

$$\left. \begin{aligned} r \rightarrow 0, \quad V_p &= -\frac{Ze^2}{r}; \\ r \rightarrow \infty, \quad V_p &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (5.129)$$

式(5.127)满足边界条件的解等于

$$\left. \begin{aligned} V_p &= -\frac{Ze^2}{r} \exp(-qr), \\ q^2 &= 4\pi e^2 N(E_M), \end{aligned} \right\} \quad (5.130)$$

这里的 q 称为屏蔽常数。我们可以从式(5.130)来理解它的物理意义：当 $r = \frac{1}{q} V_p$ 即降为库仑场的 $1/2.72$ ，故 $1/q$ 称为屏蔽半径。

当 r 比屏蔽半径大数倍，附加电荷所产生的电场就可忽略不计。表 5.2 列出了几种金属的屏蔽半径的计算值。对于一般的金属， $1/q$ 的值小于 1 埃，表示附加电荷的影响只及于最近邻的原子的范围。

表 5.2 贵金属的屏蔽半径

金属	Cu	Ag	Au
$1/q(\text{埃})$	0.55	0.58	0.58

将式(5.130)，代入式(5.126)，即可导出屏蔽电荷的密度

$$\begin{aligned} \rho(E_M, r) - \rho_0(E_M, r) &= -\frac{1}{4\pi e} \nabla^2 V_p \\ &= -N(E_M) e V_p = -\frac{Ze q^2}{4\pi} \cdot \frac{\exp(-qr)}{r}. \end{aligned} \quad (5.131)$$

令 r_0 为原子球的半径 ($\frac{4}{3}\pi r_0^3 =$ 原子体积)，在溶质原子球以外的屏蔽电荷为

$$\begin{aligned} Z'e &= \int_{r_0}^{\infty} 4\pi r^2 \frac{Ze q^2}{4\pi} \exp(-qr) \frac{dr}{r} \\ &= Ze(1 + qr_0) \exp(-qr_0). \end{aligned} \quad (5.132)$$

可以区分三种情况来讨论：

(1) 过渡族中 $N(E_M)$ 的值很大, 因此 q 值大, Z' 值小, 屏蔽电荷集中在溶质原子自身. 相邻溶质原子间相互作用很弱, 倾向于形成接近于理想的固溶体. 当尺寸效应不大时, 这类合金是具有这种特征的. 例如 NiCo 合金, 溶解热很小, 而原子排列也接近于完全无序.

(2) 在一般的合金中, 例如 CuZn, $1/q \approx 0.5$ 埃, 而 $r_s \approx 1.5$ 埃, 因此 $|Z'|$ 约为 $(1/10)Z$ 的数倍. 在原子球范围之内, 屏蔽并不完全. 溶质原子间产生小量的相互作用. 相互作用能可以表示为

$$\Delta U = \frac{Z_1 Z_2 e^2 \exp(-qd)}{d}, \quad (5.133)$$

这里的 Z_1, Z_2 分别表示两溶质原子的过剩电荷, 而 d 表示间隔的距离. 这种效应也存在于高浓度的合金中, 例如 β 黄铜 (50% Zn), 由于屏蔽不完全, 每个锌原子带有正电荷, 而每个铜原子带有负电荷. 这种静电的相互作用可能就是造成有序结构的根源.

(3) 在有些多价金属中 (例如石墨, 铋等), $N(E_M)$ 的值很小, 按照这种理论, 屏蔽半径应较大, 而溶质原子间的相互作用也比较强. 这方面实验资料还少, 理论的推论是否正确, 尚未经过检验.

(b) 夫里德耳的理论 夫里德耳进一步发展电子屏蔽模型, 采用量子力学的方法来处理问题^[94]. 令干扰电荷密度表示为 δ 函数形式, 即 $Z|e|\delta(r)$, 屏蔽电荷密度为 $\delta n(r)|e|$, r 为到干扰源的距离. 按照静电学的泊松方程, 电势 Φ 与电荷密度之间存在着如下关系:

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi \delta n(r)|e| - 4\pi Z|e|\delta(r), \quad (5.134)$$

而电子的势能 $V = -|e|\Phi$, 所以

$$\nabla^2 V = -4\pi e^2 \delta n(r) + 4\pi Z e^2 \delta(r), \quad (5.135)$$

这样就得出两未知函数 $\delta n(r)$ 与 $V(r)$ 之间的第一个方程式.

为了以后计算方便起见, 引入 $V(r)$ 与 $\delta n(r)$ 的傅里叶变换

$$V(\mathbf{q}) = \frac{1}{N\Omega} \int V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r};$$

$$V(\mathbf{r}) = (N\Omega) \int V(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}, \quad (5.136)$$

这里的 \mathbf{q} 为倒空间的矢量, N 为晶体中的原子数, Ω 为原子体积. $\delta n(q)$ 的表示式可以类推.

这样, 泊松方程可以简化为 $V(q)$ 与 $\delta n(q)$ 的线性关系式, 即

$$-q^2 V(q) = -4\pi\delta n(q)e^2 + 4\pi Z e^2. \quad (5.137)$$

只要再从传导电子被势 V 的散射求出另一个关系式, 就可以解决问题. 如果采用最简单的玻恩近似, 即得

$$\delta n(q) = 2\chi(q) \frac{V(q)}{\Omega}, \quad (5.138)$$

这里的

$$\chi(q) = -\frac{Z}{4} \left(\frac{2}{3} E_F \right)^{-1} \left[1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right], \quad (5.139)$$

用以表征电子气对干扰势的响应. 式中 Z 为传导电子数/原子, x 为一参量, 等于

$$x = \frac{q}{2k_F}. \quad (5.140)$$

这样, 我们可以从式 (5.139) 及式 (5.140) 导出 $V(q)$ 与 $\delta n(q)$.

$$\Phi(r) = \frac{Z|e|}{r} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin qr}{q\epsilon(r)} dq, \quad (5.141)$$

$$\delta n(r) = \frac{Z}{r} \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \sin qr \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right) q dq, \quad (5.142)$$

这里的 $\epsilon(q)$ 为介电函数

$$\epsilon(q) = 1 - \frac{8\pi e^2}{\Omega q^2} \chi(q). \quad (5.143)$$

势 Φ 在近程是库仑型的 ($\sim Z/r$), 在远程可求出其渐进式为

$$\Phi(r)_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{2Z|e|}{\pi a_0 \epsilon^2(2k_F)} \frac{\cos 2k_F r}{(2k_F r)^3} \quad (5.144)$$

也导致振荡式的远程电荷密度分布

$$\delta n(r)_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{2k_F^3 Z}{\pi^2 \epsilon^2(2k_F) a_0} \cdot \frac{\cos 2k_F r}{(2k_F r)^3} \quad (5.145)$$

被称为夫里德耳振荡 (Friedel oscillation), 上式中 $\epsilon(2k_F)$ 为 $q =$

$2k_F$ 处的 δ 值, $a_0 = 0.53$ 埃为氢原子的第一玻尔轨道的半径。

玻恩近似只适用于干扰势微弱的情况, 对于较强的干扰势, 可以应用量子力学的分波法求解。渐近解有类似的形式, 但增加了一相位项 η , 即

$$\Phi(r)_{r \rightarrow \infty} = AZ|e| \frac{\cos(2k_F r + \eta)}{(2k_F r)^3}, \quad (5.146)$$

$$\delta n(r)_{r \rightarrow \infty} = -Z \frac{k_F^3}{\pi} A \frac{\cos(2k_F r + \eta)}{(2k_F r)^3}, \quad (5.147)$$

如果进一步考虑周期势场的影响, 则上面的结果还要作适当的修正。图 5.14 分别表示了溶质原子附近电荷密度和电势的夫里德耳振荡。可以看确切解(实线)和渐近解(虚线)之间的差异, 还有相对比的汤麦斯-费密近似的计算结果, V 单调地下降而趋于零, 不出现振荡。

已经有一些实验来直接探测溶质原子周围的电荷密度和电场梯度的分布^[10]。对于稀固溶体核磁共振谱线奈特偏移 (Knight

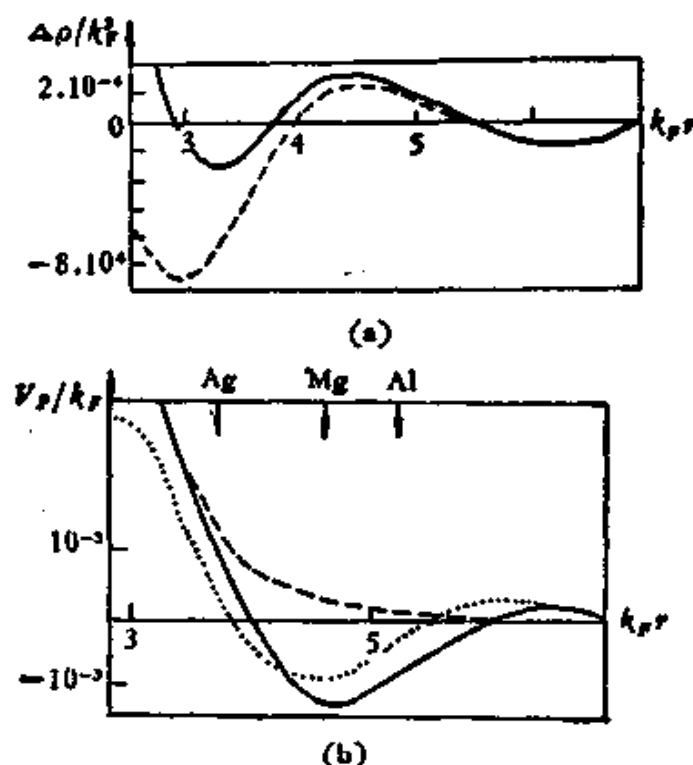


图 5.14 溶质原子附近的夫里德耳振荡。
(a) 电荷密度; (b) 电势。

shift) 的研究表明溶剂原子的奈特谱线确有展宽, 甚至出现一些卫星线, 这可以归结为原子核所在处电荷密度异常的效应, 半定量地证实了溶质原子周围夫里德耳振荡的存在. 应用核四极矩共振来探测原子核所在处的电场梯度, 也得到类似的结果.

应用电子屏蔽模型也成功地解释了稀固溶体的某些特征, 例如溶质原子间的化学相互作用问题. 可以设想一对, 不同价数 Z_1 与 Z_2 的溶质原子处于自由电子气中. Z_2 电荷及其屏蔽电荷在周围形成势 $V_2(r)$; 如果 Z_1 在其附近距离为 R 处, 则相互作用能可近似地表示为

$$W_{12}(R) = Z_1 V_2(R). \quad (5.148)$$

即使 $Z_1 = Z_2$, 由于夫里德耳振荡的存在相互作用能也可正可负, 视基质的某些特征而定. 有人算出了处于近邻位置的溶质原子的相互作用能

$$W = \beta Z_1 Z_2. \quad (5.149)$$

对单价基质: $\beta = 0.03$ 电子伏;

双价基质 $\beta = -0.015$ 电子伏;

三价基质 $\beta = -0.01$ 电子伏,

这个结果也定性地与经验事实相符, 例如在单价基质的铜锌合金中, 溶质原子相斥, 产生短程序; 而在三价基质的铝铜合金, 溶质原

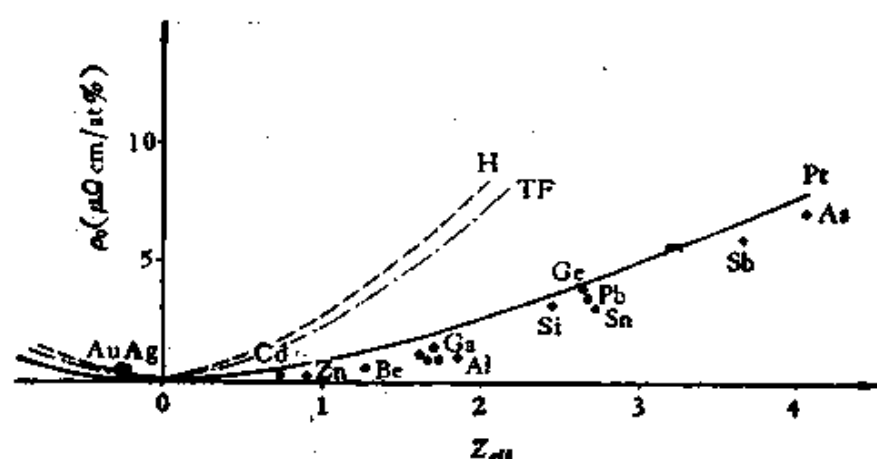


图 5.15 铜的稀固溶体的剩余电阻.

TF 为汤麦斯-费密方法, H 为玻恩近似. 实线为夫里德耳分波法的计算结果.

相吸,产生原子簇聚的现象,可以根据溶质原子附近基质原子的静电作用力来说明弹性理论的原子尺寸效应,也取得大致合理的结果。关于稀固溶体剩余电阻的问题,也进行了不少研究。汤麦斯-费密近似及玻恩近似的计算结果,虽则得出剩余电阻率随 Z 增长的趋势,但数值偏大,采用夫里德耳的分波法的处理,获得比较满意的结果(参看图 5.15, Z_{eff} 系 Z 值作了原子尺寸效应的修正)。

如果溶质原子价数比基质的大得多,由于强的核电势的作用,将使溶质周围的势能曲线往下拉,如图 5.16 (a) 所示。但溶质势足够强时,将可在能带底 E_0 下面形成束缚态 E_b 。如果反过来溶质原子价数低于基质的,溶质原子附近的势能曲线将被抬高,如图 5.16 (b) 所示。这种溶质原子的原子能级可能处于能带中间。

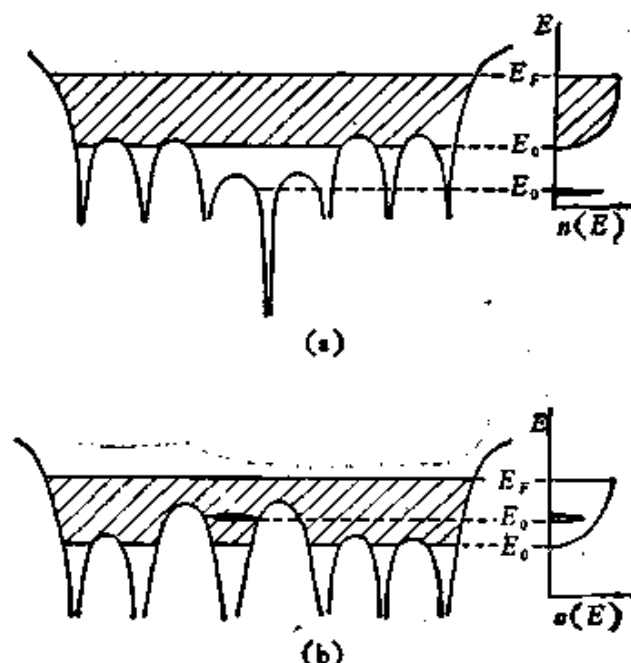


图 5.16 局域态形成的示意图。

(a) 束缚态 E_b ; (b) 虚束缚态 E_{vb} 。

这样,处于原子能级的电子将可能通过坠道效应以一定几率进入导带。这样的局域态具有一定的寿命和宽度,被称为虚束缚态。夫里德耳应用虚束缚态来解释过渡金属溶于贵金属基质的稀固溶体的电阻、电子比热及磁化率等,也取得一定的成功。如果进一步考虑交换相互作用,使得对正负自旋电子的势有所不同,就可以从

理论上来阐明溶质原子是否形成局域磁矩的问题^[10]。

§ 5.10 刚能带模型及其他

处理高浓度无序合金能带结构问题最简单的理论就是刚能带模型，其原始的形式是莫脱与琼斯 (H. Jones) 在三十年代所提出的^[93]，即认为合金化并不改变基质的态密度曲线的形状和其相对于能量坐标轴的位置，仅仅由于电子数的增加或减少，引起费密能级 E_F 位置的变化。这样，合金的态密度 N 和基质的态密度 N_0 之间存在如下的简单关系：

$$N(E_F) = N_0(E_F^0 + \Delta E), \quad (5.150)$$

这里的 E_F^0 和 E_F 分别代表基质和合金的费密能，而 ΔE 则代表由电子浓度变化 $\Delta(c/a)$ 异致的费密能的变化。

夫里德耳进一步考虑到溶质原子引起的电荷屏蔽效应 (§5.9)，提出了另一形式的刚能带模型^[94]：考虑在矢径矢量为 \mathbf{r} 处的电子浓度 (能量低于 E 的) 受到干扰势 V_p 的影响可表示为

$$\rho(E, \mathbf{r}) = \rho_0(E - V_p, \mathbf{r}), \quad (5.151)$$

这里的 ρ_0 为基质的电子浓度。可以通过积分来求出平均的态密度 (引入晶体的体积 V)，即

$$\begin{aligned} N(E) &= V^{-1} \int \rho(E, \mathbf{r}) d\mathbf{r} = V^{-1} \int \rho_0(E - V_p, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &\simeq V^{-1} \int \rho_0(E, \mathbf{r}) d\mathbf{r} - V^{-1} \int (\partial \rho_0 / \partial E) V_p d\mathbf{r} \\ &\simeq N_0(E - V^{-1} \int V_p d\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (5.152)$$

即在一级近似下，态密度曲线保持其原来的形状，但沿能量坐标轴作一位移

$$\Delta E = V^{-1} \int V_p d\mathbf{r},$$

即

$$N(E) = N_0(E - \Delta E), \quad (5.153)$$

这里的 ΔE 代表整个导带的位移。上述的两种形式的刚能带模型都认为态密度曲线的形状不随合金化改变，但考虑电荷屏蔽效应

的模型,多出一能带的刚性位移,这也比较符合于能带结构实验的结果。图 5.16 表示了尼尔森 (P. O. Nilsson) 根据 Ag-In 合金光电电子能谱实验数据所作出的态密度曲线,在原子成分为 13% 的合金中,能带的位移为 0.4 电子伏,而费密面的位移为 0.3 电子伏。

也可以用电子比热的数据来检验刚能带模型是否正确。这已在一系列的 $3d$, $4d$ 及 $5d$ 过渡族合金中得到证实。图 5.18 示

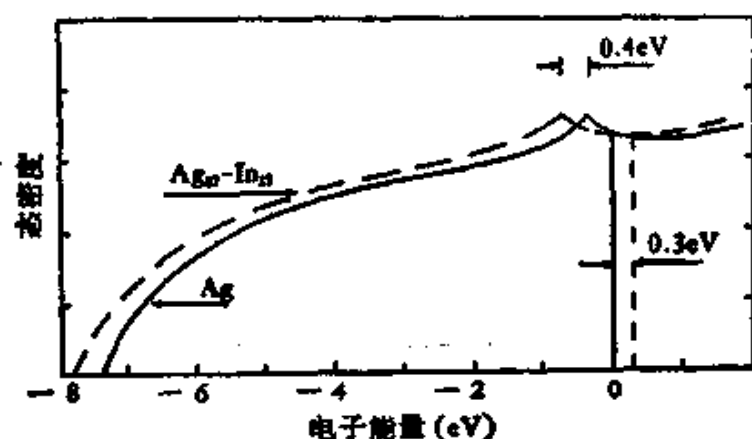


图 5.17 Ag-In 合金的态密度曲线示意图, 曲线的尖点来源于费密面与 $\{111\}$ 区边界。

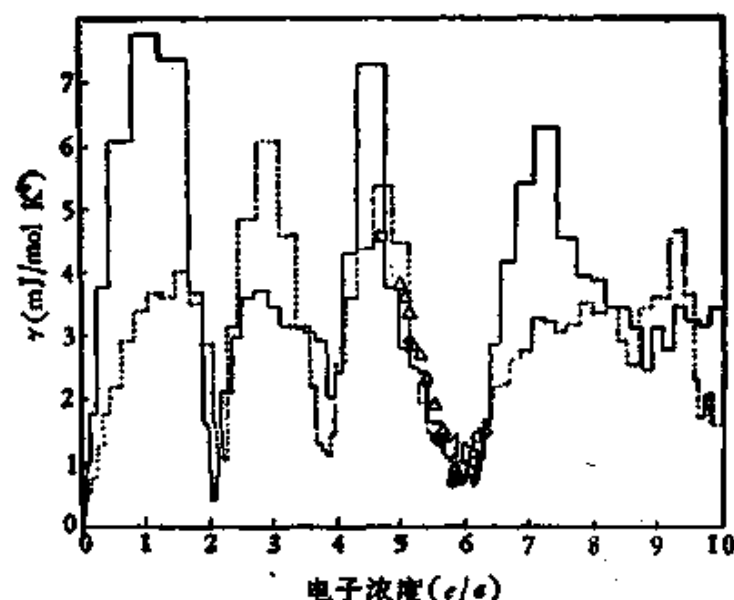


图 5.18 费密能级附近的态密度, 实验值 (● Ta-W, □ Hf-Ta, ○ W-Re, △ Ta-Re) 经过电子-声子相互作用的校正; 直方图系根据 Ta (实线) 与 W (虚线) 的 $N(E)$ 计算曲线获得。

出了一系列 5d 过渡金属 (Hf, W, Ta 与 Re) 合金的电子比热的实验数据(经过电子-声子相互作用的修正),这和刚能带模型的计算结果大体相符。当然,也有一些合金的实验结果是和刚能带模型有严重分歧的,Cu-Ni, Ag-Pd 等合金即是如此。

下面,我们来探讨导致刚能带模型失效的原因。

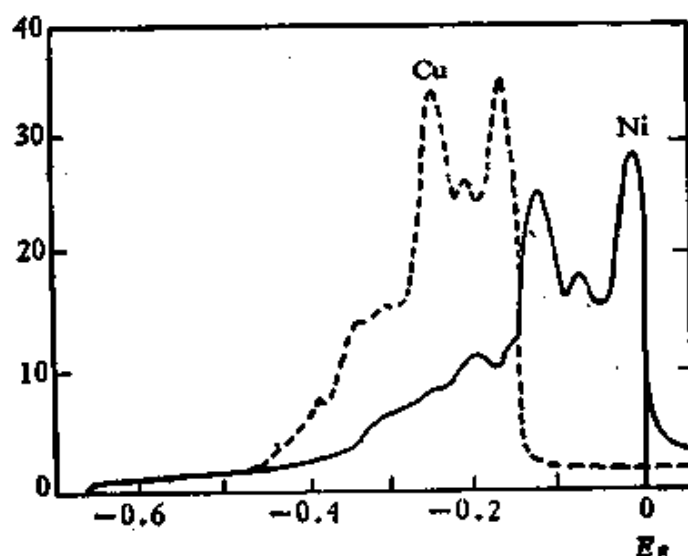


图 5.19 Cu 与 Ni 的态密度计算曲线(使两费密面重合)。

概括起来,有如下两种:其一为干扰势过大,致夫里德耳理论的一级微扰失效。从物理上来说,即是异类原子间可能发生电子转移,以致于引起刚能带模型失效。但应该指出,这种情况在稀固溶体中比较严重;在高浓度固溶体中,由于平均的效应,抹去了许多电子结构的细节,因而在高浓度固溶体观察到刚能带模型能够成立,并不意味着合金的能带结构一定保持着纯金属原始的能带结构,而是相当于一种虚晶近似 (virtual crystal approximation),即用 a, b 两种原子势的加权平均势 (c_a 与 c_b 分别为 a, b 的成分)

$$V = c_a V_a + c_b V_b \quad (5.154)$$

所构成的周期势场的能带结构来代替真实的能带结构。而这种能带结构,对于合金元素的增减,可保持其刚性。导致刚能带模型失效的第二种因素为两种金属的局域化能带(如 d 带)的能量差较大(图 5.19),因而形成合金后,这两个局域化的能带仍然保留,并

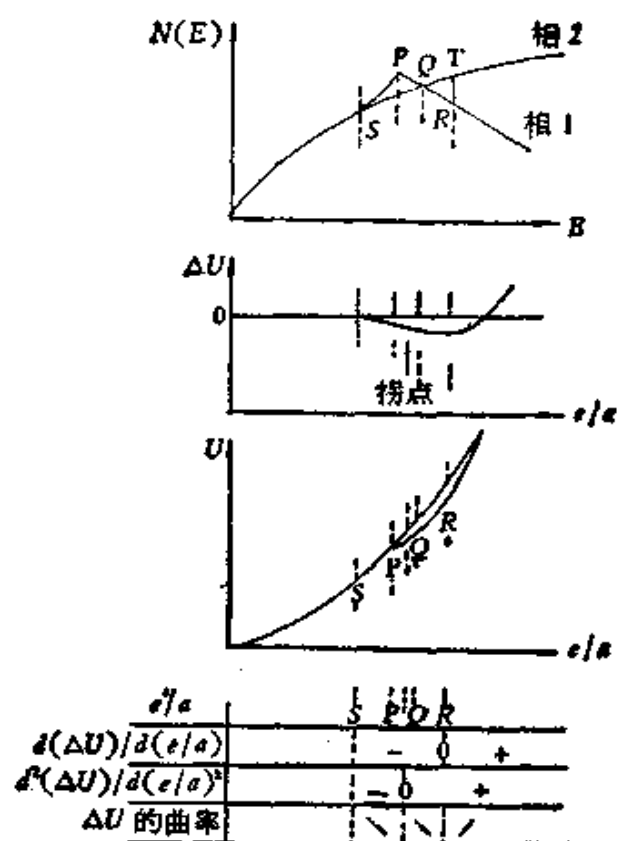


图 5.20 琼斯模型的说明。

不归并为一个能带。Cu-Ni 合金就是一个例子^[66]。

琼斯首先用刚能带模型中费密面与布里渊区周界之间的相互作用来解释休谟-饶塞里所揭示关于电子化合物的经验规律(参阅 § 4.7)¹⁾，这是应用合金电子理论解释合金相结构的最早的尝试。他们的尝试多年来一直受到争议，至今尚无定论。但是这种简单的理论和经验规律吻合得相当好，表明确有其合理的内核存在，不容忽视。琼斯的基本理论考虑是这样的：设想在 0K 温度下，决定两种相当中那一个是稳定相就要看那一个相内能低。他将内能

1) 严格说来，最好用琼斯区(威大区)的周界来替代布里渊区周界。对于面方立方或体心立方结构的晶体，两者是等同的；但对于复式点体的晶体，两者就不一定等同了。琼斯区的周界总对应于能隙 V_c ，不为零的情况。由于 V_c 的值是和晶体结构因子成正比的，对于一些复杂结构的晶体，如 Cu-Zn 合金的 γ 相，往往可以直接根据强的衍射谱线来确定琼斯区的周界。

表示为态密度与能量的乘积的积分, 即

$$U_1 = \int_0^{E_F} N_1(E) E dE, \quad U_2 = \int_0^{E_F} N_2(E) E dE, \quad (5.155)$$

而每个原子的价电子数 (e/a) 则等于

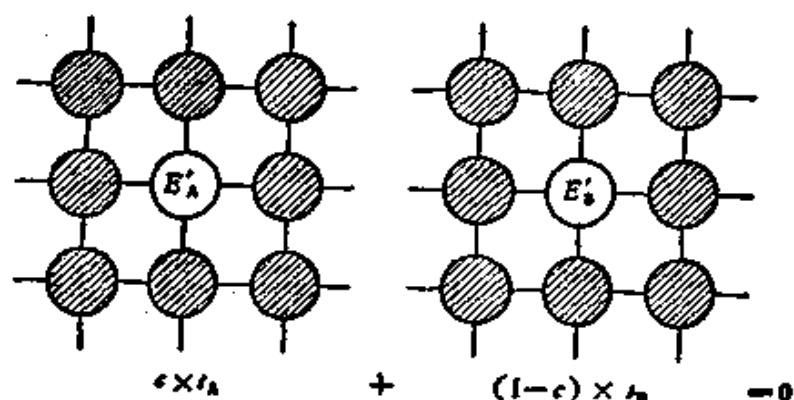
$$\left(\frac{e}{a}\right)_1 = \int_0^{E_F} N_1(E) dE, \quad \left(\frac{e}{a}\right)_2 = \int_0^{E_F} N_2(E) dE. \quad (5.156)$$

关键的量是两相间的内能差 $\Delta U = U_1 - U_2$ 以及内能差对 (e/a) 的一次微商和二次微商

$$\frac{\partial(\Delta U)}{\partial(e/a)} = E_{F_1} - E_{F_2}, \quad (5.157)$$

$$\frac{\partial^2(\Delta U)}{\partial(e/a)^2} = \frac{1}{N_1(E_{F_1})} - \frac{1}{N_2(E_{F_1})}. \quad (5.158)$$

假设相 1 的费密面在某一 (e/a) 值处和布里渊区周界相切, 对应于态密度曲线上的峰值(图 5.20 中的 P 点), 经过峰值后, $N(E)$ 急剧下降; 另设相 2 的态密度曲线在相应的区域内单调上升. 这样, 可以在相 1 的态密度曲线上可以定出 R 点, 其条件为使图 5.20 中 SPQ 区域和 QTR 区面积相等. 在 R 点, $E_{F_1} = E_{F_2}$, 因而对应于 ΔU 曲线的极小值. 由此可以看出, 对于相 1 稳定性最有利的成分并不和峰点 P 相应, 而是对应于处在曲线下降部分的 R 点. 在 R 点对应的 e/a 值的附近一个区域将是相 1 的稳定区. 当然, 这种理论解释能够成立的先决条件是合金化对于费密面的影响不大, 故仍可用近自由电子理论来处理这个问题, 这已为贵金属合金费密面的实验测量结果所证实. 另外一个问题, 就是费密面与布里渊区周界相接触的能量效应是否足够大到影响合金相的稳定性. 这一点海涅 (V. Heine) 与韦阿尔 (D. Weaire) 作了估计^[97], ΔU 约为 50—100 (卡/摩尔) 的量级, 仅为能带结构总能量的 0.1%, 认为量级太小, 因而对此解释表示怀疑. 但马萨耳斯基 (T. B. Massalski) 等对于贵金属合金的实验数据进行了全面总结^[98], 也得出类似的估算值, 即 ΔU 仅占总能量的 0.1%, 但确认为这个量级正好合适, 如果 ΔU 超出这个量级, 将导致整个成分范围之内无其他结构的相出现. 当然, 还应要求其他因素(如 d 带的



5.21 相干势近似用于替代式二元固溶体的说明。

影响,马德隆能等)对能量的贡献只占次要的地位。马萨耳斯基等的总结中还列举一些贵金属合金的态密度曲线来讨论电子化合物的结构稳定性。总的说来,理论解释是合理的,但还存在不少尚未澄清的问题。

由于刚能带模型过于粗略,近年来已经建立和发展了一些更加严格的无序合金的能带理论。有人将多重散射理论应用于无序合金问题。和虚晶近似相似,也是用有序晶体来代替原来的无序合金,而在每一晶格坐位上起作用的具有平均散射矩阵的原子,即平均散射矩阵 t_{av} 等于 A, B 原子散射矩阵 t_A 与 t_B 的平均值 (c_A, c_B 为 A, B 的原子成份)

$$t_{av} = c_A t_A + c_B t_B, \quad (5.159)$$

这种方法被称为平均 t 矩阵近似 (ATA)。另一种卓有成效的计算方法就是索文 (P. Soven) 于 1967 年提出的相干势近似 (CPA) [9, 99]。从某种意义上来说,这种方法是将虚晶近似与平均 t 矩阵近似地结合起来,除了中心坐位以外,所有晶格坐位上都为具有相干势 V_0 的原子所占据(图 5.21 中的划线的原子)。中心坐位可以有两种情况:一是为 A' 原子所占,其势为 $V_A - V_0$;或是为 B' 原子所占,其势为 $V_B - V_0$ 。这样,就将原来的无序合金转化为只在中心坐位具有无序的晶格。两种情况可以分别求出其散射矩阵 $t(V_A - V_0)$ 及 $t(V_B - V_0)$, 相干势的选择要求满足基本条件

$$c_{At}(V_A - V_0) + c_{Bt}(V_B - V_0) = 0. \quad (5.160)$$

从上面的介绍可以看出，相干势近似实质上是物理常用的一种平均场理论：实际的无序合金过于复杂不便于理论处理，因而近似地用假设的简单无序体系（无序局限于晶格中单一坐位上）的平均来代替。有不少论文对于相干势近似进行了推广和改进，并广泛地用来解决具体的无序合金问题。例如对于铜镍合金的电子比热，镍铁合金的电子比热与磁矩等问题，所得到的结果都和实验结果符合得较好。有关无序合金理论的新进展请参阅文献[100]。

第二编 参考文献

- [1] Hansen M., Anderko K., *Constitution of Binary Alloys*, McGraw-Hill (1958); Elliot R., 1st Suppl., 1965; Shunk P. A., 2nd Suppl. (1968).
- [2] Вол А. Е., *Строение и свойства двойных металлических систем*, Том 1,—4, Физматгиз (1959—1979).
- [3] Pearson W. B., *A Handbook of Lattice Spacings and Structure of Metals and Alloys*, Pergamon Press vol. 1(1958), vol. 2(1967).
- [4] Kubaschewski O., Catterall J. A., *Thermochemical Data of Alloys*, Pergamon Press (1956).
- [5] Hultgren R., et al., *Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys*, Wiley (1972).
- [6] *Metals Handbook*, ASM, 9th ed., vol. 1—5(1978—1982).
- [7] Smithells C. J., *Metals Reference Book*, Butterworths (1975).
- [8] Swalin R. A., *Thermodynamics of Solids*, Wiley (1972).
- [9] Wagner C., *Thermodynamics of Alloys*, Addison-Wesley (1952).
- [10] Lumaden J., *Thermodynamics of Alloys*, Inst. of Metals (1952).
- [11] Darken L. S., Gurry R. W., *Physical Chemistry of Metals*, McGraw-Hill (1953).
- [12] 徐祖耀, *金属材料热力学*, 科学出版社 (1981).
- [13] Hume-Rothery W., Raynor G. V., *The Structure of Metals and Alloys*, Inst. of Metals (1954).
- [14] Pearson W. B., *The Crystal Chemistry and Physics of Metals and Alloys*, Wiley (1972).
- [15] Wells C. F., *Structure of Crystals*, Solid State Phys. Vol. 7, 125(1958).
- [16] Guggenheim E. A., *Mixture*, Oxford (1952).
- [17] Münster A., *Statistische Thermodynamik*, Springer (1956).
- [18] Janot C., et al., *Propriétés Electroniques des Metaux et Alliages*, Masson (1973).
- [19] Sellmyer, D. J., *Electronic Structure of Metallic Compounds and Alloys: Experimental Aspects*, Solid State Physics, Vol. 33(1978).
- [20] *Theory of Alloy Phases*, ASM Seminar (1956).
- [21] *The Physical Chemistry of Metallic Solutions and Intermetallic Compounds*, Nat. Phys. Lab. Symposium, Her Majesty's Stationary Office (1959).
- [22] *Thermodynamics in Physical Metallurgy*, ASM Seminar (1950).
- [23] *Phase Stability in Metals and Alloys* (eds. P. S. Rudman et al), McGraw-Hill (1967).
- [24] Wilson A. J. C., *J. Inst. Metals*, 70, 543(1944).
- [25] Лившиц Б. Г., *Физические свойства металлов и сплавов*, Матгиз, (1959).
- [26] Meijering J. L., 21, 5A, p. 2.
- [27] Lawson A. W., 见 [22], p. 85.
- [28] Zener C., 见 [22], p. 16.
- [29] Borelius G., *Ann. Physik*, 24, 489(1935); 28, 507(1937).
- [30] Oelsen W., Wever F., *Arch. Eisenhüttenw.*, 19, 97(1948).

