alpha}{2r_0} \bar{u}^2\right), \quad (6)$$

而不致于有超出拉力试验可能实验误差范围(如 10%)。其中

$$D_1(x) = D \left[ Ae^{-\frac{\alpha}{r_0} x^2} - 2e^{-\frac{\alpha}{2r_0} x^2} \right],$$

1) 更细致的考虑杂质原子和其他近邻的键合作用时，因为键的性质相同， $\alpha$  值相同，因此，规律性不会变，但总的键合作用加强，理论估计的杂质摩擦力会增大。

$A$  为某一合适参量。(6)式在极低温度近似程度较差,但在  $\frac{\alpha \bar{u}^2}{2r_0 T}$  小时可取  $A \sim 1$ ,则即使在极低温度,近似程度也不坏。

$$\sigma b = - \left( \frac{\partial U_c}{\partial x} \right)_{\text{最大}} (C_i n)^{1/3}, \quad (7)$$

令  $\sigma^*(0) = - \frac{1}{b} \left( \frac{\partial D}{\partial x} \right)_{\text{最大}} (C_i n)^{1/3}$ , 又因  $\bar{u}^2 \propto T$ , 故

$$\sigma(T) = \sigma^*(0) \exp(-BT), \quad (8)$$

其中

$$B = \frac{\alpha}{2r_0} \langle \bar{u}^2 / T \rangle. \quad (9)$$

$B$  的单位为 ( $^{\circ}\text{K}^{-1}$ );  $C_i$  表示固溶体中正常点阵地区溶质原子浓度;  $n$  为单位体积基体金属原子数。(8)式即为实验所表现的近似指数规律。从(8)式的由来再一次看到我们和派-纳力指数规律的区别。我们的指数关系是近似的,严格的结论应当是从处理附录二中的(II-1)式得到。

2.  $B$  值的数量级估计  $B$  的数值主要决定于  $\bar{u}^2$ 。前面已经指出:位错中心原子的  $\bar{u}^2$  起主要作用的是位错线段的热振动(参看图8)。对于高纯金属,可以根据 Leibfried 的计算<sup>[29]</sup>估计位错线段中部有杂质应力场作用时的热振幅大小(在计算时,把杂质摩擦应力近似到线性相互作用项)。

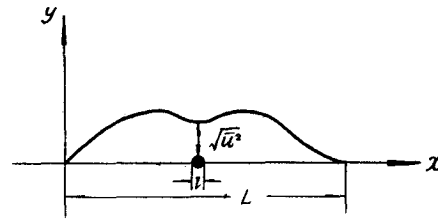


图8 位错线段振动

$$\bar{u}^2 = \frac{2kT}{\frac{E\pi^2}{L} + 2\tau_i l} = \begin{cases} \sim \frac{kT}{\tau_i l} \left( \tau_i \gg \frac{Gb^2}{lL} \right), \\ \sim \frac{kT}{2\tau_i l} \left( \tau_i \approx \frac{Gb^2}{lL} \right), \end{cases} \quad (10)$$

其中  $l$  表示杂质应力场作用范围,一般令  $l \sim b$ ;  $L$  为位错线段长度;  $E$  为位错线能量 ( $= \frac{1}{2} Gb^2$ );  $G$  为切变模量;  $\tau_i$  为杂质产生的摩擦应力参数。如令  $\tau_i \sim 2 \times 10^{-3} G$  (附录四),由于  $\tau_i \geq \frac{Gb^2}{lL}$  [ $L \cong (10^3 \sim 10^4)b$ ], 根据(10)式,  $\bar{u}^2 \cong \frac{kT}{2\tau_i b} = 5b^2 T / T_s$ , [其中  $kT \cong 2 \times 10^{-2} Gb^3 (T/T_s)$ ]<sup>[7]</sup>, 则

$$(\bar{u}^2)_{\text{Mo}} \cong 0.17 \times 10^{-2} b^2 T \quad (T_s = 2898^{\circ} \pm 25^{\circ} \text{K});$$

$$(\bar{u}^2)_{\text{Fe}} \cong 0.27 \times 10^{-2} b^2 T \quad (T_s = 1808^{\circ} \text{K}).$$

