

文章编号: 1004 - 0609(2006)07 - 1166 - 05

ZrCr₂ Laves 相弹性性质和堆垛层错能的第一性原理计算^①

孙 坚, 姚 强

(上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海 200030)

摘 要: 采用缀加平面波加局域轨道方法和广义梯度近似对立方 C15 结构的 ZrCr₂ Laves 相金属间化合物的弹性性质, 包括弹性常数和弹性模量, 以及层错能进行理论计算。结果表明: 计算得到的 ZrCr₂ Laves 相的弹性性质与实验结果相近, 其泊松比和弹性各向异性系数大小说明 ZrCr₂ 中原子键合的方向性并不强烈; ZrCr₂ Laves 相的内禀和外禀层错能分别为 112 mJ/m² 和 98 mJ/m²。并计算了层错与位错的弹性交互作用。对 ZrCr₂ Laves 相的力学特性和变形机制进行了讨论。

关键词: 弹性常数; 弹性模量; 堆垛层错能; ZrCr₂ Laves 相; 第一性原理

中图分类号: TG 146.2

文献标识码: A

First-principles study of elastic properties and stacking fault energies of ZrCr₂ Laves phase

SUN Jian, YAO Qiang

(School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030, China)

Abstract: First-principles calculations were performed to investigate the elastic constants, elastic moduli, stacking fault energies, and dislocation dissociations of C15 ZrCr₂ Laves phase, based on the method of augmented plane waves plus local orbitals with generalized gradient approximation. The results show that the calculated elastic properties are close to the experimental results. The high value of Poisson's ratio and low value of elastic anisotropy ratio imply that the interatomic force in ZrCr₂ is weakly directional. The intrinsic and extrinsic stacking fault energies of ZrCr₂ Laves phase are found to be 112 mJ/m² and 98 mJ/m², respectively, and the elastic interactions between faults and dislocations are considered. Finally, the mechanical properties and deformation mechanism of ZrCr₂ Laves phase are discussed with the calculated results.

Key words: elastic constant; elastic modulus; stacking fault energy; ZrCr₂ Laves phase; First-principles

以 Cr 为主要组分的 XCr₂ 型 Laves 相金属间化合物属于拓扑堆垛晶体结构, 由于这些 Laves 相金属间化合物具有高熔点、高强度以及良好的高温抗氧化性等优点, 是一种潜在的超高温结构材料, 并受到了人们的广泛关注^[1-4]。但是 Laves 相金属间化合物通常在室温下呈现出很差的塑性和断裂韧性, 这极大地限制了这些 Laves 相金属间化合物材料的实际工程应用。目前已经有大量的文献报道了

针对 Laves 相金属间化合物的缺陷结构、塑性变形机理以及合金化方面开展的研究工作^[5-8]。近年来, 第一性原理计算已成为研究晶体材料基本性质的一种重要手段。针对 Laves 相金属间化合物的第一性原理计算也已经有文献报道, 例如 Ormeci 和 Chu 等^[9, 10] 分别采用线性 Muffin-Tin 轨道(LMTO)方法和线性缀加平面波(LAPW)方法研究了 NbCr₂ 和 HfV₂ Laves 相金属间化合物的生成热、弹性模

① 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50271040)