- [31] Пинес Б. Я., Очерки по металлофизике, Изд. харьковского ун-та (1961).
- [32] Gaye H., Lupis C. H. P., *Scripta Met.*, 4, 685(1970).
- [33] Kaufman L., Bernstein H., *Computer Calculation of Phase Diagrams*, Academic Press (1970).
- [34] Vogt W., *Physikalische Eigenschaften der Metalle*, Akad. Verlag (1958).
- [35] Friedel J., *Canadian Jour. Phys.*, 34, 1190(1956).
- [36] Shull C. G., 见 [20] p. 279.
- [37] Ильина В. А., Крицкая В. К., Курдюмов Г. В., *Изв. АН СССР, Серия физ.*, 10 723(1956).
- [38] Грузин П. Л. et al., *Проблемы Металловедения и физика металлов*, 5 326(1958).
- [39] Averbach O. I. *The Structure of Solid Solutions*, 见 [33] p. 361.
- [40] Münster A. 见 [21] 2 Др. 2.
- [41] Лившиц В. Л., *Неоднородные растворы*, *Сов. физ.*, 1958.
- [42] Иверовна В. И. et al., *Кристаллография*, 2, 414(1957).
- [43] Nix F. C., Shockley W., *Order-Disorder Transformations in Alloys*, *Rev. Mod. Phys.*, 10, 1(1938).
- [44] Lipson H., *Order-Disorder Changes in Alloys*, *Progr. Mat. Phys.*, Vol. 2(1950).
- [45] Pashley D., Presland A. E. B., *J. Inst. Metals*, 87, 419(1958—1959).
- [46] Massalski T. B. *Intermediate Phases and Electronic Structure*, 见 [33] p. 63.
- [47] Taylor W. H., *Acta Met.*, 2, 684(1954).
- [48] Haworth C. W., Hume-Rothery W., *Phil. Mag.*, 3, 1013(1958).
- [49] Frank F. C., Kaspar J. S., *Acta Cryst.*, 11, 184(1958); 12, 483(1959).
- [50] Sinha A. K. *Topologically Close-Packed Structures of Transition Metal Alloys*, *Prog. Mat. Sci.*, Vol. 15(1970).
- [51] Watson R. E., Bennett L. H., *Acta Met.*, 32, 477; 491(1984).
- [52] Самсонов Г. В., Уманский У. С., *Твердые соединения тугоплавких металлов*, *Металлургиздат*(1957).
- [53] Rundle R. E., *Acta Cryst.*, 1, 180(1948).
- [54] Нешпор В. С., *Труды семинара по жаростойким материалам*, В 5(1960).
- [55] Klement W., Jr., Willens R. H., Duwez P., *Nature*, 187, 187(1960).
- [56] Guntherodt R. J., *Metallic Glasses*, Vol. 1, 2, Springer (1980, 1981).
- [57] Cargill, G. S., III, *Structure of Metallic Alloy Glasses*, *Solid State Phys.* Vol. 30(1975).
- [58] 郭貽誠, 王震西主編, *非晶态物理学*, 科学出版社 (1984).
- [59] Spaepen F., *Defects in Amorphous Metals*, in *Physics of Defects*, eds. R. Balian et al, North Holland (1980).
- [60] Kauzmann W., *Chem. Rev.*, 42, 219(1948).
- [61] Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. W., *Phys. Rev. Lett.*, 53, 1951 (1984).
- [62] Zhang Z. (张泽), Ye H. D. (叶恒强), Kuo K. H. (郭可信), *Phil. Mag.*,

- A52, L49(1985).
- [63] Levine D., Steinhardt P. J., *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 2477(1984).
 - [64] Penrose R., *Bull. Inst. Math. Its Appl.*, **10**, 266(1974).
 - [65] Gardiner M., *Sci. Am.*, **236**, Jan., 110(1977).
 - [66] Bursill L. A., Peng J. L. (彭菊琳), *Nature*, **316**, 50(1985).
 - [67] Bak P., *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 1517(1985).
 - [68] Levine D., et al., *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 1520(1985).
 - [69] Mermin N. D., *Troian S. M.*, **54**, 1524(1985).
 - [70] Muto T., Takagi Y., *The Theory of Order-Disorder Transitions in Alloys*, Solid State Phys., Vol. 1(1955).
 - [71] Guttman L., *Order-Disorder Phenomena in Metals*, Solid State Phys., Vol. 3 (1956).
 - [72] Chang T. S. (张荣燧), *Proc. Roy. Soc.*, **A178**, 48(1939).
 - [73] Rudman P. S., Averbach B. L., *Acta Met.*, **2**, 576(1954).
 - [74] 杨振宁、李荫远, *中国物理学报*, **7**, 59(1945); Yang C. N. (杨振宁), *J. Chem. Phys.*, **13**, 66 (1945).
 - [75] Li Y. Y. (李荫远), *J. Chem. Phys.*, **17**, 447(1949).
 - [76] Onsager L., *Phys. Rev.*, **65**, 117(1944).
 - [77] Mott N. F., *Proc. Phys. Soc.*, **49**, 258(1937).
 - [78] Shimoji M., *Jour. Phys. Soc. Japan*, **14**, 1525(1959).
 - [79] Khachaturyan A. G., *Ordering in Substitutional and Interstitial Solid Solutions*, Prog. Mat. Sci., Vol. 22(1978).
 - [80] Mott N. F., Nabarro F. R. N., *Proc. Phys. Soc.*, **52**, 86(1940).
 - [81] Bilby B. A., *Proc. Phys. Soc.*, **A63**, 191(1950).
 - [82] Eshelby J. D., *The Continuum Theory of Lattice Defects*, Solid State Physics, Vol. 3(1956).
 - [83] Oriani R. A., *Phys. Chem. Solids*, **2**, 327(1957).
 - [84] Friedel J., *Phil. Mag.*, **46**, 514(1955).
 - [85] Huang K. (黄昆), *Proc. Roy. Soc.*, **A190**, 102(1947).
 - [86] Kröner E., in *Theory of Crystal Defects*, p. 215, Academia (1966).
 - [87] Snoek J., *Physica*, **8**, 711(1941).
 - [88] Nowick A. S., Berry B. S., *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, Academic Press (1972).
 - [89] Zener C., *Phys. Rev.*, **74**, 639(1948).
 - [90] 杨正举, *物理学报*, **22**(1966), 294.
 - [91] Peisl H., *Defect Properties from X-Ray Scattering Experiments*, *J. de Phys.*, **37**, C7-47(1976).
 - [92] Khachaturyan A. G., *Theory of Structural Transformations in Solids*, Wiley (1983).
 - [93] Mott N. F., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **32**, 281(1936).
 - [94] Friedel J., *Adv. Phys.*, **3**, 446(1954); *Nuovo Cimento. Suppl.*, **7**, 297(1958).
 - [95] Jones H., *Proc. Roy. Soc.*, **A144**, 225(1934).
 - [96] Yonezawa F., in *The Structure and Properties of Matter* (ed. T. Matsubara), Chap. 11, Springer (1982).

- [97] Heine V, Weare D., Pseudopotential Theory of Cohesion and Structure, Solid State Phys., Vol. 24(1970).
- [98] Massalski T. B., Mizutani U, Electronic Structure of Hume-Rothery Phases, *Prog. Mat. Sci.*, 22, 151(1978).
- [99] Soven P., *Phys. Rev.*, 156, 809(1967).
- [100] Ehrenreich H., Schwartz L., Solid State Phys., 21, 150(1976).

第三编 晶体的缺陷

冯 端

引言

斯梅克耳 (A. Smekel) 将固体的性能分为两类：一类是非结构敏感性的，例如弹性模量、密度、热容量等，对于同一种材料的不同样品进行测量的结果，差别不大，而且和将晶体视为理想的完整晶体的理论计算结果，基本相符。另一类是结构敏感性的，如屈服强度与断裂强度，对于同一种材料的不同样品测得的结果，往往差异很大，而且和根据理想完整晶体的理论计算结果有显著的分歧。例如实际晶体的屈服强度只有理论值的千分之一左右。当然，这种区分并不是绝对的。就同一种性能而言，不同类型的材料可能表现出差异：例如半导体的电阻率就是结构敏感性非常显著的，微量杂质可以产生很大的影响；相对而言，金属的电阻率就是非结构敏感性的。而就同一种材料的同一种性能来看，在不同的温度范围中又可能呈现不同的情况：例如在室温以上，金属的电阻率基本上是非结构敏感性的；但在低温的剩余电阻率就呈现结构敏感性了。精密的测量可以显示出一些传统上认为是非结构敏感的性能，如弹性模量、热容量等，在一定程度上也具有结构敏感性。反过来，如果我们能够严格地控制结晶的条件、杂质的含量与分布、热处理的历程，对某些结构敏感的性能也可能测出恒定的可重复的结果，类似于非结构敏感的性能。

实质上，所谓结构敏感性，无非是反映了晶体中的缺陷对于性能的影响。因此绝对的非结构敏感的性能是不存在的。每一种性能，或多或少地都受到晶体缺陷的影响。但是按照缺陷对性能影响的程度将性能大体上划分为两类，在实践中还是很有意义的。如果我们研究一种大体上是非结构敏感的性能，例如说，金属的压

缩系数。我们可以根据金属的晶体结构与电子结构，在金属电子论的基础上进行理论的计算，再将计算结果直接和实验数据相比较，即可以判定理论是否正确。但是研究一种结构敏感的性能，理论的任务就不那末单纯。此时，晶体中的缺陷的分布与运动对问题起了关键性的作用。必须通过细致的实验来揭示晶体中缺陷的具体情况，再在晶体缺陷理论的基础上进行理论的解释。

晶体的缺陷是指实际晶体结构中和理想的点阵结构发生偏差的区域。由于晶体结构具有规律性，结构中出现缺陷的型式也不是漫无限制的，往往可以归结为少数标准的类型，而每一种类型可以用相当确切的几何图象来加以描述。按照缺陷在空间分布的情况，我们将晶体结构中存在的缺陷分为如下三类：

(1) 点缺陷 其特征是所有方向的尺寸都很小，亦称为零维缺陷。例如空位、填隙原子、杂质原子等。

(2) 线缺陷 其特征是在两个方向上的尺寸很小，亦称为一维缺陷。例如位错。

(3) 面缺陷 其特征是只在一个方向上的尺寸很小，亦称为二维缺陷。例如晶界、相界、堆垛层错等。

这些缺陷在空间中呈现明确可辨认的图象，而在时间上也具有一定的延续性，因而在某种程度上可以当作为具有一定特征的个体来看待。它们的产生和发展、运动与相互作用、以至于合并或消失，在晶体的范性与强度、扩散以及其他的结构敏感性的问题中扮演了主要的角色，晶体的完整部分反而默默无闻地处于背景的地位。因而不少年来对晶体缺陷的研究在金属物理学中占了重要的地位。在这个领域中进行了大量的实验和理论的工作，进展非常之快。

晶体缺陷理论的发展过程是迂回的，钱临照曾对其早期的历史进行了概述^[1]。在早期的晶体 X 射线衍射强度的研究中，就已发现在几近完整的晶体中存在有缺陷。早在 1914 年，达尔文 (C. G. Darwin) 提出了图象不很明确的嵌镶组织 (mosaic structure)，用来解释实际晶体的 X 射线衍射强度和理想的完整晶体的差异^[2,3]。

嵌镶组织的概念长期为人们所沿用，但没有获得进一步的发展。搞清楚嵌镶组织的确切的图象，还是在位错理论确立以后的事情。在二十年代中，夫仑克耳 (Я. И. Френкель) 为了解释离子晶体导电的实验事实，提出了晶体的点缺陷理论^[4]。在四十年代初，塞兹与亨丁顿 (H. B. Huntington) 研究了金属中点缺陷的一些基本性质^[5]，目的是为了阐明扩散的机制。五十年代以后，由于原子能反应堆技术的进展，高能粒子对固体的辐照效应引起了人们的重视，又推动了对于晶体中的点缺陷作全面而深入的研究。

自二十年代末起，人们对于金属单晶的范性形变开展了有系统的研究。实际晶体的屈服强度比根据理想的完整晶体所作的理论估计值约低一千倍左右，引起了人们的重视。而正在同一时期，根据理想晶体的点阵动力学理论很成功地说明了晶体的热学性质和弹性；这个差异就显得更加突出。为了解释这个差异，在 1934 年，泰勒 (G. I. Taylor)^[6]、奥罗万 (E. Orowan)^[7] 与波兰伊 (M. Polanyi)^[8] 差不多同时提出了位错的假设，即认为晶体中存在有一种线缺陷，它在切应力下容易滑移，并可以引起范性形变。随后康托洛娃 (Т. А. Конторова) 与夫仑克耳提出了一种动态的位错点阵模型^[9]，伯格 (J. M. Burgers) 将位错的概念加以普遍化，并发展了位错的应力场的一般理论^[10]。接着位错理论得到多方面的发展，并被人们用来解释各式各样的范性形变的问题。但当时关于晶体中是否存在位错尚未获得实验的证明，而对于晶体中的位错分布情况更是一无所知。因而在一部分解释范性形变的位错理论中往往带有一定的任意性，也引起了一部分科学家对位错理论的怀疑和非难^[11]。自 1949 年以后，位错理论的发展进入了一个新的时期。夫兰克的螺型位错促成晶体生长的理论预言^[12]，获得了令人信服的实验证实^[13]（实际上晶体生长螺旋的图象早已被人摄取过，但埋在文献中未引人注意）；多种的实验观察（例如侵蚀斑、缀饰法等）揭示了晶体中位错分布状态，证明了晶体中确实存在着位错。特别是在 1956 年以后，门特 (J. W. Menter)^[14] 与赫许 (P. B. Hirsch) 等^[15] 利用电子显微镜薄片透射法直接观察位错

的一系列实验结果，对于晶体中位错的结构、分布、动力学性质以及位错与范性形变的关系等提供了确切可靠的第一手资料，证实了位错理论的一些基本论点及许多细节，为进一步发展范性形变的位错理论奠定了巩固的基础。近年来，高分辨率电子显微镜的发展又使直接观察晶体缺陷的原子图象成为可能。

位错理论也促进了晶界理论的发展。早在1940年伯格与布喇格就提出了晶界的位错模型^[16,17]，在五十年代这个模型得到了丰富的实验资料的证实。同时愈来愈多的工作揭示了各种类型的晶体缺陷间的内在联系与交互作用，各个领域内的研究工作起了相互促进的作用。从目前的情况来看，晶体缺陷理论的骨架已经确立。我们对于各种缺陷的基本性质以及它们之间的相互作用已经有了一定程度的了解；各种具体材料中晶体缺陷的一些特征，正在被人们注意研究；同时也注意研究晶体缺陷的某些复杂组合的特性，这对于阐明晶体的力学性质将具有重大的意义。另一方面，晶体缺陷理论的应用范围也日益推广，除了传统的范性形变与扩散等问题外，在滞弹性、断裂、相变、晶体的电磁性质、晶体的热学性质、以及催化与表面性质等领域内，这种理论也愈来愈重要。有关晶体缺陷的文献很多，而且分布得很广，这里不可能一一列举。综览整个领域，比较全面的论著有塞格（A. Seeger）在《物理大全》中的专论^[18]，范布尔仑（H. G. van Bueren）的专著^[19]以及赫许主编的著作^[20]。关于位错理论方面，瑞德（W. T. Read）^[21]、科特雷耳（A. H. Cottrell）^[22]及夫里德耳^[23]的三本教科书，对于基本问题给出了清楚扼要的阐述。进一步更深入的探讨可以参阅纳巴罗（F. R. N. Nabarro）^[24]以及赫思（J. P. Hirth）与洛底（J. Lothe）的专著^[25]。纳巴罗主编的六卷《固体中的位错》提供了有关位错各方面问题的详尽的参考资料^[26]。关于金属中的点缺陷，也有一些专著可供参考^[27]。

本篇分为两章；第六章讨论点缺陷和辐照效应等问题；第七章集中讨论位错，也涉及堆垛层错等问题；至于晶界及相界的问题则将于第四篇的第九章中进行论述。

第六章 点缺陷

I. 点缺陷的基本性质

晶体中的点缺陷包括空位、填隙原子、杂质或溶质原子（替代式或填隙式），以及它们所组合成的复杂缺陷（例如空位对或空位集团等）。溶质原子的问题在第二编合金理论中已经讨论过，这里主要只讨论有关空位及填隙原子的问题^[27,28]。

§ 6.1 几何组态

如果在晶体中抽去在正常点阵坐位上的一个原子就造成了点阵的空位；如果在点阵的间隙位置挤进一个同类的原子，则形成一个填隙原子。

经典的空位图象是很简单的：原子抽去后，周围的原子基本上保留在原有的坐位上，留下一个很明确的空位。如果周围原子朝向空位作较大的松弛，或甚至崩塌到空位里面去，那么，就形成一种弥散的空位或者十几个原子构成的松弛集团，类似于局部的熔区，有人称之为松弛群（relaxion）^[29]。这两种不同的空位图象，还很难通过直接观察来证实。但晶体的皂泡筏模型对解决这个问题提供了一些线索。在皂泡筏模型的照片^[30]（图 6.1）中可以看出，在一般温度（在皂泡筏模型中用机械振动来模拟）下，空位是很明确的，符合于经典的图象；只有在接近于熔点的温度，才和松弛群的图象有些类似。

填隙原子的情况要更复杂些。下面将讨论面心立方晶体中的填隙原子。我们在 § 4.1 中已经讨论过面心立方晶体中的间隙位置，最大的间隙位置是八面体型的 $[1/2\ 1/2\ 1/2]$ 。如果填隙原子处在八面体位置的正中心，将周围的原子稍加挤开，这就是第一种

可能的组态(见图 6.2(a)), 所产生的畸变具有球面对称性。第二种可能的组态为: 填隙原子沿了 $\langle 100 \rangle$ 方向偏离一些, 将点阵上的一个近邻原子也挤离了平衡位置(见图 6.2(b)), 形成一对原子

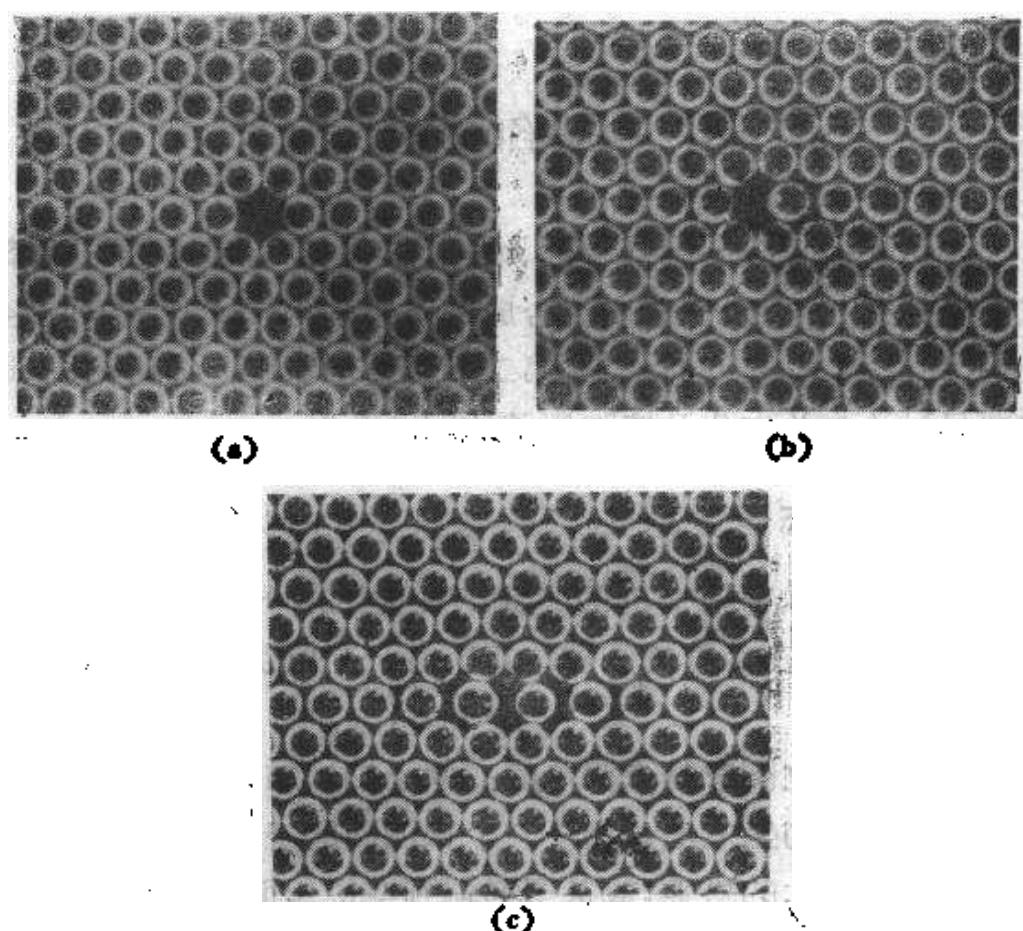


图 6.1 气泡链模型中空位(用机械振动来模拟热振动)。
(a) 室温; (b) 约 200°C ; (c) 接近熔点。

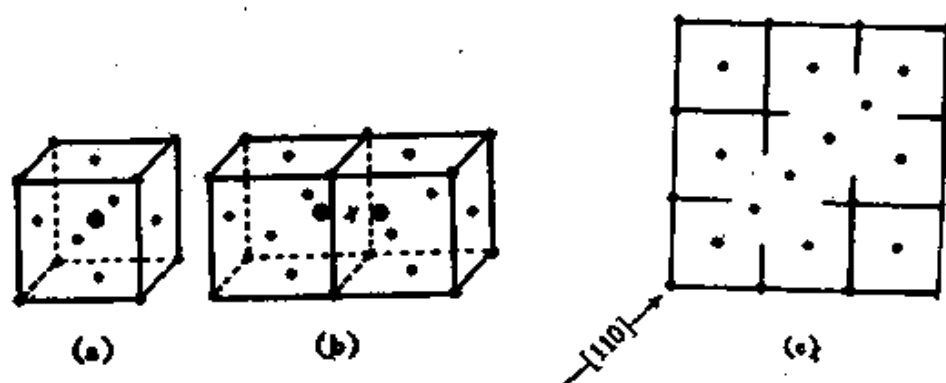


图 6.2 面心立方晶体中的填隙原子。
(a) 体心组态; (b) 哑铃组态; (c) 挤列组态。

的哑铃式填隙组态。所产生的畸变具有四方对称性。另一种是所谓挤列 (crowdion) 组态：沿密排方向，有 $(n+1)$ 个原子挤占了 n 个原子坐位(图 6.2(c))。只有对这些不同组态的填隙原子的能量进行细致的理论计算后，方能判定那一个组态具有最低的能量，因而是平衡组态。理论计算结果表明哑铃组态能量最低，这已为实验观察所证实^[31]。

§ 6.2 点缺陷的形成能

空位的形成能被定义为在晶体内取出一个原子放到晶体的表面上(但不改变晶体的表面能)所需要的能量。为了不影响晶体的表面积，取出的原子应放在晶体表面的台阶处(见图 6.3)。可以用类似的方式来定义填隙原子的形成能：从表面台阶上取出一个原子，挤进晶体的原子间隙中所需的能量。

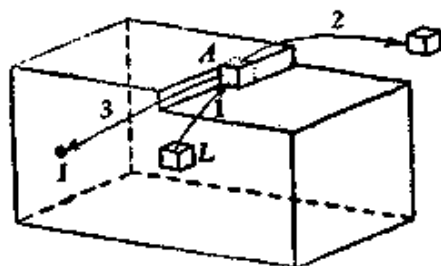


图 6.3 点缺陷的形成。
1——形成空位；2——蒸发；3——形成填隙原子。

我们可以对空位的形成能作一简单的估计：设想晶体为面心立方结构，原子间的交互作用限于最近邻。在晶体内取出一个原子要割断 12 个键(面心立方结构的配位数为 12)，而在表面台阶处置放一原子，要形成六个键。因此净效应为割断六个键，应和晶体的结合能(即升华能)相等。这样的估计显然是很粗略的，没有考虑到金属键的特征，以及空位周围原子的位移。更精确的计算表明，空位的形成能大约只为结合能的 $1/2$ 到 $1/4$ 。但空位的形成能和结合能之间有密切的关系这一点是符合实验事实的：结合能愈大，熔点愈高，则空位的形成能也愈大。

较精确地计算点缺陷的形成能，需要全面考虑缺陷周围的畸变情况及缺陷对于电子状态的影响，因而是个复杂的问题。为解决这个问题，各家所采用的方法也不尽相同，这里只能简略地介绍比较有代表性的富米 (F. G.umi) 的计算^[32]。

设想按照下述的程序形成空位:

(1) 将点阵中的一个正离子取出, 并将所带的正电荷均匀地散布在晶体中, 以抵销它的价电子, 使整个晶体仍保持电中性。空位的静电效应和一个零价的溶质原子相似, 在单价贵金属中, 空位的附加电荷为 $-Z$, (即 $Z = -1$), 引起导带电子的屏蔽效应 (参看 § 5.9)。达到平衡状态后, 空位周围只保留局部的干扰电势 V_p 。设导带的电子浓度为 n , 静电能的增加就等于 nV_p 的体积分:

$$E_1 = n \int_0^R 4\pi V_p r^2 dr, \quad (6.1)$$

这里的 r 表示积分元到空位中心的距离, R 表示积分区域的半径。根据电子屏蔽模型, V_p 与 Z 应满足下列关系:

$$-N_0(E_M) \int_0^R 4\pi V_p r^2 dr = Z = -1, \quad (6.2)$$

这里的 $N_0(E_M)$ 表示晶体导带在费密能级 E_M 处的能态密度。从式 (6.1) 及 (6.2) 中消去积分式, 即可求出

$$E_1 = \frac{n}{N_0(E_M)}. \quad (6.3)$$

对于自由电子,

$$\left. \begin{aligned} N_0(E) &= CE^{\frac{1}{2}}, \\ n &= \int_0^{E_M} N_0(E) dE = C \int_0^{E_M} E^{\frac{1}{2}} dE = \frac{2}{3} CE_M^{\frac{3}{2}}, \end{aligned} \right\} \quad (6.4)$$

这里的 C 是一个常数。所以,

$$E_1 = \frac{2}{3} E_M. \quad (6.5)$$

(2) 将取出的正离子放在表面台阶上, 由于自由电子气的膨胀, 造成费密能的下降。根据式 (6.4), E_M 可表示为

$$E_M = \left(\frac{3}{2} \frac{N}{CV} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (6.6)$$

