基于电子理论的断裂机理新探

程开甲 程漱玉*

西北核技术研究所，西安 710024

摘要 应用 TFDC (Thomas-Fermi-Dirac-Cheng)电子理论探讨了材料的断裂机理。该文分析了稳定的材料量子袋中电子受到向内的 Coulomb 作用力和与表面张力相关的电子斥力作用时的平衡状态，提出了平衡状态受到破坏而产生断裂的可能。研究得到了稳定材料颗粒的纳米级极限尺度判据。

关键词 Thomas-Fermi-Dirac 纳米 断裂条件

在 TFDC (Thomas-Fermi-Dirac-Cheng) 电子理论模型[1]中，一个定义为量子袋的隧道电子构成的电子云壳层包复着块材.

这一电子壳层受到了两种力的作用：由于作用在块体材料的表面张力，一个向外的推力作用在壳层电子上；相反方向的 Coulomb 力作用则将壳层电子向内拉. 对于大尺寸的块体，作用于量子袋上的向外的力与 Coulomb 力相平衡. 但当块体尺寸减小到一定尺度，向外作用的力的作用急剧变大、起到主要作用而使平衡被破坏，然后壳层裂开发生断裂. 块体能够稳定的极限尺寸为 R_L，尺度小于 R_L 时，壳体成为小粒子的多体集合. R_L 的粗略估算结果为纳米量级.

1 TFDC 电子理论

在 TFDC 电子理论中，块材被等价于一个半径为 R 的球体（见图 1).

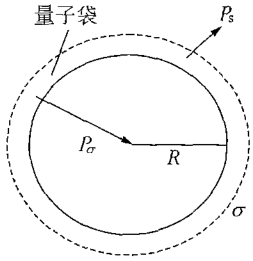

图 1 量子袋示意图

图 1 中，σ 为块体表面的电子密度，P_s 为作用在隧道电子上的向外的推力；P_σ 为向内拉的 Coulomb 力.

块体的总能量 E 为

$$E = K + \Phi + \Phi_s,$$

$$\Phi_s = -\frac{Q^2}{\varepsilon_0 2R}, \quad Q = 4\pi R^2\sigma ,$$

式中 K 和 Φ 为块体的总动能和总势能，Φ_s 为赝势，Q 为块体的表面电荷，ε_0 为介电常数.

块材表面存在着电荷密度为 σ 的隧道电子壳层(称之为量子袋)，在 Coulomb 作用下受到向内的表面电子压力：

$$P_\sigma = \frac{(4\pi\sigma)^2}{\varepsilon_0 8\pi} = 2\pi\sigma^2/\varepsilon_0 ,$$

$$\Phi_s = -3PV = -\frac{Q^2}{\varepsilon_0 2R}(Q = 4\pi R^2\sigma) .$$

当块材为无限大的平面时，表面张力为零；当块材表面开始弯曲时，向内压的表面张力的作用随之显现出来、并随着表面弯曲的程度而增大. 块材受到表面张力作用的同时，一个与表面张力相反的力作用在块材表面量子袋中的隧道电子上，

2005-04-11 收稿，2005-06-20 收修改稿

通讯作者，E-mail: ckjshuyu@public.bta.net.cn

$$P_s = \frac{2\gamma}{R}.$$

因此，在这两种作用共同的作用下，量子袋上的合成静压 P_t 为

$$P_t = P_s - P_\sigma = \frac{2\gamma}{R} - \frac{2\pi\sigma^2}{\varepsilon_0},$$

P_t 必须为负方能使电子壳层稳定，即

$$\frac{2\gamma}{R} - \frac{2\pi\sigma^2}{\varepsilon_0} < 0, \quad R > \frac{\gamma\varepsilon_0}{\pi\sigma^2} = R_L.$$

如果是 $R<R_L$ 的纳米粒子，电子壳将不稳定而使量子袋中的粒子不能积聚在一起. 当水被包复成这种极限尺寸以下的纳米粒子时，就会有特殊的功能——成为极佳的溶剂.

2 量子袋，极限尺度与不稳定性和断裂

块材的稳定性条件已如上所得为

$$R > R_L = \frac{\gamma\varepsilon_0}{\pi\sigma^2}.$$

假设块材由许多分子量为 M，质量密度为 ρ 的分子组成，可如下计算得分子的半径为 r_0

$$\frac{4}{3}\pi r_0^3 \cdot \rho = \frac{M}{6.06 \cdot 10^{-23}}, \quad r_0 = \left(\frac{M}{8\pi \cdot 10^{23}\rho}\right)^{\frac{1}{3}},$$

则有极限尺寸 R_L 为

$$R_L = \frac{\gamma\varepsilon_0}{\pi\left(\frac{e\eta}{\pi r_0^2}\right)},$$

式中 η 为分子的隧道电子数.

以水为例，$\rho=1\ g/cm^3$，$\varepsilon_0=88$，$\gamma=75\ mN/m$ 若设 $\eta<\frac{1}{3}$，则 $R_L>1.5\ nm$

因此，R_L 是量子袋处于亚稳态时的极限尺寸，大小为纳米量级.

当表面张力 $\frac{2\gamma}{R}$ 的作用与 Coulomb 作用相比可忽略时，赝势 Φ_s 在固体材料总能量中起作用，材料是稳定的. 但在极限尺寸 $R<R_L$ 的条件下，表面能的大小可以与体积能相比拟时，系统进入了新的状态：间界面之间失去了清晰的界限. 当系统为尺度 R 近似于 R_L 的非均匀状态时，系统处于亚稳状态，系统崩溃而发生断裂.

如果考虑受外压加载的情况，稳定性条件变为

$$P + \frac{2\gamma}{R} - \frac{(4\pi\sigma)^2}{\varepsilon_0 8\pi} < 0,$$

$$R'_L = 2\gamma / \left(\frac{(4\pi\sigma)^2}{8\pi} - P\right) < R.$$

对向内的压力作用在块体的情况，块体的极限尺度 R'_L 要比没有外加作用时的 R_L 大.

相反，对拉伸力作用的情况，块体的极限尺度 R'_L 要比没有外加作用时的 R_L 小.

因此，断裂问题不仅与块体尺度有关，还与在界面上作用的内应力有关，内应力对微观尺度产生了非均匀的环境. 断裂过程开始于极限尺寸以下的亚稳态，在这样的区域里，结构中存在着杂质和缺陷.

3 结论

对量子袋来说，与表面张力相对应的作用使隧道电子云壳层受到向外推的作用，而 Coulomb 作用将隧道电子云壳层向里拉. 一般来说，为保持块体材料的稳定，向内的拉力要大于向外的推力，也即给所有隧道电子提供的负赝势起到主要作用.

当块体尺寸减小到极限尺寸以下时，量子袋不再稳定而坍塌，系统变成没有清晰边界的多体，是一个大分子体.

断裂实际上是应力在极小的纳米范围里一种转变过程——从稳定的固态衰变成不稳定的纳米尺度大分子.

参考文献

1 程开甲，程漱玉. 材料科学的理论基础. 自然科学进展，1996，6 (1)：12—20