收稿日期: 2005 - 12 - 14; 修订日期: 2006 - 03 - 24

通讯作者: 孙 坚, 教授; 电话: 021-62932566; E-mail: jsun@sjtu.edu.cn

量和电子结构等性质。研究表明, 这些 Laves 相金属间化合物虽然具有高的体模量和弹性模量, 但剪切模量并不高, 同时弹性各向异性系数小, 应具有同步剪切变形的能力。由于材料的层错能的大小对其塑性变形行为起着决定性作用, Hong 和 Chu 等^[11, 12] 还分别对 NbCr₂ 和 TaCr₂ 两种 Laves 相金属间化合物的层错能以及位错分解机制进行了理论研究。最近 Kremer 等^[13] 利用超软赝势法对 ZrCr₂ 的缺陷结构进行了研究, 理论计算结果与实验结果有很好的 consistency。上述研究对深入理解和揭示这些 Laves 相金属间化合物的物理、机械特性以及塑性变形机制无疑具有重要意义。在以 Cr 为主要组分的 XCr₂ 型 Laves 相金属间化合物中, ZrCr₂ 是一种具有代表性的化合物材料。但对于 ZrCr₂ Laves 相金属间化合物的基本性质的研究尚不多见。本文作者采用基于密度函数理论的平面波加局域轨道方法和广义梯度近似条件对 ZrCr₂ Laves 相金属间化合物的一些基本性质, 包括弹性常数和弹性模量, ZrCr₂ Laves 相金属间化合物的内禀和外禀层错能, 以及位错与层错的交互作用方面进行深入的理论研究, 此外还结合理论计算结果对 ZrCr₂ Laves 相金属间化合物的力学特性和塑性变形机制进行讨论。

1 计算方法

采用基于密度函数理论(DFT)的缀加平面波加局域轨道(APW+lo)方法, 并采用广义梯度近似(GGA)来处理交换关联能, 该方法的优点是在获得高计算精度的同时可以得到更快的收敛速度^[14]。平面波的截断点($R_{\text{m}}K_{\text{max}}$)的取值为 7.0; 经测试 k 点网格数取 $12 \times 12 \times 12$ 。对 ZrCr₂ 金属间化合物进行计算时, Zr 和 Cr 的 Muffin-Tin 半径分别取 2.2 a. u. 和 2.4 a. u., 自洽循环计算的收敛准则为 0.0001Ry。

AB₂ 型 Laves 相金属间化合物具有拓扑密堆结构, 可以 3 种不同的晶体结构方式存在: 即 C14 (MgZn₂ 型六方结构)、C15 (MgCu₂ 型立方结构) 和 C36 (MgNi₂ 型六方结构)。C15 结构的空间群为 $Fd\bar{3}m$, 属于面心立方结构, 其单胞中包含 6 个原子。而 C14 和 C36 结构均属于 $P6_3/mmc$ 空间群, 均为六方结构, C14 结构的单胞中包含 12 个原子, 而 C36 结构却含有 24 个原子。AB₂ 型 Laves 相晶体结构可以认为由原子密排面按不同堆垛顺序形成的拓扑密堆结构, 其中由 A、B 原子面依次构成的

三层结构有 2 种不同的堆垛方式: $\alpha A' \alpha (\beta B' \beta$ 和 $\gamma C' \gamma)$ 和 $\alpha \beta (\beta \alpha \gamma$ 和 $\gamma \beta \alpha)$, 这种堆垛结构的示意图如图 1 所示, 这里 α, β, γ 代表 AB₂ Laves 相中的 A 原子, a, b, c 和 A', B', C' 分别代表 Laves 相中不同原子面中的 B 原子。立方 C15 结构的 (111) 面与六方 C14 和 C36 结构的 (0001) 面分别具有以下不同的堆垛顺序:

$$\text{C15: } \dots A' \alpha \beta B' \beta \alpha \gamma C' \gamma \beta \alpha \dots$$

$$\text{C14: } \dots A' \alpha \beta \gamma C' \gamma \beta \alpha \dots$$

$$\text{C36: } \dots A' \alpha \beta B' \beta \alpha \gamma C' \gamma \alpha \beta B' \beta \alpha \dots$$