这里的 N 为晶体中的原子数, V 为晶体的总体积。体积膨胀了 ΔV , 费密能级的变化就等于

$$\Delta E_M = -\frac{2}{3} E_M \frac{\Delta V}{V}. \quad (6.7)$$

现在 ΔV 等于一个原子体积, 而 $\frac{\Delta V}{V}$ 就等于 $\frac{1}{N}$; 自由电子的平均动能为 $\frac{3}{5} E_M$, 因此总的费密能的变化为

$$E_2 = -\frac{2}{3} \cdot \frac{3}{5} E_M = -\frac{2}{5} E_M. \quad (6.8)$$

E_1 与 E_2 的迭加就等于空位的形成能(忽略了畸变能)

$$E = E_1 + E_2 = \frac{4}{15} E_M. \quad (6.9)$$

这样定出的 E , 大体上符合于实验的结果, 但偏高一些。后来富米应用夫里德耳的理论改进了计算, 求出

$$E_1 + E_2 = \frac{1}{6} E_M. \quad (6.10)$$

另一方面, 再估计到空位周围的原子略有松弛, 可能降低能量; 因而有第三项能量 E_3 , 对铜的估计值为 -0.3 电子伏。这样, E_1 , E_2 , E_3 三项的叠加就接近于实验值(参看表 6.1 及表 6.2)。

空位引起的畸变较小, 在形成能的计算中, 电子能占了首要的地位, 畸变能只引起附加的校正项; 在填隙原子的情形, 正好相反, 畸变能占了首要的地位。长程的弹性畸变可以用连续弹性介质模型来处理(类似于 § 5.5 中所述的方法); 对于近程的畸变, 就应采用更确切的点阵模型(考虑各原子按照特定的势函数交互作用, 通过繁复的数值计算, 可以确定最低能量的组态。). 计算的结果表明, 填隙原子具有较大的形成能, 比空位大好几倍; 而在面心立方晶体中三种可能的填隙原子的组态中, 以哑铃组态(图 6.2(b)) 能量为最低, 应为平衡组态^[33,34]。点阵模型对空位周围原子组态的计算结果表明, 在密集结构中, 原子位移不大(小于 5%), 接近于经典的空位图象; 和松弛群并不相象(在计算中没有考虑原子热运动的影响)。在表 6.1 列出金属中点缺陷形成能的一些理论计算值。

表 6.1 贵金属中点缺陷的形成能(理论计算值)
(根据文献 [35], 并作了补充)

缺陷类型	金属	形成能(电子伏)	作 者
空 位	Cu	0.8—1.0	富米
		1.3—1.5	亨丁顿
	Ag	0.6—0.92	富米
	Au	0.6—0.77	富米
填隙原子	Cu	4—5	亨丁顿
		2.5—2.6	特沃特 (Tewordt) ^[46, 46]
		3	塞格等 ^[37]

数个点缺陷也可能组合起来形成能量更低的缺陷集团, 例如空位对, 三空位, 空位集团, 以及点缺陷与杂质原子的组合等。集团中单个缺陷的形成能的总和与缺陷集团的形成能的差值就代表缺陷集团的结合能。也有人对空位对, 三空位的结合能作过计算。由于对它们的原子组态还不清楚, 结果分歧很大, 都不甚可靠。拉扎留斯 (D. Lazarus) 用简单的电子屏蔽模型计算了单价贵金属中杂质原子(价数为 $Z + 1$) 与空位的交互作用能^[48]

$$E = -\frac{Ze^2}{r} \exp(-qr). \quad (6.11)$$

银的屏蔽常数为 $q \approx 1.7$ [埃⁻¹], 原子的平均半径 $r_0 = 2.9$ [埃], 若 $Z = 2$, 则 $E \approx 0.07$ 电子伏。利用这个关系可以解释为什么银中杂质原子的扩散系数是和原子价有关的。

§ 6.3 热平衡态的点缺陷

点缺陷的存在使晶体的内能增加; 但另一方面, 由于混乱程度的增加, 也使晶体的熵加大。根据自由能表示式 $F = U - TS$ 可以看出, 一定量的点缺陷有可能使晶体的自由能反而下降。根据自由能极小的条件, 可以求出在热力学平衡状态下的点缺陷浓度。

设想晶体中总共有 N 个原子坐位, 形成 n 个空位可以有

$N!/(N-n)!n!$ 种不同的方式,因此组态熵的增加为

$$\begin{aligned} \Delta_c &= k \ln \frac{N!}{(N-n)!n!} \\ &\simeq k[N \ln N - (N-n) \ln (N-n) - n \ln n]. \quad (6.12) \end{aligned}$$

晶体的自由能即可表示为

$$\begin{aligned} F &= n(U_f - TS_f) - kT[N \ln N \\ &\quad - (N-n) \ln (N-n) - n \ln n], \quad (6.13) \end{aligned}$$

这里的 U_f 为形成一个空位的能量, S_f 为形成一个空位, 改变了周围的原子振动所引起的振动熵。在平衡态自由能为极小值, 即

$$\frac{\partial F}{\partial n} = 0,$$

就可求出(考虑到 $N \gg n$) 平衡态的空位浓度

$$\begin{aligned} c &\simeq \frac{n}{N-n} = \exp[-(U_f - TS_f)/kT] \\ &= A \exp(-U_f/kT), \quad (6.14) \end{aligned}$$

这里的

$$A = \exp(S_f/k). \quad (6.15)$$

用类似的方式可以求出填隙原子的浓度表示式。平衡浓度随温度的上升而增加,其数值和点缺陷形成能的关系很大。一般金属中, U_f 的数值约为 1 电子伏,关于 S_f 尚无可靠的计算值,一般估计因素 A 约在 1—10 之间。在接近于熔点的温度,空位浓度可高达 10^{-3} — 10^{-4} 。填隙原子的形成能较大(为空位的 3—4 倍),对应的平衡浓度就非常小,通常可以忽略不计。

点缺陷的存在使传导电子受到散射,产生附加的电阻。附加电阻的大小和点缺陷浓度成正比,因而可用来作为点缺陷浓度的标志。从附加电阻和温度的关系可以定出空位的形成能。有两种不同的测量方法:一种是直接在高温测量电阻对温度的曲线,曲线上的异常部分归结为空位的影响;另一种方法是将样品淬火,令金属迅速冷却下来,过饱和的空位就被冻结,可以保留到室温或低温。根据不同温度淬火后电阻测量的结果,也可求出空位的形成

能。在表 6.2 中列出了一部分的实验结果,和表 4.1 所列理论计算结果大致相符。

淬火是金属热处理的基本方法之一,传统用来保留高温的合金相或产生亚稳的过渡相(如钢中的马氏体)。但认识到淬火可以保留过饱和的空位还是比较迟的事(这方面的总结可参看文献[39])。过去在纯金属方面工作较多,对于澄清金属中空位的性质起很大的作用。对一些合金的淬火效应的研究表明,空位的冻结在许多传统的热处理过程(例如铝合金的时效)中也起很重要的作用,值得注意^[40]。

缪勒(E. W. Müller)发展了场离子显微镜技术,能够分辨金属表面上的原子排列,直接观察到表面层中的空位^[41];并用低温蒸发的方法,使表面层逐层脱去,就可以显示出原存于体内的空位。缪勒用这种方法直接测出了淬火铂样品中的空位浓度为 5.9×10^{-4} 。根据淬火温度 1500°C 和式(6.15)(设 A 为 1),求出了

表 6.2 空位的形成能(实验值)^[31]

金属	$U_f(\text{eV})$ 淬火	$U_f(\text{eV})$ 正电子湮灭	$U_f(\text{eV})$ 最佳值
Au	0.94	0.97	0.95
Al	0.69	0.66	0.67
Pt	1.51	—	1.51
Cu	1.27	1.29	1.28
Ag	1.10	1.16	1.13
W	<3.9	—	<3.9
Mo	~3.2	—	~3.2

铂中空位的形成能为 1.1 电子伏,和电阻法测定的结果相近似(参看表 6.2)。

表 6.3 空位对与单空位浓度的比值

温度 $T(\text{K})$	1000			500		
结合能 E_b (电子伏)	-0.2	-0.3	-0.4	-0.2	-0.3	-0.4
比值 c_2/c	0.02	0.06	0.2	0.2	2	20

如果知道了空位集团的结合能 E_b , 也可以约略地估计其平衡浓度。兹以空位对为例, 作一说明。空位对与单个空位间的平衡关系和双原子气体分子的分解平衡相似



按照分解平衡的统计理论^[43], 空位对的浓度 c_2 与单空位的浓度 c 应满足下列关系:

$$\frac{c_2}{c} = Azc \exp\left(-\frac{E_b}{kT}\right), \quad (6.16)$$

这里的 A 为一常数, z 为配位数。由于空位对具 z 个不同的位向, 所以其组态数应乘上 z 这个因素。表 6.3 列出了不同温度下 c_2/c 与 E_b 的关系。可以看出, 结合能的绝对值愈大, 温度愈低, 空位结合成空位对的倾向也就愈加显著。

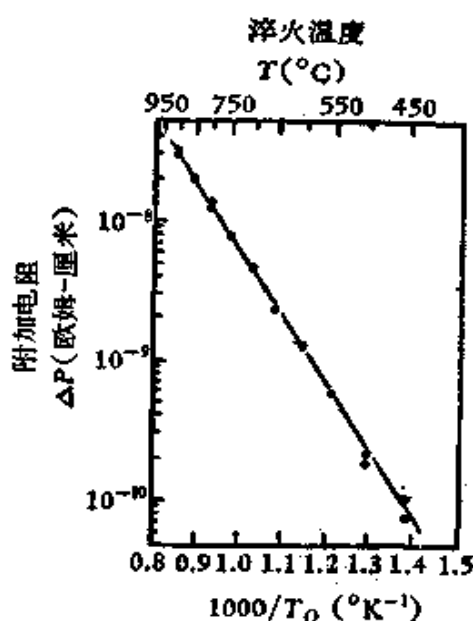


图 6.4 淬火金样品的附加电阻与淬火温度的关系^[43]。

§ 6.4 点缺陷对物理性能的影响

晶体中有了点缺陷, 其一系列的物理性能都会受到影响^[35]。比较引人注意的是点缺陷对于密度及电阻的影响:

(a) 密度与线度 如果在点阵中取走一个原子, 放到表面上去, 点阵就形成一个空位。如空位周围原子都不移动, 则应使晶体体积 V 增加一个原子体积, 而点阵参数 a 保持不变。但是实际上空位周围原子会产生位移, 因此 V 及 a 都有变化。理论计算的结果表明, 填隙原子引起的体膨胀约在 1~2 原子体积, 而空位的体膨胀则约为 0.5 原子体积。

(b) 电阻 点缺陷对于传导电子产生附加的散射, 引起电阻的加大。关于点缺陷的电阻的理论计算, 一般是套用夫里德耳的合金理论, 将点缺陷看为零价或一价的杂质的原子。但是填隙原子所引起的畸变较大, 效应不易正确估计, 结果的差异也较大(参

看表 6.4)。

表 6.4 点缺陷产生的附加电阻(微欧姆-厘米%)^[30]

空位	填隙原子	计 算 者
0.4	0.6	德克斯特 (Dexter)
1.3	4.5~5.5	琼根伯格 (Jongenburger)
1.28		阿培耳 (Abelès)
1.28	1.41	布拉特 (Blatt)
1.5	10.5	奥佛好塞 (Overhauser) 等
1.67		塞格
	2(1.16~2.90)	颇特 (Potter)

§ 6.5 点缺陷的移动

如果图 6.5 中 B 处的原子跳入 A 处的空位，就相当于空位自 A 移至 B ，在过程中原子应通过中间的位置 C 。当原子处在 C 位置上（见图 6.5）时，引起点阵的畸变较大，因而能量较高，被称为鞍点组态。鞍点组态和正常空位组态的能量差即相当于空位移动的激活能。由于鞍点组态实质上处于不平衡状

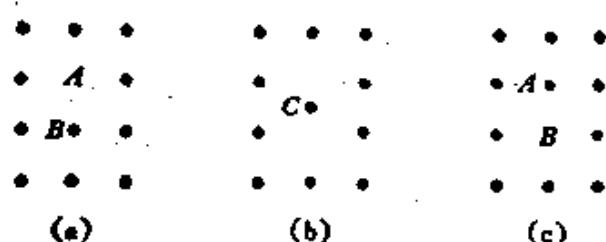


图 6.5 空位自 A 位置 (a) 移至 B 位置 (c), (b) 鞍点组态。

表 6.5 点缺陷移动的激活能(计算值)^[31]

缺陷类型	金属	移动激活能 (eV)	作 者
空 位	Cu	1	亨丁顿
空 位 对	Cu	0.4 0.15	巴特勒特 (Bartlett) 等 洛默 (Lomer)
三 空 位	Cu	1.75	达马斯克 (Damask) 等 ^[40]
填隙原子	Cu	0.07—0.27 0.08 0.6—0.7	亨丁顿 约翰逊 (Johnson) 等 ^[33] 塞格等 ^[41]

态，很难精确地计算它的能量。因此点缺陷移动激活能的计算值存在有较大的分歧(参看表 6.5)。

空位周围的原子经常作不规则的热运动，当其所具有的动能超过移动激活能 U_m 时，即可越过势垒跳入空位，使空位跃进一个原子间距。如果原子的振动频率为 ν_0 ，点缺陷的移动频率为

$$\nu = Az\nu_0 \exp(-U_m/kT), \quad (6.17)$$

这里的 z 表示配位数， A 为决定于移动激活熵 S_m 的一个因素，通常在 1~10 之间。因此点缺陷不是静止的，而是在不断地作不规则的布朗运动。空位的布朗运动所造成的原子迁移就是晶体中的自扩散。自扩散决定于空位的浓度和空位跃迁的频率，因此金属的自扩散的激活能应为空位的形成能与移动激活能的总和。从自扩散激活能的测定值减去空位形成能即得出移动激活能(详见第十章)。另一方面，过饱和的点缺陷作不规则的布朗运动时，可能碰到点缺陷的漏洞(例如自由表面，晶界，位错等)，即消失在漏洞中，引起了点缺陷的回复。回复过程的快慢是和温度和移动的激活能有关的，如果肯定了参与某一回复过程中点缺陷的实质，则从缺陷回复的实验中也可以直接定出点缺陷的移动激活能(参看表 6.6)。

表 6.6 点缺陷移动激活能的实验值 (电子伏)^[11]

金属	U_m 淬火	U_m 辐照后 退火第 III 阶段	U_m 最佳值	U_{sd} 自扩散 激活能最佳值	$U_{sd}-U_f$ 最佳值
Au	0.83—0.89	0.81	0.83	1.76	0.81
Al	0.65	0.59	0.62	1.28	0.61
Pt	1.42	1.43	1.43	2.9	1.39
Cu	0.72	0.70	0.71	2.07	0.79
Ag	—	0.66	0.66	1.76	0.63
W	1.8	1.69	1.7	<5.7	~1.8
Mo	1.3—1.9	1.29	1.3	~4.5	~1.3

II 辐照效应

通过适当的处理过程,例如高能粒子的辐照、高温的淬火、冷加工等,可以在晶体内产生超出平衡浓度的点缺陷。近年来由于反应堆技术的需要,对于固体材料的辐照效应进行了全面而深入的研究,有助于我们了解晶体中点缺陷对性能的影响,以及有关点缺陷本身的性质。这里将对金属的辐照效应作一概括的介绍,偏重于和基本性质有关的问题,详细的总结可以参看文献[48]。

§ 6.6 辐照效应的一般介绍

原子能的发展,对于金属研究提出了一个新的课题:即高能粒子对于金属材料性能的影响。反应堆中应用的金属材料都是在强辐照条件下工作的,辐照对于材料性能所引起的一些特殊效应就特别令人注意:例如铀棒在辐照下的伸长,石墨在辐照下累积的潜能,钢板的脆性转变温度的升高等,都会影响到反应堆的工作情况。如果不予注意,将会造成严重的事故。因此,有不少工作是为了累积辐照对反应堆结构材料性能影响的数据,以供反应堆设计工作者的参考。但是为了了解辐照对材料性能影响的规律性,也有不少研究工作注意于辐照效应机制的阐明。另一方面,通过辐照,可以控制在金属中点缺陷的数量,对于研究晶体缺陷的本质问题,很有帮助。

高能粒子在固体中所产生的辐照效应有三种类型:

(1) 电离 在离子晶体中产生色中心,在高分子材料中引起键的破坏,但在金属中除了发热以外,没有其他的效应。

(2) 蜕变 这种效应在裂变材料中特别显著。在高温(400℃以上)铀棒的肿胀(swelling),就是蜕变所产生的惰性气体的效应。

(3) 离位 使点阵中的原子离开了正常的坐位,产生空位和填隙原子(即所谓夫伦克耳缺陷),这是金属中最主要的辐照效应。

以下的讨论都限于这方面的问题。

最重要的辐照源是反应堆,主要是利用快中子(能量大于 1 兆电子伏)的效应。其他象加速器中高能电子及离子,强的 γ 射线(如钴 60 的射线)也可在金属中引起比较轻微的效应。对于离子晶体,弱的辐射如紫外线及 X 射线也可以引起显著的辐照效应。

表 6.7 各种射线的辐照效应

辐射类型	能量(电子伏)	行程	电离效应	离位效应	蜕变效应
紫外光	$10-10^3$	不定	有	无	无
X 射线	10^3-10^5	厘米—米	有	无	无
γ 射线	10^3-10^3	厘米—米	有	少量	无
中子(热)	$0.01-0.1$	不定	无	无	有
中子(快)	10^4-10^7	厘米	无	有	少量
带电核子	10^4-10^8	微米到毫米	有	有	少量
带电重离子	$10-10^4$	< 1000 埃	有	有	无
裂变碎片	$\approx 10^8$	$1-10$ 微米	有	有	有
电子	$\geq 10^6$	$0.1-1$ 毫米	有	有	无

§ 6.7 辐照对金属性能的影响

这里将辐照对金属性能的影响作一简略的介绍。

(a) 密度与线度 对于一般的金属,辐照引起了体膨胀,但效应不十分显著。在室温下,辐照引起密度的变化很少超过 0.1—0.2%。所引起的体膨胀可以用夫仑克耳缺陷的效应来解释。

在反应堆中受辐照的 α 铀单晶体,显示出特殊的辐照生长 (radiation growth) 的现象: 辐照引起晶体线度异常的变化。令 G_i 表示辐照的生长系数

$$G_i = \frac{\ln(L/L_0)}{n_i/n_0}, \quad (6.18)$$

这里 L_0 及 L 分别表示晶体在辐照前后的线度, n_0 为单位体积中原子数, n_i 为单位体积中产生裂变的原子数。表 6.8 列出了实验的结果。在 $[010]$ 向产生显著的膨胀,而在 $[100]$ 向有对应的收缩,这种辐照生长现象,显然和 α 铀晶体显著的各向异性的晶体结

构(α 铀属于三角晶系)有关。关于辐照生长的机制,尚未得出定论。有两种推测:一种意见认为是空位及填隙原子各向异性的扩散所引起的。另一种意见则认为是点缺陷凝聚成位错圈的效应(参看 § 7.21)。直接观察的结果支持后一种看法。

表 6.8 α 铀单晶的辐照生长系数
(在 100℃, 辐照到产生 0.1% 的裂变)^[40]

晶 轴 方 向	辐照生长系数 G_i
[100]	-420 ± 20
[010]	$+420 \pm 20$
[001]	0 ± 20

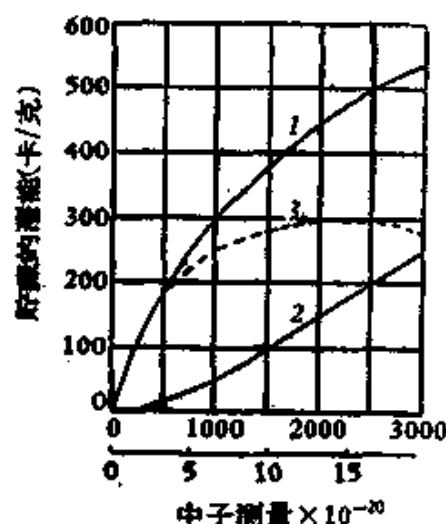


图 6.6 石墨在中子辐照下
潜能的累积。

- 1——辐照下情况;
2——1000℃退火后的情况;
3——1000℃退火中释放的潜能。

(b) 潜能 辐照在晶体中产生的缺陷,使晶体的潜能增加。在缺陷回复的过程中,潜能就被释放出来。在图 6.6 中表示了石墨在辐照中所累积的潜能,及 1000℃ 退火对潜能的影响。从图中可以看出,即使在 1000℃ 的退火尚不足以将累积的潜能全部释放出来。

(c) 电阻 很多工作测量了辐照对金属电阻的影响。图 6.7 表示了 20K 随了辐照时间的增长,附加电阻相应地加大^[48];而在图的左侧表示出了退火温度的影响,使附加电阻逐渐消除。辐照对金属电阻

的影响在技术上虽没有什么重要性(在室温,金属电阻的变化不大),但由于电阻的测量比较简便而且容易精确,在辐照效应机制的研究工作中常应用电阻的变化来追踪金属中缺陷的演化情况。

(d) 晶体结构 对于有序合金有比较突出的影响,辐照很显著地破坏了合金的有序度。在铀钼合金中,中子辐照将高温相稳

定到室温。

(c) 力学性质 辐照引起金属的强化和变脆，在以后将作较详细的讨论。

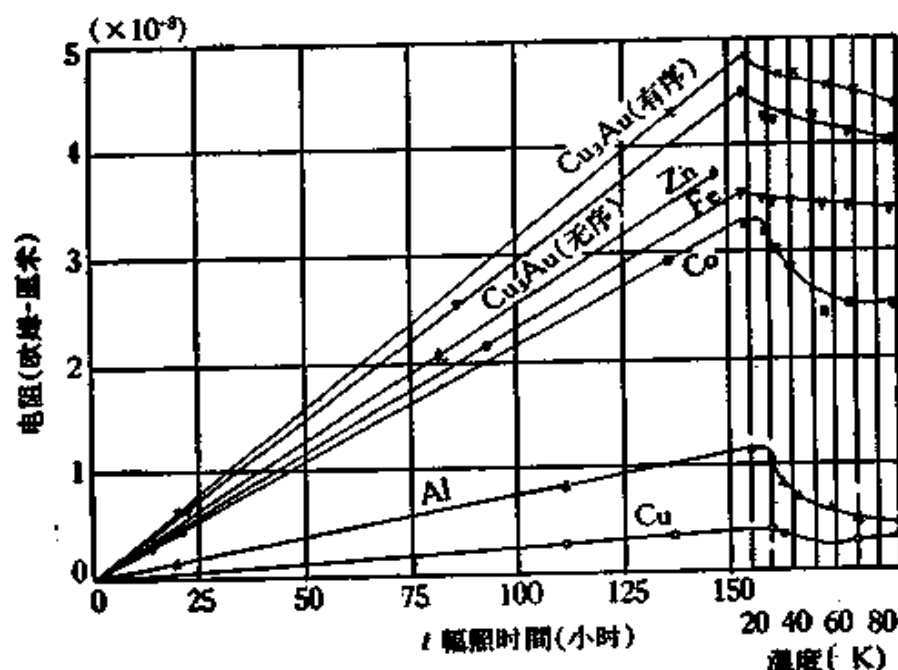


图 6.7 中子辐照对金属电阻的影响。

§ 6.8 高能粒子与点阵原子的碰撞

辐照效应理论首先接触到的问题，就是高能粒子和点阵中原子的碰撞。弹性碰撞中的能量转移，可能使原子离位，形成一对夫伦克耳缺陷。这里牵涉到能量转移及散射截面的计算以及对于离位阈能 E_d （点阵中原子离位所需要获得的最低能量值）的估计。本小节中先讨论前面两个问题，对于离位阈能的理论处理将在下一小节中讨论。

(a) 弹性碰撞中的能量转移 重粒子的轰击，可以采用经典力学方法来处理（参看附录 6-I）。设轰击的粒子的质量为 M_1 ，动能为 E ，点阵中被撞原子的质量为 M_2 ，初速为零（热运动可以忽略不计），弹性碰撞中转移能量的极大值为（出现于正碰的情况）

$$T_m = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E. \quad (6.19)$$

如果 $M_2 \gg M_1$, 近似地,

$$T_m \simeq \frac{4M_1}{M_2} E. \quad (6.20)$$

由于电子质量很小, 处理电子与点阵原子的离位撞击, 就应该考虑到相对论效应. 电子的动量可表示为

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = v/c, \quad (6.21)$$

这里的 m 表示电子的质量, v 表示电子的速度. 电子的动能可表示为

$$E = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right), \quad (6.22)$$

因而

$$p^2 = \frac{(E + 2mc^2)E}{c^2}. \quad (6.23)$$

由于被碰的原子要比电子重得多, 在正碰中最大的动量转移为 $2p$, 转移能量的极大值就等于

$$T_m = \frac{4p^2}{2M_2} = \frac{2E}{M_2c^2} (E + 2mc^2). \quad (6.24)$$

如果知道了点阵中原子的离位阈能 E_d 的数值, 使它等于 T_m , 我们就可以根据式 (6.24) 及式 (6.20) 算出产生离位效应轰击粒子所应具有的最小能量. 表 6.9 列出了将 E_d 设为 25 电子伏的计算结果. 值得注意的是, 不同类型的轰击粒子, 差异很大. 产生离位轰击的电子需要兆电子伏数量级的能量; 而中子及质子就小得多, 只需数百电子伏; 如果轰击粒子的质量和被轰原子很接近 (例如核裂片), 产生离位轰击不一定要高能粒子, 具有数十电子伏的能量也就够了. 近年来对于低能离子 (汞离子, 氙离子) 轰击下的金属溅射效应 (sputtering) 的研究, 证实了溅射实质上是一种金属表面的辐照效应^[49], 但由于低能离子在金属中行程很短, 只能在表面或薄膜样品 (薄于 1000 埃) 中产生效应.

表 6.9 产生离位的最低轰击能量(设 $E_d = 25$ 电子伏)

静止原子的原子量	10	50	100	200
中子, 质子(电子伏)	76	325	638	1263
电子, γ 射线(电子伏)	0.10×10^6	0.41×10^6	0.68×10^6	1.10×10^6
α 粒子(电子伏)	31	91	169	325
核裂片, 质量数为 100 (电子伏)	76	28	25	28

(b) 散射截面 粒子作弹性碰撞的几率可以用散射截面来表示(参看附录 6-1)。对于中性的粒子, 碰撞可以看为刚球型的, 能量转移在 T 及 $T + dT$ 间的散射截面(微分散射截面)为

$$d\sigma = \frac{\sigma_t(E)}{T_m} dT, \quad (6.25)$$

这里的 $\sigma_t(E)$ 为具有能量 E 的粒子的总散射截面。中子的 σ_t 约在 $1-10$ 靶¹⁾, 随着 M_2 的加大而增加。因此对于中子, 散射截面和能量转移值无关, 转移的平均能量即为

$$\bar{T} = \frac{1}{2} T_m. \quad (6.26)$$

粒子的总散射截面 σ_t 决定了粒子的平均自由程

$$L = \frac{1}{n_0 \sigma_t}, \quad (6.27)$$

n_0 为原子密度, 对于一般材料, 在 $10^{22}-2 \times 10^{23}$ 之间。因而中子在物质中具有很长的平均自由程($\sim 1-100$ 厘米), 撞击到原子的几率很小。

带电的粒子与点阵中的原子有电交互作用, 因而散射截面就要另作计算。一般情形下, 带电粒子与原子间的交互作用势是屏蔽的库仑势能

$$V(r) = \frac{e_1 e_2}{r} \exp(-r/a), \quad (6.28)$$

这里的 $e_1 = Z_1 e, e_2 = Z_2 e$ 分别表示投入粒子和点阵离子的电荷, r 为粒子间的距离, a 为一屏蔽常数。

1) 1 靶 $= 10^{-28}$ 厘米²。

令 b 表示投射粒子的最接近距离, 满足下列关系 (μ 表示折合质量, $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$):

$$\frac{|e_1 e_2|}{b} = \frac{\mu V^2}{2}. \quad (6.29)$$



图 6.8 散射过程中最近距离。

可以根据屏蔽的强弱, 分下述两种情况来讨论:

(1) 弱屏蔽, $b \ll a$, 粒子穿入电子云的内部, 相当于纯库仑作用, 得到的是经典的卢瑟福 (Rutherford) 散射公式

$$d\sigma = \frac{\pi b^2}{4} T_m \frac{dT}{T^2}. \quad (6.30)$$

$d\sigma$ 与 T^2 成反比, 表示低能量转移的散射几率较大。总的散射截面要比中子的大得多, 相应地平均自由程就很短, 只有数个原子间距。

(2) 强屏蔽, $b \gg a$, 则可以采用刚球型碰撞近似。被撞出的初生原子(带电的)在晶体内所作的次级碰撞, 就可以用这种近似来描述。

在上面的考虑中, 忽略了粒子和点阵的非弹性碰撞。实际上高能的带电粒子穿过晶体时, 非弹性碰撞具有更高的几率。粒子将大部分能量消耗于电离。因而决定带电粒子在固体内部的行程的, 主要是电离效应, 但是由于电离不会在金属中产生缺陷, 这里就不去深究。

§ 6.9 原子碰撞的级联过程

点阵的原子被撞以后的行为是决定辐照效应的关键问题。如果接受的能量小于一临界值 E_d (离位阈能), 将不产生离位原子, 相当于产生了一个局部热点, 称为热峰 (thermal spike); 如果接受的能量大于 E_d , 则原子离开了正常的点阵坐位, 产生了一个空

位和填隙原子对;如果离位的原子获得足够大的能量,它和点阵中其他的原子的碰撞,继续产生离位原子(所谓次生的离位原子),形成一复杂的级联过程(cascade process)。长期以来,对于级联过程中具体的情况是不清楚的,也有人提出一些理论性的猜测,但都缺乏根据。范亚德(G. H. Vineyard)等采用点阵模型作了比较确切的计算^[34],方始澄清了这个问题。

他们选择铜晶体中的一个区域作为理论计算的模型,其中包含的原子数约一千个。原子间的互斥作用可以用下列的玻恩-梅耶(Born-Mayer)势函数来表示:

$$\varphi = A \exp[-\rho(r - r_0)/r_0], \quad (6.31)$$

这里的 r 表示原子间的距离, r_0 为原子间的平衡距离, A 及 ρ 为两个常数,可根据金属的弹性系数的数据导出。列出各原子的运动方程,并在周界上加以弹性的及耗散性的作用力来模拟环境的影响。设想其中有一原子受到高能粒子的撞击,获得了一定的初始动能和动量。用电子计算机求出诸运动方程的解:即得出晶体中各原子运动的轨迹,具体反映出辐照后各原子运动的情况。在静止后各原子的位置就代表在级联过程后点阵的情况。图 6.9 示出

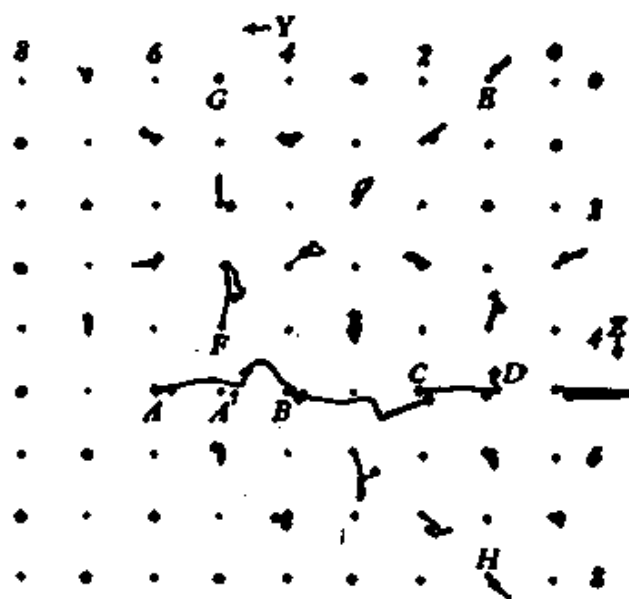


图 6.9 辐照产生缺陷的图象(点阵动力学模型的计算结果)。

A 原子被撞击和 -Y 轴成 15° , 获得的动能为 40 电子伏。

了受撞原子具有 40 电子伏的计算结果,具体表示出各原子运动的轨迹.从图上可以看出,在 A 处留下一个空位, D 处产生一填隙原子.在 B 处及 C 处发生了置换碰撞 (replacement collisions), 即撞

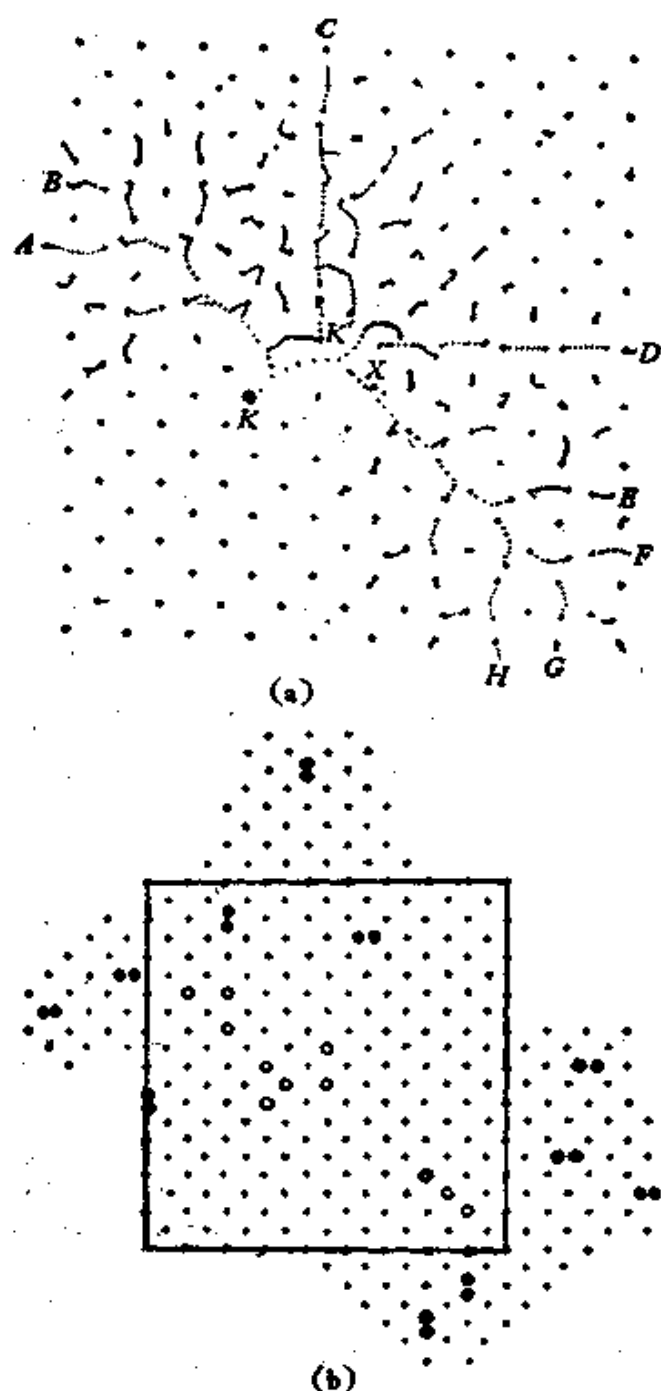


图 6.10 辐照产生缺陷的图象(点阵动力学模型的计算结果).

