

各向异性立方晶体的弹性 格林函数及其应用

杨 正 举

(南京大学物理系, 固体物理研究所)

1986年6月18日收到

提 要

本文计算了各向异性立方晶体的弹性格林函数的级数展开式, 给出了直到二级近似的展开式的系数. 将所得结果应用于弹性偶极子模型, 给出了对称中心所产生的位移场及两对称中心间的弹性相互作用的表示式. 应用于 Cu, K 等强各向异性立方晶体, 虽然级数的收敛较慢, 但所得关于对称中心的位移场, 及二对称中心间的相互作用能的数值结果, 竟与基于点阵的不连续性作出的点阵静力学计算所得的结果基本一致. 从而表明, 本文给出的直到二级近似的弹性格林函数的解析表示提供了一个可以普遍应用的简便的方法. 它可以较准确地描述立方晶体的某些力学行为.

一、引 言

迄今为止, 人们关于晶体中缺陷的微观理论研究大多是在弹性连续介质模型的基础上进行的, 并常常又假设了弹性各向同性^[1]. 这样得到的结果具有一定的合理性, 因而一直被广泛地应用着. 但它与点阵静力学的结论不一致而受到批评^[2,3]. 点阵静力学计算异常繁复, 这就迫使人们不得不使用他们熟悉的并具有一定效力的弹性连续统理论(包括各向同性假设)来处理很大一类有关力学性质的研究课题, 同时又不断地对它能反映微观真实情况的精确程度提出疑问.

由于希望各向异性弹性连续统理论能给我们提供一个讨论晶体中与缺陷有关问题的精确而又简便的方法, 本文对各向异性立方晶体的弹性行为进行了研究. 首先, 用相似于 Kelvin^[4] 用于解各向同性立方晶体的弹性微分方程的方法, 计算了直到二级近似的各向异性的弹性微分方程的基本积分(弹性格林函数). 并将所得结果应用于弹性偶极子模型, 计算了立方晶体中对称中心所产生的位移场和二对称中心间的弹性相互作用, 以检验所得结果的可应用程度. 对 Cu, Al, K 等立方晶体中置换的和间隙的杂质原子所产生的位移场和它们间的相互作用能进行的数值计算并与相应的点阵静力学结果的比较表明, 尽管对强弹性各向异性晶体所得的结果收敛较慢, 但在所有的情况下关于位移场所得的结果, 除最近邻原子外, 与由基于点阵的不连续性作出的点阵静力学计算的结果基本一致. 对于点缺陷间的相互作用能, 在大多数情况下也基本一致. 这一令人感兴趣的结果表明, 本文给出的可以普遍应用的解析解, 可以在一定的精确程度上用于描述立方晶体的

弹性行为。这样, 本文的结果给出了一个可以较准确地研究立方晶体的某些问题(如缺陷, 力学性质, 铁弹相变等)的简便的出发点。

二、各向异性立方晶体的弹性格林函数

弹性理论计算的一个重要的出发点是弹性格林函数, 即在无限大介质中点力所产生的位移场。这一问题的研究已有很长的历史。Kelvin 首先给出了在点力作用下各向同性弹性微分方程的解^[4], 但要得到各向异性弹性微分方程的解却十分困难。这一问题的研究基本上是从两个方面进行的。一方面是基于 Fredholm^[5] 给出的这种解的普遍表示进行数值计算^[6-8]; 另一方面的的工作是 Лифшиц 和 Розенцвейг^[9] 用 Fourier 变换方法求得一级近似的解析解。但正如 Dederichs 和 Leibfried^[10] 所表明的, 他们的解中遗漏了一些项。而后者按同样的方法给出的结果中, 一些项的系数也有错误。所以, 实际上, 这一问题至今没有很好地解决。

立方晶体在单位点力作用下的弹性各向异性微分方程为^[8]

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} (c_{11}\nabla_1^2 + c_{44}(\nabla_2^2 + \nabla_3^2)) & (c_{12} + c_{44})\nabla_1\nabla_2 & (c_{12} + c_{44})\nabla_1\nabla_3 \\ (c_{12} + c_{44})\nabla_2\nabla_1 & c_{11}\nabla_2^2 + c_{44}(\nabla_1^2 + \nabla_3^2) & (c_{12} + c_{44})\nabla_2\nabla_3 \\ (c_{12} + c_{44})\nabla_3\nabla_1 & (c_{12} + c_{44})\nabla_3\nabla_2 & c_{11}\nabla_3^2 + c_{44}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} -\delta(0) & 0 & 0 \\ 0 & -\delta(0) & 0 \\ 0 & 0 & -\delta(0) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

其中 $\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ $i = 1, 2, 3$, c_{ij} 为弹性常数, \mathbf{G} 为弹性格林函数张量, $G_{ii}(\mathbf{r})$ 是当晶体在原点在 x_i 方向受有点力作用时, 在 \mathbf{r} 点在 x_i 方向所产生的位移。由格林函数张量可以得到在任何力场分布 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 作用下, 空间各点所产生的位移为

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \int \mathbf{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') : \mathbf{F}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (2)$$

可以将 (1) 式的算符张量分解成

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \nabla_1^2 + \frac{c_{44}}{c_{12} + c_{44}} \nabla^2 & \nabla_1\nabla_2 & \nabla_1\nabla_3 \\ \nabla_1\nabla_2 & \nabla_2^2 + \frac{c_{44}}{c_{12} + c_{44}} \nabla^2 & \nabla_2\nabla_3 \\ \nabla_1\nabla_3 & \nabla_2\nabla_3 & \nabla_3^2 + \frac{c_{44}}{c_{12} + c_{44}} \nabla^2 \end{pmatrix}$$

$$+ \delta \begin{pmatrix} \nabla_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \nabla_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \nabla_3^2 \end{pmatrix} = \mathbf{D}^{(0)} + \delta\mathbf{D}^{(1)}, \quad (3)$$

其中 $\delta = (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) / (c_{12} + c_{44})$ 。我们知道, 立方晶体的各向异性的强弱由 $\frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}) - c_{44}$ 所量度, 对各向同性弹性体, $\delta = 0$ 。 δ 是方程中唯一含有 c_{11} 的参