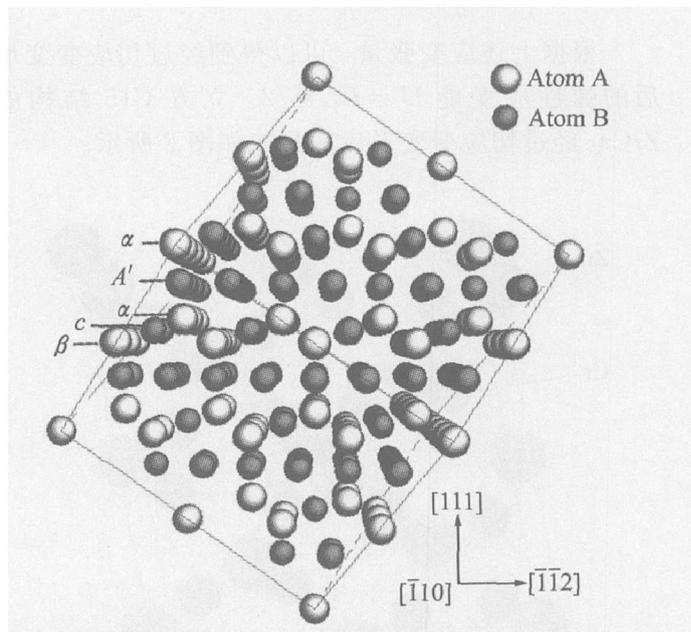


图 1 Laves 相金属间化合物 $\alpha A' \alpha$ 和 $\alpha \beta$ 基本堆垛结构

Fig. 1 $\alpha A' \alpha$ and $\alpha \beta$ stacking structures in Laves phase

2 计算结果和讨论

立方 C15 结构的 ZrCr₂ Laves 相金属间化合物存在 3 个独立的弹性常数即 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 。为了计算 ZrCr₂ 的弹性常数, 可先对晶胞进行不同方式的弹性变形, 然后算出变形后的能量, 并通过此能量与未变形的原始晶胞之间的能量差, 求出弹性应变能, 进而得到弹性常数。弹性应变能计算式为

$$U = \Delta E/V_0 = 1/2 \sum_i^6 \sum_j^6 C_{ij} e_i e_j \quad (1)$$

式中 ΔE 为变形前后晶胞的能量差值; V_0 为原始晶胞的体积; C_{ij} 为弹性常数。首先对晶胞进行等体积的正应变变形, 此时应变变量 $e_1 = e_2 = -1/2e_3 = e$, 应变张量 ε 为

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & -2e \end{bmatrix}$$

根据此应变张量,可以得到经过正应变变形后的弹性应变能 $U = 3(C_{11} - C_{12})e^2$ 。另外,由于体模量(可以通过晶胞的体积优化得到)和弹性常数存在以下关系 $B = 1/3(C_{11} + 2C_{12})$,因此,可以求出 $ZrCr_2$ 的弹性常数 C_{11} 和 C_{12} 。其次,对原始晶胞进行切应变变形,此时应变变量 $e_4 = e$,应变张量 ϵ 为

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}e \\ 0 & \frac{1}{2}e & 0 \end{pmatrix}$$

根据上述应变张量,可以得到经过切应变变形后的弹性应变能 $U = C_{44}e^2/2$ 。立方 C15 结构的 $ZrCr_2$ 经过切应变变形后的晶胞如图 2 所示。