再令  $\alpha r_0 \sim 3$ <sup>[30]</sup> (一般金属和非金属原子之间的势函数参数还缺乏数据,这里作为数量级估计,采用了 Slater 的近似量,根据经验,  $\alpha r_0$  的变化范围很小,均在  $3 \sim 4$  左右,参看文献[31]),并设  $r_0 \sim 0.8b$ <sup>[24]</sup>, 则

$$B_{\text{Mo}} \cong 0.40 \times 10^{-2} (^{\circ}\text{K}^{-1}),$$

$$B_{\text{Fe}} \cong 0.60 \times 10^{-2} (^{\circ}\text{K}^{-1}).$$

这个数值和实验值在数量级上符合。

3. 从(10)式还可以推想到:杂质原子越多,  $\bar{u}^2$  会越小,也就是说  $B$  值会减小。这也

能初步定性地说明为什么 Lawley 等六次区域提纯的铝单晶,  $B$  值比一次区域提纯得高。

总结以上: 利用杂质原子和位错中心原子成键的概念, 利用 Morse 势可以得到以下三点结论: (1) 临界切应力的温度依赖关系表现为 Morse 势特点的复杂函数关系; 在合适的温度范围内(约在  $100-500^\circ\text{K}$  之间), 则近似为指数规律; (2) 常数  $B$  的数值对铝单晶和铁单晶而言, 数量级在  $10^{-2}-10^{-3} (^{\circ}\text{K}^{-1})$  之间; (3) 固溶体内杂质浓度对  $B$  值有影响, 杂质浓度越低,  $B$  值越大。这些结论和前面得到的三点实验现象是一致的。

在整个实验过程中, 徐振江同志担任了某些具体操作; 姜健、邹本山同志参加了部分分析计算。工作过程中, 苟清泉教授在金属键理论方面, 钱临照教授在实验方面给作者许多启发性的讨论和建议, 周邦新同志介绍了铝单晶制备方法。许多前辈和同行工作者们对本文提出了宝贵的意见, 作者在此一并致谢。

## 附 录

一、令  $f_c$  及  $f_e$  相应表示键作用和弹性作用力(弹性作用力暂用 Fisher 的表达式), 则合力

$$F = f_c + f_e = A_1 e^{-B_1 T} + \frac{K}{T}, \quad (\text{I-1})$$

$$\begin{aligned} \ln F &= \ln A_1 - B_1 T + \ln \left[ 1 + \frac{K e^{B_1 T}}{A_1 T} \right] \cong \\ &\cong \ln A_1 - B_1 T + \ln \left[ 1 + \frac{K}{A_1 T} + \frac{K B_1}{A_1} + \frac{K B_1^2}{2 A_1} T \right] \cong \\ &\cong \ln A_1 - B_1 T + \frac{K}{A_1 T} + \frac{K B_1}{A_1} + \frac{K B_1^2}{2 A_1} T \quad (\text{设 } f_e/f_c < 1); \\ B_{\text{实}} &\cong \left( -B_1 + \frac{K B_1^2}{2 A_1} \right) - \frac{K}{A_1 T^2} = \text{常数} - \frac{K}{A_1 T^2}. \end{aligned} \quad (\text{I-2})$$

在各温度  $B_{\text{实}}$  对常数的相对偏离  $\varphi(T)$  为

$$\frac{1}{B_{\text{实}}} \frac{\partial B_{\text{实}}}{\partial T} = \frac{2K}{A_1 B_{\text{实}} T^3} < \frac{2}{B_{\text{实}}^2 T^3} = \frac{2 \times 10^4}{T^3}. \quad (\text{I-3})$$

上式用了  $f_e/f_c < 1$  及  $B_1 \sim B_{\text{实}} \sim 10^{-2}$  的条件, 因此

- (1)  $f_e/f_c \leq 1$ ,  $T = 100^\circ\text{K}$  时,  $\varphi(T) \leq 2 \times 10^{-2}$ ;
- (2)  $f_e/f_c = \frac{1}{2}$ ,  $T = 100^\circ\text{K}$  时,  $\varphi(T) < 1 \times 10^{-2}$ .

$f_e/f_c$  的比值越小,  $T$  值越高, 则在各温度  $B_{\text{实}}$  对常数的相对偏离  $\varphi(T)$  会更小, 在极低温度偏离会大, 这是和超出 Fisher 表达式的应用范围有关的。

二、溶质原子和位错中心原子键合能量的近似式

$$U_c = D \left[ e^{-\frac{\alpha}{r_0}(x^2+u^2)} - 2e^{-\frac{\alpha}{2r_0}(x^2+u^2)} \right], \quad (\text{II-1})$$

其中用了以下关系:

$$r - r_0 \sim \frac{x^2 + u^2}{2r_0}.$$

又因  $\bar{u}^2 \propto T$ , 故

$$U_c = D \left[ e^{-\frac{\alpha}{r_0} x^2 - 2BT} - 2e^{-\frac{\alpha}{2r_0} x^2 - BT} \right]. \quad (\text{II-2})$$