变量, 设其为小于 1 的数. 将格林函数张量也按照 δ 的幂展开

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}^{(0)} + \delta \mathbf{G}^{(1)} + \delta^2 \mathbf{G}^{(2)} + \dots \quad (4)$$

将 (3), (4) 式代入 (1) 式, 比较 δ 的同次幂, 得到

$$\mathbf{D}^{(0)} : \mathbf{G}^{(0)} = - \begin{pmatrix} \delta(0) & 0 & 0 \\ 0 & \delta(0) & 0 \\ 0 & 0 & \delta(0) \end{pmatrix} \frac{1}{c_{12} + c_{44}}, \quad (5a)$$

$$\mathbf{D}^{(0)} : \mathbf{G}^{(1)} = -\mathbf{D}^{(1)} : \mathbf{G}^{(0)}, \quad (5b)$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\mathbf{D}^{(0)} : \mathbf{G}^{(k)} = -\mathbf{D}^{(k)} : \mathbf{G}^{(k-1)}. \quad (5c)$$

(5a) 式所表示的零级近似即各向同性的弹性微分方程. 当只在原点存在有单位大小的体力密度时, Kelvin 给出它的解为

$$G_{ii}^{(0)} = a \frac{1}{r} + b \frac{x_i^2}{r^3} \quad i = 1, 2, 3;$$

$$G_{ij}^{(0)} = b \frac{x_i x_j}{r^3} \quad i \neq j, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (6)$$

其中

$$a = \frac{c_{12} + 3c_{44}}{8\pi c_{44}(c_{12} + 2c_{44})}, \quad b = \frac{c_{12} + c_{44}}{8\pi c_{44}(c_{12} + 2c_{44})}.$$

由 (5) 式可见, 各级近似的弹性格林函数遵守相同形式的微分方程, 故可以相同的方法求解. 但近似的级数愈高, 等式右方的函数愈复杂而使得求解愈困难. 下面, 我们将 G_{11} , G_{21} , G_{31} 分别记作 ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 , 表示在原点在 x_1 方向有单位点力作用时, 在空间各点在 x_1 , x_2 和 x_3 三个方向上的位移. 并用如下的简略符号: $(a_1 c_{12} + a_2 c_{44}) \equiv (a_1, a_2)$; $(a_1 c_{12}^2 + a_2 c_{12} c_{44} + a_3 c_{44}^2) \equiv (a_1, a_2, a_3)$; $(a_1 c_{12}^3 + a_2 c_{12}^2 c_{44} + a_3 c_{12} c_{44}^2 + a_4 c_{44}^3) \equiv (a_1, a_2, a_3, a_4)$.

(5b) 式给出一级近似下的位移场所遵守的微分方程为

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\nabla \cdot \xi^{(1)}) + \frac{c_{44}}{c_{12} + c_{44}} \nabla^2 \xi_i^{(1)} = - \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \xi_i^{(0)} \quad i = 1, 2, 3. \quad (7)$$

按照 Kelvin, 引入标量函数 $\varphi^{(1)}$ 及矢量函数 $\mathbf{A}^{(1)}$, 使

$$\xi^{(1)} = \nabla \varphi^{(1)} + \nabla \times \mathbf{A}^{(1)}, \quad \nabla \cdot \mathbf{A}^{(1)} = 0. \quad (8)$$

代入 (7) 式, 并由 (6) 式得到

$$\begin{aligned} & -\nabla^2 \left[\frac{(1,2)}{(1,1)} \frac{\partial}{\partial x_1} \varphi^{(1)} + \frac{(0,1)}{(1,1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_2} A_3^{(1)} - \frac{\partial}{\partial x_3} A_2^{(1)} \right) \right] \\ & = \frac{-a + 2b}{r^3} + \frac{(3a - 15b)x_1^2}{r^5} + \frac{15bx_1^2}{r^7}, \\ & -\nabla^2 \left[\frac{(1,2)}{(1,1)} \frac{\partial}{\partial x_2} \varphi^{(1)} + \frac{(0,1)}{(1,1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_3} A_1^{(1)} - \frac{\partial}{\partial x_1} A_3^{(1)} \right) \right] \\ & = \frac{-9bx_1x_2}{r^5} + \frac{15bx_1x_2^3}{r^7}, \\ & -\nabla^2 \left[\frac{(1,2)}{(1,1)} \frac{\partial}{\partial x_3} \varphi^{(1)} + \frac{(0,1)}{(1,1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_1} A_2^{(1)} - \frac{\partial}{\partial x_2} A_1^{(1)} \right) \right] \end{aligned}$$

$$= -\frac{9bx_1x_3}{r^5} + \frac{15bx_1x_3^3}{r^7}. \quad (9)$$

上式所表示的 Poisson 方程, 可以利用通常的势函数积分求解. 但实际上, 应用下式

$$\begin{aligned} \frac{x_1^l x_2^m x_3^n}{r^{k+2}} &= \frac{1}{k[2(l+m+n) + (1-k)]} \\ &\times \left[\nabla^2 \left(\frac{x_1^l x_2^m x_3^n}{r^k} \right) - \left(\frac{l(l-1)}{x_1^2} + \frac{m(m-1)}{x_2^2} + \frac{n(n-1)}{x_3^2} \right) \frac{x_1^l x_2^m x_3^n}{r^k} \right], \quad (10) \\ &l, m, n > 0 \end{aligned}$$

可以容易地求得 (9) 式的解为

$$\begin{aligned} & - \left[\frac{(1,2)}{(1,1)} \frac{\partial \varphi^{(1)}}{\partial x_1} + \frac{(0,1)}{(1,1)} \left(\frac{\partial A_3^{(1)}}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2^{(1)}}{\partial x_3} \right) \right] \\ &= -\frac{a-2bx_1^2}{2r^3} - \frac{3bx_1^4}{4r^5}, \\ & - \left[\frac{(1,2)}{(1,1)} \frac{\partial \varphi^{(1)}}{\partial x_2} + \frac{(0,1)}{(1,1)} \left(\frac{\partial A_1^{(1)}}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3^{(1)}}{\partial x_1} \right) \right] \\ &= \frac{3bx_1x_2}{4r^3} - \frac{3bx_1x_2^3}{4r^5}, \\ & - \left[\frac{(1,2)}{(1,1)} \frac{\partial \varphi^{(1)}}{\partial x_3} + \frac{(0,1)}{(1,1)} \left(\frac{\partial A_2^{(1)}}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1^{(1)}}{\partial x_2} \right) \right] \\ &= \frac{3bx_1x_3}{4r^3} - \frac{3bx_1x_3^3}{4r^5}. \quad (11) \end{aligned}$$

