

第三届全国物理力学学术 会议论文集

Proceedings of the 3rd National
Conference of Physical Mechanics

主办单位：中国力学学会物理力学专业委员会
国防科技大学原子分子与物理力学研究中心

1989年4月 长 沙

選請報告

物理力学与原子分子物理 茹清泉 (1)Dynamics of Resistless Charged Fluids
in Hamiltonian Formalism Cheng Kaijia (98)

高超声速气动研究的复兴 乐嘉陵等 (34)

晶体缺陷的计算机模拟 陈致英 (83)

化学气相沉积材料的几个问题 崔季平 (96)

密度泛函理论与材料性质研究 张万箱 (15) 张万箱

激光与材料相互作用研究中的物理学问题 赵伊君 (45)

[illegible]

12345678910111213141516171819202122232425262728293031323334353637383940414243444546474849505152535455565758596061626364656667686970717273747576777879808182838485868788899091929394959697989910010110210310410510610710810911011111211311411511611711811912012112212312412512612712812913013113213313413513613713813914014114214314414514614714814915015115215315415515615715815916016116216316416516616716816917017117217317417517617717817918018118218318418518618718818919019119219319419519619719819920020120220320420520620720820921021121221321421521621721821922022122222322422522622722822923023123223323423523623723823924024124224324424524624724824925025125225325425525625725825926026126226326426526626726826927027127227327427527627727827928028128228328428528628728828929029129229329429529629729829930030130230330430530630730830931031131231331431531631731831932032132232332432532632732832933033133233333433533633733833934034134234334434534634734834935035135235335435535635735835936036136236336436536636736836937037137237337437537637737837938038138238338438538638738838939039139239339439539639739839940040140240340440540640740840941041141241341441541641741841942042142242342442542642742842943043143243343443543643743843944044144244344444544644744844945045145245345445545645745845946046146246346446546646746846947047147247347447547647747847948048148248348448548648748848949049149249349449549649749849950050150250350450550650750850951051151251351451551651751851952052152252352452552652752852953053153253353453553653753853954054154254354454554654754854955055155255355455555655755855956056156256356456556656756856957057157257357457557657757857958058158258358458558658758858959059159259359459559659759859960060160260360460560660760860961061161261361461561661761861962062162262362462562662762862963063163263363463563663763863964064164264364464564664764864965065165265365465565665765865966066166266366466566666766866967067167267367467567667767867968068168268368468568668768868969069169269369469569669769869970070170270370470570670770870971071171271371471571671771871972072172272372472572672772872973073173273373473573673773873974074174274374474574674774874975075175275375475575675775875976076176276376476576676776876977077177277377477577677777877978078178278378478578678778878979079179279379479579679779879980080180280380480580680780880981081181281381481581681781881982082182282382482582682782882983083183283383483583683783883984084184284384484584684784884985085185285385485585685785885986086186286386486586686786886987087187287387487587687787887988088188288388488588688788888989089189289389489589689789889990090190290390490590690790890991091191291391491591691791891992092192292392492592692792892993093193293393493593693793893994094194294394494594694794894995095195295395495595695795895996096196296396496596696796896997097197297397497597697797897998098198298398498598698798898999099199299399499599699799899910001001100210031004100510061007100810091010101110121013101410151016101710181019102010211022102310241025102610271028102910301031103210331034103510361037103810391040104110421043104410451046104710481049105010511052105310541055105610571058105910601061106210631064106510661067106810691070107110721073107410751076107710781079108010811082108310841085108610871088108910901091109210931094109510961097109810991100110111021103110411051106110711081109111011111112111311141115111611171118111911201121112211231124112511261127112811291130113111321133113411351136113711381139114011411142114311441145114611471148114911501151115211531154115511561157115811591160116111621163116411651166116711681169117011711172117311741175117611771178117911801181118211831184118511861187118811891190119111921193119411951196119711981199120012011202120312041205120612071208120912101211121212131214121512161217121812191220122112221223122412251226122712281229123012311232123312341235123612371238123912401241124212431244124512461247124812491250125112521253125412551256125712581259126012611262126312641265126612671268126912701271127212731274127512761277127812791280128112821283128412851286128712881289129012911292129312941295129612971298129913001