对于不同的  $B$  值(如  $B = 0.0058$ ), 可以通过 (II-2) 严格求出各温度下的  $\frac{\partial U_c}{\partial x}$  的最大值, 再按

$$\sigma(T)/\sigma(0) = \left( \frac{\partial U(x, T)}{\partial x} \right)_{\text{最大}} / \left( \frac{\partial U(x, 0)}{\partial x} \right)_{\text{最大}} \quad (\text{II-3})$$

求出各种温度的  $\sigma(T)$  (如图 9)。图中曲线 1 表示严格的曲线, 可以看出它和曲线 2

$$y = 1.2e^{-BT} \quad (\text{II-4})$$

在 100—500°K 范围内  $\frac{\Delta\sigma}{\sigma}$  不超过 10%; 在绝对零度附近偏差较大,  $\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim 20\%$ 。可是在实验上, 根据 Lawley 等<sup>[9]</sup> 的 4°K 鉬单晶数据看来, 分散程度也接近 20% 了。

三、假设实验数据符合直线关系  $y = a + bx$ , 在 (I)  $y = \ln \sigma$ ,  $x = T$ ; (II)  $y = \sigma$ ,  $x = T^{1/3}$ ; (III)  $y = \ln \sigma$ ,  $x = \ln T$  三种情况下, 可以用最小二乘法定出各种情况的  $a$ ,  $b$  值, 并求出均方偏差作比较。

从  $M_I$ ,  $M_{II}$ ,  $M_{III}$  三种样品的实验结果看来, 在三种规律中,  $\ln \sigma = a + bT$  的偏差最小。

四、为了估计 (10) 式中的  $\tau_i$ , 我们按照 Leibfried 原来的定义:

$$\tau_i = -\frac{\tau(x)b}{x} = -\frac{2\alpha DC_i^{1/3}}{r_0 b} \left[ e^{-\frac{\alpha}{r_0} x^2} - e^{-\frac{\alpha}{2r_0} x^2} \right]. \quad (\text{IV-1})$$

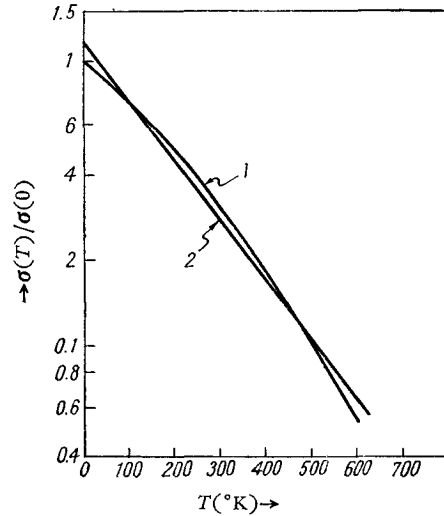


图 9

1——严格处理 Morse 势函数  $\sigma(T)/\sigma(0)-T$  关系; 2——在实验上可能得到的近似半对数线性关系

	$M_I$		$M_{II}$		$M_{III}$	
	$a, b$	$\sum(\sigma_{\text{实}} - \sigma_T)^2/n$	$a, b$	$\sum(\sigma_{\text{实}} - \sigma_T)^2/n$	$a, b$	$\sum(\sigma_{\text{实}} - \sigma_T)^2/n$
(I)	$a = 4.20$ $b = -5.7 \times 10^{-8}$	0.738	$a = 4.19$ $b = -7.7 \times 10^{-8}$	1.14	$a = 4.64$ $b = -7.7 \times 10^{-8}$	2.42
(II)	$a = 79.32$ $b = -9.97$	1.64	$a = 60.63$ $b = -7.82$	2.03	$a = 92.45$ $b = -11.5$	12.16
(III)	$a = 10.95$ $b = -1.50$	1.245	$a = 13.42$ $b = -2.05$	5.65	$a = 15.24$ $b = -2.34$	3.82

[注意: 我们的  $\tau(x)$  相当于文献 [29] 中的  $\tau(x, y)$ ,  $\tau_i$  相当于  $\tau_0$ .] 一般说,  $\tau_i$  和  $x$  有关, 可以看出, Leibfried 的近似是比较粗略的:

$$\tau_i \sim \frac{\alpha^2 DC_i^{1/3}}{r_0^2 b} x^2. \quad (\text{IV-2})$$

为得到近似值,取  $\bar{\tau}_i$ :

$$\bar{\tau}_i \sim \frac{\alpha^2 DC_i^{1/3}}{r_0^2 b} \left[ \int_0^{r_0/2} x^2 dx / \frac{r_0}{2} \right] = \frac{3DC_i^{1/3}}{4br_0^2}. \quad (\text{IV-3})$$