由上式可以解得 $\varphi^{(1)}$ 及 $\mathbf{A}^{(1)}$ 所遵守的 Poisson 方程, 并再一次利用 (10) 式而求得

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)} &= \frac{(1,1)}{(1,2)} \left[\frac{b-a}{8} \frac{x_1}{r} + \frac{(3a-b)x_1^3}{24r^3} + \frac{bx_1 \sum x_i^4}{8r^5} \right], \\ A_1^{(1)} &= \frac{(1,1)}{(1,0)} \left[\frac{15b}{4} \frac{x_1x_2x_3(x_2^2-x_3^2)}{r^5} \right], \\ A_2^{(1)} &= -\frac{(1,1)}{(1,0)} \left[\frac{a-2bx_3}{8} \frac{x_1}{r} + \frac{ax_1^2x_3}{8r^3} + \frac{bx_3^3}{24r^3} + \frac{bx_1^4x_3 - x_1^2x_3^3}{8r^5} \right], \\ A_3^{(1)} &= \frac{(1,1)}{(1,0)} \left[\frac{a-2bx_2}{8} \frac{x_1}{r} + \frac{ax_1^2x_2}{8r^3} + \frac{bx_2^3}{24r^3} + \frac{bx_1^4x_2 - x_1^2x_2^3}{8r^5} \right]. \quad (12) \end{aligned}$$

由 (8) 式, 可以得到一级近似的弹性格林函数为

$$\begin{aligned} \xi_1^{(1)} &= \frac{(1,1)}{8^2\pi(0,1,2)^2} \left\{ (0,2,2) \frac{1}{r} - (6,16,2) \frac{x_1^2}{r^3} \right. \\ &+ (3,18,15) \frac{x_1^4}{r^5} - (1,2,1) \frac{x_2^4+x_3^4}{r^5} \\ &\left. + 5(1,2,1) \frac{x_1^2 \sum x_i^4}{r^7} \right\}, \\ \xi_2^{(1)} &= \frac{(1,1)}{8^2\pi(0,1,2)^2} \left\{ -(6,20,14) \frac{x_1x_3}{r^3} + 2(1,5,4) \frac{x_1^3x_2+x_1x_2^3}{r^5} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 5(1, 2, 1) \frac{x_1 x_2 \sum x_i^4}{r^7} \Big\}, \\
\xi_3^{(1)} &= \frac{(1, 1)}{8^2 \pi (0, 1, 2)^2} \left\{ -(6, 20, 14) \frac{x_1 x_3}{r^3} \right. \\
& \left. + 2(1, 5, 4) \frac{x_1^3 x_3 + x_1 x_3^3}{r^5} + 5(1, 2, 1) \frac{x_1 x_3 \sum x_i^4}{r^7} \right\}. \quad (13)
\end{aligned}$$

在这样的计算中, 我们没有像通常那样^[4], 先按照变换 (8) 式求得 $\varphi^{(1)}$ 及 $\mathbf{A}^{(1)}$ 所遵守的四阶微分方程, 而后连续两次解 Poisson 方程以求得 $\varphi^{(1)}$ 及 $\mathbf{A}^{(1)}$, 从而避免了在利用 (10) 式给出 Poisson 方程特解时, 由于解中含有如 $1/r$, x_1/r^3 等形式的项, 而它们恰好又是 Laplace 方程的解, 而使得在利用试凑法得到的解中引入了或失去了一些这种类型的项. 使得所得的解不满足其所应满足的微分方程 (5). 这是这里的计算中很重要的一点. 另外, 显然可见, 这样的求解过程要比进行 Fourier 变换求解^[9,10] 方便得多.

用同样的方法, 可以得到二级近似下的弹性格林函数. 但是计算要繁复得多. 结果为

$$\begin{aligned}
\xi_1^{(2)} &= \frac{(1, 1)^2}{8^3 \pi (0, 1, 2)^3} \left\{ \frac{1}{2} (1, 2, -15, -16) \frac{1}{r} + \frac{1}{4} (139, 728, 1199, 354) \frac{x_1^2}{r^3} \right. \\
& - \frac{1}{4} (153, 816, 1845, 990) \frac{x_1^4}{r^5} + \frac{1}{4} (-55, -520, -395, 70) \frac{x_1^6}{r^7} \\
& + \frac{1}{4} (-63, 210, 609, 336) \frac{x_1^8}{r^9} - \frac{1}{2} (6, 11, 4, -1) \frac{x_2^4 + x_3^4}{r^5} \\
& - \frac{1}{4} (189, 1036, 1505, 658) \frac{x_1^2(x_2^4 + x_3^4)}{r^7} + \frac{1}{4} (77, 574, 917, 420) \frac{x_1^4(x_2^4 + x_3^4)}{r^9} \\
& + (13, 43, 47, 17) \frac{x_2^6 + x_3^6}{r^7} + \frac{1}{2} (-35, -14, 77, 56) \frac{x_1^2(x_2^6 + x_3^6)}{r^7} \\
& \left. - 7(1, 3, 3, 1) \frac{x_2^8 + x_3^8}{r^9} + \frac{63}{2} (1, 3, 3, 1) \frac{x_1^2(\sum x_i^4)^2}{r^{11}} \right\}, \\
\xi_2^{(2)} &= \frac{(1, 1)^2}{8^3 \pi (0, 1, 2)^3} \left\{ (-22, -48, 18, 44) \frac{x_1 x_2}{r^3} \right. \\
& + (105, 368, 341, 78) \frac{x_1^3 x_2 + x_1 x_2^3}{r^5} - (129, 532, 637, 234) \frac{x_1^5 x_2 + x_1 x_2^5}{r^7} \\
& - (188, 624, 644, 208) \frac{x_1^3 x_2^3}{r^7} + (14, 112, 182, 84) \frac{x_1 x_2^7 + x_1^7 x_2}{r^7} \\
& \left. + (91, 308, 343, 126) \frac{x_1^5 x_2^3 + x_1^3 x_2^5}{r^9} + \frac{63}{2} (1, 3, 3, 1) \frac{x_1 x_2 (\sum x_i^4)^2}{r^{11}} \right\}, \\
\xi_3^{(2)} &= \frac{(1, 1)^2}{8^3 \pi (0, 1, 2)^3} \left\{ (-22, -48, 18, 44) \frac{x_1 x_3}{r^3} \right. \\
& + (105, 368, 341, 78) \frac{x_1^3 x_3 + x_1 x_3^3}{r^5} - (129, 532, 637, 234) \frac{x_1^5 x_3 + x_1 x_3^5}{r^7} \\
& \left. - (188, 624, 644, 208) \frac{x_1^3 x_3^3}{r^7} + (14, 112, 182, 84) \frac{x_1 x_3^7 + x_1^7 x_3}{r^7} \right\}
\end{aligned}$$