- (a) 沿 (100) 面, 和 $[011]$ 夹角为 10° 的撞击, 转移的能量为 400 电子伏;
 (b) 根据 (a) 估计产生的缺陷, 空位以圆圈表示, 填隙原子为双黑点.

来的原子置换了点阵中原有的原子。沿了 $\langle 110 \rangle$ 及 $\langle 100 \rangle$ 方向的行列 AD , AE , FG , BH 产生了聚焦碰撞 (focusing collisions), 即碰撞的动量优先地沿了密排的行列传递。但是除 AD 列以外, 其他各列的原子都倾向于返回原来位置, 总的效应是产生一对夫伦克耳缺陷和两个置换碰撞。图 6.10 示出了受撞原子接受 400 电子伏动能的计算结果。受撞的原子原来在 K 处, 移至 K' 。而 A , B, \dots, H 等聚焦碰撞的行列到周界上还在起作用。图 6.10(b) 示出了对于终了后效果的估计, 产生了 11 个空位和 11 个填隙原子(哑铃组态), 空位集中中心的区域, 填隙原子分布在外围, 和勃林克曼 (J. A. Brinkman) 所设想的离位峰 (displacement spike) 有些相似^[40]。

聚焦碰撞的效应也从更简单的模型导出^[50]: 设想沿 x 轴有一列整齐排列的刚球, S 为两球心间的间隔, D 为球的直径 (见图 6.11)。根据球体的碰撞关系可以求出, 如果第一球沿着和 x 轴夹

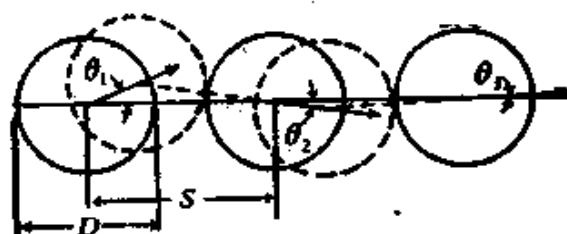


图 6.11 刚球列的聚焦碰撞。

角为 θ_1 的方向撞向第二球, 则第二球撞出的偏向角为

$$\theta_2 = \arcsin [(S/D) \sin \theta_1] - \theta_1. \quad (6.32)$$

如果球体间隔不大, 则可能产生 $\theta_2 < \theta_1$, 因而一般地 $\theta_{i+1} < \theta_i$, 如果 θ_i 很小, 即式 (6.34) 可以简化为

$$\theta_2 = (S/D - 1)\theta_1. \quad (6.33)$$

可以看出, 聚焦碰撞的条件为

$$\frac{S}{D} < 2. \quad (6.34)$$

汤姆森 (M. W. Thompson) 等用质子轰击金单晶薄膜, 观察所引起的原子溅射的效应^[51], 在沿了一些晶体密排方向看到特别

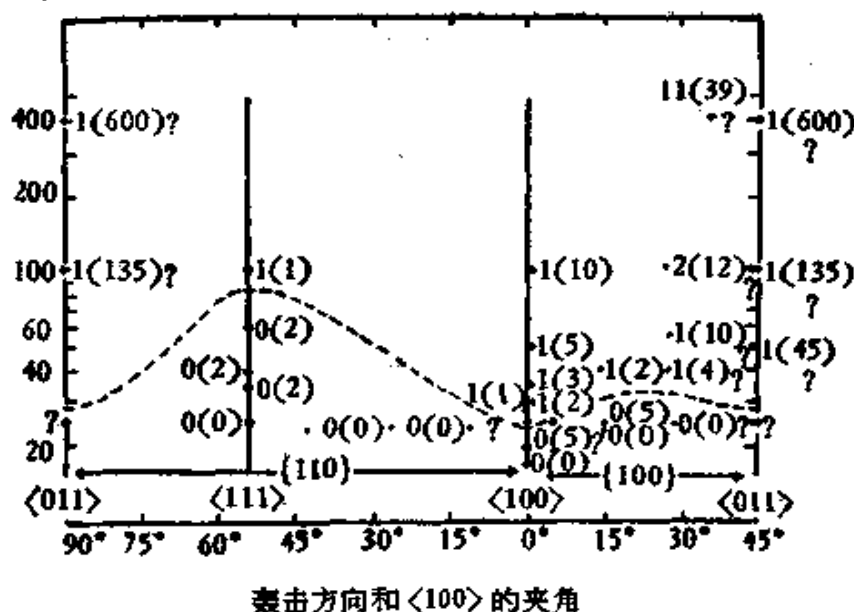


图 6.12 转移的能量与离位原子数的关系(点阵动力学模型计算结果)

强的溅射痕迹,证实了聚焦碰撞的理论。最近用场离子显微镜直接观察 α 粒子对金属的轰击,也看到聚焦碰撞的迹象。

范亚德等对于不同的动能和动量所进行理论计算的结果,汇列在图 6.13 中,其中每一黑点代表一次事件,黑点旁的数字表示所产生的夫伦克耳缺陷数,括号中的数字表示所产生的置换碰撞数。从图中可以看出,离位阈能的数值是具有方向性的,在 $\langle 100 \rangle$ 及 $\langle 110 \rangle$ 向最低,接近于 25 电子伏,和过去亨丁顿的计算相符^[40],而沿 $\langle 111 \rangle$ 向却要大得多,估计接近于 85 电子伏。

在上述的计算中,由于初始的动能受到计算条件的限制,还没有足够的数据足以求出离位原子总数 ν 与初生原子能量 E 的函数关系,而这个函数关系是定量计算辐照所产生缺陷数所必须的。一般对于 $\nu(E)$ 的计算往往是在一些简化的模型(假定所有碰撞都是二元的,忽略晶体点阵结构的影响)上进行的。由于模型的细节上的一些差异,计算的结果也有一定的分歧。这里只简单介绍金兴(G. H. Kinchin)与皮斯(R. S. Pease)的计算:他们假定所有碰撞都是刚球型的。当初生原子的能量大于电离阈能 E_i 时,只产生非弹性碰撞;当小于 E_i 时,则只产生弹性碰撞。假定初生原子的能量 E 满足条件 $E_i > E > 2E_i$ 。它和另一原子碰撞后,

保留能量 E_1' , 有能量 E_2' 转移给被撞原子, 即

$$E_1' + E_2' = E. \quad (6.35)$$

现在有两个原子可以分别产生离位碰撞. 如果 $E_1' \geq E_d$, $E_2' \geq E_d$, 这两个原子产生的离位原子数将分别为 $\nu(E_1')$ 及 $\nu(E_2')$. 考虑到在刚球型碰撞中, 能量对分在单位能量范围内的几率为 $1/E$ (参看式 (6.27)), 原子 1 及原子 2 所产生的平均离位原子数可分别表示为

$$\int_{E_d}^E \frac{1}{E} \nu(E_1') dE_1' \quad \text{及} \quad \int_{E_d}^E \frac{1}{E} \nu(E_2') dE_2'.$$

两者相加应等于 $\nu(E)$, 因而求出 $\nu(E)$ 所满足的基本积分方程

$$\nu(E) = \frac{2}{E} \int_{E_d}^E \nu(E') dE'. \quad (6.36)$$

两侧乘以 E , 再对 E 微分, 上式即转化为一微分方程

$$E \frac{d\nu}{dE} = \nu, \quad E_d > E > 2E_d, \quad (6.37)$$

其解为 $\nu(E) = CE$. 常数 C 可由条件 $\nu(2E_d) = 1$ 定出, 使和 $E \leq 2E_d$ 的解匹配, 因此总的结果可以表示为

$$\left. \begin{aligned} \nu(E) &= 1, & 0 < E < 2E_d; \\ \nu(E) &= \frac{E}{2E_d}, & 2E_d < E < E_i; \\ \nu(E) &= \frac{E_i}{2E_d}, & E > E_i. \end{aligned} \right\} \quad (6.38)$$

结果表示在图 6.13 中, 在图上也示出了塞兹与哈里森 (W. A. Harrison) 所作的计算, 结果是大同小异的^[40].

在单位体积内辐照所产生的离位原子数 N_d 即可表示为

$$N_d = \phi t n_0 \sigma_d \bar{\nu}, \quad (6.39)$$

这里的 ϕ 为辐照粒子的通量密度, t 为辐照时间, n_0 为样品中单位体积中的原子数, σ_d 为产生离位碰撞的原子截面, $\bar{\nu}$ 为 ν 对于不同能量的初生原子所求出的平均值. 在中子辐照的情形, $\bar{\nu}$ 可以表示为 $\nu(\bar{T})$, 这里的 \bar{T} 表示初级碰撞中能量转移的平均

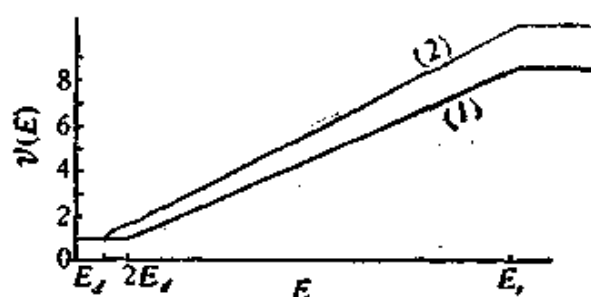


图 6.13 ν 值与能量的关系(理论计算值)。

1——金兴与皮斯的计算； 2——哈里森与惠兹的计算。

值。按照式 (6.19) 及式 (6.26)，加乘一校正因素 f

$$\bar{\nu} = f[2M_1M_2/(M_1 + M_2)^2]\bar{E}, \quad (6.40)$$

这里的 \bar{E} 为轰击中子的平均能量， f 为快中子散射中各向异性及非弹性散射所引起的校正因素，对于一般反应堆中子的轰击，通常取 f 值为 $2/3$ 。表 6.10 列出了对于反应堆辐照在几种元素内 $\bar{\nu}$ 值的理论计算值^[48]。由于理论计算是在一系列简化的假定基础上进行的，因此准确度是不高的。

表 6.10 中子辐照 $\bar{\nu}$ 值的理论计算值^[48]

元 素	原 子 量	$\bar{\nu}$
Fe	56	390
Cu	64	380
Ge	93	290
Au	197	140

§ 6.10 实验结果与理论计算值的比较

为了检验前述的辐照效应理论，就有必要将理论计算的一些基本参量和实验结果进行定量的比较。下面分述关于离位阈能及离位原子数这两方面所进行的工作：

(a) 离位阈能 克隆兹 (E. E. Klontz) 首先测定了 n 型锗的离位阈能。他用不同能量的电子对样品进行轰击，求出电导率随轰击电子能量变化的关系。典型的曲线显示在图 6.14 中^[49]。可以看出，当轰击能量较小时，曲线是水平的；当超过一定能量以后，电

导率有急骤的下降；转折点(0.63—0.65 兆电子伏)就相当于产生离位的临界能量，再根据式(6.18)即可求出锗的离位阈能为30 电子伏。后来洛孚斯基(J. J. Loferski)等测量了少数载流子的寿命随轰击能量的变化，得出低一些的阈能值(13 电子伏)，更接近于理论计算值(~ 10 电子伏)。科贝特(J. Corbett)对铜的离位阈能作了细致的测定^[52]，求出的数值为22 电子伏，和理论计算值基本符合。表 6.11 列出这方面工作的一些结果。

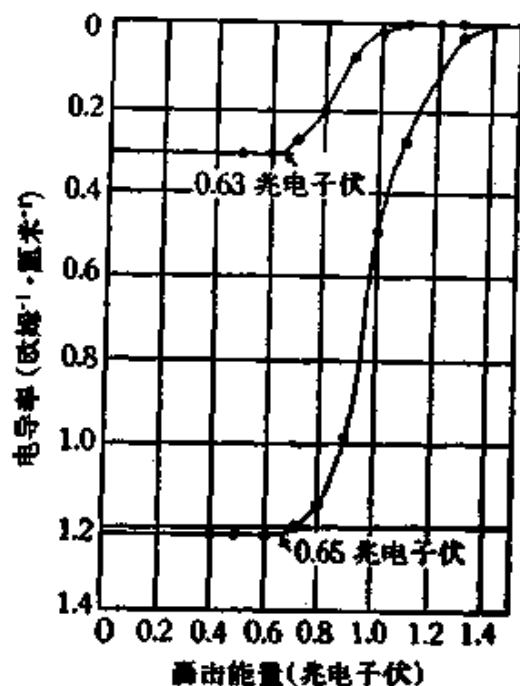


图 6.14 锗的电导率与轰击电子能量的关系。

(b) 离位原子数 辐照效应

应的另一基本参量就是一定剂量辐照所引起的离位原子数。根据实验定出的电阻变化与辐照剂量的关系(为了避免缺陷的回复，

表 6.11 离位阈能的实验值与理论值(根据文献[48]作了补充)

被轰击的材料	测量的性能	离位阈能(电子伏)		作 者
		实验值	理论值	
n 型锗 (77K)	电阻	30	~ 10	克隆兹
n 型锗(室温)	少数载流子的寿命	13		洛孚斯基等
p 型硅(室温)	同上	13		同上
锗				康
石墨		25		埃根 (Eggen)
铜 (10K)	电阻	22		科贝特等
铜	电阻	25		埃根等
铜			17—34	亨丁顿
铜			25—85	吉布森等
铁铜合金(铁原子离位)	饱和磁化率	27		登纳 (Denney)
Cu ₃ Au	有序度	10		德格达耳 (Dugdale)

实验应在低温进行,图 6.15 所示为在 12K 温度下,用 12 兆电子伏

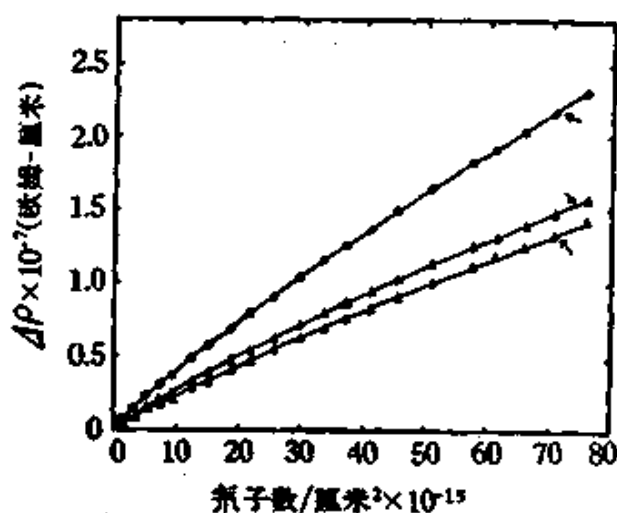


图 6.15 电阻率的增加与粒子累积通量的关系。

氘子轰击材料的实验结果), 求出曲线的初始斜率, 即可得到单位剂量粒子轰击所引起的电阻变化 (见表 6.12)。进一步要求出离位原子数, 必须知道每一对夫仑克耳缺陷所产生的电阻增量。目前还不能用实验方法直接定出这个参量, 只有依据理论计算值; 而从表 6.4 中可以看出理论计算值还存在有

相当大的分歧。塞兹与寇勒 (J. S. Koehler) 采用布拉特的计算值 2.7 微欧姆·厘米/夫仑克耳对, 求出铜受到 10^{17} 氘子/厘米² 轰

表 6.12 12 兆电子伏氘子辐照的数据 (12K)

样 品	Cu	Ag	Au
初始斜率微欧姆·厘米/ 10^{17} 氘/厘米 ²	0.221	0.263	0.379

击的离位原子数为 0.082%, 而根据级联过程理论算出的离位原子数为 0.43%, 比实验值大 5 倍。塞格认为每夫仑克耳缺陷对所引起体积变化的理论计算值比较可靠 (每%的缺陷引起的体积变化为 1.5%), 根据点阵参数随辐照剂量变化的关系 ($\Delta a/a = 3.8 \times 10^{-21}$ 氘子/厘米²), 定出离位原子数, 转过来求出每夫仑克耳对的电阻率增量为 3.6 微欧姆·厘米。塞格应用了这个参数从不同粒子对铜轰击的实验数据中求出了离位原子数, 并和级联过程理论算出的数值进行了比较^[59] (见表 6.13)。可以看出, 所有的理论值都大于实验值。在电子轰击的情形差别最小, 这是可以理解的, 因为轰击的能量比较低, 不足以引起级联过程, 而理论值与实验值的

表 6.13 离位原子数的理论值与实验值的比值^[53]

轰击粒子	离位原子数理论值与实验值之比值	实验值的作者
电 子	2.5	科贝特等
氦 子	6.3	西芒斯 (Simmons) 等
中 子	10—11	布莱威特 (Blewit) 等

差异可以用近邻的缺陷对的复合来解释。在中子辐照的情形下, 差异达十倍之多。这可能是过去的级联效应理论中包含了不少简化的假定, 影响到结果的可靠性。而比较确切的点阵模型还没有获得足够多的结果可以和实验值来比较。

§ 6.11 辐照后缺陷的回复

辐照在固体中所产生的缺陷, 可以通过热激活的运动过程而逐渐消失。因此辐照所产生的各种性能(例如电阻, 密度, 力学性能)变化, 在退火过程中产生回复的现象, 伴随着缺陷消失的同时, 有能量释放出来。确定回复过程的温度范围及其激活能, 可以帮助我们理解辐照所产生各种缺陷的物理本质。

在回复过程中, 缺陷的浓度 n , 随时间 t 的变化可以表示为

$$-\frac{dn}{dt} = \kappa f(n), \quad (6.41)$$

这里 $f(n)$ 为 n 的函数。如果

$$f(n) = n^r, \quad (6.42)$$

仿照化学反应, r 称为反应的阶数, 决定于缺陷消失的情况。 κ 为温度的函数, 通常可表示为

$$\kappa = \kappa_0 \exp(-U/kT), \quad (6.43)$$

U 为回复过程的激活能, κ_0 为时率常数。

由于电阻的测量最方便, 因此绝大多数的辐照回复实验采用了电阻法。为了确定反应的阶数和激活能, 可以在不同温度下进行等温退火曲线的测量。为了获得回复情况的全貌, 通常应用脉冲退火的方法, 将样品在不同温度保温同样时间, 求出等时退火曲线。图 6.16 所示为三种贵金属辐照后的等时退火曲线。

回复过程被研究得最细致的几种是面心立方结构的贵金属

(铜, 金, 银), 特别是铜。不同的辐照(电子, 氘子, 中子) 以及淬火及冷加工的实验结果可以相互参证。

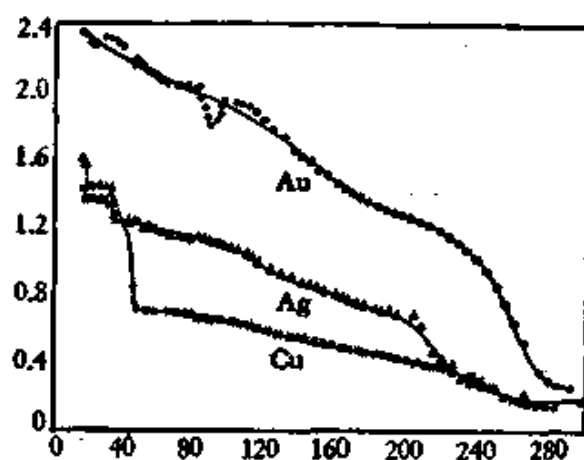


图 6.16 贵金属辐照后的等时回复曲线。

根据等时退火曲线，可以将贵金属的回复过程大致划分为五个阶段（参看图 6.16 及图 6.17）^[18]。

阶段 I 25—65 K

之间。在不同类型的辐照后的样品中都有这个阶段出现，在此阶段中，电阻大量回复。在电子辐照的情形，回复了 87.2%；在氘子辐照的情形，回复了 53%；在中子辐照的情形，回复了 40%。在冷加工的样品中没有这个阶段出现。

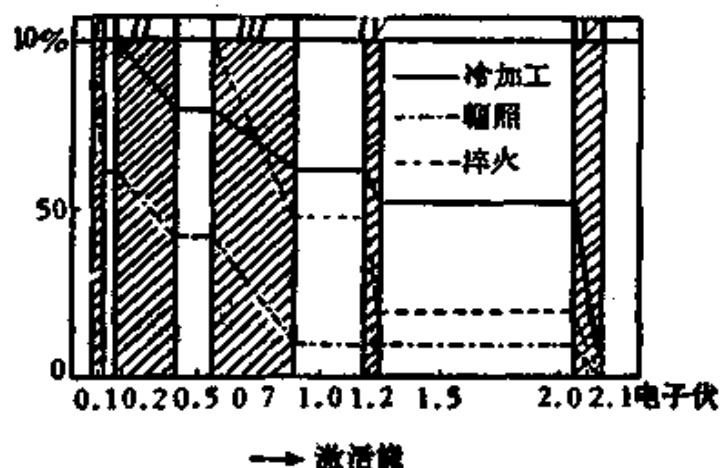


图 6.17 贵金属回复的五个阶段。

阶段 II 65—240K 之间，电阻作连续地下降。各种辐照的情况下都有这个阶段出现。回复是在广阔的温度范围内进行的，求不出单一的激活能。在电子辐照，这个阶段和样品的纯度有很大的关系。在很纯的样品中，这个阶段只回复了 1.8%，而在不纯的样品中，回复的百分率大为提高。

阶段 III 在 220—300K 之间, 是相当明显的回复阶段。具有单一的激活能 0.7 电子伏。

阶段 IV 在 100—200℃ 之间, 在一部分的冷加工及辐照的样品中出现, 但在有些辐照实验中没有观察到。

阶段 V 在 300—400℃ 之间, 辐照样品的力学性能完全回复, 在冷加工的样品中产生再结晶。激活能和自扩散的激活能相同。

更细致的实验表明阶段 I 还不是单一的^[54], 而是可分解为五个次阶段 (I_A, I_B, I_C, I_D, I_E), 分别定出激活能 (0.05—0.12 电子伏)(参看图 6.18)。

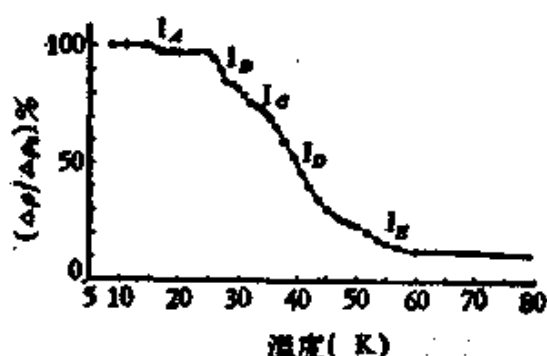


图 6.18 电子辐照的低温回复。

电子辐照所产生的缺陷比较单纯 (个别的空位及填隙原子), 关于阶段 I 的解释比较肯定。

I_A, I_B, I_C 三个次阶段相当于距离不同的近邻对的复合, 而潜能的测量也表明每一对复合的能量为 5.4 电子伏, 和形成一对夫仑克耳缺陷的能量相近。

I_D 与 I_E 被解释为填隙原子的自由迁移所引起的效应。前者对应于填隙原子与同对的空位的相关性的复合; 而后者对应于与其他空位的非相关性的复合。阶段 II 对应于填隙原子聚集成团, 而第 III 阶段则对应于空位的迁移, 从而使填隙原子集团消失。第 III 阶段测出的激活能在数值上也和空位移动的激活能一致(参看表 6.6)^[55]。

附录 6-I 经典的碰撞理论^[55]

1. 弹性碰撞中的能量转移 处理粒子的弹性碰撞问题, 采用质心坐标系最为简便。图 6.19 表示了一个质量为 M_1 的粒子, 以初速 V_0 撞向一初始为静止的粒子(质量为 M_2)。系统的质心

就以速率 $V' = M_1 V_0 / (M_1 + M_2)$ 向右运动。在质心坐标系中，质量为 M_1 及 M_2 的粒子朝向质心运动的速率分别为

$$V'' = V_0 - V' = \frac{M_2 V_0}{M_1 + M_2} \quad (6.44)$$

及 V' 。在碰撞以后，根据动量及能量守恒的关系，在质心坐标系中，两粒子反向运动，但速率的绝对值仍保持不变。 χ 角表示质心坐标中散射的偏向角，则根据矢量合成的几何关系，可求出实验室坐标系中碰撞后的速率 V_1 , V_2 ，及偏向角 θ_1 , θ_2 (见图 6.19)

$$\left. \begin{aligned} \tan \theta_1 &= \frac{M_2 \sin \chi}{M_1 + M_2 \cos \chi}, \quad \theta_2 = \frac{\pi - \chi}{2}, \\ V_1 &= \frac{\sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1 M_2 \cos \chi}}{M_1 + M_2} V_0, \\ V_2 &= \frac{2M_1 V_0}{M_1 + M_2} \sin \frac{\chi}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (6.45)$$

V_2 的极大值出现于 $\chi = \pi$ ，即正碰的情形。因此，动能转移的极

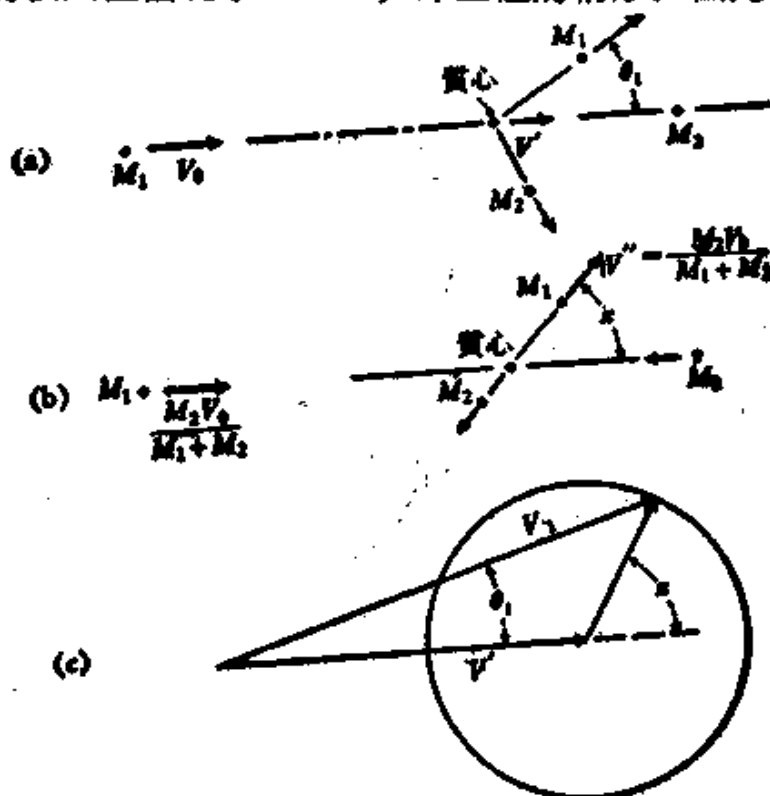


图 6.19 粒子的弹性碰撞。

(a) 实验室坐标系；(b) 质心坐标系；(c) 矢量合成的关系。

大值就等于

$$T_m = \frac{1}{2} M_2 V_1^2 = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E, \quad (6.46)$$

这里的 E 为撞入粒子的初始动能。

2. 散射截面的计算 设有一束粒子以相同的初速投向散射中心，各个粒子以不同的角度 χ 被散射，令 dN 表示单位时间内散射角为 χ 到 $\chi + d\chi$ 间的粒子数，则散射的微分截面被定义为

$$d\sigma = \frac{dN}{n}, \quad (6.47)$$

这里 n 表示单位截面积在单位时间内的投射粒子数。 $d\sigma$ 具有面积的量纲。

在经典力学中，散射角 χ 是碰撞参数 ρ 的函数（碰撞参数表示粒子未散射而直进时的轨道与散射中心的最短距离，参看图 6.20）。因此， χ 到 $\chi + d\chi$ 的间隔将和 $\rho(\chi)$ 到 $\rho(\chi) + d\rho(\chi)$ 相对应。在 $\rho(\chi)$ 到 $\rho(\chi) + d\rho(\chi)$ 间隔中的粒子数显然等于 $dN =$

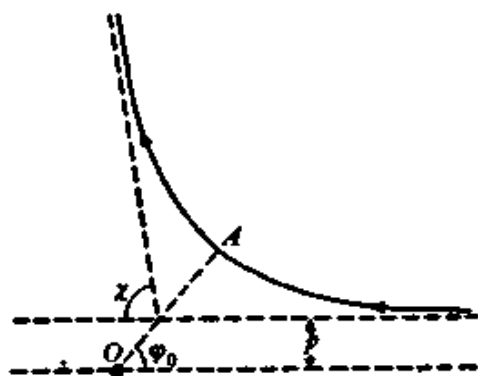


图 6.20 粒子的散射。

$2\pi\rho d\rho \cdot n$ ，因此散射的微分截面等于

$$d\sigma = 2\pi\rho d\rho. \quad (6.48)$$

微分截面与散射角的关系就可表示为

$$d\sigma = 2\pi\rho(\chi) \left| \frac{d\rho(\chi)}{d\chi} \right| d\chi. \quad (6.49)$$

计算散射截面即可归结为寻找 ρ 与 χ 的函数关系。当粒子在散射场中势能 U 已知的情况下，这可以根据经典力学的轨道计算来求出。

(a) 刚球型散射 设投射的粒子及散射中心都是刚球，半径分别用 a_1, a_2 来表示。在碰撞时动量的转移是沿了两球接触瞬间球心联线的方向，因此

$$\rho = (a_1 + a_2) \sin \theta_2. \quad (6.50)$$

根据式(4.45)所表示的 θ_2 与 χ 角的关系, 即得

$$\rho = (a_1 + a_2) \sin \frac{\pi - \chi}{2} = (a_1 + a_2) \cos \frac{\chi}{2}. \quad (6.51)$$

代入式(6.49), 可求出

$$d\sigma = \frac{\pi(a_1 + a_2)^2}{2} \sin \chi d\chi. \quad (6.52)$$

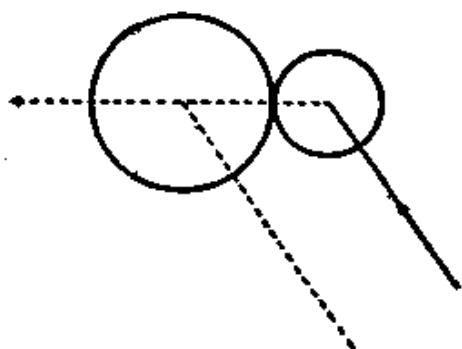


图 6.21 刚球间的碰撞.

