

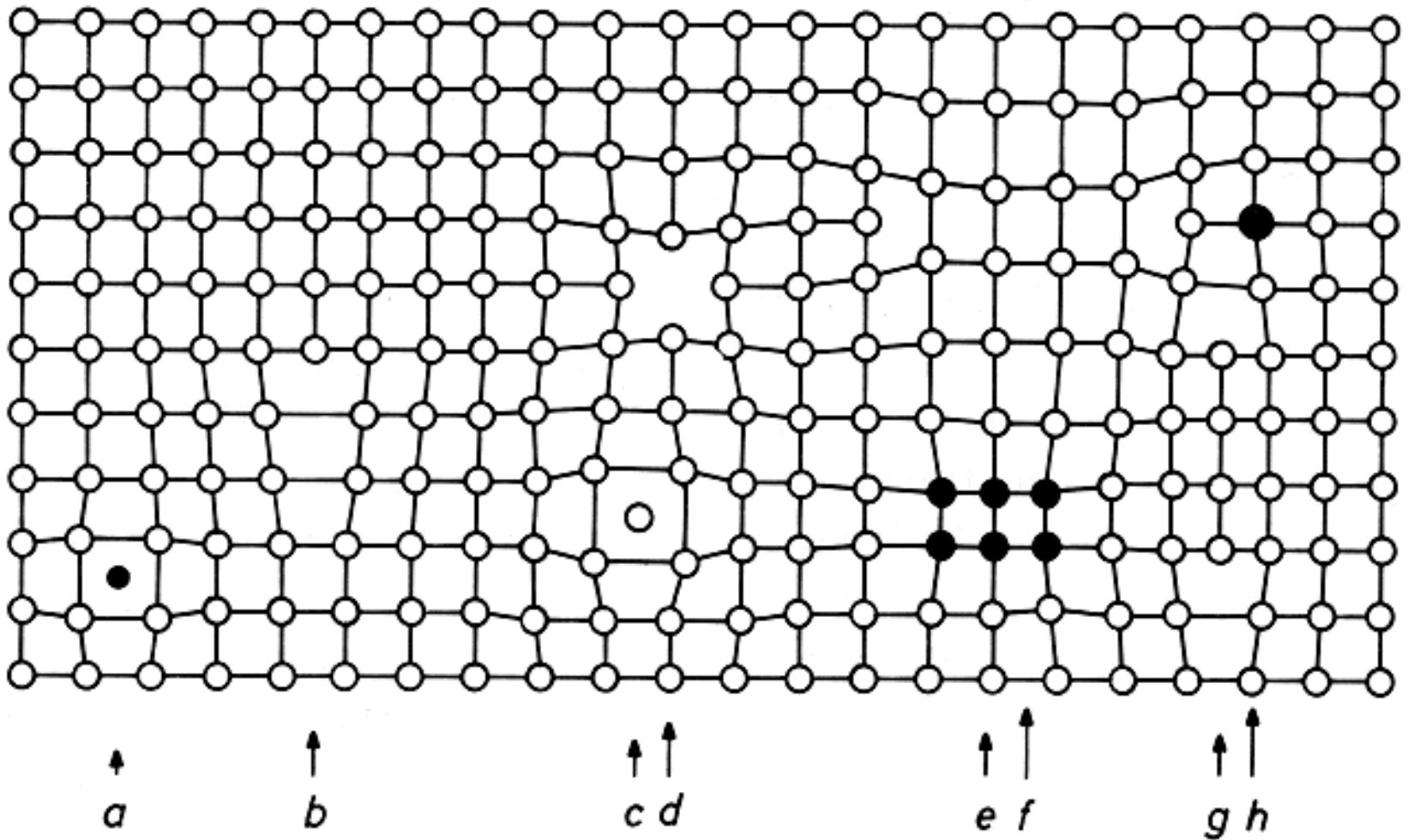
第三章 晶体缺陷

Defects in Crystals

“It is the defects that makes materials so interesting, just like the human being.”

“Defects are at the heart of materials science.”