$$+ (91, 308, 343, 126) \frac{x_1^2 x_3^2 + x_1^2 x_2^2}{r^9} + \frac{63}{2} (1, 3, 3, 1) \frac{x_1 x_3 (\sum x_i^4)^2}{r^{11}} \}. \quad (14)$$

三、各向异性立方晶体中点缺陷的位移场和相互作用

这里,我们仅将上面的结果应用于点缺陷的情形,并仅讨论在立方结构中的空穴和替代式杂质原子或球形包裹物等缺陷. 对于它们,即使在各向异性的立方晶体中,由于其周围原子是对称分布的,它们仍然是一个对称的膨胀中心或压缩中心. 在弹性力学处理中,它们可以用一三维的弹性偶极子模拟之^[1,11]. 一个在原点的在 x_1 方向的单轴偶极子 p_{11} 在空间任一点 \mathbf{r} 所产生的位移场为 $p_{11} \left(\frac{\partial G_{11}}{\partial x_1} i + \frac{\partial G_{21}}{\partial x_1} j + \frac{\partial G_{31}}{\partial x_1} k \right)$, 这里我们取膨胀的力偶极子为正. 于是可以得到一个对称的膨胀中心 ($p_{11} = p_{22} = p_{33}$) 所产生的位移场的 x_1 分量为

$$U_1 = p_{11} \left(\frac{\partial G_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial G_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial G_{13}}{\partial x_3} \right). \quad (15)$$

将上面得到的直到二级近似的 G_{ij} 代入,可得

$$\begin{aligned} U_1 = & -p_{11} \left\{ \frac{-2}{8\pi(1,2)} \frac{x_1}{r^3} + \delta \frac{6(1,1)}{8^2\pi(0,1)(1,2)^2} \left[\left(\frac{8}{3}, \frac{16}{3} \right) \frac{x_1}{r^3} \right. \right. \\ & + (0, -4) \frac{x_1^3}{r^5} + (-5, -5) \frac{x_1 \sum x_i^4}{r^7} \left. \right] + \delta^2 \frac{-(1,1)^2}{8^3\pi(0,1,2)^3} \left[-(406, 1515, 1612, 375) \frac{x_1}{r^3} \right. \\ & + \frac{1}{4} (6069, 22344, 26673, 8862) \frac{x_1^3}{r^5} \\ & - \frac{1}{4} (8463, 30144, 38259, 15618) \frac{x_1^5}{r^7} + \frac{1}{4} (5215, 16408, 19411, 8218) \frac{x_1^7}{r^9} \\ & - \frac{1}{4} (1071, 2142, 1071, 0) \frac{x_1^9}{r^{11}} + \frac{1}{2} (2499, 9981, 11265, 3783) \frac{x_1(x_2^2 + x_3^2)}{r^7} \\ & - \frac{1}{4} (8715, 33180, 39095, 14630) \frac{x_1^3(x_2^4 + x_3^4)}{r^9} + \frac{9}{4} (441, 1608, 2289, 924) \frac{x_1^5(x_2^4 + x_3^4)}{r^{11}} \\ & - 7 (125, 599, 783, 309) \frac{x_1(x_2^6 + x_3^6)}{r^9} + \frac{9}{2} (147, 602, 763, 308) \frac{x_1^3(x_2^6 + x_3^6)}{r^{11}} \\ & \left. \left. + 63 (1, 13, 23, 11) \frac{x_1(x_2^8 + x_3^8)}{r^{11}} - \frac{63}{2} (1, 3, 3, 1) \frac{x_1(\sum x_i^4)^2}{r^{11}} \right] \right\}. \quad (16) \end{aligned}$$

在 x_2 及 x_3 方向的位移,将上式对 x_i 作相应的轮换即可. 由上式可见,考虑到高级近似,在零级近似下弹性位移场的各向同性性质不再保持.

不难算出两个对称的膨胀中心间的相互作用能. 我们现在不考虑由于偶极子间的相互弛豫而引起的效应^[11]; 而只考虑由于实际晶体的各向异性的存在所产生的影响. 偶极子 p_{ij} 和应变场 ε_{ij} 间的相互作用能 $W = -\sum p_{ij}\varepsilon_{ij}$. 在零级近似下,两个对称中心的相互作用能为零. 由(16)式,可以得到由于各向异性的存在,两膨胀中心间的相互作用能为

$$\begin{aligned}
 W = & -p_{ii}^2 \left\{ \delta \frac{24(1,1)}{8^2\pi(1,2)^2} \left(\frac{3}{r^3} - \frac{5\sum x_i^4}{r^7} \right) + \delta^2 \frac{2(1,1)^2}{8^4\pi(0,1,2)^3} \left[3(6069, 22344, 26673, 8862) \frac{1}{r^3} \right. \right. \\
 & - (123795, 461790, 554595, 204120) \frac{\sum r_i^4}{r^7} + (189315, 715050, 873355, 340900) \frac{\sum x_i^6}{r^9} \\
 & - 9(21840, 83430, 103320, 40740) \frac{\sum x_i^8}{r^{11}} + 11(7938, 30726, 41202, 16632) \frac{\sum x_i^{10}}{r^{13}} \\
 & \left. \left. + 9(10920, 41220, 50540, 19250) \frac{(\sum x_i^4)^2}{r^{11}} - 99(735, 2812, 3815, 1540) \frac{\sum x_i^4 \sum x_i^4}{r^{13}} \right] \right\}. \quad (17)
 \end{aligned}$$