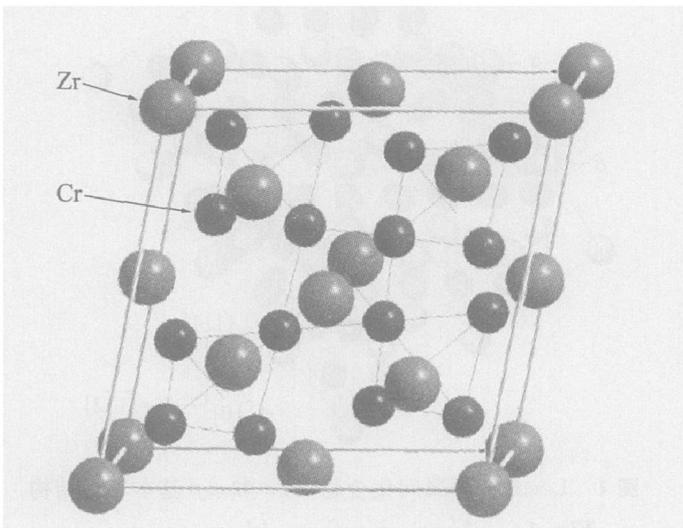


图 2 $ZrCr_2$ 经切应变后的晶胞

Fig. 2 Unit cell of $ZrCr_2$ by rhombohedral distortion

根据上述计算得到的弹性常数可以进一步计算出 $ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物的弹性模量、切变模量、泊松比和弹性各向异性系数等弹性性质。在多晶材料弹性模量的理论估算方法中,采用了 Voigt、Reuss 以及 Hill 等的计算方法。Hill 通过极值原理证明,Voigt 和 Reuss 模型的计算结果是弹性常数的上下限。Hill 模型则将 Voigt 和 Reuss 模型的计算结果取一个简单的算术平均,其结果和实际测定值较为接近。在 Voigt 模型中,切变模量 G_v 为

$$G_v = 1/5(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (2)$$

而在 Reuss 模型中,切变模量 G_R 为

$$G_R = 5/(4S_{11} - 4S_{12} + 3S_{44}) \quad (3)$$

式中 S_{ij} 为 C_{ij} 的逆矩阵。弹性模量 E 、泊松比 ν 和弹性各向异性系数 A 的计算式为

$$E = 9B/(1 + 3B/G) \quad (4)$$

$$\nu = 1/2(B - 2/3G)/(B + 1/3G) \quad (5)$$

$$A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) \quad (6)$$

$ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物的弹性模量、切变模量、泊松比和弹性各向异性系数等弹性性质的计算结果列于表 1。可以看出,本文的计算结果与实验结果相近,其中 $ZrCr_2$ 体模量的计算值比实验值大 11%,而弹性模量和切变模量却分别比实验值小 14% 和 16%。Ormeci 等在计算中也发现有类似的结果,他们认为采用局部密度近似(LDA)处理的计算方法会高估原子的结合强度,从而导致计算得到的晶胞平衡体积比实验值小;而且由于第一性原理计算所得结果均是在 0 K 基态条件下的,所以弹性模量的计算值通常大于实验值^[9]。然而计算所得的弹性模量和切变模量均小于实验值,具体原因目前还不清楚。相对其它铝系金属间化合物材料, $ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物的切变模量不高。此外,计算得到的 $ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物的泊松比高,而弹性各向异性系数小,说明 $ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物中原子键合的方向性并不强烈。而 B_2 结构的 NiAl 金属间化合物的泊松比在 0.2 左右,而弹性各向异性系数则高达 3.28,反映出 NiAl 金属间化合物中原子键合存在较强烈的方向性;同时 NiAl 金属间化合物的切变模量高达 70 GPa^[16]。材料的剪切模量与变形能力存在密切关系,根据 Rice-Thomson 准则, Gb/γ 是判断材料变形能力的指针,降低材料的剪切模量 G 和位错的柏氏矢量 b ,以及提高 γ 材料的断裂表面能 γ 有利于材料的塑性变形。综合上述 $ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物的弹性性质,说明 $ZrCr_2$ 应该具备塑性变形的能力。

表 1 $ZrCr_2$ Laves 相的弹性常数及弹性模量

Table 1 Calculated elastic constants and elastic moduli for $ZrCr_2$ Laves phase (GPa)

C_{11}	C_{12}	C_{44}	B
247.8	145.9	57.6	179.9
			161.5 ^[15]
E	G	ν	A
149.3	54.8	0.362	1.13
173.2 ^[15]	65.7 ^[15]	0.322 ^[15]	

如上所述,在 Laves 相金属间化合物堆垛结构中,存在两种三层结构 $\alpha A' \alpha / \beta B' \beta$ 和 $\gamma C' \gamma$ 以及 $\alpha \beta$ ($\beta \alpha \gamma$ 和 $\gamma \beta \alpha$),如图 1 所示,其中 $\alpha \beta$ 型三层结构较 $\alpha A' \alpha$ 型在空间排布上更加紧密,所以 $\alpha \beta$ 型切变矢量较 $\alpha A' \alpha$ 型更短,从而导致其易于发生剪切变形。