按照式(6.45), 一般情形下的能量转移值为

$$T = T_m \sin^2 \frac{\chi}{2}, \quad (6.53)$$

因而

$$dT = \frac{1}{2} T_m \sin \chi d\chi. \quad (6.54)$$

用转移能量的间隔来表示微分截面,

$$d\sigma = \pi(a_1 + a_2)^2 \frac{dT}{T_m}. \quad (6.55)$$

积分出来, 就可以求出总散射截面为 $\pi(a_1 + a_2)^2$.

(b) 库仑散射 设入射粒子的电荷为 $Z_1 e$, 库仑场的电荷为 $Z_2 e$, 则在库仑场中运动电荷的势能为

$$U = Z_1 Z_2 \frac{e^2}{r}. \quad (6.56)$$

采用极坐标 (r, α) 表示能量守恒与角动量守恒定律, 并消去时间后, 可求出轨道微分方程

$$\left(\frac{dr}{d\alpha}\right)^2 + r^2 + \frac{br^3}{2\rho^2} = \frac{r}{\rho}. \quad (6.57)$$

参数 b 相当于散射最近距离

$$\frac{Z_1 Z_2 e^2}{b} = \frac{1}{2} \mu V_{12}^2, \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}. \quad (6.58)$$

从式 (6.57) 可解出 ρ 与 χ 的关系

$$\rho = \frac{b}{2} \cot \frac{\chi}{2}, \quad (6.59)$$

代入式 (6.49), 求出

$$d\sigma = \frac{\pi b^2}{2} \cdot \frac{\cos \frac{\chi}{2}}{\sin^3 \frac{\chi}{2}} d\chi. \quad (6.60)$$

再利用式 (6.53) 及式 (6.54), 可求出

$$d\sigma = \frac{\pi b^2}{2} \cdot \frac{T_\infty dT}{T^2}. \quad (6.61)$$

第七章 位 错

I 位错的几何性质

位错具有比较复杂的几何组态,而其易于运动的特征又是由它的几何组态所决定的。因此,要理解位错这种晶体缺陷的基本性质,首先应该搞清楚它的几何性质^[24]。本节将首先介绍两种最简单的位错组态(刃型位错与螺型位错)以及两种最基本的运动方式(滑移与攀移);然后对于位错的几何学与运动学特征作一般的讨论;并且从几何性质的角度简略地说明位错与范性形变的关系。

§ 7.1 刃型位错与螺型位错

两种最简单的位错组态就是刃型位错与螺型位错。设想晶体内有一个原子平面中断在晶体内部,这个原子平面中断处的边沿就是一个刃型位错(见图 7.1(b))。在螺型位错的情形,则并没有原子平面中断在晶体内部;而是原子面沿了一根轴线(近似地和原子面相垂直),盘旋上升。每绕轴线一周,原子面上升一个晶面间距。在中央轴线处即为一螺型位错(见图 7.1(c))。

在图 7.2 中分别示出了简单立方晶体中沿 x 轴的刃型及螺型

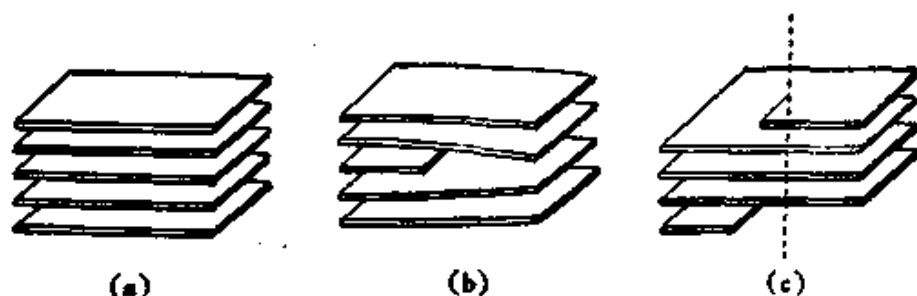


图 7.1 晶体中原子面的示意图。

(a) 完整晶体; (b) 含有刃型位错的晶体; (c) 含有螺型位错的晶体。

位错周围原子排列的情况：从图中可以看出，在距离位错线较远的地区，除了弹性畸变外，原子的排列接近于完整的晶体；但是在位错线的近旁，则产生了严重的原子错排情况。

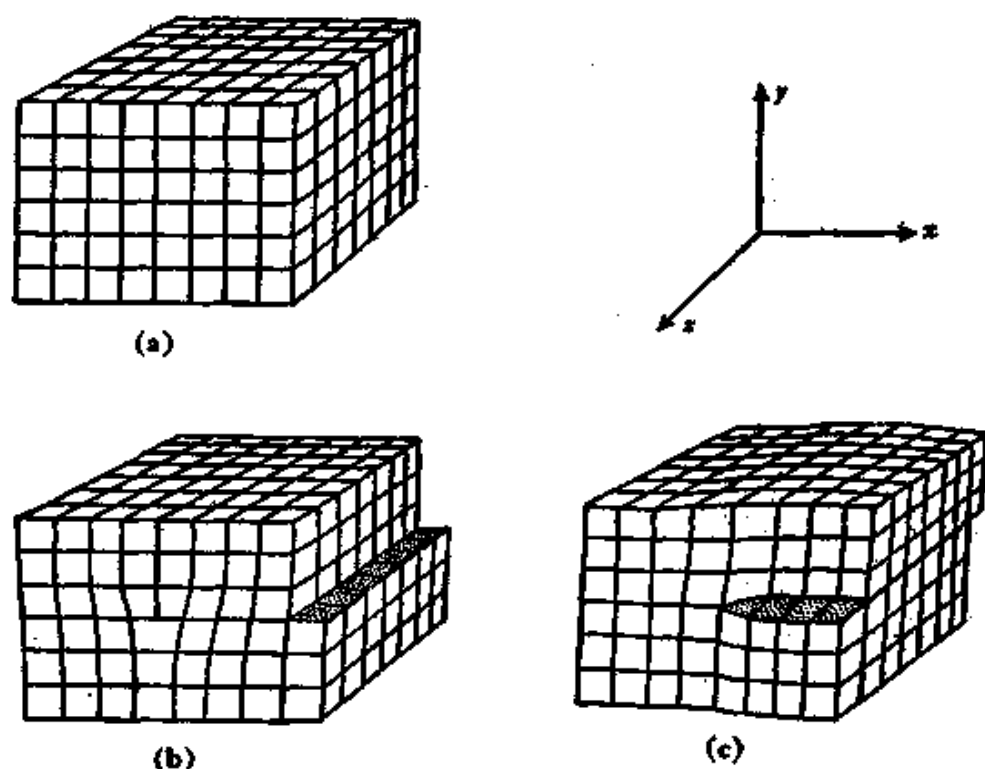


图 7.2 刃型位错与螺型位错的原子组态。

(a) 完整晶体；(b) 含有刃型位错的晶体；(c) 含有螺型位错的晶体。

近年来，利用高分辨本领的电子显微镜作薄膜透射法观察，可以将晶体中晶面间距 2 埃以下的点阵平面分辨出来。门特首先摄取了铂酞花青 (platinum phthalocyanine) 晶体中刃型位错的图象^[44] (见图 7.3)，谬勒及布兰登 (D. G. Brandon) 等用场离子显微术也直接观察到金属中位错的图象^[42,56]。

对于汽相或溶液中生长出的晶体表面进行的观察，获得了螺型位错存在的实验证据。螺型位错在晶体表面露头处形成一个台阶。如果原子沿了台阶一列一列地填上去，台阶永远不会消失。夫兰克指出，晶体表面上螺型位错的台阶的存在，避免了晶体成长过程中在光滑晶面上成核的困难。因此可以解释为什么晶体成长

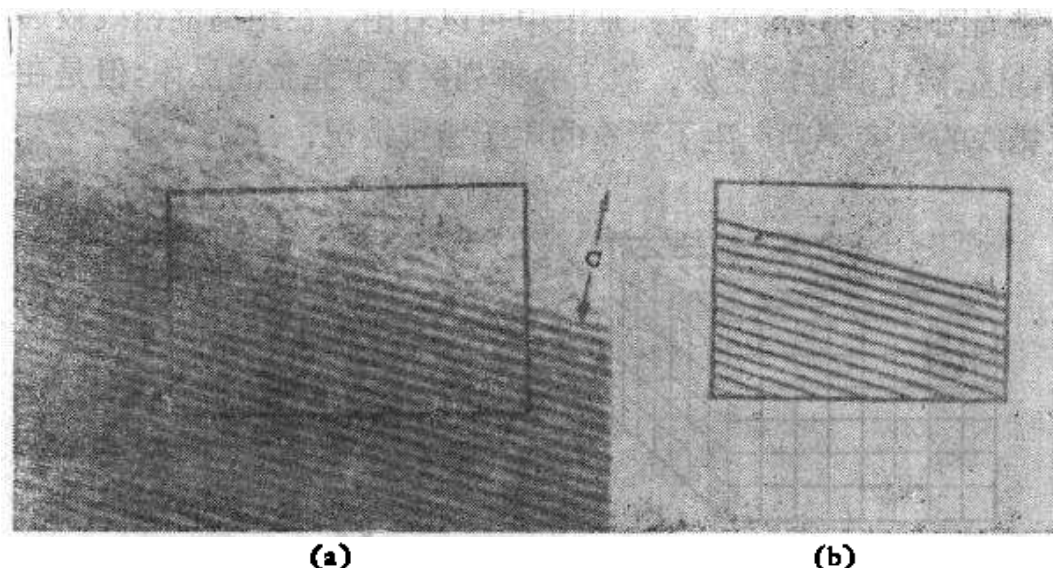


图 7.3 铅钛花青中的刃型位错^[14] ($\times 1,100,000$).

(a) 电子显微镜照片; (b) 原子平面的示意图.

可以在很低的过饱和度 (1% 左右) 下进行 (根据光滑晶面成核理论估计, 所需要的过饱和度应达 50%). 按照这种成长机制, 晶体的表面将出现螺旋式的台阶, 图 7.4 中的 P 点为一螺型位错的露头处, 如果原子沿了台阶均匀地填补上去, 经历图中所示的程序, 即可形成螺旋式的台阶或金字塔形的台阶 (参看图 7.5). 利用光学显微镜或电子显微镜, 可以在许多晶体表面上发现这种形式的螺旋线^[15], 图 7.6 所示就是一个典型的例子. 测出的台阶高度正好等于晶面间距或其整数倍数, 这表明螺旋台阶的确是螺型位错露头的地方.

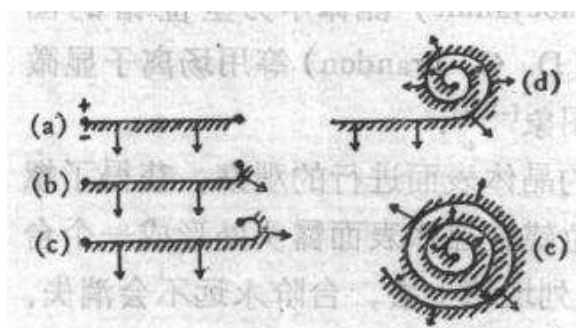


图 7.4 螺型位错露头处形成生长螺旋的过程.

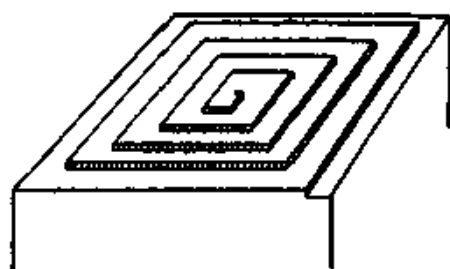


图 7.5 螺旋生长机制所形成的金字塔形台阶.

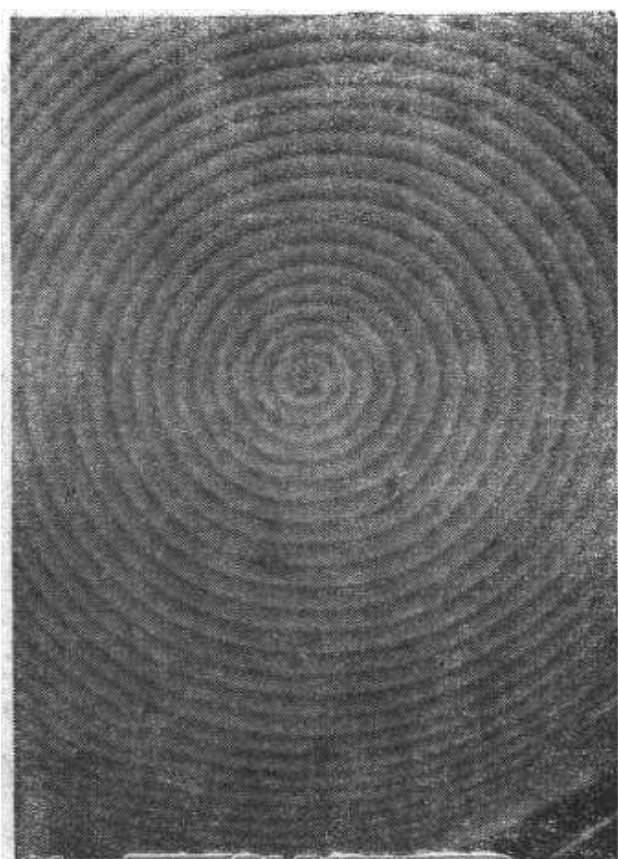


图 7.6 SiC 的生长螺旋线($\times 200$).

§ 7.2 位错的滑移与攀移

察视图 7.2(b), (c), 我们可以将位错线理解为晶体中已经滑移的区域与没有滑移的区域的分界线。在图 7.2(b) 所示的刃型位错的情形, 可以设想为位错线右侧的晶体沿 xz 平面分为两半, 而下半晶体相对于上半作了位移 \mathbf{b} (\mathbf{b} 相当于沿 x 轴的最短的点阵平移矢量); 在图 7.2(c) 所示的螺型位错的情形, 相对位移矢量 \mathbf{b} 是沿了 z 轴的方向。在两种情形中, 已经滑移的区域与没有滑移区域的界线就是位错线。位移矢量与位错线所确定的平面称为滑移面。刃型位错的位移矢量垂直于位错线, 因此滑移面是完全确定的, 它和附加的半原子平面垂直。螺型位错的位移矢量平行于位错线, 因此不具有确定的滑移面, 任一包含有位错线的平面都可以作为滑移面。

在一般情形下, 滑移区域的界线不一定是直线。例如图 7.7

所示的情形(相对位移矢量为 \mathbf{b})，滑移区的界线 AC 是一曲线，

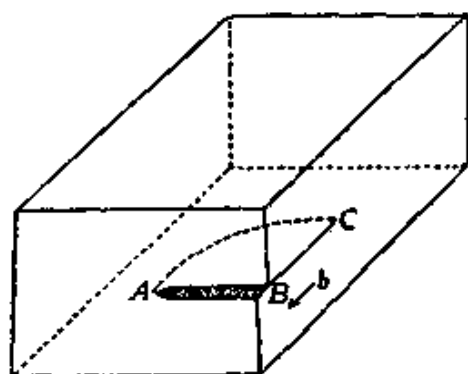


图 7.7 混合型位错。

相当于更一般化的位错线。曲线在 A 处和 \mathbf{b} 平行,是纯螺型的;在 C 处则和 \mathbf{b} 垂直,为纯刃型的;在中间的部分,位错线和滑移矢量的夹角 ϕ 可以为 0 到 $\pi/2$ 间的任意值,相当于混合型的位错。

位错既然相当于晶体中已经滑移的区域与未滑移区域的界线,位错线沿了滑移面运动即相当于晶体中滑移的逐步发展,晶体的范性形变遂可以通过位错的运动来实现。图 7.9(a) 示出了正刃型位错(附加的半原子平面在上部,通常以符号 \perp 表示)在切应力作用下的运动;在图 7.9(b) 示出了同样的切应力作用下负刃型位错(附加的半原子平面在下半,以符号 \neg 表示)的运动。运动的方向在两种情形正好相反,但产生完全相同的形变。图 7.10 示出了螺型位错在切应力下的滑移。

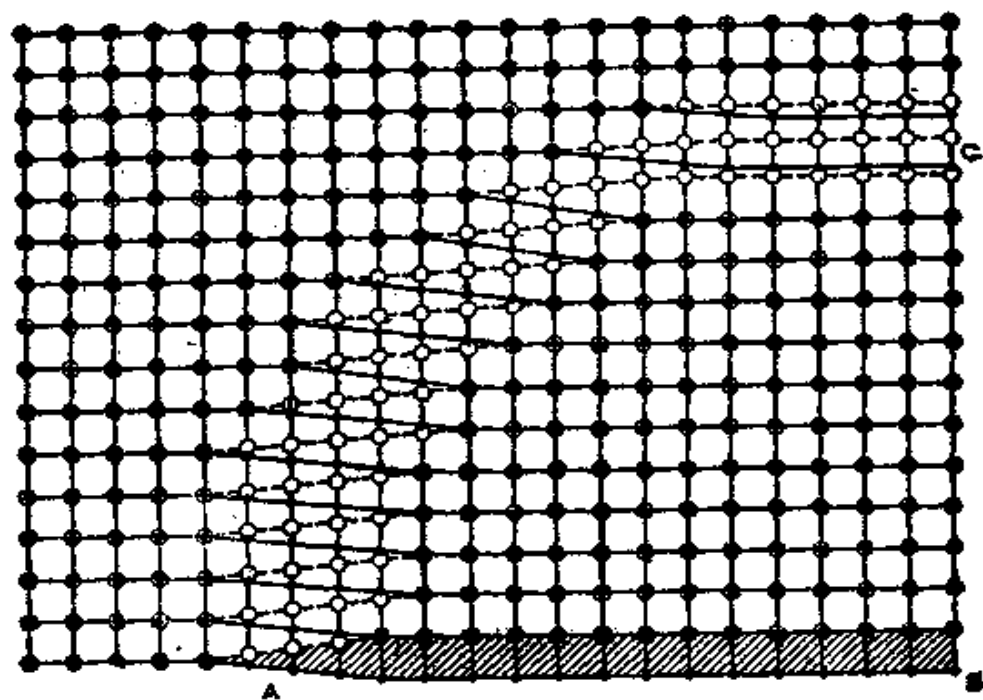


图 7.8 混合型位错的原子排列。

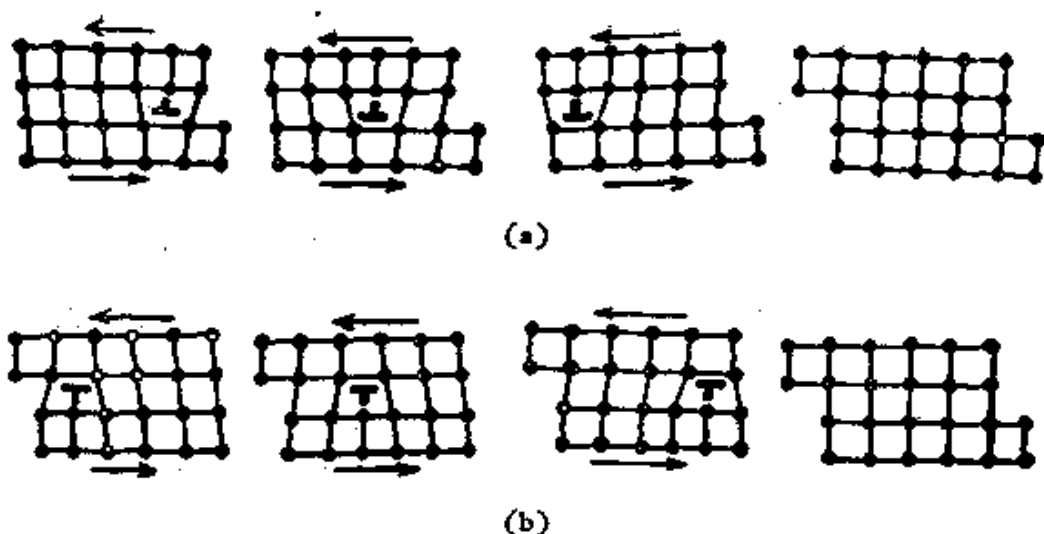


图 7.9 刃型位错的滑移。
(a) 正刃型；(b) 负刃型。

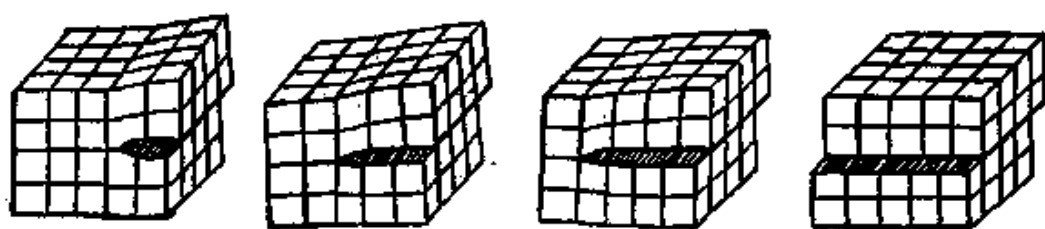


图 7.10 螺型位错的滑移。

如果晶体的范性形变不是通过位错的运动来实现，而要依靠两半晶体作刚性的位移，显然是比较困难的。图 7.11(a) 示出了理想晶体中沿滑移面 CD 的势能曲线⁽⁶⁾，在 CD 线上的势能可近似地用余弦函数来表示

$$U = -2A \cos(2\pi x/b), \quad (7.1)$$

式中 b 为相邻两原子的间距， $2A$ 为振幅。作刚性滑移时，各原子要同时翻越高为 $4A$ 的势垒。如果晶体包含一位错（设想为一垂直于图面的刃型位错，见图 7.11(b)），设在滑移面下方的原子列中的 N 个原子和上方原子列中 $N+1$ 个原子相对应。此时，沿 CD 的势能可以用下式来表示：

$$U = -A \cos 2\pi \frac{x}{b} \left(\frac{N+1}{N + \frac{1}{2}} \right) - A \cos 2\pi \frac{b}{x} \left(\frac{N}{N + \frac{1}{2}} \right). \quad (7.2)$$

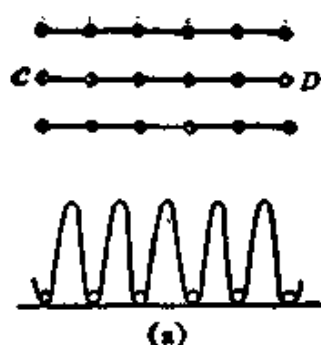


图 7.11(a) 理想晶体中的原子排列及其势能曲线。

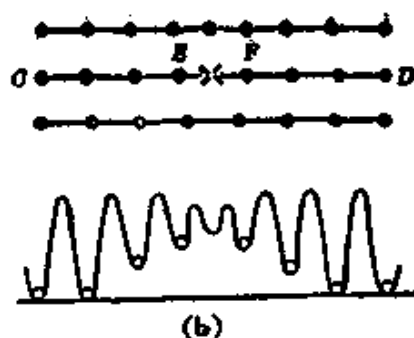


图 7.11(b) 晶体中存在位错的原子排列及其势能曲线。

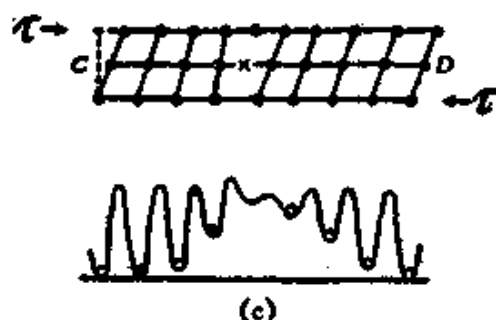
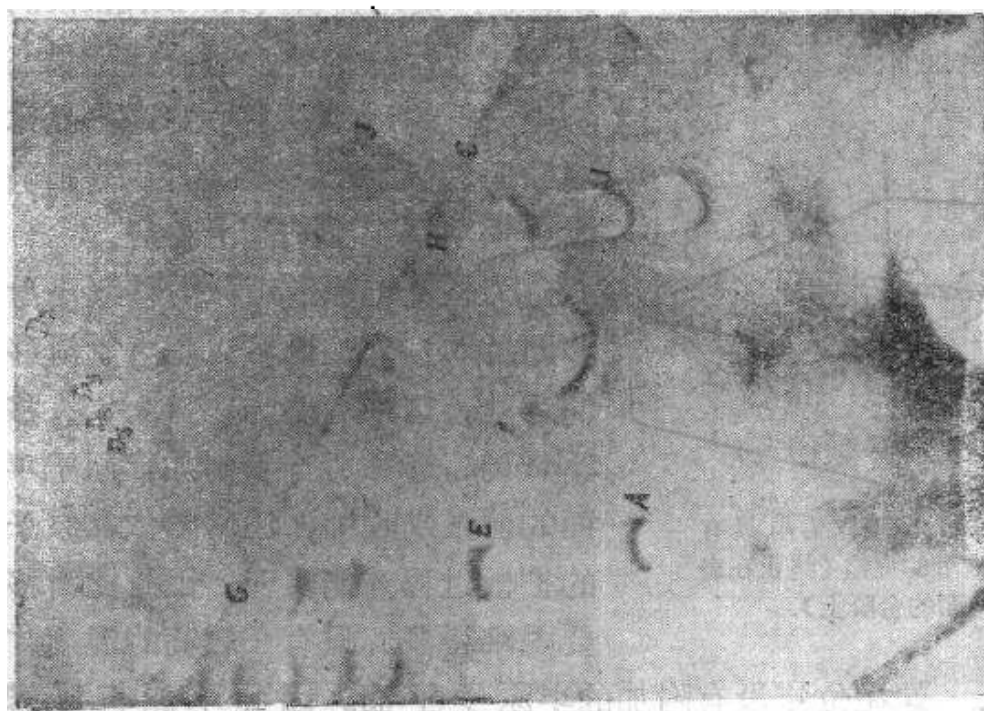


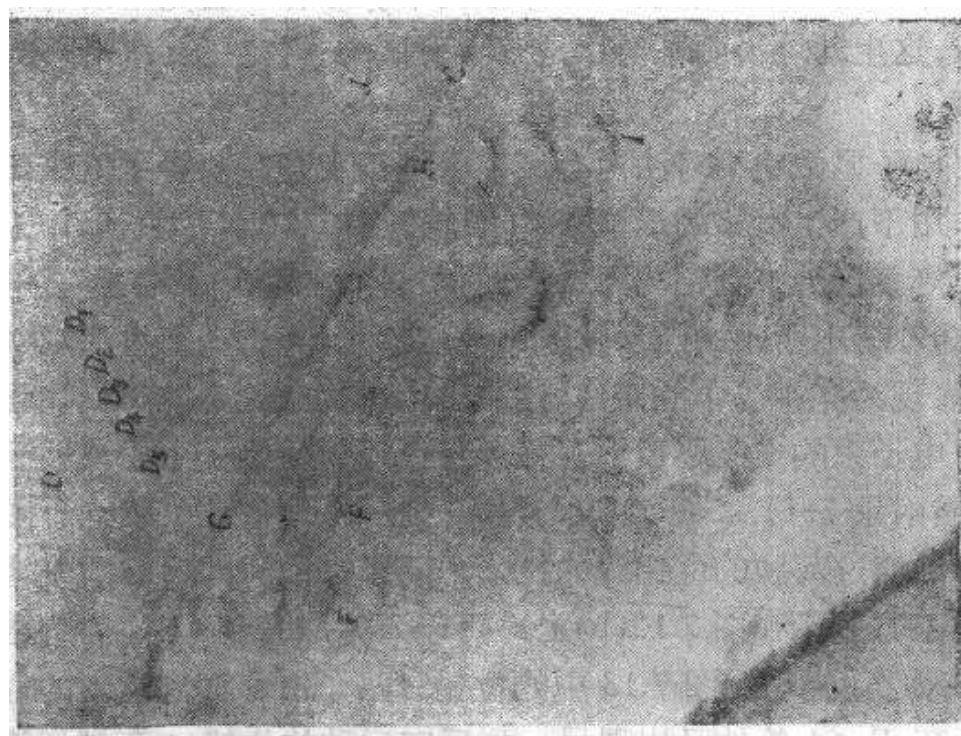
图 7.11(c) 在切应力作用下存在位错的晶体中的原子排列及其势能曲线。

势能曲线出现拍频的情况,使位错中心附近的势能曲线压低(见图 7.11(b))。在中间的势能极小处原子是空缺的。如果 P 处的原子跃入空位,别处的势能曲线稍为作一些调整,就相当于位错向右滑移 b 距离。这样的过程显然要比理想晶体中原子列作刚性滑移要容易得多。如果加一切应力 τ ,使势能曲线变为不对称的,则有利于位错作定向的滑移(见图 7.11(c))。因此从以上直观的考虑,就明确地指出了位错沿滑移面的易动性。由于晶体中存在着位错,将使产生范性形变所需的临界切应力大大地低于理想的完整晶体。更定量的计算将在以后讨论(参看 § 7.14)。