只有各向异性成分存在。以上所有结果不难推广于非各向同性缺陷的情形。

四、数值结果

为了考察本文的结果对于具体情况的应用,我们对表 1 中列出的五种材料进行数值计算。它们有各不相同的各向异性值 δ 。

关于在点力作用下的位移场(实即各级近似的格林函数张量(6),(13)和(14)式)的结果表明,对 W, Al 等 δ 较小值的晶体,高级修正很快地收敛。而对 Cu, K 等,其 δ 值较大,其在点阵位置上的原子位移值则逐点变化,起伏甚大。但仍可以看出它对于晶轴方向和点力间的距离的依赖性。同时,平均起来,一级修正相对于零级近似有较大的下降(K 为 1/3, Cu 为 1/4),而二级修正相对于一级修正的下降较小(在 1/2 左右)。所以,忽略三级以上的修正值所引起的误差估计不超过 10%。

表 1 数值计算中所采用的材料的弹性常数

晶 体	c_{11}	c_{12}	c_{44}	δ (%)
	(×10 ¹⁰ dyn/cm ²)			
W ^[123] (bcc)	52.3	20.4	16.1	-0.82
Nb ^[123] (bcc)	24.6	13.4	2.9	33.4
K ^[133] (bcc)	0.46	0.38	0.26	-68.8
Al ^[23] (fcc)	10.8	6.2	2.8	-11.1
Cu ^[23] (fcc)	17.0	12.3	7.5	-52

由(16)及(17)式可以计算在各向异性立方晶体中膨胀或收缩中心所产生的位移场和它们间的相互作用能。点缺陷的这类问题曾是长期以来被研究的对象。过去的计算大多是用弹性连续介质的模型进行的^[1,14-16],但也有些基于点阵的不连续性而作的计算。对于后者,除了有少量的利用 Morse 势计算点缺陷几个最近邻原子的位置弛豫外^[17-19],大量的工作是用在 Kanzaki^[20] 工作的基础上发展成的点阵静力学方法计算点缺陷所产生的位移场和它们间的相互作用能。这方面有 Hardy 及其合作者对于对称中心^[12,3,21-26]和 Tewary 等人^[27,28]对于非对称中心所作的计算。Tewary^[29]并用点阵格林函数方法对这一

表2 Cu中原点的膨胀中心在其近邻位置所产生的位移场和与另一膨胀中心间的相互作用能(均为相对值。括号内的值为点阵静力学^[2]的计算结果)

近邻位置	位 移			相互作用能 E
	ξ_1	ξ_2	ξ_3	
110	0.00120 (0.0120)	0.00120 (0.0120)	0.0 (0.0)	0.000479 (-0.0930)
200	-0.000086 (-0.0022)	0.0 (0.0)	0.0 (0.0)	-0.000341 (-0.0218)
211	0.000389 (0.0033)	0.000277 (0.0026)	0.000277 (0.0026)	0.000045 (0.0070)
220	0.000299 (0.0043)	0.000299 (0.0043)	0.0 (0.0)	0.000059 (0.0147)
222	0.000257 (0.0019)	0.000257 (0.0019)	0.000257 (0.0019)	0.00009 (0.0033)
310	0.000034 (-0.0007)	0.000056 (0.0001)	0.0 (0.0)	-0.000078 (-0.0072)
321	0.000168 (0.0017)	0.000146 (0.0015)	0.000082 (0.0009)	0.000016 (0.0017)
330	0.000133 (0.0019)	0.000133 (0.0019)	0.0 (0.0)	0.000016 (0.0050)
400	-0.000022 (-0.0007)	0.0 (0.0)	0.0 (0.0)	-0.000043 (-0.0042)
411	0.000024 (-0.0001)	0.000025 (0.0001)	0.000025 (0.0001)	-0.000032 (-0.0051)
420	0.000058 (0.0002)	0.000057 (0.0004)	0.0 (0.0)	-0.000015 (-0.0033)
422	0.000097 (0.0011)	0.000069 (0.0007)	0.000069 (0.0007)	0.000005 (-0.0010)
431	0.000091 (0.0011)	0.000084 (0.0009)	0.000033 (0.0003)	0.000007 (0.0003)
433	0.000094 (0.0009)	0.000079 (0.0010)	0.000079 (0.0010)	0.000016 (0.0018)
440	0.000074 (0.0010)	0.000074 (0.0010)	0.0 (0.0)	0.000007 (-0.0012)
442	0.000079 (0.0009)	0.000079 (0.0009)	0.000048 (0.0006)	0.000011 (0.00006)
444	0.000064 (0.0008)	0.000064 (0.0008)	0.000064 (0.0008)	0.000011 (0.0024)

问题进行了系统处理。所有这些基于点阵不连续性作出的计算结果都表明,对强各向异性晶体,如 Cu, K 等,点缺陷周围原子位移的变化很大,可以向内或向外弛豫,点缺陷间的相互作用能也可以为正或负,依赖于具体的点阵位置。这样的结果当然是各向同性的弹性连续统理论所不能得到的。但点阵静力学方法即使对于点缺陷计算也非常繁复,更难于应用于其他类型的问题了。

利用上述结果,对表1所示的五种立方晶体的数值计算结果表明,包括了各向异性修

表 3 K 中原点的膨胀中心在其近邻位置所产生的位移场和与另一膨胀中心间的相互作用能(均为相对值, 括号内的值为点阵静力学^[3]的计算结果)