多钟电话时要求补沙哈牙院叫叫的住和
能时改之吸双条烟(2日)无痰

报 告

低密度氢气的分子间相互作用与状态方程 的理论计算	周茂堂等	(3)
高密度氢气的分子间相互作用与状态方程 的理论计算	周茂堂	(4)
高压氢气的相变理论	葛清泉等	(5)
金属强度和变形的微观结构力学初探	何思龙	(7)
NaH 晶体的物态方程与相变的理论计算	王新宏等	(9)
加温加压对高密度聚乙烯晶体的微观结构 与性能	王 惠等	(11)
LiH 晶体的物态方程与相变的理论计算	葛清泉等	(13)
La_2CuO_4 的晶格振动研究	葛宜福等	(16)
氮的物态方程及高压下的金属化	张春斌等	(16)
锗 Ge 原子各级电离能的理论计算	解建勇等	(17)
强激光与高 Z 靶的相互作用——激光与等 离子体相互作用的理论模拟	彭惠民等	(18)
经典混沌道的量子力学含义	解伯民等	(19)
$LiHO_2$ 晶体的晶格动力学	蒋亦民等	(20)
几种合金钢在高压下的状态方程	鲍忠兴等	(22)
非晶碳电阻的压力效应	鲍忠兴等	(23)
形变金属低能位错结构	刁小雪等	(24)
单向纤维增韧陶瓷的位错模型	胡海云等	(25)
尾喷焰中辐射能传输研究的现状	王福恒	(26)
固体火箭发动机尾喷焰红外辐射 计算中微观理论应用	王 俊	(27)
激光与铝靶相互作用能量耦合的理论计算	董雁冰	(27)
铝晶格处于外场中类氢杂质束缚能的一组化方法	李树深等	(28)
高温下活塞顶面的交变温度和热应力	潘留仙等	(29)
在 GaAs / $G_{1-x}Al_x$ As 非对称量 子陷阱类氢杂质中心	伍 林等	(30)
激光辐射对钢材棒试样的疲劳寿命、表面层深度 的影响及残余应力估算	周雅文	(31)
激光弱作用对铝合金材料力学性质的宏观分析	李长春	(32)
BN 粉尘在高温空气中的烧蚀产物及辐射特性	陈力超等	(33)
用从头计算方法计算聚乙烯的杨氏模量和力常数	孙宪武等	(36)
Anderson-Grancisen 参数与晶体弹性模量对压强		

的一阶导数之间的关系	严祖同等	(38)
一般金属表面吸收系数的计算	彭 健	(40)
水分子 $6.3\ \mu$ 带模型参数的计算	冯慰荣	(41)
Li 和 Fe 的原子形状因子的计算	胡洪波等	(42)
同种原子和异种原子的原子簇性质研究	唐荣奇等	(43)
Li_2 和 Li_3 的电子结构	唐荣奇	(44)
金属膜反射镜在强激光辐射下热畸变的估算	刘同江等	(46)
用多重散射 X_α 方法计算 Al_{13} 原子簇的总能量及力常数	章雅平	(47)
InSb 晶体比热的计算	刘泽金等	(48)
几种碱卤晶体热膨胀系数的理论计算	孙凤国等	(49)
高压下的类氢原子	孙凤国等	(49)
表面偏折问题中平均方程的迭代求解	赵 敏等	(50)
关于 ASALT 程序的移植与开发	周连胜	(51)
准分子激光溅射法制备高温超导薄膜的 实验研究	安承斌等	(52)
九字厚等离子 Abel 变换的插值解法	母英魁等	(53)
X 射线激光介质中的原子动力过程	李家明	(54)
分子近邻结构随键角变化的规律	鲍敏 等	(55)
激光内爆等离子体的光谱线形的研究	侯 氢等	(56)
离化态原子近核区单电子波函数	刘 磊等	(57)
离化态原子的激发态结构	鲍敏琪	(58)
用相函数方法计算低能电子与一价碱金属 离子散射的相移散射长度	林在昆等	(59)
CIIV 2s2pnf ($n=7,8,9,10$) 组态能级的组态 相互作用计算	董晨钟等	(61)
多体理论中的不可约张量方法	李伯符	(62)
原子能量的 CI 计算	朱 霞等	(64)
跃进几率的 CI 计算	朱 霞等	(65)
Na, K, La 原子激发态能级计算	王 宛等	(66)
类氢离子的双电子激光	段云波等	(67)
分子的(谐和非谐)振动能及相对论修正	周凌云	(69)
在高温条件下实现准分子的一种新方法	熊 辉	(72)
分子辐射特性的研究	田兴时	(74)
用从头计算法计算 N_2 的势能曲线和相对跃迁强度	陈小青	(76)
靶原子波函数对计算低能电子散射结果的影响	袁建民等	(77)
原子激发态寿命的多道量子亏损理论	刘学文等	(78)
Ga II $4sns\ ^1s_0$ 能级结构的 MQDT 分析	梁 良	(79)

低能电子分波 Be、Mg、Ca、Zn、Cd 和 Sr 原子散射

中的形状共振	袁建民等	(80)
开壳层相互作用矩阵元的推导及计算	吴 兵等	(81)
原子过程中的相对论效应和扭曲波计算	干文甲	(82)
原子谱线跃迁几率的激变研究	周曙白等	(84)
含温有界平均原子理论模型的研究	李世昌	(85)
原子多光子电离中哈密顿量的选取	陈宝振	(86)
扩展电阻法研究变能量 N^+ 注入 Si	马得家等	(88)
C_2H_4 / NO 反应动力学的数值模拟研究	竺乃宜	(91)
任意温度和密度下热稠密物质的状态方程计算	李招宁	(92)
用 2.5 千瓦氩等离子体作建立 10000-15000K 温度		
标准的模拟性实验	韩隆恒等	(94)
化学气相沉积材料技术的几个问题	崔季平	(96)
A Possible Method of Calculating Atomic And		
Molecular Problems	Kong linghua	(97)

物理力学与原子分子物理

苏清泉

(成都科技大学高温高压物理研究所)

提要

一、物理力学的提出与发展

1. 什么是物理力学?