- 晶体的性能
- 扩散、相变、塑性变形、再结晶等



a) Interstitial impurity atom, b) Edge dislocation, c) Self interstitial atom, d) Vacancy, e) Precipitate of impurity atoms, f) Vacancy type dislocation loop, g) Interstitial type dislocation loop, h) Substitutional impurity atom

实际晶体中的缺陷

- 晶体缺陷：晶体中各种偏离理想结构的区域

根据几何特征分为三类

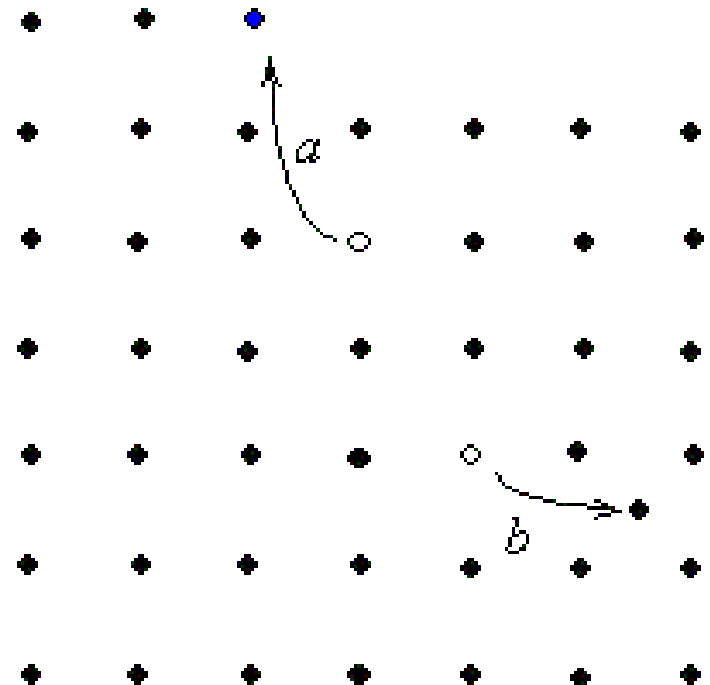
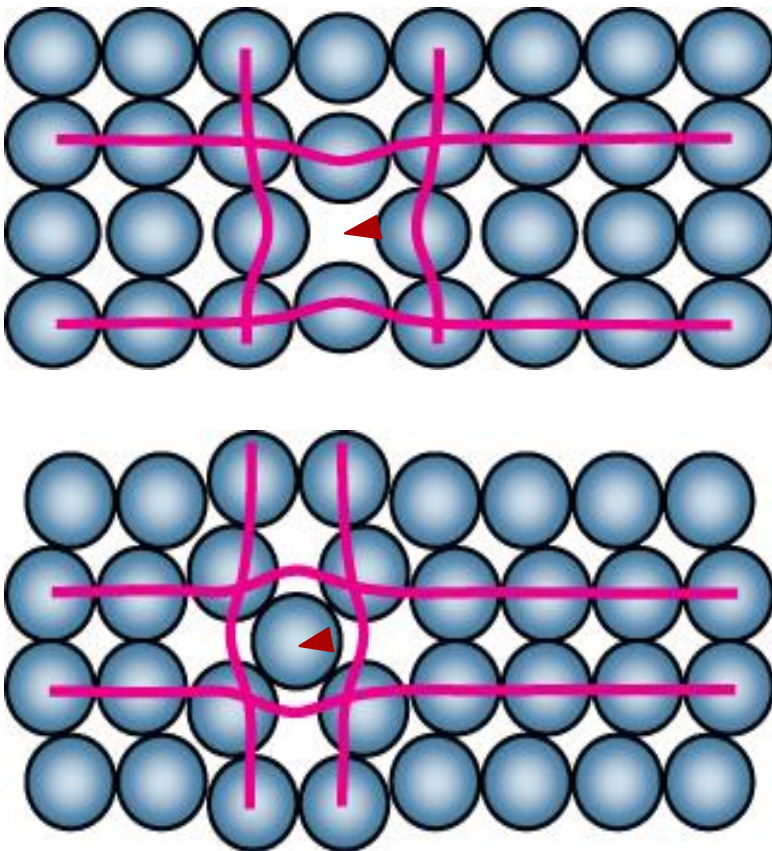
点缺陷 (point defect) 三维空间的各个方向均很小
零维缺陷 (zero-dimensional defect)