近邻位置	位 移			相互作用能 E
	ξ_1	ξ_2	ξ_3	
111	0.03605 (0.02551)	0.03605 (0.02551)	0.03605 (0.02551)	0.03106 (0.00734)
200	-0.00874 (-0.02281)	0.0 (0.0)	0.0 (0.0)	-0.0132 (-0.01833)
220	0.00953 (0.00589)	0.00953 (0.00589)	0.0 (0.0)	0.00263 (0.01068)
222	0.00901 (0.0126)	0.00901 (0.0126)	0.00901 (0.0126)	0.00388 (0.00761)
311	0.00152 (-0.0024)	0.00219 (-0.00073)	0.00219 (-0.00073)	-0.00200 (-0.00844)
331	0.00456 (0.00378)	0.00456 (0.00378)	0.00206 (0.00004)	0.00097 (0.00267)
333	0.0040 (0.00697)	0.0040 (0.00697)	0.0040 (0.00697)	0.00115 (0.00418)
400	-0.00218 (-0.00207)	0.0 (0.0)	0.0 (0.0)	-0.00165 (0.00162)
420	0.00104 (-0.00018)	0.00172 (-0.00001)	0.0 (0.0)	-0.00063 (-0.00014)
422	0.00288 (-0.00070)	0.00232 (0.00075)	0.00232 (0.00075)	0.00022 (-0.00284)
440	0.00238 (0.00267)	0.00238 (0.00267)	0.0 (0.0)	0.00033 (0.00132)
442	0.00268 (0.00246)	0.00268 (0.00246)	0.00168 (0.00036)	0.00049 (0.00128)
444	0.00225 (0.00401)	0.00225 (0.00401)	0.00225 (0.00401)	0.00048 (0.00219)
511	-0.00069 (-0.00088)	0.00028 (0.00013)	0.00028 (0.00013)	-0.00079 (-0.00051)
531	0.00140 (0.00011)	0.00140 (0.00025)	0.00059 (0.00015)	-0.00004 (-0.00033)
533	0.00213 (0.00024)	0.00172 (0.00098)	0.00172 (0.00098)	0.00029 (-0.00716)
551	0.00157 (0.00179)	0.00157 (0.00179)	0.00045 (0.00019)	0.00018 (0.00088)
555	0.00144 (0.00242)	0.00144 (0.00242)	0.00144 (0.00242)	0.00025 (0.00117)
600	-0.00097 (-0.00085)	0.0 (0.0)	0.0 (0.0)	-0.00049 (-0.00057)
620	-0.00028 (-0.00041)	0.00037 (-0.000038)	0.0 (0.0)	-0.00041 (-0.00013)

正, 点缺陷的位移场不再保持其零级近似下的各向同性性质. 对 W, Al 等的修正值较小, 而对 K, Cu 等强各向异性晶体, 位移场和相互作用能随位置的不同而变化很大. 而使得在点缺陷周围的原子可以向内或向外弛豫, 相互作用能也可正可负. 结果示于表 2 及表 3 中, 其中我们仅给出了包括一级及二级修正后的总的结果. 虽然各级近似逐点变化很大, 但具体的计算表明, 平均起来, K 的位移场每级下降 1/2, 而对 Cu 则为 1/3. 级数的收敛较慢. 忽略三级以上的修正项所引起的误差, 估计分别为 12% 及 4%.

五、讨 论

已如前述, 以前关于各向异性立方晶体的弹性微分方程所作的计算中, 只有 Лифшиц 和 Резенцев^[9] 与 Dederichs 和 Leibfried^[10] 先后用进行 Fourier 变换的方法给出了可以普遍应用的一级近似解, 但都存在着一些计算上的缺陷. 严格重复 Dederichs 和 Leibfried 的计算过程, 算得其正确的结果应为

$$\begin{aligned}\xi_1^{(D-L)} &= \frac{(1,1)}{8^2\pi(0,1,2)^2} \left\{ (-1, -6, -13) \frac{1}{r} + (-7, -22, -7) \frac{x_1^2}{r^3} \right. \\ &\quad \left. + (3, 18, 15) \frac{x_1^4}{r^5} + (-1, -2, -1) \frac{x_2^4 + x_3^4}{r^5} + 5(1, 2, 1) \frac{x_1^2 \sum x_i^4}{r^7} \right\}, \\ \xi_2^{(D-L)} &= \frac{(1,1)}{8^2\pi(0,1,2)^2} \left\{ (-7, -26, -19) \frac{x_1 x_2}{r^3} \right. \\ &\quad \left. + (2, 10, 8) \frac{x_1^3 x_2 + x_1 x_2^3}{r^5} + 5(1, 2, 1) \frac{x_1 x_2 \sum x_i^4}{r^7} \right\}, \\ \xi_3^{(D-L)} &= \frac{(1,1)}{8^2\pi(0,1,2)^2} \left\{ (-7, -26, -19) \frac{x_1 x_3}{r^3} \right. \\ &\quad \left. + (2, 10, 8) \frac{x_1 x_3 + x_1 x_3^3}{r^5} + 5(1, 2, 1) \frac{x_1 x_3 \sum x_i^4}{r^7} \right\}. \quad (18)\end{aligned}$$

与 (13) 式比较可见, 两者在系数上有差别. 可以表明, 此相差部分是 (5b) 式的齐次解. 实际上, 将零级方程 (5a) 与一级方程 (5b) 相比, 可看出, (5b) 式有如下形式的齐次解:

$$\xi_1^{(D)}(H0) = \alpha \frac{1}{r} + \beta \frac{x_1^2}{r^3}, \quad \xi_2^{(D)}(H0) = \beta \frac{x_1 x_2}{r^3}, \quad \xi_3^{(D)}(H0) = \beta \frac{x_1 x_3}{r^3}. \quad (19a)$$

且有

$$(1,1)\alpha = (1,3)\beta. \quad (19b)$$

实际上, 若设

$$\xi_1^{(D)} = \sigma \frac{1}{r} + \theta \frac{x_1^2}{r^3} + \dots, \quad \xi_2^{(D)} = \varepsilon \frac{x_1 x_2}{r^3} + \dots, \quad \xi_3^{(D)} = \varepsilon \frac{x_1 x_3}{r^3} + \dots,$$

以及未表示出来的项和 (13) 式因而也和 (18) 式相同, 其中 $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, β, θ 等类似. 为使 (19a) 式是 (5b) 式的解, 容易证明, ε, σ 和 θ 间应有下列关系:

$$\begin{aligned}(1,1)\sigma &= (1,3)\theta + (6, 36, 54, 8), \\ (1,1)\sigma &= (1,3)\varepsilon + (6, 40, 78, 44).\end{aligned} \quad (20)$$

Dederichs 和 Leibfried 的修正后的结果 (18) 式及本文的结果 (13) 式都满足上式, 从而

表明都是 (5b) 式的解. 而两者的系数 σ , θ 和 ε 的差又满足 (19b) 式, 说明它们间的差正好是齐次方程的解. 这样的结果是容易理解的. 显然, (13) 式及 (18) 式又都满足边界条件: $r \rightarrow \infty$ 时, $\xi \rightarrow 0$.