物理力学是近代力学的一个分支,是研究宏观力学现象的微观理论的学科。其目的是从构成物质的微观粒子(原子分子等)的性质和相互作用出发,找出介质、材料的力学性质的计算方法,使力学问题的解决建立在微观分析与计算的基础上。所以物理力学是一门新兴学科,它从物质的微观结构出发,提出计算工程技术所用介质和材料力学性质的方法,使介质和材料的力学性质可以不完全依靠实验就可以确定,是一门为工程技术服务的技术科学。

2. 物理力学建立的时代背景

(1)需要:由于近代尖端科学技术的发展,面临着高温高压、超高温、超高压条件下的材料性质问题,材料在苛刻条件下的问题,不能完全靠实验的方法,急需要建立理论计算方法,要用由微观结构到宏观性质的道路来建立材料性质的计算方法,由微观结构设计出工程上需要的介质和材料。

(2)可能:由于近代物理的发展,特别是原子与分子物理的发展及近代计算机和计算方法的发展,为物理力学的研究提供了较好的基础,使这门学科的建立和发展成为可能。

3. 物理力学的研究方法

理论与实验相结合,并特别注意以下两点:

(1)注意问题中的微观机理分析,认清问题的主要因素,提出一个简化模型,便于分析计算。

(2)注意运算的手段,尽量利用高效率的计算工具,算出有用的数据来。

4. 力学现代化的标志

1977年在制定全国基础学科规划时,在一些座谈会上,钱学森同志认为力学现代化的标志主要有两点:(1)尽量使用物理力学。(2)尽量使用高效率的计算机。我同意这种观点。所以物理力学在近代力学的发展上占有重要的地位。

物理力学
——在近代力学中的地位

物理力学是近代力学的重要组成部分

高不下,物理力学是近代力学的重要组成部分!
物理力学是一个学科,它

5. 物理力学的发展过程

物理力学是钱学森同志于五十年代初明确提出来的,写了这方面的专门著作,开创了这门学科的建立和发展。他55年回国后,培养了这方面的研究生,六十年代初建立了一支队伍,在力学所建立了物理力学研究室。稍后我在吉林大学,东北物理所组织了这方面的队伍,开展了这方面的工作。北京物理所也开展了这方面的研究。从1963年起这几个单位密切协作,以原子分子物理为基础开展研究。在两三年内取得了可喜的成绩。1966年2月3日在北京召开了第一届的全国性会议,是与原子与分子物理联合召开的,取名为原子与分子物理及物理力学学术座谈会明确了分子物理为基础来研究物理力学,是一个创造。文革期间,队伍被解散了。1978年全国力学规划会议后,又恢复了这门学科。1979年由我主持在武汉举办了“物理力学讲习班”,培养了人才,重建了队伍,十年来队伍有所壮大,水平有所提高。1986年11月在成都召开了第二届全国物理力学学术会议,参加的人比较多,有一百多人参加,提出的报告也比较多,标志着这门学科开始兴旺起来了,并成立了专业委员会,使这门学科进入了有计划有组织的发展阶段。

二. 物理力学的主要研究内容

(1)高温气体;(2)高压气体;(3)高压固体状态方程;(4)相变及临界现象;(5)液体的平衡性质;(6)固体强度的微观理论;(7)材料的原子分子设计;(8)强光、高速粒子与固体材料的相互作用。

三. 物理力学与原子分子物理的关系

要以原子与分子物理为基础来研究物理力学问题,已于1966年2月3日在北京召开的第一届会议上明确了。这是总结我们六十年代初的研究而得出的结论。因为当时我们从原子与分子物理出发研究高温气体中的慢电子碰撞,高压固体状态方程,高压气体的性质等都取得了比较好的进展,促使我们明确认识到要解决好物理力学问题,没有很好的原子分子物理基础是不行的。物理力学要从微观出发来分析研究宏观性质问题,而这里所说的微观主要是原子与分子结构层次。这就是说要从原子分子这一微观层次出发来分析研究物体的宏观性质。从学科上来说,就是要从原子与分子物理过渡到物理力学。原子分子物理与力学结合产生了物理力学这门新兴的学科。这是理工结合产生新科学技术的一个重要例子。

为了进一步发展物理力学,原有的原子与分子物理并不够用,尚须针对物理力学发展的需要开展应用原子分子物理。钱学森同志很重视这一点。他看到《原子与分子物理学报》的创刊号后,给我复信,提倡发展应用原子分子物理,使之成为工程师设计产品的工具,发展原子与分子工程,希望有一群原子与分子物理学家转为原子分子工程师。我认为他的这个意见很重要,因此把他的信公布在《原子与分子物理学报》1987年1月第1期上。建议大家看看。

针对物理力学发展的需要,进一步推动原子与分子物理的发展,从而为物理力学发展奠定更好的基础。相信这门学科在我国今后会有一个很大的发展,形成具有自己特色的研究基地和一支强有力的研究队伍,能跟上高新技术发展的需要,作出重要贡献。

低密度氢气的分子间相互作用与状态方程的理论计算

周茂堂

(大连舰艇学院)

葛清泉

(成都科技大学)

在外加压力下,若氢分子质心间距大于氢分子的有效直径(大约 $6a_0$),本文称之为低密度。在此状态下,氢分子可以自由转动。分子间瞬时作用与分子轴相对取向有关。但在一个比它的转动周期长得多的微观长时间内,处于振动和转动基态的两个氢分子之间的相互作用应按 $w = \frac{1}{4\pi}$ 作等几率平均。

本文采用我们提出并加以数学证明的计算两个氢分子间平均相互作用的分子单中心模型及公式

$$\Delta E = \langle E \rangle - \langle E \rangle_{\infty} + k(R) (C_4/R^4 + C_6/R^6)$$

