

面心立方晶体的泊松比

任 尚 元
(中国科学技术大学物理系)

1982年6月2日收到

提 要

用简单的物理模型解释了面心立方晶体的泊松比 $\nu_{1\bar{1}0}$ 为负的原因。指出了其两种泊松比 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001} 的数值的理论联系。实验结果和理论符合较好。

一、引 言

如果对面心立方晶体 $[110]$ 方向加一应力,除开在 $[110]$ 方向会有应变 ϵ_{110} 外,在与其垂直的另外两个主轴方向 $[1\bar{1}0]$ 和 $[001]$ 方向都会有相应的应变 $\epsilon_{1\bar{1}0}$ 和 ϵ_{001} 。据此可定义出两个泊松比

$$\nu_{1\bar{1}0} = -\epsilon_{1\bar{1}0}/\epsilon_{110} \quad (1a)$$

和

$$\nu_{001} = -\epsilon_{001}/\epsilon_{110} \quad (1b)$$

对于十二种面心立方晶体,泊松比 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001} 的实验数据可以根据泊松比和弹性模量的关系^[1]而由弹性模量 C_{ij} 的实验数据直接计算出,如表1所示。

一个非常有趣的现象就是除了 Al 以外,几乎所有的面心立方晶体的泊松比 $\nu_{1\bar{1}0}$ 都是负的 (Pd 和 Ar 在低温下呈现很小的正值,但它很可能是由实验误差引起^[2])。这表明,如果在 $[110]$ 方向加的是一个张力,那么除开在 $[110]$ 方向要伸长以外,在 $[1\bar{1}0]$ 方向也会伸长。这个有趣的现象曾被人用一个比较复杂的理论加以解释^[3]。我们认为,可以用非常简单的物理模型来解释这个现象,并有助于我们对其物理本质的进一步的认识。

二、模 型 1

我们可以讨论如图1所示的这样一个小单元。取 $[110]$ 方向为1方向, $[1\bar{1}0]$ 方向为2方向, $[001]$ 方向为3方向。取任何一个原子位置为原点0。在它的附近共有12个最近邻原子,其中4个原子W, X, Y, Z和0在同一个平面上,其坐标分别为 $(1, 0, 0)$, $(0, -1, 0)$, $(0, 1, 0)$ 和 $(0, 0, 1)$ 。这里我们取相邻原子之间在平衡时的距离为1。另有4个原子A, B, C, D共在一个平面上,坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}})$, $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}})$, $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}})$ 和 $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}})$ 。最后4个原子A', B', C', D'共在一个

表1 面心立方晶体的泊松比 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001}
(由文献[1]根据弹性常数的实验数据计算得到)

晶 体	温 度	$\nu_{1\bar{1}0}$	ν_{001}
Pd	0	0.010	0.745
	50	0.005	0.753
	100	-0.004	0.765
	150	-0.015	0.777
	200	-0.028	0.789
	250	-0.038	0.801
	300	-0.049	0.813
Th	0	-0.215	0.753
	300	-0.223	0.794
Cu	0	-0.138	0.806
	300	-0.136	0.819
Ag	0	-0.093	0.809
	300	-0.096	0.828
Au	0	-0.029	0.867
	300	-0.032	0.876
Al	0	0.267	0.397
	300	0.272	0.414
Pb	0	-0.186	0.970
	300	-0.209	1.033
Ni	0	-0.051	0.607
	300	-0.055	0.631
Ne	4.7	-0.13	0.65
	24.3	-0.095	0.69
Ar	4	0.006	0.459
	4.2	-0.11	0.520
	82.3	-0.083	0.710
Kr	0	-0.078	0.611
Xe	151	-0.10	0.69

平面上,坐标为 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$, $\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$, $\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$, 和 $\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$.

以上是没有应变时的情形. 如果存在应变,我们假定在 1, 2, 3 三个主轴方向的应变分别为 $\delta_1, \delta_2, \delta_3$, 那么在应变后, 如果我们保持原点 0 的位置不变, W 原子的位置将成为 $(1 + \delta_1, 0, 0)$, X 原子的位置将成为 $(0, -1 - \delta_2, 0)$, 而 A 原子的位置将成为 $\left(\frac{1 + \delta_1}{2}, \frac{1 + \delta_2}{2}, \frac{1 + \delta_3}{\sqrt{2}}\right)$, 余类推.