此外,也有直接的实验证明晶体的滑移是逐步实现的,而不是整块晶体作刚性的滑移。陈能宽等用电影照相法研究了铝单晶中滑移线的形成和发展^[59]。他们看到在形变开始时,滑移线是细而短的。然后在中部变宽,两端伸长,甚至于当在中部已经显著变宽



(a)



(b)

图 7.12 不锈钢中位错运动的直接观察 ($\times 34,000$; 取自电子显微镜衍射法拍摄的电影)。

时(相当于已经滑过了几千个原子距离),滑移线的两端还没有扫过整个晶体。这个事实表明在晶体形变中,还存在着完全没有滑移的区域,这生动地说明了滑移是逐步发展的,肯定了晶体滑移的位错机制。

利用电子显微镜衍衬法对金属薄膜进行观察,获得了位错在切应力作用下产生滑移的最直接的证据。赫许与惠兰(M. J. Whelan)等直接观察到铝与不锈钢中位错的滑移,并拍摄了电影^[59]。图 7.12 中所示的照片就取自他们的工作。在衍衬法观察中,位错表现为亮视场中的暗线,这是由位错周围的点阵畸变加强了晶体对电子束的布喇格反射,相应地使透射的电子束的减弱而成象(参看附录 7-I)。图 7.12(a) 中 I 处的一群位错就相当于图 7.13 中所示穿过薄膜的位错线的投影。隔了一段时间后,同一地区位错的组态显示在图 7.12(b)上。可以清楚地看到, I 处的位错都向前移动了,相当于图 7.13 中的位错 A 沿了滑移面到达新的位置 B;而在 E, A 等处又出现另一群反向运动的位错。在赫许等的工作中,作用于位错的应力是通过加强照射的电子束强度来获得的,产生应力的原因还不十分清楚。贝尔盖曾(A. Berghezen)等对电子显微镜观察的铝样品进行了直接的拉伸,也看到位错在

切应力下的运动,当位错跑出晶体表面后,就形成了表面的台阶,相当于金相观察中看到的滑移线。

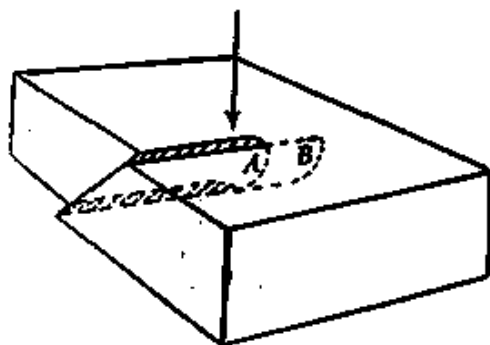


图 7.13 薄膜样品中具有螺型分量的位错(终止在表面的台阶上)。

刃型位错除了可以滑移(沿滑移面运动)外,还可以垂直于滑移面运动,这种运动方式称为攀移(climb)。攀移相当于附加半原子平面的伸张或收缩,通常要依靠原子的扩散过程才能实现,因此比滑移要困难得多。只有在较高的温度才

能实现。螺型位错没有附加的半原子平面,因此不能直接攀移。

§ 7.3 位错的普遍定义与伯格斯矢量

在直观的基础上对位错的几何性质有了一定的了解以后，我们在这里可以对于位错作出更普遍的定义。晶体中任意的位错可以按照下述的操作来形成：

设想将晶体沿一任意面 S 剖开，将 S 面的两岸 S_1 及 S_2 作一刚性的相对位移 \mathbf{b} ， \mathbf{b} 可以是晶体中任意的点阵平移矢量（ \mathbf{b} 不为点阵矢量的情形，将在第 V 节中讨论）。经过这样的操作以后，如果 \mathbf{b} 不平行于 S 面，有些地方将产生原子的重迭或留出了空隙，设想将重叠的原子去掉，空隙处按照原来晶格排列的方式将原子填补起来。由于 \mathbf{b} 是点阵矢量，这样一来， S 面上就不留下任何痕迹。但是晶体中已经相对位移的区域和没有作相对位移区域的分界线（即 S 面的周界）上，形成原子错排的情况，就是位错线。 \mathbf{b} 矢量称为伯格斯矢量（Burgers vector），它是位错特征的标志，其数值 b 称为位错的强度。

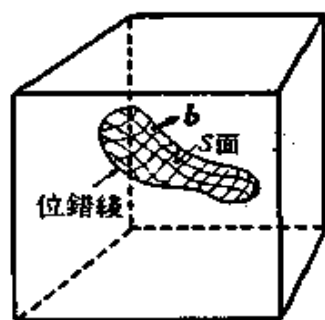


图 7.14 一般形式的位错圈

关于位错的定义，有下列几点值得注意：

(1) 上述的想象操作不仅是用来说明位错的特征，也模拟了晶体内产生位错的实际过程。关于晶体中位错生成的过程，以后将另作讨论。

(2) 对于同一根位错线，可以有不同的 S 面，只要伯格斯矢量相同，形成的就是相同的位错。因此，决定位错特征的是伯格斯矢量，而不是 S 面的具体位置。可以任选以位错线为周界的任意面作为上述操作中的 S 面。例如对于沿 z 轴的刃型位错，我们选 xz 面为 S 面，或选 yz 面为 S 面，得出的结果都是相同的。

(3) 实际上，从已经作过相对位移的区域到未作相对位移的区域间的过渡不可能是突变式的，否则将产生无法填补的裂缝。因此，严格说来， S 面两岸的刚性位移不能一直保持到周界，而应

在接近于周界处逐渐下降到等于零。准确地说，位错不是一根线而是具有一定宽度 w 的区域。在这个区域内相对位移从 \mathbf{b} 下降到等于零。只是由于宽度比起它的长度要小得多，所以可以近似地看为一根线(这个问题将在§7.14中仔细讨论)。

(4) 上述定义中对伯格矢量 \mathbf{b} 的方向规定得还不够明确。因为如果 S_1 不动， S_2 作位移 \mathbf{b} ；或 S_2 不动， S_1 作位移 $-\mathbf{b}$ ，得出的是相同的位错。为明确起见，可以选定位错线的一个顺向作为位错线的方向，用右螺旋关系就确定了 S 面的法线方向，设 S 面的法线自 S_1 穿向 S_2 ，而伯格矢量 \mathbf{b} 规定为 S_1 岸相对于 S_2 岸的位移。这样，当位错线的方向选定后，伯格矢量就唯一地确定。这里对伯格矢量方向的规定是按照夫兰克所确定的惯例^[60]和瑞德在其“晶体中位错”(Dislocations in Crystals)一书中采用的正好相反^[41]。

位错线既然被定义为 S 面的周界，位错必然形成闭合的回路或终止在晶体的表面上，决不能终止在晶体内部。因此，一根不分岔的位错线各个部分的伯格矢量一定是相同的。

伯格矢量既然是位错特征的标志，确定它也不一定要依靠上述的想象的操作。为此，夫兰克提出如下的方案^[60]，即将含有位错的实际晶体和一理想的完整晶体相比较：设从实际晶体中任意一个原子出发，围绕位错线作一闭合的回路，回路的每一步都联结了相邻的原子，作回路时应注意避开位错线附近原子严重错排的区域(这样的回路称为伯格回路)。在完整晶体中作出对应的路线，路线的终点将不和起点相重合，自路线终点引向起点的矢量即为伯格矢量。为了使这样定出的伯格矢量和前面规定的一致起见，伯格回路的方向应和位错线的方向成右螺旋关系。图7.15示出了应用对应路线方法确定一正刃型位错的伯格矢量的例子。设图中位错线的方向自纸面伸出，定出的伯格矢量和位错线正好垂直。这样定出的伯格矢量和回路起点的选择无关，也和回路所经历的具体途径(只需绕了位错一周)无关，如果所选择回路不围绕位错，则理想晶体中对应的路线也是闭合的，用类

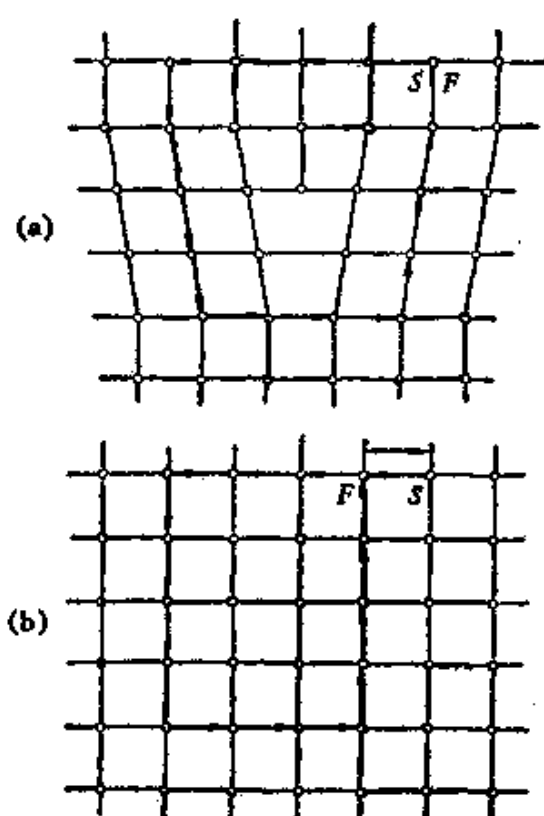


图 7.15 定义伯格斯矢量的夫兰克方案。

(a) 实际晶体; (b) 参考晶体。

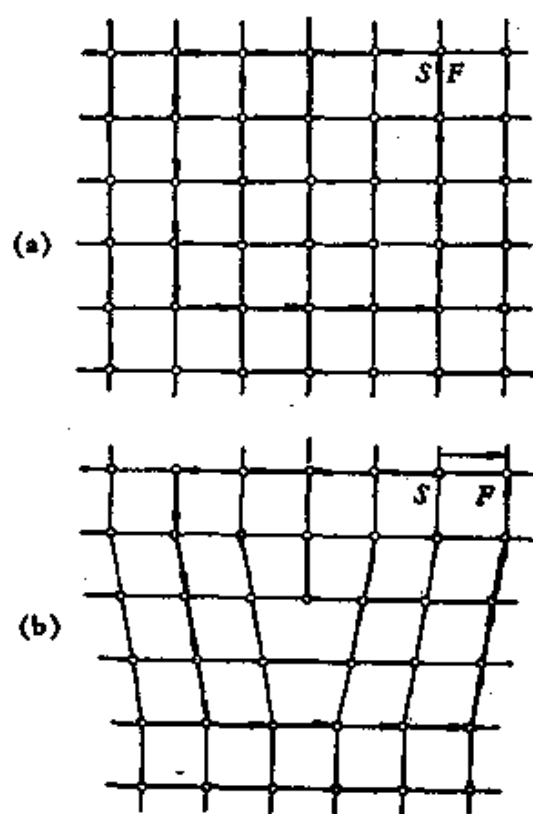


图 7.16 定义伯格斯矢量的瑞德方案。

(a) 完整的参考晶体; (b) 实际晶体。

似的方法可以定出螺型位错的伯格斯矢量是平行于位错线的。

我们也可以采用另一方案, (瑞德方案)来定义位错的伯格斯矢量^[21]: 即在完整晶体中作闭合回路, 然后再在实际晶体中作出环绕位错的不闭合的回路, 将从起点到终点的缺口矢量定义为伯格斯矢量(图 7.16)。由于实际晶体中存在畸变, 因而这样定出的伯格斯矢量将随回路的不同选择而略有差异。严格说来, 应称之为局域伯格斯矢量, 以区别于前一方案定义出的真正伯格斯矢量; 但由于两者相差甚微, 通常可以忽略不计。应该指出, 后一方案直截了当地显示了位错的存在所引起的效应, 在实际应用中比较方便。

在本书中, 回路法的夫兰克方案是采用终点到起点的矢量来定义伯格斯矢量, 而瑞德方案却颠倒过来, 是用起点到终点的矢量

来定义。这样做主要是为了可以将两种方案并行不悖，而不致于引起伯格斯矢量在方向上发生混淆。当然，在瑞德的原书中是采用另一惯例^[21]。

掌握回路法对伯格斯矢量的定义，对于我们分析位错的具体问题是大有助益的。通常我们对于纯刃型或纯螺型位错的原子组态了解得比较清楚，而对于混合型位错的原子组态，则由于画图困难，会感到束手无策，这就需要推理来帮助了。例如设想一混合型直位错，其伯格斯矢量 \mathbf{b} 可以分解为螺型分量 \mathbf{b}_s 及刃型分量 \mathbf{b}_r ，我们绕位错线作回路推断：与此位错线正交的原子平面都变为螺距等于 b_s 的螺旋面，和螺型位错相似；而垂直于位错线来观测可以看和 \mathbf{b}_r 正交的原子平面中断在位错线上，和刃型位错相似。

上面已经讲到确定位错的伯格斯矢量的回路可以任意改变其形状，只要不触及位错线附近的原子严重错排区域，就不会影响所得的结果，也就是表明这些回路都是等效的。应用等效伯格斯回路的概念，即可论证伯格斯矢量的守恒定律：

(1) 一根位错线不可能中止在晶体内部，它必然构成闭合的圈或中止在晶体表面上。沿一根不分岔的位错线的伯格斯矢量是

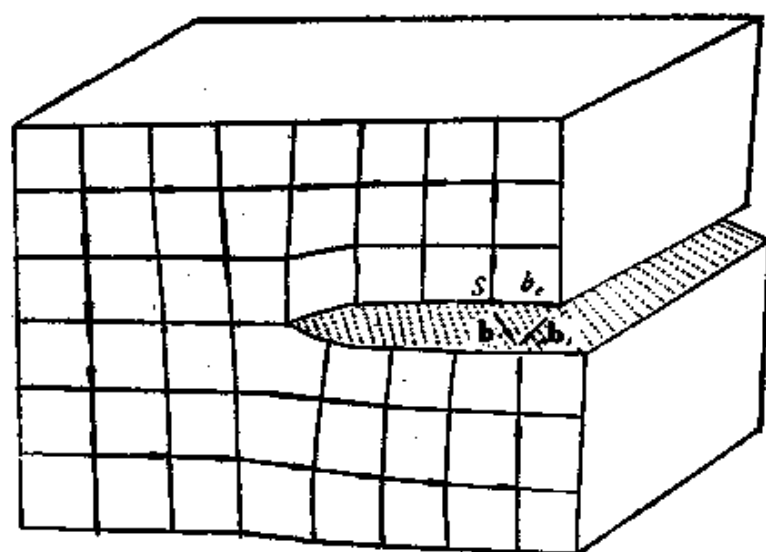


图 7.17 根据回路法来推导混合型位错的原子图象特征。

守恒的,具有相同的大小和方向。

(2) 如果数根位错线相交于一点(被称为位错的节点), 朝向节点的各位错线的伯格斯矢量的总和等于流出节点各位错线伯格斯矢量的总和。要证明这一点, 从图 7.18 中可以看出, B_1 回路和 B_2 回等效, 而且可以通过连续形变, 分别和围绕两分岔位错线的两回路等效。所以 $b_1 = b_2 + b_3$ 。如果所有的位错线的方向都是从节点发出, 则上述的关系可以改写为各分支伯格斯矢量的总和为零, 即

$$\sum_i b_i = 0. \quad (7.3)$$

在形式上, 伯格斯矢量守恒定律和稳定电流的基尔霍夫 (Kirchoff) 定律相似, 差异处在于电流是标量, 而 b 是矢量。

用衍衬法观察位错, 可能测定位错线的伯格斯矢量。对于位错线节点处伯格斯矢量关系的直接测定^[61], 证实了伯格斯矢量的守恒定律。

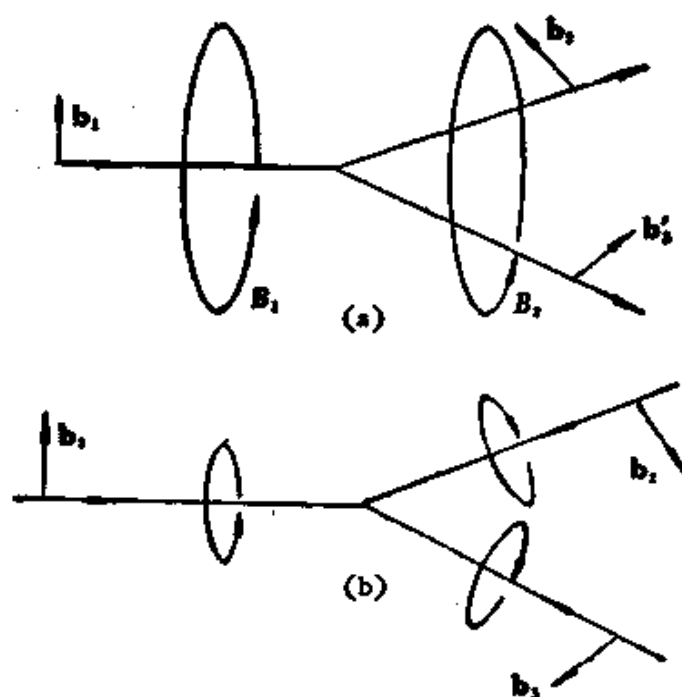


图 7.18 伯格斯矢量的守恒定律。

§ 7.4 位错的一般运动学特征

根据 § 7.3 中对伯格斯矢量 \mathbf{b} 的普遍定义，我们可以对位错的一般运动学特征作一讨论。首先可以证明，当位错在晶体作任意运动，位错线所掠过面的两岸的原子都产生了相对位移 \mathbf{b} 。设想晶体中的任意闭合回路 C 。现有一位错线切入该回路，回路就在切入点脱开，切入点两岸产生相对位移 \mathbf{b} 。严格来说，这里的 \mathbf{b} 是指局域伯格斯矢量。

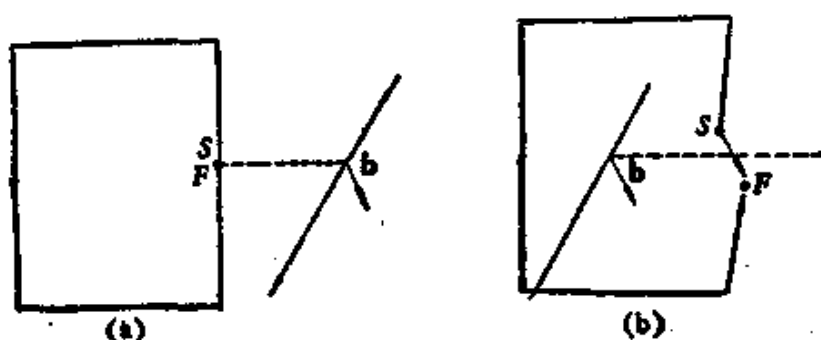


图 7.19 位错运动所引起的晶体中相对位移。

(a) 位错进入前的闭合回路；(b) 位错进入回路后所引起的相对位移。

根据上面的讨论可以看出，如果位错线所掠过的面平行于 \mathbf{b} ，这样的运动称为保守运动或滑移。如果位错线掠过的面不和 \mathbf{b} 平行，则将使晶体的体积发生变化，产生空位或间隙原子，这种运动称为非保守运动或攀移。设位错所掠过的 S 面的法线矢量为 \mathbf{n} ，所引起体积的变化为

$$\Delta V = S \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}. \quad (7.4)$$

位错的伯格斯矢量与其线元 $d\mathbf{s}$ 所确定的面即为该位错的滑移面，其法线矢量为

$$\mathbf{n}^* = \frac{\mathbf{b} \times d\mathbf{s}}{|\mathbf{b} \times d\mathbf{s}|}, \quad (7.5)$$

满足关系式

$$\mathbf{n}^* \cdot \mathbf{b} = 0. \quad (7.6)$$

因此位错的滑移面不一定是一个平面，在一般情形下，可以是一个平行于 \mathbf{b} 的柱面。位错线沿此柱面的运动都属于滑移式的

运动；在文献中称为棱柱滑移 (prismatic glide)，以区别于更习见的沿平面的滑移。一般情形下，位错线离开了柱面运动，就包含了攀移。唯一的例外是纯螺型位错部分（位错线平行于 \mathbf{b} ），它可以沿了包含位错线的任意面作滑移，因而可能离开原来的柱面。但无论如何，纯粹的滑移不会改变位错圈在垂直于 \mathbf{b} 的平面上投影的面积（参看图 7.20）。在电子显微镜的观察中也看到了位错圈作棱柱滑移的事例^[42]。

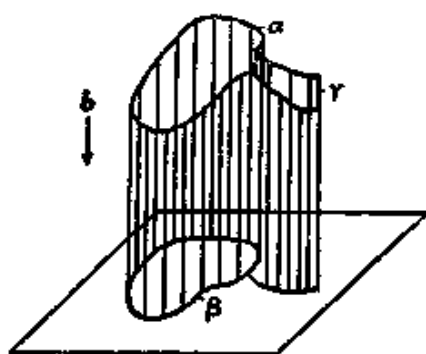


图 7.20 位错的滑移柱面。

§ 7.5 位错与晶体的范性形变

位错的运动及分布，可以引起晶体的宏观范性形变。在本书第五篇中将对晶体的范性形变作较细致的讨论，这里只是就位错的几何性质来说明它和范性形变之间一些最基本的关系。

首先考虑晶体滑移所造成的形变。图 7.21 示出了侧面为 $L_1 \times L_2$ 的一块晶体，假设滑移面平行于上下底面。设想一个直刃型位错沿了滑移面扫过整个晶体，所产生的切应变

$$\gamma = \frac{b}{L_1} \quad (7.7)$$

如果位错还没有跑出晶体，而只扫过滑移面的一部分，所经的路程为 $s = \alpha L_2 (\alpha < 1)$ ，在这种情形，根据直观的考虑，应变也应乘以因子 α

$$\gamma = \frac{\alpha b}{L_1} = \frac{L_3 s b}{V} \quad (7.8)$$

式中 L_3 为晶体的另一线度，也等于位错线的长度； $V = L_1 L_2 L_3$ ，为晶体的体积。式 (7.8) 表示的是一根位错线对应变的贡献，推广到一族平行的滑移面中一组任意形状有位错线，总的应变为各位错线贡献的叠加

$$\gamma = \sum_i \frac{L_i b}{V} = \frac{L}{V} b \bar{s}, \quad (7.9)$$

这里的 \bar{s} 表示位错线所掠过距离的平均值, L 为各位错线长度的叠加. 将单位体积内位错线的总长度定义为位错密度

$$\rho_v = \frac{L}{V}. \quad (7.10)$$

如果位错线都是平行的直线, 则位错的密度即等于垂直于位错线单位面积中穿过的位错数

$$\rho_s = \frac{N}{S}. \quad (7.11)$$

上式中 N 为 S 面积中穿过的位错数¹⁾.

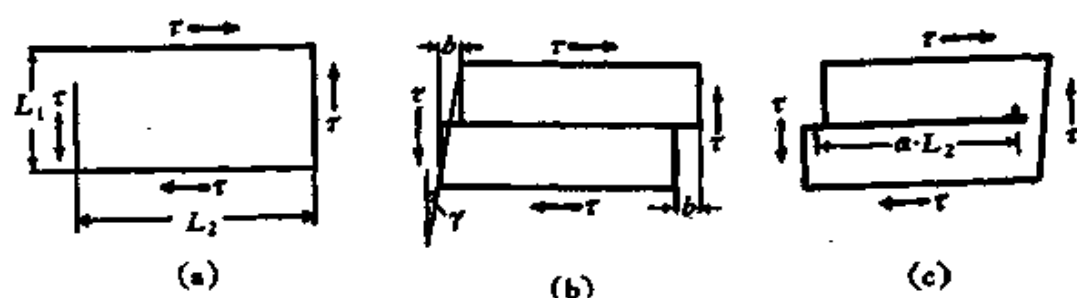


图 7.21 位错滑移所引起的宏观范性形变.

实验结果表明, 一般退火金属的 ρ 值约在 $10^3 - 10^8$ 厘米⁻² 间, 决定于晶体完整的程度. 强烈的冷加工可以使 ρ 值增至 10^{12} 厘米⁻². 如果晶体的滑移是由同号的位错的运动所造成的, 尚残留了 N 根位错线在晶体内, 则滑移在晶体两侧所产生台阶的高度差 δh 应等于 $Nb \cos \theta$ (θ 为滑移面和晶体表面法线的夹角 (见图 7.22)). 孙瑞蕃与沙斯柯里斯卡雅 (М. П. Шаскольская) 曾对 NaCl 晶体进行过研究^[63], 台阶的高度差用干涉显微镜测量, 滑移面内残留的位错用腐蚀坑方法显示. 一系列的实验结果表明 $Nb \cos \theta$ 和 δh 为同一数量级, 但 $Nb \cos \theta > \delta h$. 这个事实说明

1) 如果位错不是全部平行, ρ_v 与 ρ_s 的数值就不相同. 它们之间差一数值因素, 决定于位错方向分布的情况. 假定位错的方向分布是完全任意的, 不难求出 $\rho_v = 2\rho_s$.

滑移面上有异号的位错，而滑移过程是由正负位错两个方向运动所造成的。

晶体的范性弯曲也可以用位错的分布来解释。假设平行于晶体的滑移面截出一厚度为 d 的薄晶片，再将此晶片沿了半径为 r 的圆柱面弯曲，晶片对轴的张角为 θ 。晶片上下底面的弧长差为

$$(r+d)\theta - r\theta = d\theta. \quad (7.12)$$

需要有 $d\theta/b$ 个正刃型位错分布在晶体中。而晶片的侧面积为 $r\theta d$ ，产生范性弯曲所需要的位错密度就等于

$$\rho = \frac{d\theta/b}{r\theta d} = \frac{1}{rb}. \quad (7.13)$$

如果位错的滑移面和弯曲的中线面成一夹角 θ ，则上式应修正为

$$\rho = \frac{1}{rb \cos \theta}. \quad (7.14)$$

福格耳 (F. L. Vogel) 等应用侵蚀斑的方法观察弯曲的错晶体的

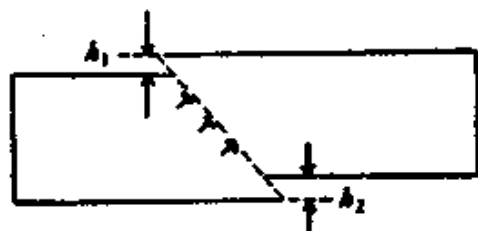


图 7.22 滑移面上位错的分布与台阶的高度差。

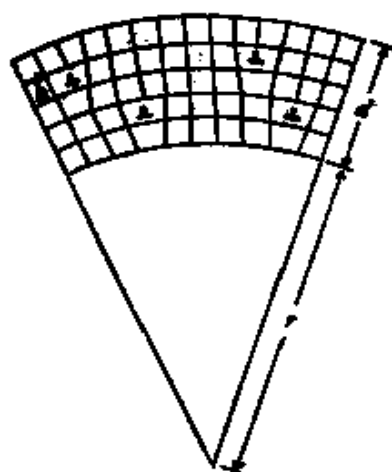


图 7.23 弯曲晶片中刃型位错的分布。

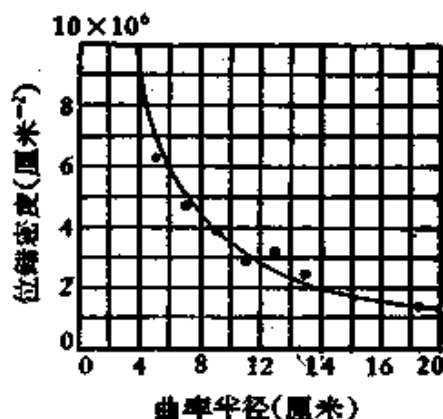


图 7.24 位错密度与曲率半径的关系(错试样)。

位错密度^[64],在样品经过退火处理使异号的位错消灭后,实验观察结果就和根据式(7.13)计算出的结果符合得很好(见图 7.22),这证实了上述的理论分析,同时也确定了观察到的蚀斑与位错的一一对应关系。

II 位错的应力场与芯结构

进一步探讨位错的性质,就需要知道位错所产生的长程弹性畸变及位错线附近的原子错排情况。这是计算位错的能量、理解位错和晶体缺陷之间的交互作用及其动力学性质的必要基础,同时也是位错理论的核心问题。关于位错的长程应力场,采用连续介质模型已经获得了很有成效的结果。但关于位错线近程的情况,即位错芯的结构,目前了解得还不够清楚,理论计算还只是初步的。因此,本节中主要介绍关于位错的长程应力场的理论;对于位错芯结构的问题的理论,则只作简略的介绍。

§ 7.6 位错的连续介质模型

通常采用连续介质模型来计算位错的长程应力场。在这种模型中,用连续的弹性介质来代替实际的晶体。应力场可以应用经典弹性力学方法来计算。这种理论模型的局限性是很明显的,它忽略了晶体的点阵结构,因而无法处理位错线近程的原子严重错排的区域。但对于它适用的范围以内的问题,所得的结果还是可靠的,已为许多的实验事实所证实。甚至在某些边缘的情况,应用连续介质模型往往能获得有用的结果。

应用连续介质模型对位错的应力场进行具体的计算时,可以采用下列的步骤:

(1) 设想将位错线附近原子严重错排的区域(距离位错小于 r_0)全部挖空,剩下的晶体用连续弹性介质来代替。

(2) 根据位错的一般定义,介质中的位移场 $u(x, y, z)$ 沿位错线所张的 S 面(可以任选)有一跃变,等于伯格斯矢量 b ,用

数学的形式来表示

$$u(M_1) - u(M_2) = b, \quad (7.15a)$$

M_1 及 M_2 为分处 S 面两侧相对应的两点; 或者用与此等效的伯格斯回路的表示法, 沿围绕位错任意的闭合回路。

$$\oint d\mathbf{u} = \oint \frac{d\mathbf{u}}{ds} ds = \mathbf{b}. \quad (7.15b)$$