在全程范围内计算了平均相互作用势曲线。考虑到较低温度下的量子效应,利用上述平均相互作用势计算结果,依据下述公式

$$B(T) = B_{cl}(T) + \left(\frac{h^2}{m}\right) - \left(\frac{h^2}{m}\right)^2 B_1(T)$$

计算了二阶 Virial 系数。计算结果与在有实验数据可比的123°K至423°K范围内符合得相当好。由于 $B(T)$ 中不仅涉及到相互作用势曲线本身,而且涉及到它的一阶导数,因而,二级 Virial 系数的符合,进一步证明,平均相互作用曲线不仅其势井深度,平衡点位置,而且曲线走向都是相当可靠的。

考虑到氢气受压时,越来越稠密,而稠密气体的定性行为主要是由硬心决定的,吸引部分只是对硬心行为的微小修正。因此,在状态方程中,用硬球势三至五阶 Virial 系数去逼近我们的非刚性实际问题。

$$PV = RT (1 + B(T)/V + C/V^2 + D/V^3 + E/V^4)$$

其中 $B(T)$ 为本文计算结果; $C = 0.625N^2b_0^2$; $D = 0.2869N^3b_0^3$; $E = 0.1929N^4b_0^4$; $b_0 = 2\pi nd^3/3$, d 为碰撞直径,由相互作用势曲线与横轴交点决定, $d = 5.749a_0$ 。计算获得气液相变临界温度以上的状态方程曲线,作为后面讨论氢气高压相变的基础。

* 本文是在葛清泉教授指导下,在成都科大作的博士论文的部分内容,并得到国家自然科学基金的资助。

高密度氢气的分子间相互作用与状态方程的理论计算

周茂堂

(大连舰艇学院)

苟清泉

(成都科技大学)

氢气被高度压缩,若分子质心间距小于氢分子有效直径,称为高密度。此时氢分子不能自由转动,决定体系宏观性质的是呈固定取向的分子间相互作用。针对两个氢分子呈矩形构型的情况

a.按自旋限制的闭壳层自洽场方法计算了分子间相互作用能

$$\Delta E_{scr} = E_{scr} - E_{scr}^0$$

6.利用本文提出并证明了的关于偶极—偶极作用的定理1和关于偶极—四极作用的定理2,证明了在自洽场 STO—3G 基组下,必须在 ΔE_{scr} 的基础上附加色散能修正项 ΔE_D 。该证明过程也可以被视为是对 Toennies 公式的数学证明

c.高度压缩的氢气体系,必须考虑分子间电子相关效应。本文利用了库仑孔的概念,建立起一种计算氢分子间电子相关能的新的理论方法

$$\Delta E_C = T, PX - (T, PX)$$

其中P为密度矩阵,X为本文定义的电子相关矩阵,其矩阵元为

$$X_{ij} = -10\pi d^3 \sum_n P_n \langle r \Phi_i \Phi_j \Phi_k \Phi_l \rangle$$

最终的相互作用能公式为

$$\Delta E = \Delta E_{scr} + \Delta E_D + \Delta E_C$$

完成全程范围的相互作用势曲线计算,并进而计算二阶 Virial 系数和状态方程曲线。在状态方程中,比低密度氢气多一项 F/V^3 , $F = 0.07428 N^3 b_0^3$, $b_0 = 2\pi d^3/3$, $d = 5.625a_0$,由相互作用势曲线确定。此处的计算结果仍作为进一步研究氢气高压相变的基础,也是氢气高压相变微观理论的组成部分。

* 本文是在苟清泉教授指导下,在成都科大作的博士论文的部分内容,并得到国家自然科学基金的资助。

高压氢气的相变理论

芮清泉

(成都科技大学)

周茂堂

(大连舰艇学院)

我们已经针对低密度氢气和高密度氢气,首先计算了分子间相互作用势,进而算出了 P-V-T 状态方程曲线,从而得到下列 P-V 相图。

1. 图 1 中,实细线为无序相等温线,点划线为有序相等温线,其中 DEF 线为临界等温线在有序相中的部分,ABC 为两相交界线,它是两相中相同温度的等温线的交点的连线,也是相变发生的地方。有序相指的是 DEF 线与 ABC 线之间的部分

两相交界的略微倾斜的直线出现在 $V' = 22 \sim 22.5$ 的地方,与本文估算的 $V' = 22.8$ 基本一致。估算时用的排列方式应当说是进入有序相前可能存在的一种最为松散的情况。因此,可以把 V' 视为氢气高压相变临界体积的上限。方程中最后一项的系数可以略有改动,但算出的 V' 不能违背这样的事实:即 V' 不能大于上限 V' ,也不能小于针对直径为 a_0 的分子球给出的最紧密的排列所估算的体积下限。实际上,下限与上限相差不多。

2. ABC 线不可能无限向上延伸。原因是在任何温度下,分子总是要在相应的压强下离解。离解以后的行为必然不同于分子气体。

3. 由图 1 可见,气相相变没有两相共存区。从物理上分析,只要体系密度均匀,则体系要么是有序相要么是有序相,除非由于热运动造成密度涨落,在交界线 ABC 处出现局部有序相。