线缺陷 (line defect) 在二个方向尺寸均很小
一维缺陷 (one-dimensional defect)

面缺陷 (plane defect) 在一个方向上尺寸很小
二维缺陷 (two-dimensional defect)

点缺陷

点缺陷类型：空位、间隙原子、溶质原子、和杂质原子、
+ 复合体（如：空位对、空位-溶质原子对）

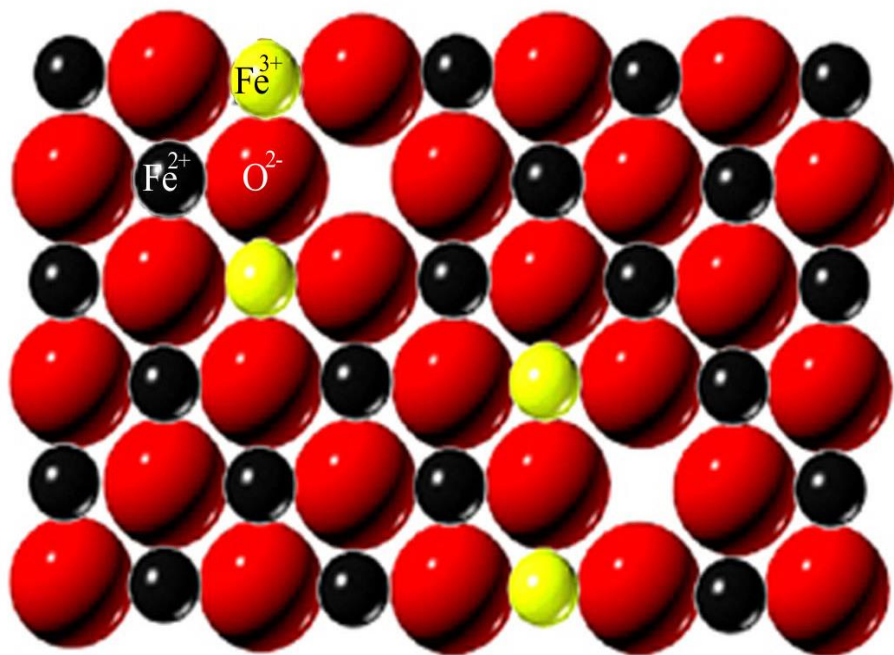


a) 肖脱基缺陷 b) 弗伦克尔缺陷

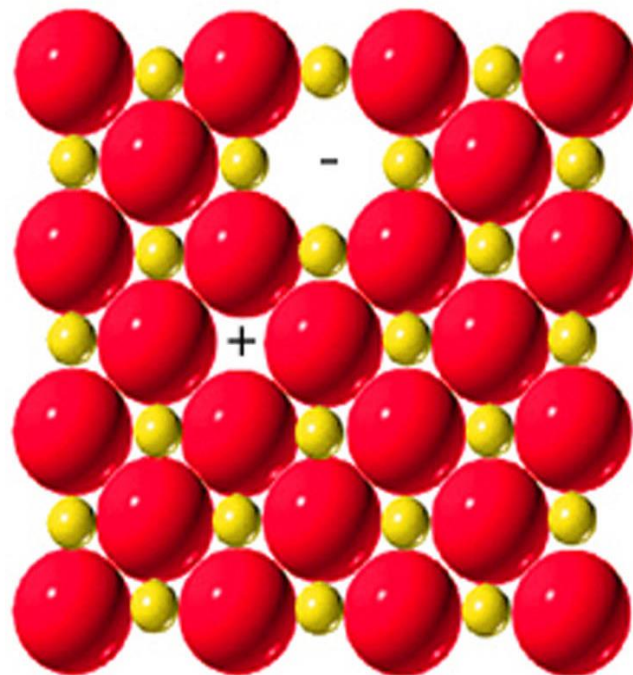
(Schottky)