对铁而言,  $\bar{\tau}_i \sim (2.0 \sim 4.4) \times 10^9$  达因/厘米<sup>2</sup>  $\sim (2.6 \sim 5.7) \times 10^{-3} G$  (其中假设了  $D_{Fe-Fe}$  和  $D_{Fe-杂质}$  之差不太大)。由此可见,前面我们假设  $\tau_i \sim 2 \times 10^{-3} G$  是合理的。

### 参 考 文 献

- [1] Cottrell, A. H., Rept. on Stength of Solids, *Phys. Soc.*, London (1948), 30.
- [2] Cottrell, A. H. and Bilby, B. A., *Proc. Phys. Soc.*, **A62** (1949), 49.
- [3] Fisher, J. C., *Trans. Amer. Soc. Met.*, **47** (1955), 451.
- [4] Heslop, J. and Petch, N. J., *Phil. Mag.*, **1** (1956), 866.
- [5] Conrad, H. and Schoeck G., *Acta Met.*, **8** (1960), 791.
- [6] Conrad, H. J., *Iron Steel Inst. (London)*, **198**, part 4 (1961), 36.
- [7] Schoeck, G., *Acta Met.*, **9** (1961), 382.
- [8] 周邦新, 物理学报, **19** (1963), 285.
- [9] Lawley, A., Van den Sype, J. and Madin, R., *J. Inst. Met.*, **91** (1962—63), 23.
- [10] Allen, N. P., Hopkins, B. E. and McLennan, J. E., *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A234** (1956), 221.
- [11] Cottrell, A. H., *Trans. Amer. Inst. Min. (Metall) Eng.*, **212** (1958), 192.
- [12] Haasen, P., *Internal Stresses and Fatigue in Metals*. (1959), 205, Elsevier Amsterdam.
- [13] Seeger, A., *Dislocation and Mechanical Properties of Crystals*, 1957, 243.
- [14] Petch, N. J., *Phil. Mag.*, **3** (1958), 1089.
- [15] Edmondson, B., 参看 Allen, N. P., in: *Frature, Proc. Inter. Conf. Atom. Mech. Frature*, Swampscott, Massachusetts, 1959.
- [16] Cox, J. J., Horne, G. T. and Mehl, R. F., *Trans. Amer. Soc. Met.*, **49** (1959), 118.
- [17] Vogel, F. L. Jr. and Brick, R. M., *Trans. AIME*, **197** (1953), 700.
- [18] Steijn, R. P. and Brick, R. M., *Trans. Amer. Soc. Met.*, **47** (1954), 1406.
- [19] Horne, C. T., Roy, R. B. and Paxton, H. W., *J. Iron Steel Inst.*, **201** (1963), 161.
- [20] Kuhlman-Wilsdorf, D., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 773.
- [21] 龙期威、何青, 中国科学, **13** (1964), 160.
- [22] Stein, D. F. and Low, J. R., *J. Appl. Phys.*, **31** (1960), 362.
- [23] Stein, D. F., Low Jr. J. R. and Seybolt, A. U., *Acta Met.*, **11** (1963), 1253.
- [24] Van Bueren, H. G., *Imperfections in Crystals*, 1960. 193—195, Amsterdam.
- [25] 苟清泉, 科学通报, **6** (1962), 22.
- [26] Hume-Rothery, W., *Atomic Theory for Students of Metallurgy*, Third (revised) Edition, 1960.
- [27] Altmann, S. L., Coulson, C. A. and Hume-Rothery, W., *Proc. Roy. Soc.*, **A240** (1957), 145.
- [28] Robins, D. A., *J. Less Common Metals*, **1** (1959), 396.
- [29] Leibfried, G., *Dislocation and Mechanical Properties of Crystals*, 1957, 495.
- [30] Slater, J. C., *Quantum Theory of Matter*, 1953, 253.
- [31] Girifalco, L. A. and Weizer, V. G., *Phys. Rev.*, **114** (1959), 687.

---

## TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE CRITICAL SHEAR STRESS OF MOLYBDENUM SINGLE CRYSTAL

LUNG CHI-WEI HO TSING CHOU CHIN

### ABSTRACT

The temperature dependence of the critical resolved shear stress (CRSS) of molybdenum single crystal has been investigated. It was found that the logarithm value of CRSS varies linearly with the absolute temperature which is not in agreement with Cottrell-Bilby's relationship based on atmosphere locking. Assuming that a chemical exchange bond between the impurity and dangling atoms would be weakened with rise in temperature and using the Morse function, the experimental linear  $\ln \sigma-T$  relationship could then be accounted for and a slope of the right order of magnitude established.