我们作如下假定:

在面心立方晶体中,只存在两种形式的弹性能. 一种是最近邻相互作用的距离弹性能 $F_d(x)$, 它只取决于最近邻原子之间的距离 x ; 另一种是最近邻相互作用的角度弹性

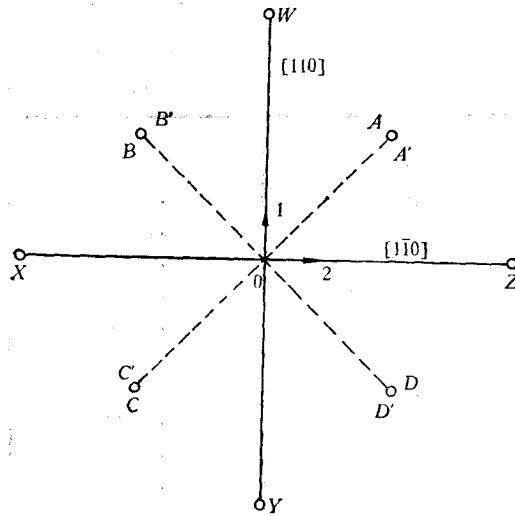


图1 面心立方晶体中任一原子0及最近邻的十二个原子

能 $F_a(\alpha)$ ，它只取决于最近邻键(这里我们取键的方向为连接两相邻原子的方向)之间的夹角 α 。

容易看到,平衡时最近邻键之间的夹角 $\alpha_0 = \pi/3$ 。这样的键角共有 24 个¹⁾。

不失一般性,我们可取这两种形式的弹性能在平衡位置时的数值为 0, 而且

$$F'_d|_{x=1} = 0, \quad (2a)$$

$$F'_a|_{\alpha=\pi/3} = 0. \quad (2b)$$

这里上撇表示对相应自变量的微商。这样,容易得到,在有应变存在着时,小单元内距离弹性能的增加为

$$\Delta E_d = \frac{1}{2} F''_d \cdot (\delta_1^2 + \delta_2^2) + 4 \times \frac{1}{2} F''_d \cdot \left(\frac{\delta_1}{4} + \frac{\delta_2}{4} + \frac{\delta_3}{2} \right)^2, \quad (3a)$$

角度弹性能的增加为

$$\begin{aligned} \Delta E_a = & 8 \times F''_a \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{3\delta_1}{4} - \frac{\delta_2}{4} - \frac{\delta_3}{2} \right) \right]^2 \\ & + 8 \times F''_a \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{3\delta_2}{4} - \frac{\delta_1}{4} - \frac{\delta_3}{2} \right) \right]^2 \\ & + 4 \times F''_a \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_1 - \frac{3}{2} \delta_2 + \delta_3 \right) \right]^2 \\ & + 4 \times F''_a \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[-\frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{3}{2} \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (3b)$$

1) 一个更为合理但稍为复杂的模型将给出基本上类似的结果: 0 原子附近的 12 个原子共形成 12 个键。这 12 个键之间共可形成 66 个键角,其中 24 个为 $\pi/3$, 24 个为 $2\pi/3$, 12 个为 $\pi/2$, 6 个为 π 。可以证明,头两种键角在应变时给出完全相同形式的弹性能,但系数可能不同。最后一种键角在我们讨论的应变下对弹性能没有贡献。可以假定, $\pi/2$ 型的键角在应变时对弹性能的贡献很小,可以忽略。如果只考虑这 66 个键角对角度弹性能的贡献,将得到和图 2 的实线完全相同的曲线,但 ϵ 的意义以及 (6b) 式中 B 的定义稍有不同。

这里都只保留到 δ 的平方项. F_d'' , F_a'' 表示对相应自变量的二次微商在平衡时的数值.

$$\text{引入记号} \quad \nu_2 = -\delta_2/\delta_1, \quad (4a)$$

$$\nu_3 = -\delta_3/\delta_1. \quad (4b)$$

可以得到, 总弹性的增加为

$$\begin{aligned} \Delta E &= \Delta E_d + \Delta E_a \\ &= A \left[1 + (-\nu_2)^2 + \frac{1}{4} (1 - \nu_2 - 2\nu_3)^2 \right] \\ &\quad + B \left[\left(\frac{3}{4} + \frac{\nu_2}{4} + \frac{\nu_3}{2} \right)^2 + \left(\frac{1}{4} + \frac{3}{4} \nu_2 - \frac{1}{2} \nu_3 \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{2} \nu_2 - \nu_3 \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} + \frac{\nu_2}{2} + \nu_3 \right)^2 \right], \quad (5) \end{aligned}$$

$$\text{其中} \quad A = \frac{1}{2} F_d'' \cdot \delta_1^2, \quad (6a)$$

$$B = \frac{4}{3} F_a'' \cdot \delta_1^2. \quad (6b)$$

很显然, 泊松比的数值应使总弹性为最小, 因此, 如果

$$\frac{\partial}{\partial \nu_2} (\Delta E) = 0, \quad (7a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \nu_3} (\Delta E) = 0, \quad (7b)$$