(3) 介质内的弹性场应满足弹性平衡方程。对于各向同性的弹性介质, 位移的平衡方程为

$$(1 - 2\nu)\nabla^2 \mathbf{u} + \text{grad div} \mathbf{u} = 0, \quad (7.16)$$

这里的 ν 为泊松比。对于平面应变问题, 平衡方程可简化为应力函数 χ 所满足的双调和方程

$$\nabla^4 \chi = 0. \quad (7.17a)$$

(4) 如果没有外界的约束力, 沿内外表面的应力分量应等于零。

我们可以用逐次近似的方法求出满足上列条件的解。

§ 7.7 刃型位错的应力场

在刃型位错的情形, 位移的 z 分量 u_z 为零, 而且其他两个分量都不随 z 而变化, 即

$$\frac{\partial u_x}{\partial z} = \frac{\partial u_y}{\partial z} = 0.$$

因此是一个平面形变的问题, 平衡方程可以用应力函数 χ 来表示, 在笛卡尔坐标中,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 \chi = 0, \quad (7.17b)$$

而诸应力分量不为零的只有

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2}, & \sigma_{yy} &= \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2}, & \sigma_{xy} &= -\frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial y}, \\ \sigma_{xz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}); \end{aligned} \right\} \quad (7.18a)$$

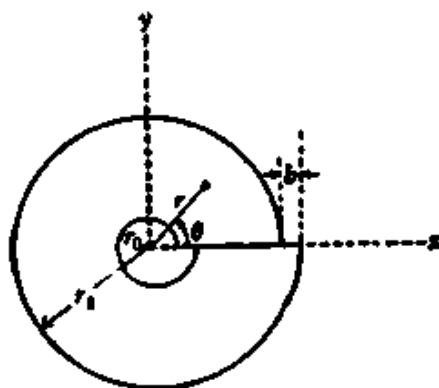


图 7.25 刃型位错的连续介质模型。

在圆柱坐标中,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right)^2 \chi = 0, \quad (7.17c)$$

而诸应力的分量为

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= \frac{1}{r} \frac{\partial \chi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \theta^2}, & \sigma_{\theta\theta} &= \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2}, \\ \sigma_{r\theta} &= -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \right), & \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta}). \end{aligned} \quad (7.18b)$$

满足双调和方程的应力函数, 可以用通常的分离变数法求出 (参看附录 7-II). 在求得的解中选出可能满足位错条件的应力函数

$$\chi = Dr \ln r \sin \theta, \quad (7.19)$$

代入式 (7.18a) 及式 (7.18b) 可求出下述诸应力分量:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{rr} &= \frac{D}{r} \sin \theta, \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{D}{r} \sin \theta, \\ \sigma_{r\theta} &= -\frac{D}{r} \cos \theta, \\ \sigma_{xx} &= \frac{Dy}{r^2} \left(1 + \frac{2x^2}{r^2} \right) = D \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{yy} &= \frac{Dy}{r^2} \left(1 - \frac{2x^2}{r^2} \right) = D \frac{y(y^2 - x^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{xy} &= -\frac{Dx}{r^2} \left(1 - \frac{2y^2}{r^2} \right) = D \frac{x(y^2 - x^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \end{aligned} \right\} \quad (7.20)$$

再利用位移与应力的关系求出位移的分量 (参看附录 7-III):

$$\left. \begin{aligned} u_r &= \frac{1}{2\mu} D(1 - 2\nu) \ln r \sin \theta - \frac{(1 - \nu)D\theta}{\mu} \cos \theta, \\ u_\theta &= \frac{1}{2\mu} [D + D(1 - 2\nu) \ln r] \cos \theta \\ &\quad + \frac{(1 - \nu)D\theta}{\mu} \sin \theta; \end{aligned} \right\} \quad (7.21a)$$

$$\left. \begin{aligned} u_x &= -\frac{D}{\mu} \left[(1-\nu)\theta + \frac{\sin 2\theta}{4} \right], \\ u_y &= \frac{D}{\mu} \left[\frac{1-2\nu}{2} \ln r + \frac{\cos 2\theta}{4} \right]. \end{aligned} \right\} \quad (7.21b)$$

根据位错的条件式 (7.15)

$$(u_x)_{\theta=2\pi} - (u_x)_{\theta=0} = b$$

定出常数

$$D = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}. \quad (7.22)$$

这里的解还不能满足界面上应力分量为零的条件。如果设想 $r_1 \rightarrow \infty$ ，则外壁的边界条件可被满足。根据以上求出的结果，应力分量一般地可表示为

$$\sigma_{ik} = D f_{ik}(\theta) \cdot \frac{1}{r}, \quad (7.23)$$

这里的 $f_{ik}(\theta)$ 为 θ 的函数。在图 7.26 中示出了在第一象限中 σ_{xy} 的分布情况，曲线到原点的距离正比于 σ_{xy} 的绝对值。拜德 (W. L. Bond) 等和英顿博姆 (B. Л. Инденбом) 等用红外偏振光方法观察硅单晶中位错应力场的分布^[65,66]，和上述计算结果大致吻合。

从式 (7.20) 可以看出，在同一地点， $|\sigma_{xx}| > |\sigma_{yy}|$ ；在 $y > 0$ 的区域， σ_{xx} 是负值，相当于压力；而在 $y < 0$ 的区域， σ_{xx} 是正值，相当于张力。这些结果也可根据直观的考虑看出。因为刃型位错相当在 $y > 0$ 的区域插进了半原子平面：上半受到压缩，而下半受到伸张。

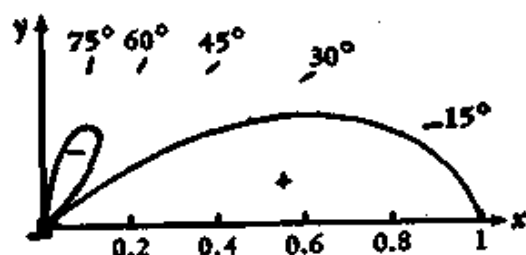


图 7.26 刃型位错的 σ_{xy} 的分布情况。

可以求出体积膨胀率

$$\begin{aligned}\delta &= e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \\ &= -\frac{b}{2\pi} \cdot \frac{1-2\nu}{1-\nu} \cdot \frac{\sin\theta}{r}.\end{aligned}\quad (7.24)$$

在 $y > 0$ 的区域, δ 为负值, 为收缩; 在 $y < 0$ 的区域, δ 为正值, 是膨胀. 由于 $\sin\theta$ 的对称性, 对于整个介质求 δ , 得到的平均值应等于零. 这个结果表明位错所产生的长程应力场中的平均密度仍和完整晶体相同.

如果要求出的解能够满足沿内外壁上应力分量为零的条件, 应力函数应采取下列的形式(参看附录 7-II):

$$\chi = \sin\theta(Dr \ln r + Br^{-1} + Cr^3), \quad (7.25)$$

应力的诸分量为

$$\left. \begin{aligned}\sigma_{rr} &= \frac{\sin\theta}{r} \left(-\frac{2B}{r^2} + 2Cr^3 + D \right), \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{\sin\theta}{r} \left(\frac{2B}{r^2} + 6Cr^3 + D \right), \\ \sigma_{r\theta} &= -\frac{\cos\theta}{r} \left(-\frac{2B}{r^2} + 2Cr^3 + D \right).\end{aligned}\right\} \quad (7.26)$$

根据内外界壁上应力为零的条件

$$r = r_0, \quad r = r_1; \quad \sigma_{rr} = \sigma_{r\theta} = 0,$$

可求出系数 B 与 C

$$\left. \begin{aligned}B &= \frac{r_0^2 r_1^2}{2(r_0^2 + r_1^2)} D, \\ C &= -\frac{D}{2(r_0^2 + r_1^2)}.\end{aligned}\right\} \quad (7.27)$$

在一般情形下, 附加项所加的校正并不太重要. 在距离位错线较远的地方, 结果和直接用式 (7.20) 相差不大, 而在接近位错线的区域, 连续介质模型本身就有毛病, 不可能获得正确的结果.

§ 7.8 直螺型位错的应力场

设想一沿 z 轴的右螺型位错, 按照下列操作形成: 沿 xz 面剖

开,两岸沿 z 轴产生相对位移 b ,再胶合起来。在这种情形,位移的 x, y 分量均等于零,而且这样的形变是纯粹的切变,不产生体积的膨胀或收缩。

因而

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \quad (7.28)$$

所以弹性平衡方程可以简化为

$$\nabla^2 u_z = 0. \quad (7.29)$$

位移所满足的位错条件为

$$(u_z)_{\theta=2\pi} - (u_z)_{\theta=0} = b,$$

因此最简单的解即为

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \theta = \frac{b}{2\pi} \arctan \frac{y}{x}. \quad (7.30)$$

各应力分量为

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xz} &= -\frac{\mu b}{2\pi} \cdot \frac{y}{r^2}, & \sigma_{yz} &= \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{r^2}, \\ \sigma_{\theta z} (= \sigma_{z\theta}) &= \frac{\mu b}{2\pi r}, \end{aligned} \right\} \quad (7.31)$$

其余的均等于零。从上式可以看出螺型位错不产生正应力,应力场对轴线是对称的。由于 $\sigma_{rr}, \sigma_{r\theta}$ 均等于零,显然满足内外柱面上应力为零的边界条件。但是 $\sigma_{\theta z}$ 作用在柱体两端 ($z = \text{常数}$) 面上,产生一力偶矩

$$\tau = \int_{r_0}^{r_1} (r \sigma_{\theta z}) \cdot 2\pi r dr = \frac{1}{2} \mu b (r_1^2 - r_0^2). \quad (7.32)$$

要松弛这个外力偶,应产生一附加的形变,其主要部分为

$$u'_\theta = -\alpha r z, \quad u'_r = u'_z = 0. \quad (7.33)$$

这样的位移可以满足弹性平衡的条件,也不产生附加的伯格矢量,但产生一附加切应力

$$\sigma'_{\theta z} = -\mu \alpha r, \quad (7.34)$$

和一附加的扭转力矩

$$\tau' = \int_{r_0}^r (r \sigma'_{\theta z}) 2\pi r dr.$$

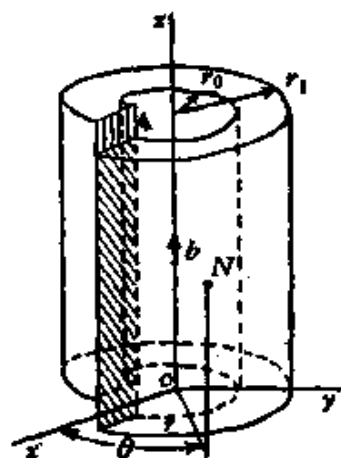


图 7.27 螺型位错的连续介质模型。

根据 τ 与 τ' 相互抵销的条件 ($\tau' = -\tau$), 可求出

$$\alpha = \frac{b}{\pi(r_1^2 + r_0^2)} \simeq \frac{b}{\pi r_1^2}. \quad (7.35)$$

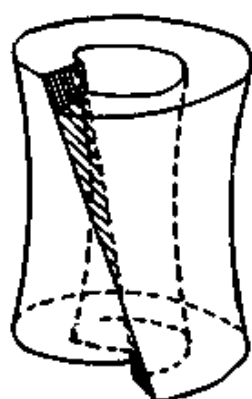


图 7.28 螺型位错 (两端力偶松弛的情形).

这样的附加形变, 相当于使柱体沿了轴线产生扭转 (见图 7.28), 而 α 即等于单位轴长的扭转角。

除非 r_1 很小, α 角一般是不易察觉的。但对于细的晶须, 沿轴线有一螺型位错, α 即成为可以测量的数量 (例如 $r_1 = 10^{-4}$ 厘米, $b = 2.5 \times 10^{-8}$ 厘米, $\alpha \simeq 40^\circ/\text{厘米}$)。韦伯 (W. Webb) 应用劳埃照相来测量这种沿晶须轴的扭转^[67], 在某些晶须 (如 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, NaCl , Pd 等) 中的确观察到这种扭转, 而且根据 α 值所算出的 b 值都正好是点阵参数的整倍数。

§ 7.9 直位错的能量

知道了位错线周围应力场的分布情况, 根据畸变能密度的积分, 即可计算应力场内所贮藏的总畸变能, 但直接计算形成位错所要作的功要更简便一些, 而形成位错的具体方式可以按照简化计算的要求来选择。

为了计算形成刃型位错所作的功, 可以设想如下的过程 (参看图 7.23): 沿 xz 面剖开, 将 S_2 岸保持不动, 令 S_1 岸作位移自 0 到 b 。在位移的过程中, 设已作了位移 αb (α 为一分数, $0 \leq \alpha \leq 1$)。将 S_2 面划分为许多单位长度的面元 dr , 沿面元所加切力设为 $\sigma'_{r\theta} dr$, $\sigma'_{r\theta}$ 应等于强度为 αb 的位错在面元所在处 ($\cos \theta = 1$) 产生的应力分量 $\sigma_{r\theta}$, 根据式 (7.20), 应为

$$\sigma'_{r\theta} = \frac{\mu \alpha b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{r}. \quad (7.36)$$

在此切力作用下作位移 $d(\alpha b)$ 所作的功为

$$dW = \int_{r_0}^{r_1} \sigma'_{r\theta} d(\alpha b) dr. \quad (7.37)$$

在位移从 0 到 b 的全部过程中, 所作总功(单位长度)

$$W = \int_{r_0}^{r_1} \int_0^1 \frac{\mu b^2 \alpha d\alpha dr}{2\pi(1-\nu)r} = \frac{1}{2} \int_{r_0}^{r_1} \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{dr}{r} \\ = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{r_1}{r_0} \right). \quad (7.38)$$

相似地可以求出单位长度螺型位错的能量

$$W = \int_0^1 \int_{r_0}^{r_1} \sigma_{\theta\theta} b d\alpha dr = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \left(\frac{r_1}{r_0} \right). \quad (7.39)$$

如果位错是混合型的, 位错线与伯格斯矢量间的夹角为 ϕ , 它就相当于伯格斯矢量为 $b \cos \phi$ 的螺型位错与伯格斯矢量为 $b \sin \phi$ 的刃型位错的叠加。由于螺型位错和刃型位错没有公共的应力分量(忽略附加项), 它们的能量即可以单纯地叠加起来。因此单位长度混合型直位错线的能量可以表示为

$$W = \frac{\mu b^2}{4\pi K} \ln \frac{r_1}{r_0}, \quad \frac{1}{K} = \cos^2 \phi + \frac{\sin^2 \phi}{1-\nu}, \quad (7.40)$$

K 的值处于 1 和 $1-\nu$ 之间。

如果 r_1 为无限大, 或 r_0 为零, 位错的能量都将等于无限大。在实际问题中, 能量发散的困难并不存在。因为在位错的中心区域, 连续介质模型就不适用了, 应该另作计算。根据在后面要讲的佩-纳模型来估计, 式 (7.38) 中的 r_0 接近于 b 。另一方面, 实际晶体中有“嵌镶结构”或位错网络, 限制了应力场的范围。在一般情形下, r_1 不能超过嵌块的大小, 约 $r_1 \simeq 10^{-4}$ 厘米, 因此单位长度位错的能量约为

$$\frac{\mu b^2}{4\pi K} \ln 10^4 \simeq \mu b^2. \quad (7.41)$$

取 $\mu = 4 \times 10^{11}$ 达因·厘米⁻², $b = 2.5 \times 10^{-8}$ 厘米, 位错的能量约为 2.5×10^4 尔格/厘米, 或 4 电子伏/原子面。

根据上面的计算, 位错具有很大的畸变能。对于位错的熵, 虽然尚缺乏确切可靠的计算值。根据一般估计^[22,23], 它对自由能的贡献远比畸变能要小。因此在通常的温度, 位错的自由能将近似

地等于其畸变能,具有正值。所以位错不象点缺陷那样,能作为一种热力学平衡态的晶体缺陷。在理想的热力学平衡状态下,晶体中将不存在任何位错。因而如果对晶体生长过程作严格的控制,人们的确可以制出无位错的晶体。

§ 7.10 位错与表面的弹性相互作用

求解有限大小的晶体中位错的弹性场,需要满足表面(或界面)的边界条件。可以仿照静电学中的镜象法来处理这类问题^[24]。

首先来考虑半无限大介质中平行于表面的螺型位错。设在 $-\infty < x < 0$ 的区域中充满了弹性介质(切变模量为 μ);而在 $0 < x < \infty$ 的区域为真空。平行于 x 轴的位错在 $x = -l, y = 0$ 处(参看图 7.29)。自由表面的边界条件为通过表面的正应力及切应力均应等于零,因而要求表面上 $\sigma_{xx} = 0$ 。只需要设想在真空中象的位错上有一等量异号的螺型位错存在,即可使这样的边界条件得到满足。介质中实际的应力场就等于原位错与象位错的应力场叠加起来。很显然位错附近的自由表面的存在导致畸变能的下降,换言之,位错受到自由表面的吸引力(被称为象应力)。也可

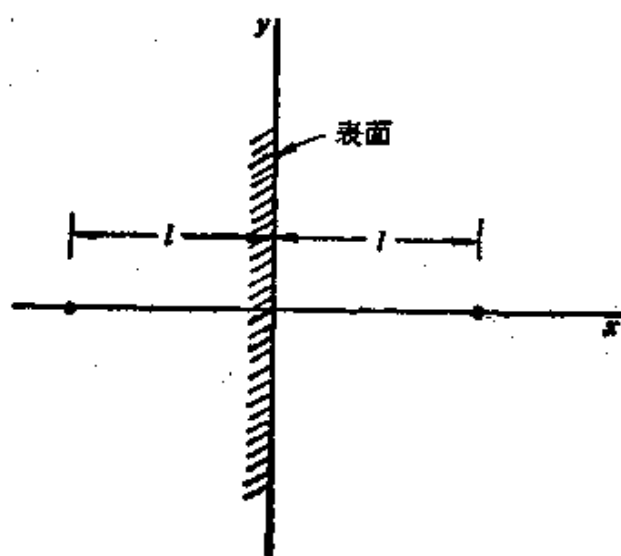


图 7.29 平行于自由表面的一根螺型位错及其象位错。

以采用上述的方法近似地处理平行于自由表面的刃型位错, 得到类似的结果。

图 7.30 表示了更复杂一些的镜象问题。在圆柱体形的介质中, 在 $x = \lambda$ 处有一平行于轴线的螺型位错。自由表面的边界条件要求圆柱表面上的切应力 $\sigma_{x\theta}$ 为零。在圆柱以外的共轭点处 $x = R^2/\lambda$ 加一等量异号的位错将使边界条件得到满足。

下面讨论两种不同介质的界面对位错的影响。如图 7.31 所示, $x > 0$ 的区域充满了切变模量为 μ_1 的介质, $x < 0$ 的区域充满了切变模量为 μ_2 的介质。在 $x = a, y = 0$ 处的 A 点有一平行于 z 轴的螺型位错, 其伯格斯矢量值为 b 。界面的边界条件要求位移和应力必须连续地穿过界面。 A 的象位错在 C 处, 其伯格斯矢量值设为 γb ; 为了说明介质 2 中的应力场, A 处位错的伯格斯矢量值应修正为 βb ; 这里引入的 γ 和 β 的数值都是待定的。式 (7.30) 给出两介质中的位移为

$$u_{x_1} = \frac{b}{2\pi} \left(\arctan \frac{y}{x-a} + \gamma \arctan \frac{y}{y+a} \right), \quad (7.42)$$

$$u_{x_2} = \frac{b\beta}{2\pi} \arctan \frac{y}{x-a}. \quad (7.43)$$

在 $x = 0$, $u_{x_1} = u_{x_2}$, 可求出 $\beta = 1 - \gamma$ 和式 (7.31) 对应的应力为

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(1) = & \frac{\mu_1 y b}{2\pi[(x-a)^2 + y^2]} \\ & + \frac{\gamma \mu_1 y b}{2\pi[(x+a)^2 + y^2]}, \end{aligned} \quad (7.44)$$

$$\sigma_{xx}(2) = \frac{\beta \mu_2 b}{2\pi[(x-a)^2 + y^2]}. \quad (7.45)$$

在 $x = 0$ 处, $\sigma_{xx}(1) = \sigma_{xx}(2)$, 可导出关系式

$$\mu_1(1 + \gamma) = \mu_2\beta. \quad (7.46)$$

这样, 就得到

$$\gamma = \frac{\mu_2 - \mu_1}{\mu_1 + \mu_2}, \quad \beta = \frac{2\mu_1}{\mu_1 + \mu_2}, \quad (7.47)$$

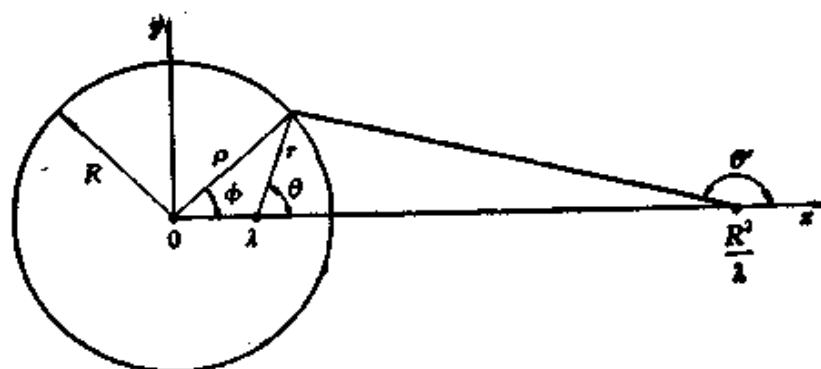


图 7.30 圆柱形介质内 λ 处的螺型位错及其象位错。

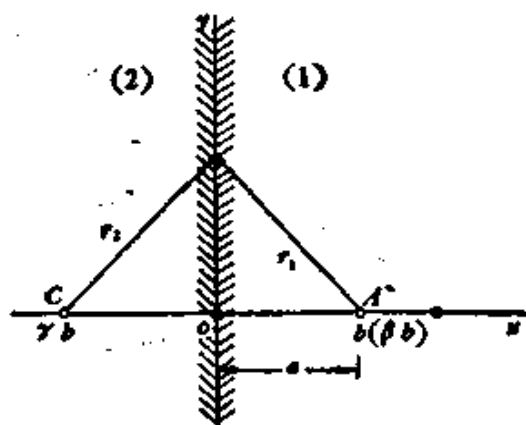


图 7.31 两种不同介质的界面附近的螺型位错及其象位错。

这一结果也可根据与电象法的类比导出。在 $\mu_2 \rightarrow 0$ 的极限, 和自由表面的结果相符。可以看出, 若 $\mu_1 > \mu_2$, 螺型位错将被界面所吸引; 而 $\mu_1 < \mu_2$, 则被排斥。这一结果不仅适用于相界, 也可用于晶界, 这是由于弹性的各向异性将导致晶界两侧 μ 的有效值不一致。如果位错就躺在界面上, $a = 0$, 两个象位错均和位错自身相重合。在 μ_1 介质内, 有效 b 值为 $(1 + \gamma)b = 2\mu_2 b / (\mu_1 + \mu_2)$; 在 μ_2 介质内, 有效的 b 值为 $2\mu_1 b / (\mu_1 + \mu_2)$ 。因而应力场相当于原来的位错处于有效切变模量为 $2\mu_1 \mu_2 / (\mu_1 + \mu_2)$ 的介质之中。至于刃型位错与表面和界面的相互作用, 计算要繁复得多。严格理论计算表明, 采用上述的象位错系统可以近似地(准确到 15% 以内)说明问题。因而对于一些更复杂的情形, 如与表面斜交的位错, 还不妨采用构筑象位错这一近似方法。

§ 7.11 任意形状位错圈的应力场

前面对位错应力场的论述限于无限长直位错线这一特例。下面要讨论任意形状位错圈的应力场这一普遍情况。仍然假定介质是无限大而且是各向同性的。

作为讨论的出发点。考虑原点附近一个伯格斯矢量为 \mathbf{b} ，法线矢量为 \mathbf{n} ，面积为 dA 的微位错圈^[68]。形成这样的位错圈，我们可以设想如下的过程：在原先介质中挖出一块面积为 dA ，厚度为 h 的介质。然后将这块挖出的介质 T 进行形变；上表面（沿 \mathbf{n} 的正向）相对于下表面作相对位移 $-\mathbf{b}$ ，这样， T 区域内对应有均匀的应变

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = -\frac{1}{2h} (b_i n_j + b_j n_i). \quad (7.48)$$

再将介质中空洞的两壁作等价的相对位移，使整个介质发生弹性应变，然后将介质 T 塞进去，胶合起来，保持弹性平衡。可以看出这一操作过程实质上 和 § 7.3 定义的剖面相对位移等效，只需令 $h \rightarrow 0$ ，在 T 区域界面上的应力张量，按照胡克定律应为（参看附录 7-II）

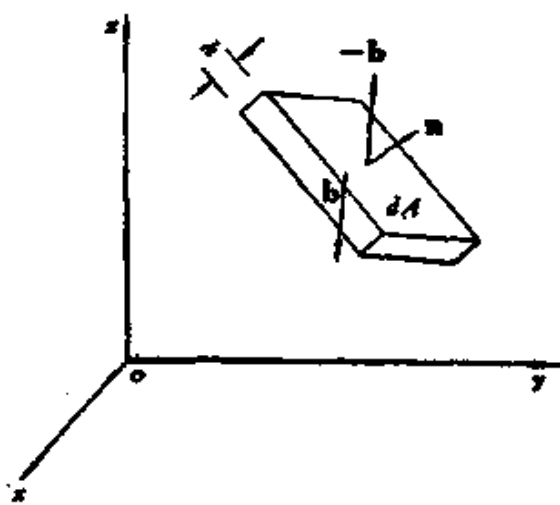


图 7.32 任意取向的微位错圈的示意图。

$$\sigma_{ij} = \sum_k \lambda e_{kk} \delta_{ij} + 2\mu e_{ij}, \quad (7.49)$$

这里的 λ 为介质的拉梅系数， μ 为介质的切变模量。这样在上下表面的作用力正好是数值相等方向相反的一对偶力，就是 § 5.7 所述的弹性偶极子。但这里偶极矩的非对角分量不一定为零，属于更普遍的情形。

从弹性力学可以算出作用于源点的力分量 F_i ，在场点的位

移分量 u_i 可以表示为(参看附录 7-III):

$$u_i = U_{ij} F_j, \quad (7.50)$$

$$U_{ij} = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)} \left[\delta_{ij} \cdot \frac{3-4\nu}{\rho} + \frac{\rho_i \rho_j}{\rho^3} \right], \quad (7.51)$$

$$\rho_i = x_i - x'_i, \quad (7.52)$$

$$\rho = +\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}, \quad (7.53)$$

这里的 U_{ij} 表示源点在 j 方向单位作用力在场点产生位移的 i 方向的分量,文献中称为格林张量函数 (Green's tensor function). 考虑到偶力的效应,用泰勒展开,保存一次项,即可得

$$u_i = - \sum_k h \sigma_{kj}^T \frac{\partial U_{ij}}{\partial x_k} dA. \quad (7.54)$$

将式 (7.49), (7.51) 代入上式, 并利用 λ, μ, ν 之间的关系, 可得

$$u_i = \frac{k_0}{\rho^3} \left\{ \frac{1-2\nu}{\rho} \cdot \sum_k [n_i b_k \rho_k + b_i n_k \rho_k - \rho_i b_k n_k] + \sum_j \sum_k \frac{3\rho_j b_k \rho_k n_j \rho_i}{\rho^3} \right\} dA, \quad (7.55)$$

这个结果与 h 无关, 即代表一无限小的微位错圈(面积 dA , 面法线 \mathbf{n} 及伯格斯矢量 \mathbf{b}) 的位移场, 也可以近似地表示有限位错圈的远程位移场. 对上式微分, 再利用胡克定律, 可以求出微位错圈的应力场, 由于式子较繁, 这里就不一一列出. 可以看出, 位移是随距离作 $1/\rho^2$ 式的衰减, 而应力则作 $1/\rho^3$ 式的衰减.