对于 Dederichs 和 Leibfried 的正确解 (18) 式, 可以得到对称中心的位移场的一级近似结果为

$$U_i^{(1)}(\text{D-L}) = -p_{11}\delta \frac{6(1,1)}{8^2\pi c_{44}(1,2)^2} \left\{ (3,7) \frac{x_1}{r^3} + (0,-4) \frac{x_1^3}{r^5} + (-5,-5) \frac{x_1 \sum x_i^4}{r^7} \right\}. \quad (21)$$

与本文得到的一级近似的结果 ((16) 式) 只在第一项系数上不同. 在只包括一级近似修正时, 二对称中心间的相互作用, 只与上式的第二项的系数有关. 故只在一级近似被考虑时, 本文与 Dederichs 和 Leibfried 关于相互作用能的结果一致. 同样的结果也被 Eshelby^[1] 得到.

再将表 2 及表 3 中列出的本文关于 Cu 及 K 的结果和 Hardy 等人^[2,3] 的结果作一比较, 结论是令人惊异的. 尽管级数的收敛不很好, 但到二级近似为止, 两者在符号和变化趋势上基本一致. 前面已估计了三级以上的项所占的比重. 显然, 它们的忽略不会对给出的结果产生根本的影响.

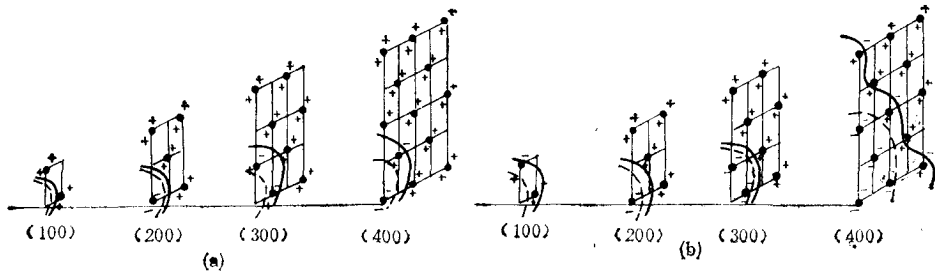


图 1 本文及点阵静力学关于 Cu 中的膨胀中心的计算结果与 (a) 原子位置弛豫 (b) 相互作用能改变符号的锥面位置的比较 实线及原子右上方的符号为点阵静力学的结果; 虚线及原子左下方的符号为本文的结果

为了分析二者有时出现的符号不一致的情况, 在图 1 及图 2 中我们将当原点有一膨胀中心时, 点阵中各个原子的弛豫方向和与点阵上另一个膨胀中心间的相互作用能的正负表示了出来, 并画出了它们改变符号的锥面在原子平面上的交截线. 由图可见, 本文及点阵静力学的结果除在锥面位置上有时有小的差异外, 没有根本的不同. 而在数值上, 由表 2 可以得到, 对 Cu, 本文及点阵静力学关于位置弛豫之比大部分在 0.07—0.12 之间, 能量之比在 0.005—0.012 之间, 这说明二者随位置变化的情况大致相同. 同时, 由于位置弛豫与 p_{11} 成正比, 能量与 p_{11}^2 成正比, 本文结果在数值上也与此一致. 而对于表 3 的 K 的结果, 位置弛豫的比值大部分在 0.6—1.4 之间, 能量的比值在 0.2—1.0 之间, 虽与点阵静力学结果变化情况相似, 但本文的能量值偏小.

还可以定量地比较位移对距离的依赖性. 对于 K, 我们取在 [111] 和 [100] 两个方向上的所有的原子的位移和相对于原点的距离作图, 如图 3(a) 及 (b) 所示. 同样的曲线

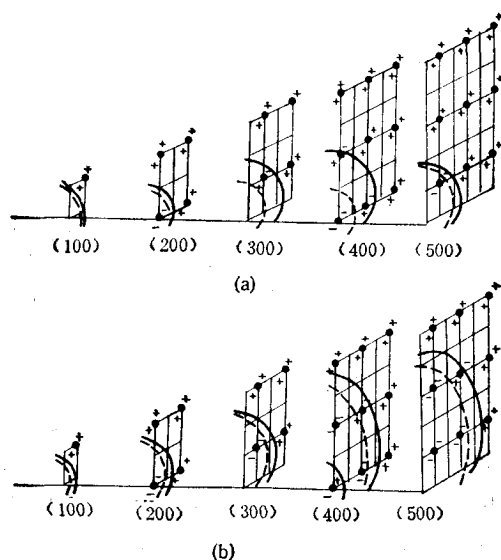
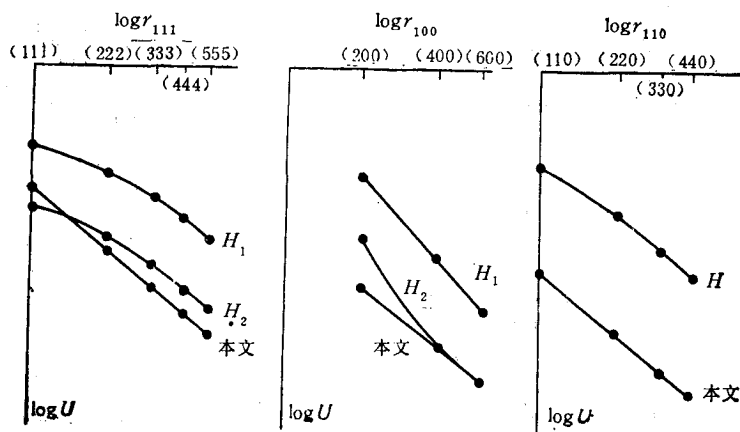


图2 本文及点阵静力学关于K中的膨胀中心的计算结果与(a)原子位置弛豫
(b)相互作用能改变符号的维面位置的比较

对Cu在[110]方向上的数据作出,表示在图3(c)中。由图3可见,除最近邻原子外,本文及Hardy等人关于位移的结果都基本上遵守 $U = A/r^n$ 形式的关系。当然,对不同的结晶方向, A 和 n 可以取不同的值,而图3的结果表明,二者的 n 值相同¹⁾。