在 αβ 型 C15 Laves 相金属间化合物结构中, 可以通过同步剪切引入内禀堆垛层错 (ISF) 和外禀堆垛层错 (ESF), 其中内禀和外禀堆垛层错在 αβ 型结构中的堆垛顺序分别为

$$\text{ISF: } \dots A' \alpha \beta B' \beta \alpha \gamma C' \gamma \beta \alpha A' \alpha \beta \gamma C' \gamma \beta \alpha A' \alpha \beta B' \beta \alpha \gamma C' \gamma \beta \alpha \dots$$

$$\text{ESF: } \dots A' \alpha \beta B' \beta \alpha \gamma C' \gamma \beta \alpha A' \alpha \beta B' \beta \alpha \gamma C' \gamma \beta \alpha B' \beta \alpha A' \alpha \beta B' \beta \alpha \gamma C' \gamma \beta \alpha \dots$$

值得指出的是在立方 C15 结构的 ISF 中存在一些类似 C14 结构的堆垛单元 (下划线部分), 而在立方 C15 结构的 ESF 中却存在一些类似于 C36 结构的堆垛单元 (下划线部分)。因此, 可以在立方 C15 结构中局部引入类似于 C14 结构的堆垛单元形成 ISF, 通过 C15 结构和 C14 结构之间的能量差就可以计算得到立方 C15 结构内禀层错能, 经理论推导, 内禀层错能:

$$\gamma_{\text{ISF}} = \frac{24 \Delta \epsilon}{\sqrt{3} a^2} \quad (7)$$

式中 Δε 为 C15 与 C14 结构之间的能量差; a 为立方 C15 结构的点阵常数。同理, 将一定数量的堆垛层错引入立方 C15 结构中, 直至形成 C36 结构, 则外禀层错能:

$$\gamma_{\text{ESF}} = \frac{48 \Delta \epsilon}{\sqrt{3} a^2} \quad (8)$$

式中 Δε 为 C15 与 C36 结构之间的能量差。

对于 ZrCr₂ Laves 相金属间化合物, C15 与 C14 结构之间的能量差值为 26.2 meV/atom, 而 C15 与 C36 之间的能量差值为 11.4 meV/atom, C15 ZrCr₂ 的点阵常数为 0.72 nm。根据这些参数, 计算得到立方 C15 结构的内禀层错能为 112 mJ/m², 外禀层错能为 98 mJ/m²。ZrCr₂、NbCr₂ 以及 TaCr₂ Laves 相金属间化合物层错能的比较列于表 2, 可以看出, ZrCr₂ 的内禀层错能大于外禀层错能, 这是因为 C14 的能量高于 C36 结构。在 NbCr₂ 和 TaCr₂ 中也出现类似的结论。因此, 在上述 Laves 相金属间化合物的变形组织中, 外禀层错出现的几率会比内禀层错出现的几率高。目前尚未有任何关于 ZrCr₂ 堆垛层错能实验数据的报道, 本文理论计算过程中采用的能量值均为在理想结构状态下的 C15、C14 和 C36 结构的能量, 没有考虑到堆垛层错形成时的可能存在的原子弛豫效应, 因此计算得到的 ZrCr₂ 的层错能可能会高估一些, 但与文献报道的 NbCr₂ 和 TaCr₂ 层错能的理论计算结果存在可比性。αβ 型立方 C15 结构的 Laves 相金属间化合物中的层错能应该说是比较低的, 几乎与一

些面心立方金属 Al、Cu 和 Ni 的层错能相当, 如 γ(Al) = 166 mJ/m², γ(Ni) = 128 mJ/m² 以及 γ(Cu) = 45 mJ/m²。可以推断: 在同步剪切条件下, 剪切变形应该出现在 αβ 型三层结构中, 此时 αA'α 型三层结构应仍然保持原有结构不变, 因此是一种不均匀变形。