(Frankel)

离子晶体的点缺陷类型



(a) 正离子空位



(b) 离子空位对

- 如果1个正离子跳到离子晶体的间隙位置，则在正常的正离子位置出现1个正离子空位，这种空位-间隙离子对为Frenkel缺陷；
- 若离子晶体中有一个正离子产生空缺，则临近必有一个负离子空位，形成1个正负离子空位对，即Schottky缺陷；

点缺陷的形成

热运动：强度是温度的函数

能量起伏= \rightarrow 原子脱离原来的平衡位置而迁移

原子热振动

部分原子获得足够高的能量

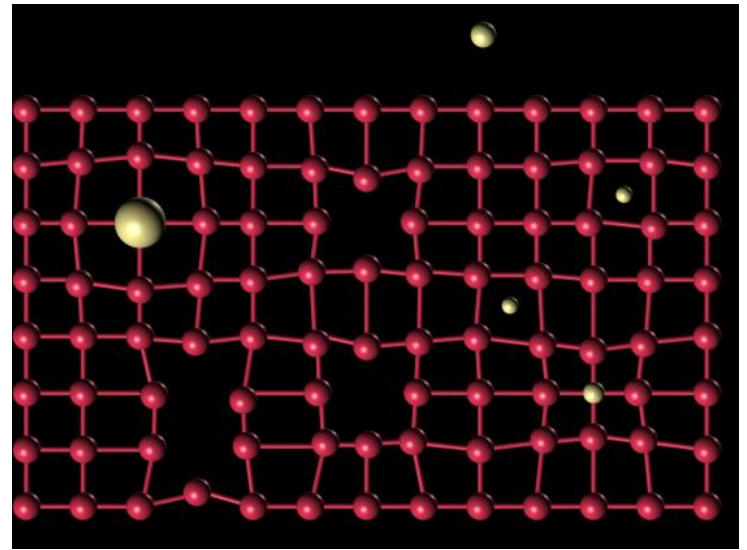
克服约束，迁移到新的位置

形成

空位、间隙原子

引起

局部点阵畸变



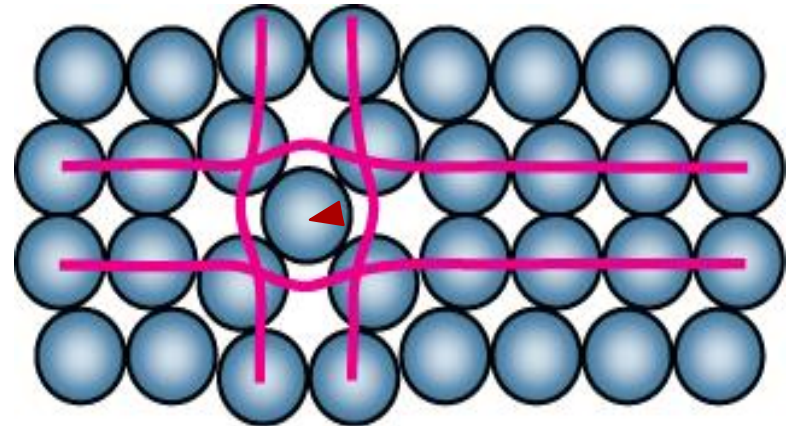
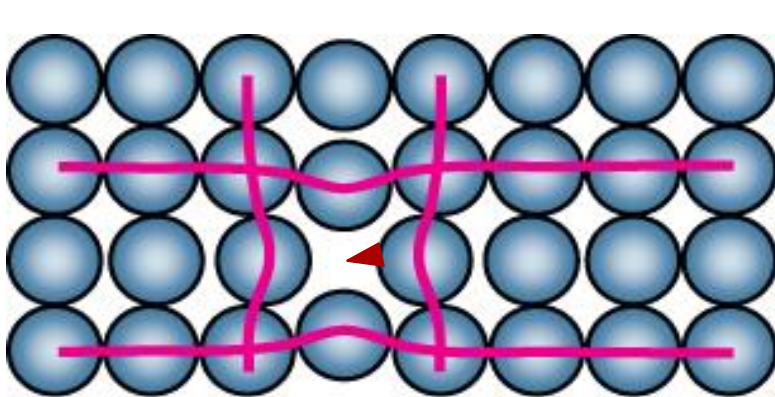
点缺陷的形成能