定出的 ν_2 , ν_3 就是泊松比. 因此泊松比 ν_2 , ν_3 满足

$$\begin{aligned} A \left(\frac{5}{2} \nu_2 + \nu_3 - \frac{1}{2} \right) + B \left(\frac{15}{4} \nu_2 - \frac{3\nu_3}{2} + \frac{9}{4} \right) &= 0, \\ A (\nu_2 + 2\nu_3 - 1) + B \left(-\frac{3}{2} \nu_2 + 2\nu_3 + \frac{3}{2} \right) &= 0. \quad (8) \end{aligned}$$

$$\text{再引入} \quad e = B/A, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \text{则(8)式化为} \quad \nu_2 \left(\frac{5}{2} + \frac{15}{4} e \right) + \nu_3 \left(1 - \frac{3}{2} e \right) &= \frac{1}{2} - \frac{9}{4} e, \\ \nu_2 \left(1 - \frac{3}{2} e \right) + \nu_3 (2 + 3e) &= 1 - \frac{3}{2} e. \quad (10) \end{aligned}$$

$$\text{简单的计算得到} \quad \nu_2 = \frac{-9e^2}{4 + 18e + 9e^2}, \quad (11a)$$

$$\nu_3 = \frac{2 + 3e - 9e^2}{4 + 18e + 9e^2}. \quad (11b)$$

很显然, ν_2 和 ν_3 就是我们在本文一开始时所引入的 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001} . 由 (11a) 和 (11b) 式可知, 如果只存在着最近邻距离弹性而不存在角度弹性时 (即 $B = 0$), 或者 $A = \infty$ (即所谓硬球模型) 时, 我们会有 (由于 $e = B/A = 0$)

$$\nu_{1\bar{1}0} = \nu_2 = 0, \quad (12a)$$

$$\nu_{001} = \nu_3 = 0.5. \quad (12b)$$

由表 1 的泊松比 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001} 的实验数据, 很清楚地表明, 在一个最粗略的估计下, (12)

式大体上说明了面心立方晶体泊松比的数值范围： ν_{001} 的数值远比 $\nu_{1\bar{1}0}$ 大，且大约为 0.5。

如果 ϵ 不为零而取很小的数值，由 (11a) 式可知， $\nu_{1\bar{1}0}$ 将取负值。因此在我们的这个模型中， $\nu_{1\bar{1}0}$ 取负值是很自然的结果。

再进一步，如果我们对不同的 ϵ 值（由 0 至 -0.18）用 (11a) 和 (11b) 式算出 $\nu_{1\bar{1}0}(\nu_2)$ 和 $\nu_{001}(\nu_3)$ ，将 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001} 的关系划成曲线，可以得到图 2 的实线。在图 2 中列入了表 1 的实验数据。考虑到这个模型的简单性和图 2 的实验数据并非直接测量而得而是由弹性模量算得的，理论和实验的符合（Al 除外）应当说是相当好的。

ϵ 为负值表明，如果只有角度弹性，系统会处在一个不稳平衡状态，但因 $\epsilon \ll 1$ ，最近邻距离弹性起主要作用。总的来讲，系统在无应变时仍处于稳定平衡状态。