4. 从无序相到有序相,伴随着分子空间对称性的破缺。这里在无序相中,分子可以自由转动,从平均的意义上讲,分子表现出球对称的特点。一旦进入有序相,便突然失去这种平均意义上的对称性。

5. 在此,不对热力学性质作广泛研究,只讨论两个与实验过程有关的系数。

a. 等温压缩系数 $k = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$

若沿等温线压缩氢气,据状态方程可以求出

$$k = \frac{RT \{1 + B(T)/V + C/V^2 + D/V^3 + E/V^4 + WG/V^5\}}{P^2 V \{1 + B(T)/V^2 + 2C/V^3 + 3D/V^4 + 4E/V^5 + 5WG/V^6\}}$$

根据上式,可以分别算出两相的 k 值。由于两相 P — V 等温线斜率不同,故 k 值变化规律不同,在交界处出现不光滑过渡。这一现象提供了一种在实验上检验是否进入有序相的方法。实验上可以这样安排:保持体系处于某个温度,加压到 V_c' 附近,细心测量 P 和 V ,代入上式计算 k 。也可以直接由测量换算出 $\Delta V / \Delta P$ 。只要测得 k 出现不光滑过渡,说明体系进入有序相。

b. 定容压缩系数 $\beta = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)$

$$\rho = \left(R / PV \right) \left[1 + B(T) / V + C / V^2 + D / V^3 + e / V^4 + WG / V^5 \right] + RTB'(T) / PV^2$$

其中 $B'(T)$ 为 $B(T)$ 对 T 的一阶导数。 β 同样可以作为体系是否进入有序相的判断。

* 本文是在苟清泉教授指导下,在成都科大完成的博士论文的部分内容,并得到国家自然科学基金的资助。 T_g

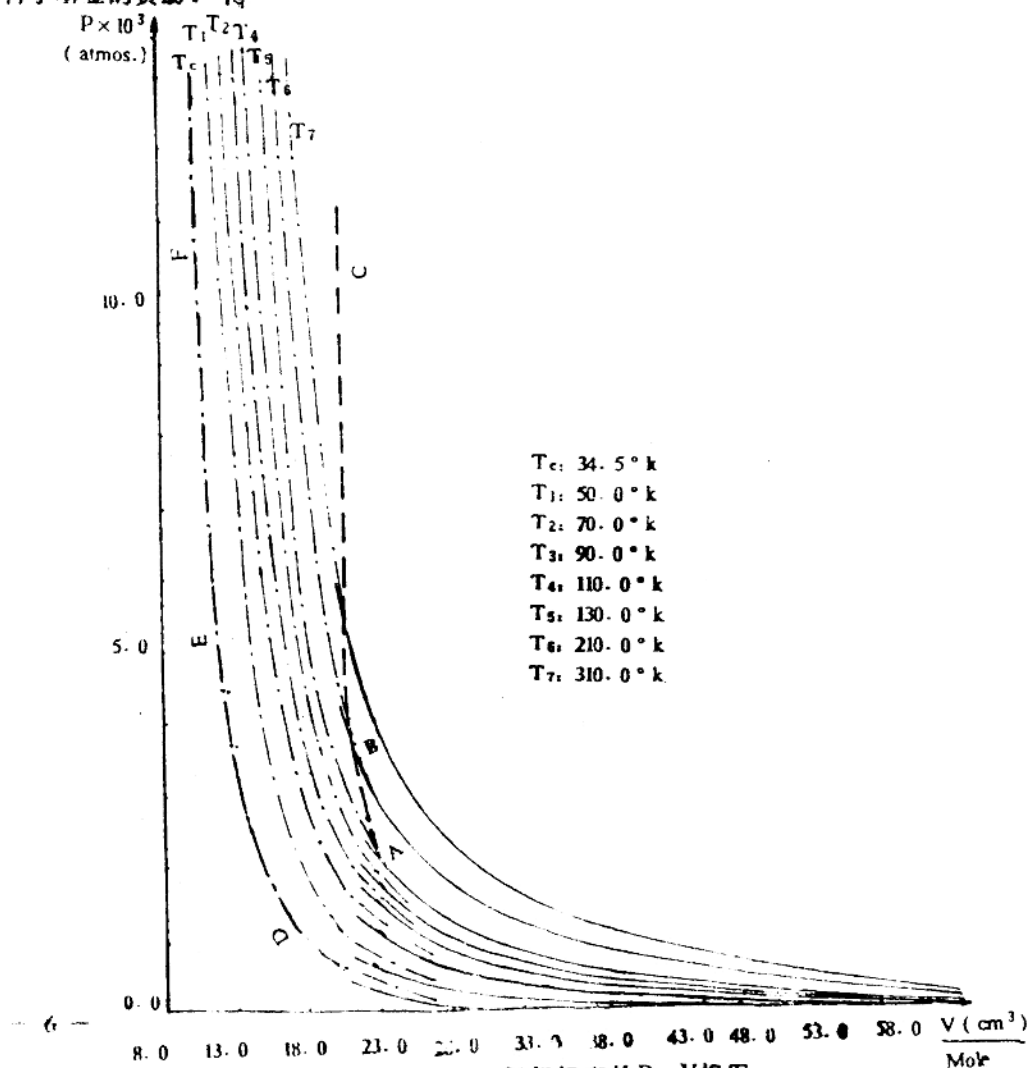


图1 高压下氢气相变的 P — V 相图

金属强度和变形的微观结构力学初探

何思龙

(成都科技大学工程力学系)