□ 空位形成能 E_v ：在晶体内取出一个原子放在晶体表面上所需要的能量（不改变表面积和表面能）。

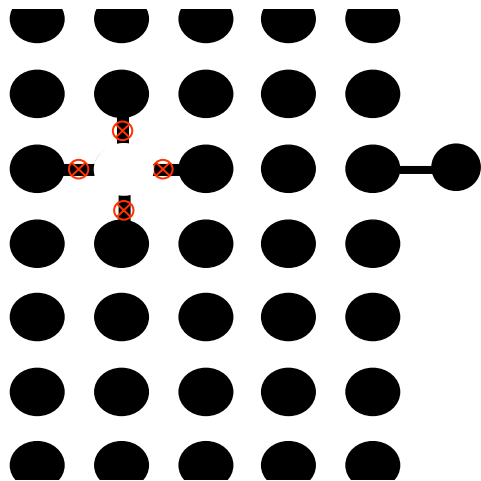
原子 \rightarrow 晶体表面 = 电子能+畸变能

材料熔点的影响？

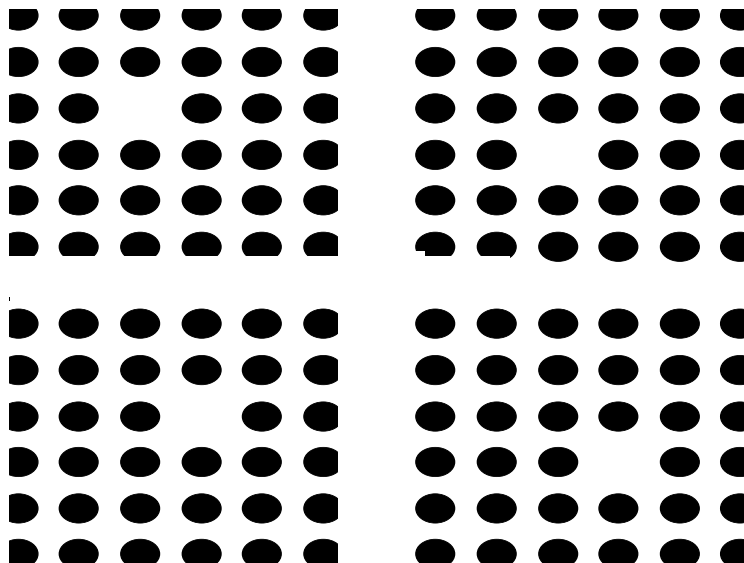
□ 间隙原子形成能： E'_v



点缺陷的平衡浓度



内能增加



熵增加

系统的自由能: $F = U - TS$

U: 内能

S: 总熵值 (包括 S_c 和 S_f)