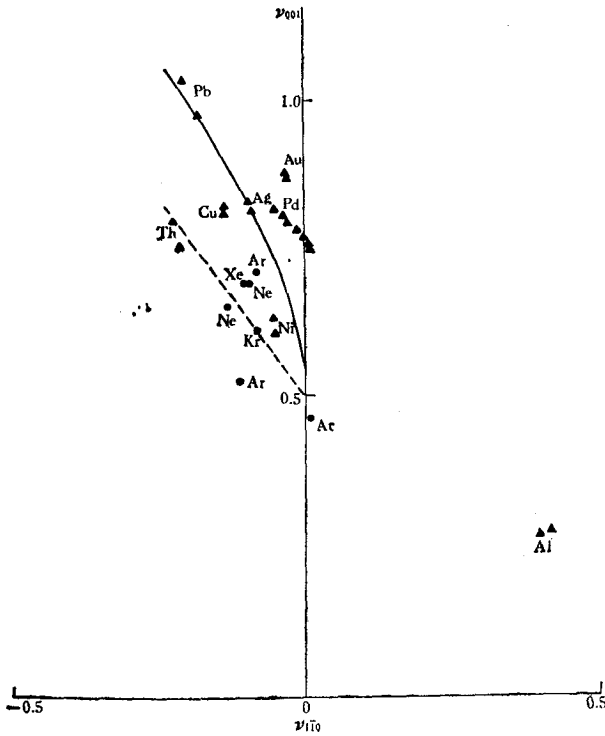


图 2 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001} 的关系图

▲ 为面心立方金属的实验结果；● 为面心立方惰性气体晶体的实验结果；注意相距最近的两个代表 Ar 的圆点，它们是由两组不同的作者在几乎相同的温度下测得的数据，这在一定程度上反映了实验误差的可能大小

三、模 型 2

同模型 1 一样，模型 2 也是假定除了最近邻相互作用的距离弹性以外，还存在着另一种弹性，这里我们假定存在着次近邻相互作用的距离弹性。完全相似于前面所作的推导，可以得到

$$\nu_{1\bar{1}0} = \frac{\epsilon'(3 + 4\epsilon')}{2 + 7\epsilon' + 4\epsilon'^2}, \quad (13a)$$

$$\nu_{001} = \frac{1}{2 + 7\epsilon' + 4\epsilon'^2}. \quad (13b)$$

这里

$$\epsilon' = \frac{F_2'' + F_1'}{F_1'' - F_1'}. \quad (14)$$

而 F_1' , F_1'' , F_2'' 分别表示最近邻相互作用能的一次微商，二次微商和次近邻相互作用能的

二次微商。同样对不同的 ϵ' 值(由 0 至 -0.11) 将 (13a) 和 (13b) 式算出的 $\nu_{1\bar{1}0}$ 和 ν_{001} 的关系画成曲线, 得到图 2 的虚线。 ϵ' 取负值是为了使 ν_{001} 大于 0.5, 这样就导致了 $\nu_{1\bar{1}0}$ 必然为负。由表 1 和图 2 可见, 我们由这个模型得出的 $\nu_{1\bar{1}0}$ 为负和 ν_{001} 大于 0.5 之间有着联系这一结论看来是正确的。

四、讨论和结论

文献[1]首先解释了 $\nu_{1\bar{1}0}$ 为负的现象, 在那里用一个包括排斥势和吸引势的物理模型来描述面心立方晶体中两个原子之间的相互作用, 而描述这两种势的参量数值则由一种特定的面心立方金属即 Ni 的弹性常数的实验数据来确定。

本文的模型和计算都要简单得多。因为并没有特别引用任何一种特定晶体的特定性质, 结论是对于一般面心立方晶体作出的。因为用两种简单的模型都可以得出 $\nu_{1\bar{1}0}$ 为负的结果, 可以认为: $\nu_{1\bar{1}0}$ 为负值来源于对“硬球模型”的修正。由模型 2 还明确得出, $\nu_{1\bar{1}0}$ 为负值是和 ν_{001} 大于 0.5 密切相关。这里的实验数据除极个别外均支持这一论点, 这点是文献[1]的作者没有注意到更没有讨论到的。

作为数值计算来讲, 模型 2 不如模型 1 好, 因为很难给原子之间的相互作用能在次近邻处截断提供充分的论据, 而模型 1 却包括了另一种形式的相互作用能, 但模型 2 在说明物理实质上, 无疑作出了重要的补充。

本文和文献[1]的作者均未讨论 Al 的行为为何这样不同于其它面心立方晶体的问题, 进一步研究这个问题将会是颇为有趣的。

黄昆先生和钱临照先生阅读了本文的初稿, 并提出了宝贵的修改意见, 谨致衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] F. Milstein and K. Huang, *Phys. Rev. B*, **19** (1979), 2030.

POISSON RATIOS OF FCC CRYSTALS

REN SHANG-YUAN

(Department of Physics, University of Science and Technology of China)

ABSTRACT

By using a simple physical model, we explain the reason why the Poisson ratio $\nu_{1\bar{1}0}$ in fcc crystals is negative. The theoretical relationship between the values of Poisson ratio $\nu_{1\bar{1}0}$ and ν_{110} is indicated. The theory agrees with experimental results fairly well.