本文提出了研究物质结构的“微观结构力学”新理论,以及“微分网架”,“粒子联杆”和“滑移元”等新概念。借助金属键的特殊性,本文导出了金属原子间结合力的定量计算式:

$$F(r) = Ke^2 \frac{1}{r^2} (1 - \frac{r}{r_0}) \quad (1)$$

式中, K 是库仑常数, e 是电子的电量, r 是平衡状态的原子间距。虽然这一公式是建立在一些假设基础上的,但这些假设是物理学普遍接受的。这样就使得金属原子间力的定量计算成为可能。通过计算发现,金属晶体中的原子存在亚稳态,正稳态,过渡稳态和负稳态等四种稳定状态。其结果和金属晶体的实际点阵结构完全一致。这一新的发现启示我们重新认识晶体结构和传统理论。分析金属原子的受力与运动。本文还导出了晶体结构的剪应力—剪应变关系的定量计算公式

$$\tau = \frac{Ke^2}{8r^4} \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \cos \frac{r}{2} \frac{1}{(\cos^2 \frac{r}{2} - \frac{1}{2})^4} - \frac{1}{(\cos^2 \frac{r}{2} - \frac{1}{2})^3} \right. \\ \left. - \frac{1}{(\cos^2 \frac{r}{2} - \frac{1}{2})^2} \sqrt{2} \sin \frac{r}{2} \right]$$

而且发现剪应力—剪应变关系曲线不是传统的确定金属的经典理论强度的 Frenkel 正弦曲线,而是剪应力控制的非正弦曲线,如图 1 所示。它清楚地显示了以下新的重大的事实:

1. 金属晶体原子存在四种稳定态(如图中的 A.O.C.D,其中 A.C 分别为负正稳态,正好是 bcc 金属的结构;O 为亚稳态,正好是 fcc 金属的结构;D 为过渡稳态,借助于相邻“滑移元”的剪应力平衡而处于稳定状态,正好是 hcp 金属结构);

2. 使不同状态的原子滑移的剪应力不相同,这就是不同晶体强度不相同的原因。亚稳态和过渡稳态原子的稳定性极差,如果没有位错等晶体缺陷的阻力,原子将很易滑移。所以 fcc 和 hcp 金属的强度极低,而且取决于位错的密度等因素(另文讨论),反之正稳态和负稳态原子的稳定性极好,所以 bcc 金属具有高强度;

3. 原子滑移各阶段所需剪应力的早晚和方向都不相同,因而使几乎所有的金属材料都具有弹性。加工转变,塑性流动和加工硬化等宏观特性。可见这些特性是物质结构本身所确

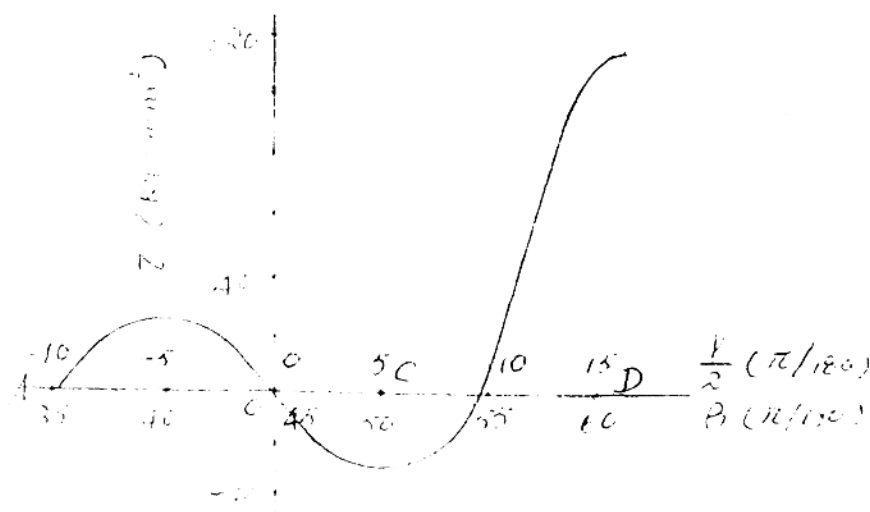
何思龙 1982.12.24

定的,而不是取决于位错的运动。

由于传统的位错运动及阻塞理论不能很好地说明以上材料的宏观特性,而“微观结构力学”理论几乎能说明所有这些现象。为此本文又提出了材料塑性变形的“整体滑移理论”,认为金属塑性变形的机制不是“位错运动”,而是金属原子全体在外剪力及原子间力的相互作用下,借助于“滑移元”的变形从一种状态向另一种状态的滑移。

本文提出的“微观结构力学”理论有待进一步的研究和证实,预计它将对力学和材料科学及工程产生极大的影响和作用。

图1.理想晶体剪应力—剪应变曲线(计算结果)



NaH 晶体的物态方程与相变的理论计算

王新强 茹清泉

(成都科技大学高温高压物理所)