对于棱柱位错圈这一特例, 可令圈处于坐标原点, 圈面沿 xy 平面, 即 $n_1 = n_2 = 0, n_3 = 1, b_1 = b_2 = 0, b_3 = b$ (图 7.33(a)), 则

$$\left. \begin{aligned} u_x &= \frac{Kx}{6r^3} \left[-(1-2\nu) + \frac{3z^2}{r^2} \right], \\ u_y &= \frac{Ky}{6r^3} \left[-(1-2\nu) + \frac{3z^2}{r^2} \right], \\ u_z &= \frac{Kz}{6r^3} \left[1-2\nu + \frac{3z^2}{r^2} \right], \end{aligned} \right\} \quad (7.56)$$

$$K = - \frac{3b}{4\pi(1-\nu)} \delta A. \quad (7.57)$$

对于滑移位错圈这一特例，可相似地选择坐标系，即 $n_1 = n_2 = 0, n_3 = 1$ ，而 $b_1 = b, b_2 = b_3 = 0$ (图 7.33(b)) 则

$$\left. \begin{aligned} u_x &= \frac{K'z}{6r^3} \left[1 - 2\nu + \frac{3x^2}{r^2} \right], \\ u_y &= \frac{K'3xyz}{6r^5}, \\ u_z &= \frac{K'x}{6r^3} \left[1 - 2\nu + \frac{3z^2}{r^2} \right], \end{aligned} \right\} \quad (7.58)$$

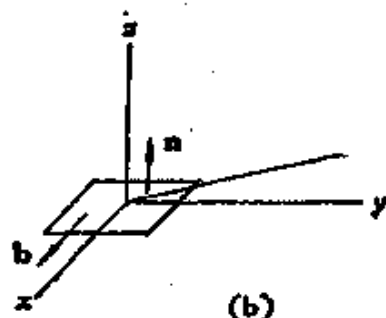
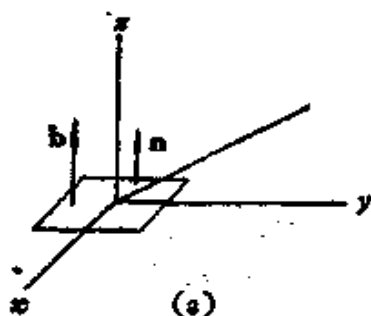


图 7.33(a) 微螺柱圈的示意图。

图 7.33(b) 微滑移圈的示意图。

$$K' = - \frac{3b}{4\pi(1-\nu)} \delta A \quad (7.59)$$

对于任意形状的有限位错圈，我们可以任选一位错圈所张之面，分划为无限多的网格，每一网格可视为一微位错圈，利用式 (7.55) 可求出其位移场，而整个位错圈的位移场可用式 (7.55) 的面积分来表示(参看图 7.34)，即

$$u_i = \iint_{(S)} du_i. \quad (7.60)$$

这样，任意形状位错圈的应力场问题，原则上得到了解决，具体求解变为一个数学问题，而前面讲过的无限长直位错线应力场的问题，也可以用这个方法求解， δA 即为以位错线为界的无限大半平面^[69]。

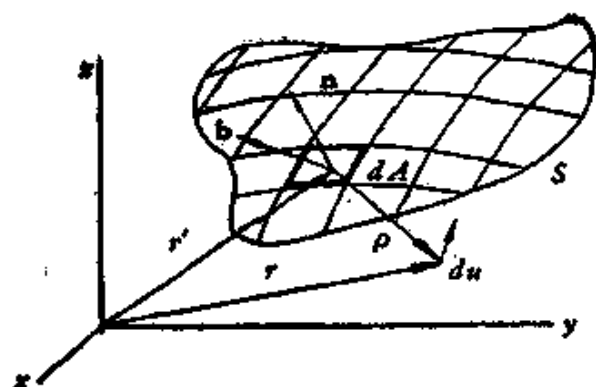


图 7.34 有限位错圈分割为微位错圈的总和。

还存在其他的求解任意形状位错圈应力场的方法，这里就不一一介绍了。有限位错圈应力场的表示式相当复杂，即使是最简单的圆环形的位错圈，也要用特殊函数的定积分来表示。

在有限圈的位错线的附近，应力是随到位错线距离 ρ 作 $1/\rho$ 式变化的，和直位错线相似；但在远处，则随 $1/\rho^3$ 而减弱，和微位错圈相似，但值得注意的是，在不大远的地方 ($\rho > 2R$, R 为位错圈的半径)，微位错圈的结果(用有限位错圈的面积代入式中)给出相当好的近似。当然在靠近位错圈或圈内的地方就不能用这样的近似。

位错圈的弹性能可以用应变能密度的体积分来表示。在积分时，必需将位错线附近的区域(即位错芯)挖掉，在能量表示式中将出现位错芯的半径 ϵ ，通常可令 $\epsilon \sim b$ 。更简单的是将弹性能表示为形成位错圈所作的功，即

$$W = \frac{1}{2} \int n_i \sigma_{ij} b_j dA. \quad (7.61)$$

在上式中，面积分也要到位错线附近截止，因而能量表示式中也出现芯半径 ϵ 。对于平面圈，上式可简化为

$$W = \frac{1}{2} n_i b_i \iint \sigma_{ij} dA. \quad (7.62)$$

在式 (7.62) 中只需知道圈平面内的应力分量，对于在 x, y 面内棱柱圈的特例，有关的应力分量只有 σ_{xx} 。

下面列出圆形棱柱圈的弹性能的计算结果

$$W = \frac{\mu}{2(1-\nu)} b^2 R \left(\ln \frac{8R}{\varepsilon} - 1 \right) \quad (7.63)$$

和圆形滑移圈的结果,

$$W = \frac{\mu(2-\nu)}{4(1-\nu)} b^2 R \left(\ln \frac{4R}{\varepsilon} - 2 \right). \quad (7.64)$$

和式 (7.48) 及式 (7.50) 所表示的直位错线的能量表示式相对比, 由于 R 取代式 (7.50) 中 r_1 在对数项的位置, 单位长度的能量要比直位错低。

一般形式的位错圈 (\mathbf{b} 与 \mathbf{n} 的夹角为 ϕ) 的能量可以表示为纯棱柱圈 (其伯格斯矢量为 $b \cos \phi$) 与滑移圈 (其伯格斯矢量为 $b \sin \phi$) 的能量的总和 (同一平面内两圈之间没有相互作用能), 考虑到 $R/\varepsilon \gg 1$, 可以略去式 (7.62), (7.63) 中的常数项, 因而圆形圈的能量近似地等于

$$W = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} L A \ln \frac{R}{\varepsilon}, \quad (7.65)$$

这里的 $L = 2\pi R$ 为圈的周长, $A = \cos^2 \phi + [(2-\nu)/2] \sin^2 \phi$, 对于棱柱圈, $A = 1$; 对于滑移圈, $A = (2-\nu)/2$ 。

§ 7.12 位错的线张力

单位长度位错线具有一定的能量, 为了降低能量应尽可能缩短其长度, 因而和具有弹性的弦线有相似之处。仿照弦线张力的意义, 我们可以定义位错的线张力如下: 当位错的长度增加一无限小量, 其能量增量与长度增量的比值就等于线张力 T_D , 即

$$T_D = \frac{\partial W}{\partial L}. \quad (7.66)$$

如果位错的能量与取向无关, 线张力就等于单位长度的能量。但是事实上, 不仅是在各向异性介质中, 位错的能量和取向有关; 在各向同性介质中, 亦复如此, 螺型位错与刃型位错的能量有差异, 就反映了能量与取向的关系^[70]。

设想在无限大的各向同性介质中的一根直位错线作少量的引

出(图 7.35)。由于位错线的能量是取向角 θ 的函数, 我们可以将单位长度位错的能量展开为泰勒级数

$$W(\theta) = W(0) + \frac{\partial W}{\partial \theta} \delta\theta + \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2} \frac{(\delta\theta)^2}{2} + \dots, \quad (7.67)$$

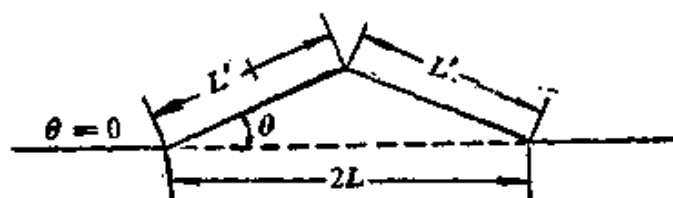


图 7.35 位错线张力计算的示意图。

如图 7.15 所示, 对线段 L^+ , $\delta\theta = \theta$; 对线段 L^- , $\delta\theta = -\theta$, 这样,

$$L' = L^+ = L^- \simeq L \left[1 + \frac{(\delta\theta)^2}{2} \right] = L \left(1 + \frac{\theta^2}{2} \right), \quad (7.68)$$

因而体系的能量增量为

$$\begin{aligned} \delta W &= \left(W + \frac{\partial W}{\partial \theta} \theta + \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2} \cdot \frac{\theta^2}{2} \right) L' \\ &\quad + \left[W + \frac{\partial W}{\partial \theta} (-\theta) + \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2} \frac{(-\theta)^2}{2} \right] L' - 2WL \\ &= 2 \left(W + \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2} \frac{\theta^2}{2} \right) L \left(1 + \frac{\theta^2}{2} \right) - 2WL, \\ &\simeq \theta^2 L \left(W + \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2} \right), \end{aligned} \quad (7.69)$$

因而线张力

$$T_D = W + \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2}. \quad (7.70)$$

对于直位错线段, 将式 (7.50) 的单位长度能量值代入式 (7.70), 可以求出

$$T_D = \frac{\mu b^2}{4\pi} \frac{1+\nu-3\nu\sin^2\theta}{1-\nu} \ln \frac{L}{er_0}, \quad (7.71)$$

这里的 θ 表示位错线与伯格矢量量的夹角, 可以求出螺型位错与

刃型位错线张力的比值为

$$\frac{T_D'}{T_D''} = \frac{1 + \nu}{1 - 2\nu}, \quad (7.72)$$

一般金属 $\nu \simeq 1/3$, 故 $T_D'/T_D'' \simeq 4$. 这个结果表示螺型位错的单位长度的能量虽然比刃型位错的要低, 但线张力却大得多. 这也是不难理解的, 因为位错线偏离螺型取向时, 能量增长得很快. 即使在各向同性的介质中, 位错的线张力也表现出明显的各向异性. 因而滑移位错圈的平衡组态并不是圆形, 而是椭圆形, 其长轴沿着伯格斯矢量的方向, 这已为透射电镜的观察所证实. 图 7.36 示出了 Cu-30%Zn 合金中第二相粒子附近的滑移位错圈, 显示出理论所预期的椭圆形.

上述的位错线张力的概念是分析问题的一种有用的近似, 特别是当在位错组态比较复杂. 确切的能量计算又有困难的情况下

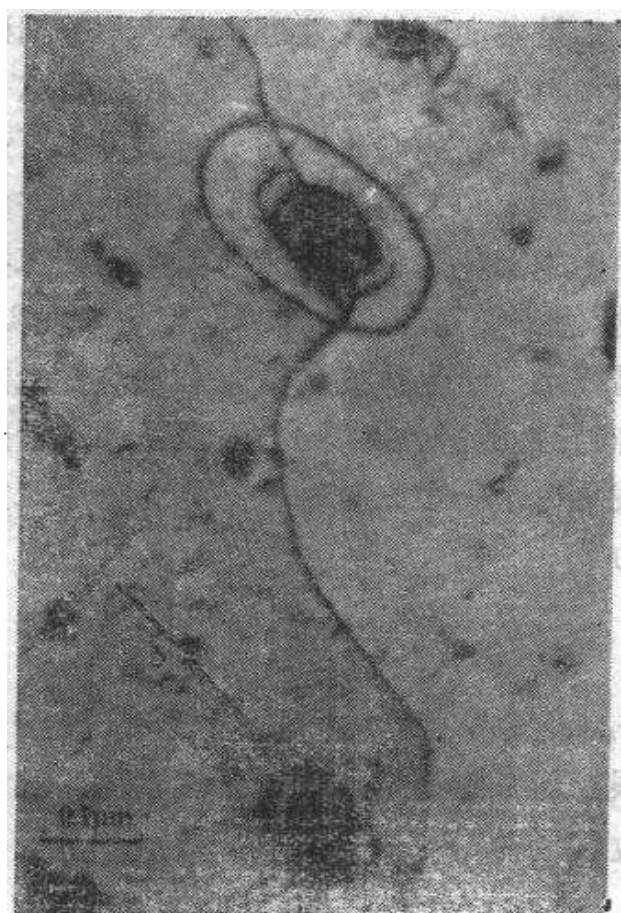


图 7.36 Cu 合金第二相附近的椭圆形滑移位错圈(透射电镜照片).

更是如此。因此，我们可采用式 (7.71) 作为线张力的近似表示式，或者更简单一些

$$T_D \approx \frac{1}{2} \mu b^2. \quad (7.73)$$

§ 7.13 各向异性的介质和非线性弹性效应

前面所述的弹性理论都基于介质是各向同性的和弹性形变是线性的这两个基本假定。实际上，所有的晶体的弹性性质都是各向异性的，而位错线附近区域的畸变显然超出了胡克定律适用的范围。所以各向异性的弹性力学和非线性弹性力学在位错研究中也占有一定的地方，不能完全忽视。但由于这方面的理论比较烦复^[71,72]，这里只能介绍一些重要的结论，不进行详细的推导。

位错理论之所以采用各向同性近似，主要有两个原因：一是数学处理简单；二是各向同性弹性理论虽然不够精确，但位错理论中的其他近似和实验观测中包含的误差往往将这一缺点掩盖掉了，因而在用来解释位错的基本性质方面取得了可观的成就。但是由于透射电子显微术和 X 射线形貌术的进展，许多直接观测的结果需要更加确切的理论解释；另一方面由于计算技术的飞速进展，也使各向异性位错弹性理论的计算变得更为现实可行。

只有当位错线平行于晶体的少数对称轴时，无限长直位错的应力场（考虑各向异性的弹性系数）方可表示为解析的形式。例如当一螺型位错线平行于一个二重轴，并和另一个二重轴垂直。位移场可以表示为

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \arctan \left[\frac{\tan \theta}{A^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (7.74)$$

这里的 $A = 2c_{44}/c_{11} - c_{33}$ ，为各向异性参量，当 $A \rightarrow 1$ ，对应于各向同性的极限。若一螺型位错平行于三重轴，并和另一个二重轴相垂直，其位移场为

$$u_z = \frac{b}{6\pi} \arctan \left[\frac{\tan 3\theta}{(1 - \delta)^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (7.75)$$

这里的 δ 为另一各向异性参量, $\delta = S_{13}/S_{11}S_{44}$, $\delta \rightarrow 0$, 为各向同性极限。表 7.1 列出了一些金属的各向异性参量。可以看出 W 的弹性性质接近于各向同性, 而 Li 及 AuCd 合金则表现出强烈的各向异性。

表 7.1 一些材料的各向异性参量

材 料	A	δ
Li (195K)	8.73	0.52
Fe	2.4	0.11
W	1.00	0.00
Nb	0.51	0.08
AuCd (50-50%)	11.7	0.62
Cu	3.2	0.20
Al	1.01	0.01
KCl	0.37	0.14

各向异性的位错弹性理论不仅在数量上和各向同性理论有差异; 也在某些问题上表现出性质上的不同。例如螺型位错的应力场, 各向同性弹性力学预言膨胀处处为零; 在各向异性的弹性力学,

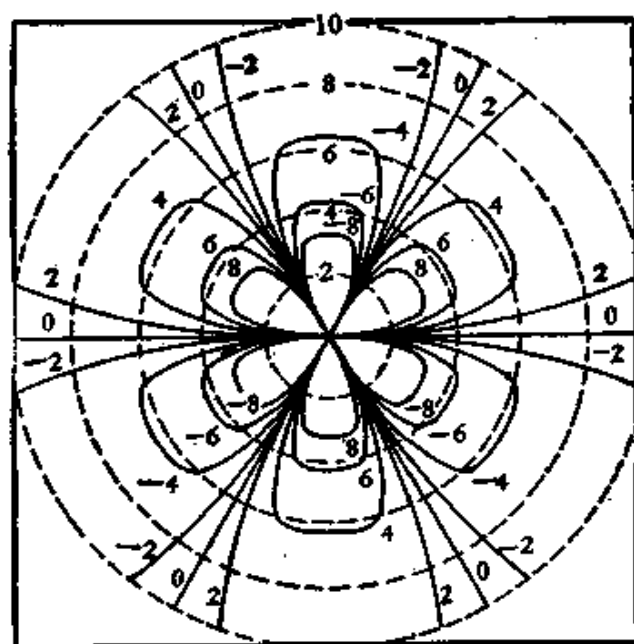


图 7.37 Li 中沿 [111] 的螺型位错的膨胀场^[73] (距离单位为 b , 膨胀单位为 $\pi/400$)。

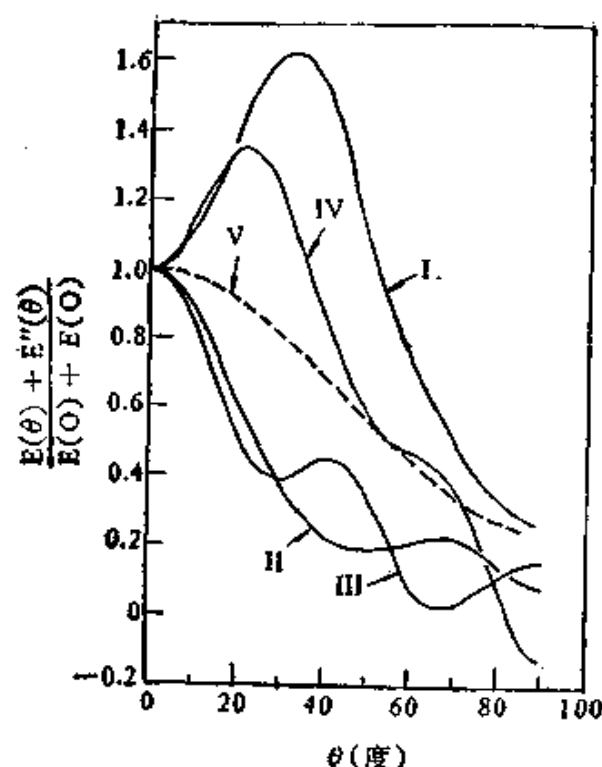


图 7.38 位错线张力随取向变化的关系 (按螺型取向归一化)。I. Nb (bcc); II. Fe (bcc); III. Pb (fcc); IV. Au (fcc); V. 为各向同性介质 (泊松比取为 0.3)。

中,沿二重轴,四重轴和六重轴的螺型位错仍然是如此,但沿着三重轴的螺型位错的膨胀率不等于零,而是

$$\Delta = \frac{(S_{11} + S_{12})b\delta \sin 3\theta}{S_{13}(1 - \delta)^{\frac{1}{2}}2\pi r(1 - \delta \cos^2 3\theta)}, \quad (7.76)$$

图 7.37 示出了 Li 中沿 [111] 的螺型位错的膨胀场^[73]。可以看出,螺型位错对晶体原有三重对称性没有影响;而刃型位错则会破坏三重对称性。

在各向异性介质中线张力随取向的变化要比各向同性介质更加猛烈。图 7.38 示出了几种金属晶体的位错线张力随取向变化的情况,与之对照的是各向同性的介质 (图中的虚线)。I 与 IV 这两种情况,出现明显的极大值;II 和 III 则除极大值外,还有极小值出现。

至于某些强烈各向异性的晶体 (例如 Li), 可以出现线张力在某些取向为负值的情况,这意味着在这些取向上,直位错线不再

是平衡组态,直位错线将自发地变为 π 字形的折线,从而降低其能量。透射电镜的观测结果证实了这一理论预期。

在位错线的附近,严重的畸变将导致线性弹性理论的失效。但是由于在这些场所连续介质模型本身就成问题,应该适当地采用离散的原子结构模型来处理。因此非线性的连续介质弹性理论虽有所发展,但应用的面尚不甚广,所以这里也不作全面的介绍。有兴趣者可参阅文献[74]。但是线性弹性理论对位错应力场的一些整体效应推导出一些不附合实际的结果:如位错引起的膨胀率平均为零,而实际上大量位错的存在导致晶体密度的下降;弹性波和位错的应力场遵从叠加原理,将不导致发生散射,而实际上弹性波会被位错的应力场所散射。这些问题显示了考虑非线性效应的重要性。

下面介绍曾讷对位错引起的膨胀效应的简单说明^[75]。在弹性理论中,膨胀率为 $\Delta = \sum_i \sigma_{ii}/3K$ (K 为体模量),在位错这一类自应力体系中由于 $\sum_i \sigma_{ii}$ 的平均值为零,所以在一级近似(线性弹性理论)中, Δ 亦为零;如果考虑二级近似,即使 $\sum_i \sigma_{ii}$ 的平均值为零,由于 K 的值与应力有关, Δ 亦不为零。 Δ 的平均值应只依赖于应力分布的标量不变量,诸如单位体积中膨胀应变能的平均值 \bar{W}_d 和单位体积中切应变能的平均值 \bar{W}_s 。这样,平均膨胀率可以表示为

$$\Delta = c_d \bar{W}_d + c_s \bar{W}_s. \quad (7.77)$$

下面我们来计算膨胀系数 c_d 。设想介质中的体元原始的体积为 v_i , 经过形变后变为 v_f 。在形变过程中的体积为 v , 作用于体元的静水压为 $p = -\sum_i \sigma_{ii}/3$, 体积的变化可表示为

$$\frac{dv}{v} = -\frac{dp}{K^*(p)}, \quad (7.78)$$

这里

$$\frac{1}{K^*(p)} = \frac{1}{K} - p \left(\frac{dK}{dp} \right) / K^2 + \dots, \quad (7.79)$$

代入式(7.78), 积分可得

$$\ln\left(\frac{v_f}{v_i}\right) = -\frac{p}{K} + \frac{p^2}{2K^2}\left(\frac{dK^*}{dp}\right) + \dots \quad (7.80)$$

我们将式(7.80)中的对数表示为 $\Delta = (v_f - v_i)/v_i$ 的幂级数, 获得

$$\Delta + \frac{1}{2}\Delta^2 + \dots = -\frac{p}{K} + \frac{p^2}{2K^2}\left(\frac{dK^*}{dp}\right) + \dots \quad (7.81)$$

如果对整个样品求平均值, 由于 $\bar{p} = 0$, 故

$$\bar{\Delta} + \frac{1}{2}\bar{\Delta}^2 = -\frac{\bar{p}^2}{2K^2}\left(\frac{dK^*}{dp}\right) \quad (7.82)$$

应变能与膨胀率之间的关系为

$$W_d = \frac{K\Delta^2}{2} = \frac{\bar{p}^2}{2K} \quad (7.83)$$

这样, 式(7.82)成为

$$\bar{\Delta} = \frac{1}{K}\left(\frac{dK^*}{dp} - 1\right)\bar{W}_d \quad (7.84)$$

$$c_d = \frac{1}{K}\left(\frac{dK^*}{dp} - 1\right) \quad (7.85)$$

类似地可求出

$$c_s = \frac{1}{\mu}\left(\frac{d\mu^*}{dp} - \frac{\mu}{K}\right) \quad (7.86)$$

上述结果可用于位错所引起的体积变化: 单位长度的螺型位错所引起的体积变化为

$$\delta v = \pi(R^2 - r_0^2)\bar{\Delta} \quad (7.87)$$

而在各向同性近似中, 螺型位错的

$$\bar{W}_d = 0, \quad \bar{W}_s = \frac{\mu b^2}{4\pi^2(R^2 - r_0^2)} \ln \frac{R}{r_0} \quad (7.88)$$

这样

$$\delta v = \frac{1}{\mu} \left(\frac{d\mu^*}{dp} - \frac{\mu}{K} \right) W, \quad (7.89)$$

这里的 W 为单位长度位错的能量。对于刃型位错，需要分别计算应力的对角分量和非对角分量所引起的应变能，可得

$$\delta v = \frac{1}{3} \left[\frac{1-\nu-2\nu^2}{1-\nu} \cdot \frac{1}{K} \left(\frac{dK^*}{dp} - 1 \right) + \frac{1-\nu+\nu^2}{1-\nu} \frac{2}{\mu} \left(\frac{d\mu^*}{dp} - \frac{\mu}{K} \right) \right] W. \quad (7.90)$$

表 7.2 列出了弹性能的膨胀系数 c_d 与 c_l 的数据。根据这些数据可以求出位错引起的体膨胀约为 $3/4-2$ 原子体积/原子面。对于刃型位错， W_d 的贡献要比 W_l 大。

表 7.2 弹性能的膨胀系数

金属	c_d 厘米 ³ ·尔格 ⁻¹	c_l 厘米 ³ ·尔格 ⁻¹
铝	3.2×10^{-13}	6.5×10^{-13}
铜	7.3×10^{-13}	2.3×10^{-12}
铁	3.9×10^{-12}	1.6×10^{-12}

§ 7.14 位错的点阵模型

位错的连续介质模型具有一定的局限性，不能用来处理位错线中心区域的问题。而且晶体结构和电子结构对位错性质的影响，在理论中的反映也很粗略（只体现在伯格矢量 \mathbf{b} 及切变弹性模量 μ ）。理论进一步的发展就需要具体考虑位错线周围原子错排的情况，这一类理论通称为位错的点阵模型。^[76]夫仑克耳与康泰洛娃^[9]，佩尔斯（R. Peierls）与纳巴罗^[77,78]都提出过比较简单的点阵模型来处理位错的问题。下面对佩尔斯-纳巴罗模型作一简略的介绍：

考虑简单立方结构中的刃型位错。设想晶体沿了滑移面剖开为两半，先作了相对位移 $b/2$ （见图 7.39），然后再拼凑起来，形成刃型位错。在滑移面两侧的原子面 A 及 B 上的原子都再作了适当的位移，到达平衡状态。令 A 面上各原子列的沿 x 轴的位移以

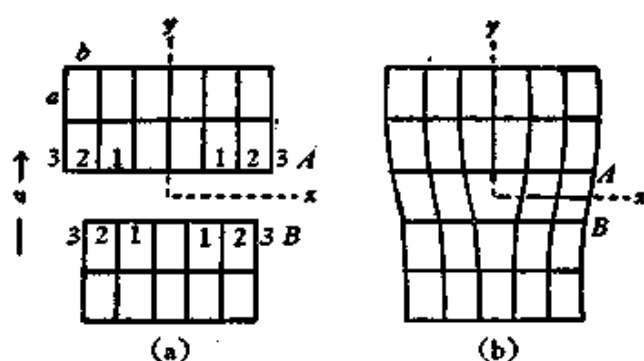


图 7.39 刃型位错的形成。
(a) 两半晶体相对位移 $b/2$; (b) 刃型位错。

$u_x(x)$ 来表示(位移的原点取图 7.39(a) 所示位置)。可以设 B 面对应的原子列作等量而反向的位移 $-u_x(x)$, 则 A, B 面上相对应的原子列的相对位移(以原始的平衡位置为计算原点)可以表示为

$$\phi(x) = 2u_x(x) + \frac{b}{2}. \quad (7.91)$$

ϕ 的边界条件可以按位错的定义来确定

$$\left. \begin{aligned} x = +\infty, \quad \phi = 0, \quad u_x = -\frac{b}{4}; \\ x = -\infty, \quad \phi = b, \quad u_x = \frac{b}{4}. \end{aligned} \right\} \quad (7.92)$$

在位错的近程区域, u_x 可以和这两个数值有较大的偏离, 假定 u_x 是 x 的连续函数, 其大致演变的情况可以用图 7.40 来表示。曲线的具体情况要通过理论的计算。

为了简化计算, 佩尔斯作了下列的假定:

(1) A, B 间互作用的切应力 σ_{xy} 是相对位移 ϕ 的正弦函数(周期为 b)

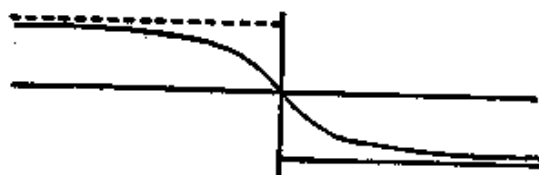


图 7.40 沿滑移面相对位移的分布。

$$\sigma_{xy} = C \sin \left(\frac{2\pi\phi}{b} \right). \quad (7.93a)$$

常数 C 可以根据胡克定律的条件来确定。当 ϕ 很小时，上式可以归结为胡克定律的关系

$$\sigma_{xy} = \frac{2\pi\phi C}{b} = \frac{\mu\phi}{a}, \quad (7.93b)$$

因此

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu}{2\pi} \cdot \frac{b}{a} \sin \left(\frac{2\pi\phi}{b} \right) = - \frac{\mu}{2\pi} \frac{b}{a} \sin \left(\frac{4\pi u_x}{b} \right). \quad (7.93c)$$

(2) A 面以上及 B 面以下的晶体都当作各向同性的连续介质来处理。相当于半无限大的弹性介质表面上有外加力 σ_{xy} (B 面上) 或 $-\sigma_{xy}$ (A 面上) 分布。

σ_{xy} 与 u_x 的关系可以根据经典的弹性力学方法求出。厄谢拜 (J. D. Eshelby) 提出下述的简单求法：我们知道，在连续介质模型中，在 $x_1 = 0$ 处的位错所对应的 u_x 值的分布是

$$\left. \begin{aligned} x > 0, \quad \phi = 0, \quad u_x &= -\frac{b}{4}; \\ x < 0, \quad \phi = b, \quad u_x &= \frac{b}{4}. \end{aligned} \right\} \quad (7.94)$$

在 $x_1 = 0$ 处， u_x 值有一跃变，决定于位错的强度

$$b = -2[(u_x)_{x>0} - (u_x)_{x<0}]. \quad (7.95)$$

在佩-纳模型中， u_x 值是作连续变化的，相当于 u_x 值的跃变散布在 $x = -\infty$ 到 $x = \infty$ 的范围之内，这就等于强度为 b 的位错 (连续介质模型) 分化为强度为无限小的位错沿着滑移面作连续分布。假定在滑移面的一个窄条 dx 中，连续分布的位错的总强度为 $b'dx$ ，则

$$\int_{-\infty}^{\infty} b'(x) dx = b, \quad (7.96)$$

另一方面，按照式 (7.95)，则

$$b'dx = -2 \frac{du_x}{dx} dx. \quad (7.97)$$

按照连续介质模型中位错应力场的公式 (§ 7.7 中的式 (7.20)), 在滑移面上 ξ 到 $\xi + d\xi$ 间强度为 $b'd\xi$ 的位错在滑移面上另一点 x 所产生的切应力为 $\mu b'd\xi/2\pi(1-\nu)(x-\xi)$, 对于全部连续分布的位错进行积分即得出 σ_{xy} 的表示式

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b'd\xi}{x-\xi}. \quad (7.98)$$

以式 (7.97) 的关系代入, 即得

$$\sigma_{xy} = - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{du_x}{d\xi}}{x-\xi} d\xi. \quad (7.99)$$

自式 (7.99) 及式 (7.93c) 消去 σ_{xy} , 就得出一个 u_x 所满足的积分方程

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{du_x}{d\xi}}{x-\xi} d\xi = \frac{(1-\nu)b}{2a} \sin\left(\frac{4\pi u_x}{b}\right). \quad (7.100)$$

满足边界条件的解为

$$u_x = - \frac{b}{2\pi} \arctan \frac{x}{\zeta}, \quad \zeta = \frac{a}{2(1-\nu)}. \quad (7.101)$$

ζ 可以理解为位错的半宽度, 当 $x = \pm\zeta$, $u_x = \mp(b/8)$, 等于无穷远处 u_x 值的一半, 大约地确定了原子严重错排区域的范围. 一般金属的 $\nu \simeq 0.3$, $\zeta = 0.75a$. 表明位错的宽度是很窄的, 在 $x \gg \zeta$ 的区域, 佩-纳模型的解就和连续介质模型基本上相同.

在佩-纳模型中, 位错的能量为三部分的叠加

$$W = W_A + W_B + W_{AB}, \quad (7.102)$$

其中 W_A 及 W_B 分别表示上下两半晶体中的弹性能, 而 W_{AB} 为 A , B 原子面间的相互作用能(称为错排能).

弹性能的计算方法类似于连续介质模型, 只需将 σ_{xy} 的值用佩-纳模型的计算结果代入

$$W_A + W_B = \int_0^1 \int_0^1 \sigma'_{xy} b da dx = \frac{1}{2} \int_0^1 \sigma_{xy} b dx$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\mu b^2}{4\pi a} \int_0^{r_1} \sin \left[2 \arctan \left(\frac{x}{\zeta} \right) \right] dx \\
&= \frac{\mu b^2}{8\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_1^2 + \zeta^2}{\zeta^2}.
\end{aligned} \quad (7.103a)$$

当

$$r_1 \gg \zeta, \quad W_A + W_B \simeq \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{r_1}{\zeta} \right), \quad (7.103b)$$

和连续介质模型的计算结果相近似,但在式(7.50)中数值不确定的 r_0 在这里为位错的半宽度 ζ 所代替。

下面计算错排能。首先可求出一对原子列间的错排能,乘以 $1/2$ 的因素即相当于分摊到每一原子列的错排能

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \int_0^b b \sigma_{xy} d\phi &= \frac{\mu b^3}{8\pi^2 a} \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi\phi}{b} \right) \right] \\
&= \frac{\mu b^3}{4\pi^2 a} \cdot \frac{\zeta^2}{\zeta^2 + x^2}.
\end{aligned} \quad (7.104)$$

令位错到原始的对称位置的距离为 ab , 则滑移面两边的原子位置可以表示为

$$x = \left(\frac{1}{2} n - a \right) b, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7.105)$$

总的错排能即等于各列的叠加

$$W_{AB} = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{\mu b^3}{4\pi^2 a} \cdot \frac{\zeta^2}{\left[\left(\frac{1}{2} n - a \right) b \right]^2 + \zeta^2}. \quad (7.106)$$

具体计算的结果为(参看附录 7-V)

$$W_{AB} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left[1 + 2e^{-\frac{4\pi\zeta}{b}} \cos 4\pi a \right]. \quad (7.107)$$

估计错排能近似值可以只取第一项,和式(7.103)相比较, $\ln(r_1/\zeta)$ 约等于 10, 因而错排能只占位错总能量的 $1/10$ 左右。第二项的绝对值虽然很小,但它是位错位置的周期函数,当位错沿滑移面移动时,将通过一系列势能峰谷的位置,其振幅的两倍相当于单位长度位错移动的激活能