表 2 ZrCr₂ 的层错能与 NbCr₂ 和 TaCr₂ 层错能的比较

Table 2 Stacking fault energies of ZrCr₂, NbCr₂ and TaCr₂ (mJ/m²)

Compound	ISF energy	ESF energy
ZrCr ₂	112	98
NbCr ₂	116 ^[17] 90 ^[12]	90 ^[17]
TaCr ₂	88 ^[11]	83 ^[11]

立方 C15 结构的 Laves 相金属间化合物的滑移系为 {111} <110>, 因此 <110> 全位错可以进一步分解为两个肖克莱 (Shockley) 不全位错, 中间夹带堆垛层错这样一种位错组态。如果柏氏矢量 b 为 $\frac{a}{2} [\bar{1}10]$ 的全位错分解产生两个肖克莱 (Shockley) 不全位错夹带一个内禀堆垛层错, 则分解过程可以用下式表示:

$$\frac{a}{2} [\bar{1}10] \rightarrow \frac{a}{6} [\bar{1}21] + \text{ISF} + \frac{a}{6} [2\bar{1}\bar{1}]$$

肖克莱 (Shockley) 不全位错与层错存在着弹性交互作用, 根据弹性理论, 可以通过剪切模量和内禀堆垛层错能来计算在扩展位错中两个肖克莱不全位错的平衡间距。由于立方 C15 结构的 ZrCr₂ 的弹性各向异性系数 A 仅为 1.13, 本文采用各向同性弹性理论来计算肖克莱不全位错的平衡间距^[18]:

$$d = \frac{Gb^2(2-\nu)}{8\pi\gamma_{\text{SF}}(1-\nu)} \left[1 - \frac{2\nu\cos 2\phi}{2-\nu} \right] \quad (9)$$

式中 G 为切变模量; ν 为泊松比; φ 为位错线与柏氏矢量的夹角。将本文理论计算得到的 ZrCr₂ Laves 相金属间化合物的 G、ν 以及 γ_{ISF} 代入上述公式, 当 b = $\frac{a}{2} [\bar{1}10]$ 位错为螺位错时, 两个肖克莱不全位错的平衡间距 d_s = 2.41 nm; 而当 b = $\frac{a}{2} [\bar{1}10]$ 位错为刃位错时, 两个肖克莱不全位错的平衡间距 d_e = 6.23 nm。同样采用外禀堆垛层错 γ_{ESF} 代入时可以计算得出两个肖克莱不全位错夹带外禀堆垛层错时的平衡间距, 计算得到的 d_s = 2.75 nm, d_e = 7.1 nm, 由于外禀堆垛层错小于内禀堆垛层错能, 此时两个肖克莱不全位错的平衡间距都相应略大于

前者。

3 结论

采用基于密度函数理论的缀加平面波加局域轨道方法和广义梯度近似对 $ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物的弹性常数和弹性模量进行了计算, 计算所得弹性模量与实验值相近; 计算得到的泊松比和弹性各向异性系数说明 $ZrCr_2$ 中原子键合的方向性并不强烈。计算结果表明, $\alpha\beta$ 型 C15 结构 $ZrCr_2$ 的内禀和外禀堆垛层错能分别为 112 mJ/m^2 和 98 mJ/m^2 。两个肖克莱不全位错夹带内禀堆垛层错时的平衡间距 $d_s = 2.41 \text{ nm}$, $d_e = 6.23 \text{ nm}$ 。两个不全位错夹带外禀堆垛层错时的平衡间距 $d_s = 2.75 \text{ nm}$, $d_e = 7.1 \text{ nm}$ 。