本文将我们在计算 LiH 晶体的物态方程和相变的工作中,提出的离子重迭——压缩模型以及对结合能的变分算法^[1],应用于 NaH 晶体. H^- 离子的波函数仍用 1s Slater 型,而 Na^+ 离子的波函数选为^[2]

$$\Psi_{1s} = N_1 e^{-\mu r}$$

$$\Psi_{2s} = N_2 [(\mu r) e^{-\mu r} - N e^{-\mu a}]$$

$$\Psi_{2p_x} = N_3 (\mu r) \sin\theta e^{i\phi - \mu r}$$

$$\Psi_{2p_y} = N_4 (\mu r) \sin\theta e^{-i\phi - \mu r}$$

$$\Psi_{2p_z} = N_5 (\mu r) \cos\theta e^{-\mu r}$$

其中 N_1, N_2, N_3, N_4, N_5 和 N 由正交归一化条件确定, $\mu = 3.36, a = 3.16$, 由对 Na^+ 离子能量变分定出. 与处理 LiH 晶体类似, 在此我们近似认为只有 H^- 离子被压缩.

计算出的平衡晶格常数为 4.725a.u., 相应的结合能为 -189.63 kcal/mol, 体弹性模量为 203.7 kbar, 与实验值 (4.612a.u., -189.5 kcal/mol, 194 kbar) 符合得较好. 在计算物态方程时, 为了减小计算量, 我们使用了排斥势的指数函数拟合形式, 其计算结果以及与实验值的比较, 见图 1, 显然, 两者符合得相当好. 两种结构 (NaCl 型和 CsCl 型) 的 Gibbs 自由能随压力的变化见图 2, 我们发现两条曲线在 200 kbar 附近相交, 即在这点附近将有相变发生, 相应的体积变化约为 10%, 这与最新的实验结果^[3] (310 kbar, 10%) 基本符合.

重迭模型中波函数 正交化时波函数也要变化.

是也?

重迭模型中波函数 参考文选

- [1] 茹清泉, 王新强, 待发表.
- [2] 茹清泉, 《原子结构的变分计算》, 待出版.
- [3] H.D. Hochheimer, K. J. Rosenberg, W. Hontela, B. Baranowski, and F. Filippek, Z. Phys. Chem. **143**, 139 (1986).
- [4] S.J. Duclos, Y.K. Vohra, A.L. Ruoff, S. Filippek, and B. Baranowski, Phys. Rev. **F33**, 7664 (1987)

* 是国家高技术计划项目

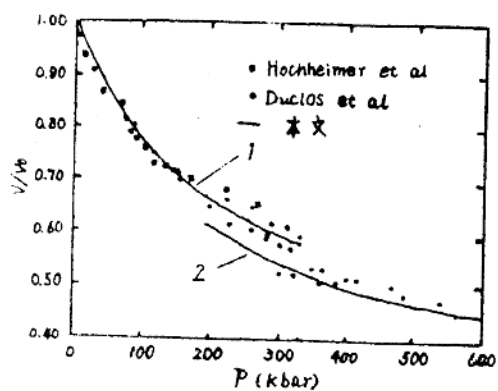


图1 物态方程的计算结果及其
与实验值的比较

1—NaCl 结构

2—CsCl 结构

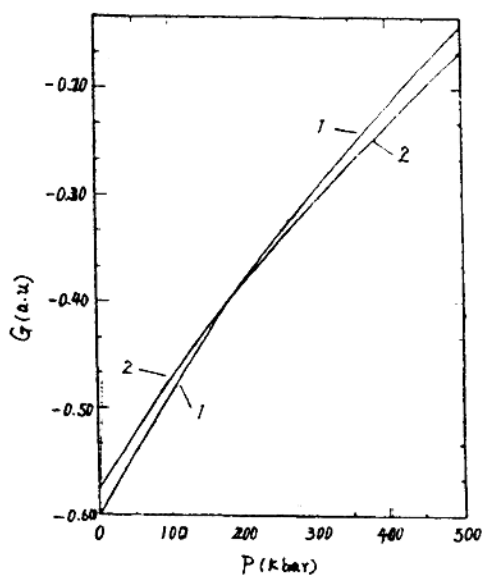


图2 Gibbs 自由能随压力的变化

1—NaCl 结构

2—CsCl 结构

利用高压改变材料结构

加温加压对高密度聚乙烯晶体的微观结构与力学性能的影响

王忠 吴瑞璜 苏清泉

(成都科技大学高温高压物理研究所)

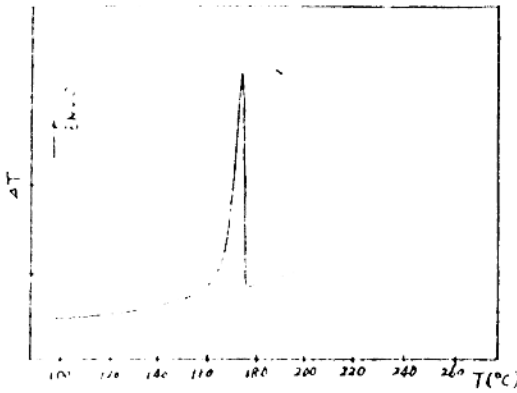
高密度聚乙烯 (HDPE) 是由支链很少的线形高分子组成。这些线形高分子在 HDPE 内形成无规线团的非晶态结构, 叠链片晶结构和伸直链片晶体 (ECC) 结构。通常情况下, 由于高分子链的柔性, 伸直链晶体 (ECC) 在 HDPE 中所占的比例是很小的。所以一般的 HDPE 材料的强度比钢材和其它高强度材料来说是较低的。近年来人们发现 HDPE 在高压熔体结晶的过程中能生长伸直片晶结构。这种由高分子主链取向排列而形成的晶体结构是高聚物中热力学上最稳定的一中结构。HDPE 中伸直链晶体的增加大大提高了它的力学性能。纵观国内外有关 HDPE 的伸直链晶体 (ECC) 的研究, 目前压力还只停留在 0—0.6 GPa 的范围内, 并且各种实验都处于探索阶段。本文的目的是在压力为 1 GPa—2 GPa, 温度在 170 °C—230 °C 之间来研究加温和加压对 HDPE 的伸直链片晶形成的影响, 期望找到 HDPE 中 ECC 的生长与压力和温度之间存在的规律, 最终导致 HDPE 力学性能的提高。