(a) K在[111]方向 (b) K在[100]方向 (c) Cu在[110]方向
图3 本文及点阵静力学关于原子位移随距离变化情况的比较

Hardy及其同事给出了K^[3], Na^[3], Cu^[2], Al^[2], α -Fe^[24]中的空穴和Cu中的间隙原子^[23]所引起的点阵弛豫以及和另一同类缺陷间的相互作用能,以及Cu中的Cu间隙原子和另一置换杂质原子间的相互作用能^[26]的点阵静力学计算的数值结果。对以上所有的情

1) 严格的定量比较是困难的,因为点阵静力学的计算结果因所取参数不同而变化很大^[2,3],而本文结果则唯一决定于实验的弹性常数。

形,我们也用本文列出的式子进行了计算,并与 Hardy 等人的结果进行了比较. 结果表明,对于点缺陷引起的位移场的所有的数值结果,二者基本一致(对 α -Fe, 二者接近). 对于相互作用能,除 Al 中的空穴对和 Cu 中的间隙原子对这两种情况外,二者也基本一致. 这进一步表明了各向异性弹性格林函数的级数表示的可应用程度. Schober 等人^[30]的理论计算也表明,取适合的耦合参数,点阵格林函数和弹性格林函数给出相同的结果.

对于 Dederichs 和 Leibfried 的修正后的结果,也计算了在一级近似下点缺陷所引起的点阵弛豫((21)式),其一级修正值较小,因而始终保持点阵中所有原子的弛豫方向不变. 其相互作用能与本文一级近似的结果相同.

总之,由上面的比较可以得出结论: 本文给出的各向异性立方晶体的弹性格林函数在一定的精确程度上,正确地表明了立方晶体的各向异性性质. 由它给出的膨胀中心的位移场和相互作用能与由基于点阵的不连续性而给出的点阵静力学计算基本一致. 因而本文给出了一个可以普遍应用的解析表示式,它可以正确地描述晶体的各向异性行为(在定量上可能不是很准确的). 这将给某些计算带来很大的方便. 例如,在各向异性立方晶体中某一取向的位错线所产生的位移场和应力场问题,各向同性连续统理论不能给出正确的结果,而用本文的结果进行计算也许是可能的. 这一方面的工作正在进行中.

参 考 文 献

- [1] J. D. Eshelby, *Solid State Physics*, **3**(1956), 79.
- [2] R. Bullough and J. R. Hardy, *Phil. Mag.*, **17**(1968), 833.
- [3] J. W. Flocken and J. R. Hardy, *Phys. Rev.*, **177**(1969), 1054.
- [4] A. E. H. Love, *The Mathematical Theory of Elasticity*, (Combridge University Press, 1952, 4th ed.).
- [5] I. Fredholm, *Acta Math. (Stockholm)*, **23**(1900), 1.
- [6] E. Kröner, *Z. Physik*, **136**(1953), 402.
- [7] E. Mann, R. V. Jan und A. Seeger, *Phys. Stat. Sol.*, **1**(1961), 17.
- [8] Kyoon-Haeng Chou Lie and J. S. Koehler, *Adv. Phys.*, **17**(1968), 421.
- [9] И. М. Лифшиц и Л. Н. Розенцвейг, *ЖЭТФ*, **17**(1947), 783.
- [10] P. H. Dederichs and G. Leibfried, *Phys. Rev.*, **188**(1969), 1175.
- [11] 杨正举, *物理学报*, **32**(1983), 1416.
- [12] Cristian Teodosiu, *Elastic Models of Crystal Defects*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, (1982).
- [13] Wei-Mei Shyu and G. D. Gaspari, *Phys. Rev.*, **163**(1967), 667.
- [14] H. Kronmüller and H. E. Schaefer, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **66**(1974), 607, **67**(1975), 63.
- [15] W. Scheu, W. Frank and H. Kronmüller, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **82**(1977), 523.
- [16] M. H. Yoo, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **61**(1974), 411.
- [17] G. L. Hall, *J. Phys. Chem. Solids*, **3**(1957), 210.
- [18] L. A. Girifalco and V. G. Weizer, *J. Phys. Chem. Solids*, **12** (1960), 260.
- [19] L. A. Girifalco and J. R. Streetman *J. Phys. Chem. Solids* **4**(1958), 182.
- [20] H. Kanzaki, *J. Phys. Chem. Solids*, **2**(1957), 24; 107.
- [21] J. R. Hardy, *J. Phys. Chem. Solids*, **15**(1960), 39; **23**(1962), 113.
- [22] J. R. Hardy and A. B. Lidiard, *Phil. Mag.*, **15**(1967), 825.
- [23] J. W. Flocken and J. R. Hardy, *Phys. Rev.*, **175**(1968), 919.
- [24] J. W. Flocken, *Phys. Rev.*, **B2**(1970), 1743.
- [25] J. W. Flocken and J. R. Hardy, *Phys. Rev.*, **B1**(1970), 2447; 2472.
- [26] L. I. Ivenov, Yu. M. Platov and M. N. Pletnev, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **64**(1974), 771.
- [27] V. K. Tewary, *J. Phys. F*, **3**(1973), 1515.
- [28] Roy Benedek and P. S. Ho, *J. Phys. F*, **3**(1973), 1285.
- [29] V. K. Tewary, *Adv. Phys.*, **22**(1973), 757.
- [30] H. R. Schober, M. Mostoller and P. H. Dederichs, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **64**(1974), 173.

THE ELASTIC GREEN'S FUNCTION OF ANISOTROPIC CUBIC CRYSTALS AND ITS APPLICATIONS

YANG ZHENG-JU

(Department of Physics and Institute of Solid State Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

The series expansion of elastic Green's function of anisotropic cubic crystal is calculated and the expansion coefficients are given under the second order approximation. Applying the results to elastic dipole model, one obtains the expressions of elastic displacement field due to a symmetrical center and the interaction between two symmetrical centers. For strongly anisotropic cubic crystals such as K and Cu, it is surprising that the numerical results of the displacement field of the symmetrical center and the interaction between them are basically the same as those obtained by using lattice statics, which is based on the discrete native of the lattice, although the convergence is not very satisfactory. This seems to indicate that our analytical expression of the elastic Green's function leads to a simple and easy method, which can be used generally to describe some mechanical behaviour of cubic crystals correctly.