

## 我在金属缺陷复合体电子结构方面的成果

王崇愚

(钢铁研究总院 北京 100081)



我从 50 年代末开始,从事合金材料研究,特别着重于探索微量元素及结构缺陷的作用机制。

一、在多年的工作实践中,在将量子力学理论及方法与经典理论及实验相结合的基础上,发展建立了以研究材料中微合金化元素-结构缺陷复合体的原子结构、电子结构、声子激发及其与宏观物性相关机制为中心的“自统一”理论研究体系,为材料科学的原子学模型研究及缺陷体系的能量学、动力学及热力学研究提供了理论基础。强调杂质与结构缺陷复合的量子效应,导出具有普适意义的原子间相互作用能解析表达式,并广泛用于合金键合特性及掺杂效应的研究。

二、提出杂质氧-层错复合体模型,相应发展了基于电子结构计算的缺陷能量与位错运动的相关表达式,揭示了缺陷复合体能量与位错运动及再结晶过程的相关机制。关于缺陷能量的理论计算结果及缺陷的几何形貌预期为实验所证实。同时,基于对层错能的电子结构及声子谱计算,判明了层错缺陷的电子效应本质以及声子作为玻色子在高温时的可能影响。该项研究为探索和预期微量轻杂质的作用,提出了具有普适意义的模式,可构成指导材料研究中组分选择的基础(相关的材料研究获国家发明奖)。

三、提出双杂质-单空位(B-V-B)类晶界模型,重点研究了掺杂效应及晶界电子结构。基于第一原理,计算了硼及轻杂质(N、S、P等)在过渡金属中的电子效应,同时定义或建立了有关掺杂能量学及电荷重新分布能表达式,指出与电子密度相关的局域杂质原子组态影响电荷重新分布,且因而可能与形变或脆断机制相关。基于杂质偏聚能、键合强度、态密度及分子动力学研究,揭示了轻杂质的偏聚特性及其对晶界强度的可能影响,预期了杂质硼具有较强的偏聚效应,同时基于截断 Green 函数计算了杂质分立谱,指出硼在合金中作用属局域效应。有关硼在合金中作用机制的综合性理论研究反映了硼改善合金物性的量子力学背景。

四、近年来基于第一原理及有效介质理论,发展了原子电荷密度与瞬变原子组态相关、具有多体效应、可传递性及不依赖于经验参数的原子间相互作用势,并成功应用于晶界原子结构及晶界能量研究。有关晶体弹性模量及空位形成能的计算结果为实验所证实。上述工作为缺陷体系能量及动力学研究提供了理论基础。1978 年以来,先后获四项国家级奖(其中两项国家发明奖),五项部级奖(其中两项为理论成果奖)。1987 年以来,在缺陷电子结构研究领域,完成论文 40 余篇,主要论文发表于《美国物理评论》、《中国科学》等刊物。