本实验所用的样品是中科院化学所提供的粉状 HDPE, 其熔融指为 1—3。实验中先将样品预压成型后, 再将它放入高压塞因筒装置中, 压力的调节由高精度的涡轮蜗杆传动其调节精度为 5×10^{-5} 。加热装置采用云母加垫环通大电流加热。样品放入高压腔后, 先将样品加热至一定的温度 (高于 HDPE 的平均熔点 141 °C), 然后用压机在三分钟内完成加载, 最后停止加温保持压力不变, 让样品保持 $5^\circ\text{C}/\text{min}$ 的速率降温。当温度降至 50 °C 时停止保压, 10 小时后取出棒状固态样品。在大气压下对样品进行了差热分析; 扫描电镜观察 (SEM) 和宽角 X 射线衍射 (WAXD) 测量。差热分析结果表明在温度为 170 °C, 压力分别为 1 GPa, 1.5 GPa 和 2 GPa 的熔融曲线中, 随着压力的增加伸直链峰明显增大, 说明压力高时 HDPE 中伸直链片晶生长得快。当压力为 1 GPa, 温度分别为 170 °C, 180 °C 和 210 °C 时差热分析结果表明温度高, 伸直链峰越大即温度升高使伸直链生长更容易。WAXD 的测量结果发现经过高温高压后的 HDPE 的结晶度由原来的 68.296 提高到 89.996。100 方向的片晶平均厚度也由原来的 140 Å 加厚为 300 Å, 其中伸直链片晶的厚度可达 400 Å。SEM 测量和观察也证实了伸直链片的存在。用压缩的方法测量了不同结晶条件下样品的杨氏模量, 其中压力为 2 GPa, 温度为 225 °C, 结晶度为 89.996 的样品的杨氏模量值为 1.46 GPa 大大高于由原始粉末样品经过熔融后得到的固体的杨氏模量 0.41 GPa, 表明高压后 HDPE 的杨氏模量比原始材料提高了约 3 倍。并且将处理后的样品在液氮中浸泡三个星期, 它的强度

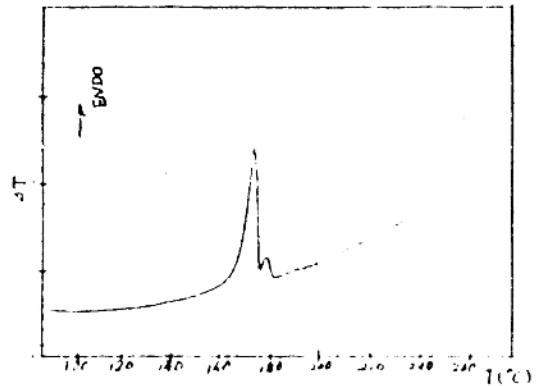
几乎没有变化。表明经过高温高压处理过的样品性能非常稳定。

以上实验结果说明,加温加压能改变 HDPE 的晶体微观结构,即大大地增加原始材料 HDPE 中伸直链晶体结构,从而改善了 HDPE 的力学性能。

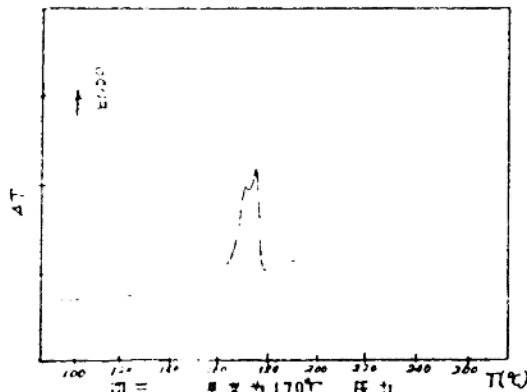
图一、图二和图三分别表示在同一温度(即 170°C),不同压力情况下的熔融曲线。图中左边一个峰代表叠链片晶结构的情况,相应右边一个峰代表伸直链片晶结构的情况。由此可见,在同一温度下,随着压力的增加,叠链片晶结构减少,伸直链晶体结构增加。从图一中可见,高密度聚乙烯只有叠链峰,该材料属于叠链片晶结构。从图三中可见,高密度聚乙烯经过恒温 170°C 加压至 2Ga 后,其伸直链峰已占绝对优势。此时材料的结构绝大部分已转变成伸直链晶体结构。



图一 温度为 170°C ，压力
为 1.0Ga 时的熔融曲线



图二 温度为 170°C ，压力
为 1.5Ga 时的熔融曲线



图三 温度为 170°C ，压力
为 2.0Ga 时的熔融曲线