REFERENCES

- [1] Liu C T, Zhu J H, Brady M P, et al. Physical metallurgy and mechanical properties of transition metal Laves phase alloys[J]. *Intermetallics*, 2000, 9: 1119 - 1129.
- [2] Thoma D J, Chu F, Peralta P, et al. Elastic and mechanical properties of $Nb(Cr, V)_2$ C15 Laves phases [J]. *Mater Sci Eng A*, 1997, 239 - 240: 215 - 259.
- [3] Takasugi T, Hanada S, Yoshida M. High temperature mechanical properties of C15 Laves phase Cr_2Nb intermetallics[J]. *Mater Sci Eng A*, 1995, 192 - 193: 805 - 810.
- [4] 鲁世强, 黄伯云, 贺跃辉. Laves 相合金的物理冶金特性[J]. *材料导报*, 2003, 17(1): 11 - 13.
LU Shi-qiang, HUANG Bai-yun, HE Yue-hui, et al. Physical metallurgy of Laves phase alloys[J]. *Materials Review*, 2003, 17(1): 11 - 13.
- [5] 孙学松, 孙峰, 孙坚. $ZrCr_2$ Laves 相金属间化合物缺陷结构及缺陷软化效应[J]. *中国有色金属学报*, 2005, 15(4): 626 - 630.
SUN Xue-song, SUN Feng, SUN Jian. Defect structure and its softening effect in $ZrCr_2$ Laves-phase compound[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2005, 15(4): 626 - 630.
- [6] Takasugi T, Yoshida M, Hanada S. Deformability improvement in C15 $NbCr_2$ intermetallics by addition of ternary elements[J]. *Acta Materialia*, 1996, 44(2): 669 - 674.
- [7] Chu F, Pope D P. Deformation twinning in intermetallic compounds—the dilemma of shears vs. shuffles[J]. *Mater Sci Eng A*, 1993, 170(1): 39 - 47.
- [8] Zhu J H, Pike L M, Liu C T, et al. Point defects in binary Laves phase alloys[J]. *Acta Materialia*, 1999, 47(7): 2003 - 2018.
- [9] Ormeci A, Chu F, Wills J M, et al. Total energy study of electronic structure and mechanical behavior of C15 Laves phase compounds: $NbCr_2$ and HfV_2 [J]. *Physical Review B*, 1996, 54: 12753 - 12762.
- [10] Chu F, Lu Y C, Kotula P G, et al. Phase stability and defect structure of the C15 phase in the HfV-Nb system[J]. *Philosophical Magazine A*, 1998, 77(4): 941 - 956.
- [11] Hong S, Fu C L, Yoo M H. Elastic properties and stacking fault energies of Cr_2Ta [J]. *Intermetallics*, 1999, 7(10): 1169 - 1172.
- [12] Chu F, Ormeci A H, Mitchell T E, et al. Stacking-fault energy of the $NbCr_2$ laves phase[J]. *Philosophical Magazine Letters*, 1995, 72(3): 147 - 153.
- [13] Krcmar M, Fu C L. First-principles study of point-defect structures in C15 $ZrCo_2$ and $ZrCr_2$ and B2 $ZrCo$ [J]. *Physical Review B*, 2003, 68: 134110.
- [14] Schwarz K, Blaha P, Madsen G K H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences[J]. *Computer Physics Communications*, 147(1 - 2): 71 - 76.
- [15] Foster K, Hightower J E, Leisure R G, et al. Elastic moduli of the C15 laves-phase materials TaV_2 , $TaV_2H(D)_x$ and $ZrCr_2$ [J]. *Philosophical Magazine B*, 2000, 80(9): 1667 - 1679.
- [16] Nakamura M. Basic Mechanical Properties and Lattice Defects of Intermetallic Compounds[M]. New York: Wiley, 2000. 885.
- [17] Hong S, Fu C L, Yoo M H. First-principles calculation of stacking fault and twin boundary energies of Cr_2Nb [J]. *Philosophical Magazine A*, 2000, 80(4): 871 - 880.
- [18] Hirth J P, Lothe J. Theory of Dislocations[M]. New York: Wiley, 1982. 136.

(编辑 陈爱华)