T: 绝对温度

平衡浓度的推导

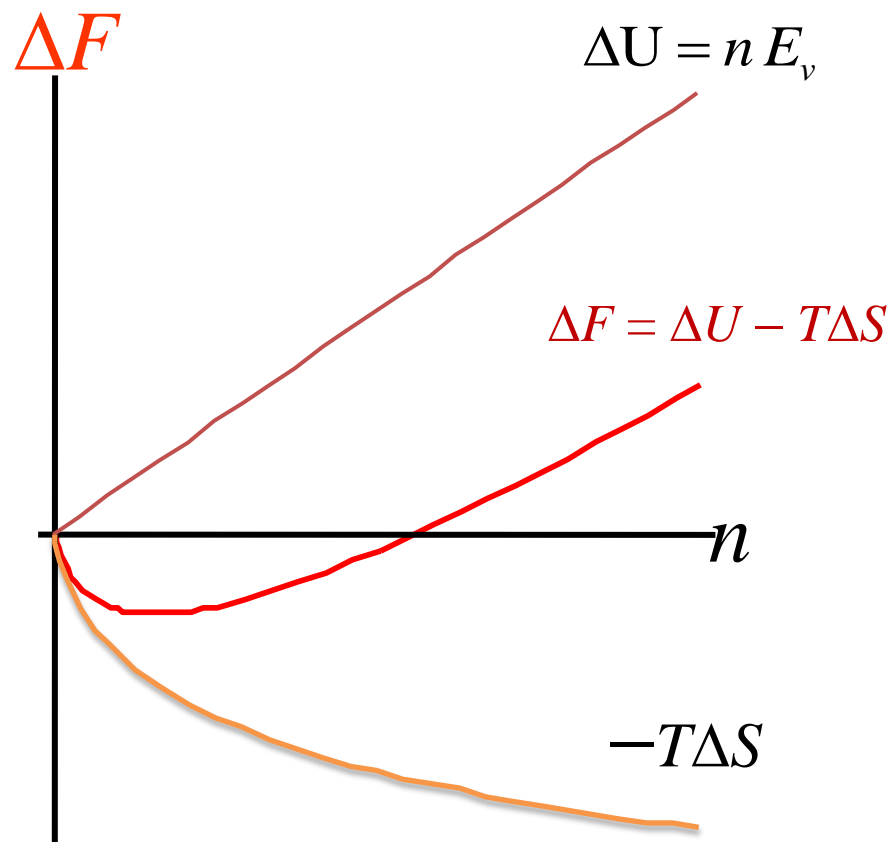
□ 平衡判据

$$F = U - TS \quad \Delta F = nE_v - T(\Delta S_c + n\Delta S_f)$$

$$\left. \frac{\partial \Delta F}{\partial n} \right|_{n=n_{eq}} = 0$$

□ 假设条件:

- (1) 晶体体积保持常数，不随温度而变；每个缺陷的能量与温度无关；
- (2) 缺陷间没有相互作用，彼此独立无关；
- (3) 空位及间隙原子的存在不改变点阵振动的本征频率。



组态熵Sc:

原子个数: N

空位个数: n ($n \ll N$)

位置点数: $N+n$

微观状态数目:

$$W = {}^{N+n}C_n = \frac{(N+n)!}{n!N!}$$

根据统计热力学，组态熵的增值为:

$$\Delta S_c = k[\ln W - \ln 1] = k \ln \frac{(N+n)!}{n!N!}$$

在统计热力学中，系统混乱程度用一定宏观状态对应的微观状态总数 W （热力学概率）来表征。

Stirling Approximation

$$\ln N! \approx N \ln N - N$$

N	$\ln N!$	$N \ln N - N$
1	0	-1
10	15.10	13.03
100	363.74	360.51

$$\Delta S_c = k \left[\ln \frac{(N+n)!}{N!n!} \right] = k [\ln(N+n)! - \ln n! - \ln N!]$$

$$\Delta S_c = k [(N+n) \ln(N+n) - n \ln n - N \ln N]$$

平衡浓度的推导

$$\Delta F = nE_v - T(\Delta S_c + n\Delta S_f)]$$

$$\Delta F = n(E_v - T\Delta S_f) - kT[(N+n)\ln(N+n) - n\ln n - N\ln N]$$

$$\left(\frac{\partial \Delta F}{\partial n}\right)\bigg|_T = 0 \quad \left(\frac{\partial \Delta F}{\partial n}\right)\bigg|_T = E_v - T\Delta S_f - kT[\ln(N+n) - \ln n] = 0$$

$$\ln \frac{N+n}{n} \approx \ln \frac{N}{n} = \frac{E_v - T\Delta S_f}{kT} \quad (N \gg n)$$

$$C = \frac{n}{N} = \exp\left(-\frac{\Delta S_f}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) = A \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right)$$

空位的平衡浓度

平衡浓度(Arrhenius方程):

$$C = A \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right)$$

Al: $E_v = 0.70 \text{ eV}$

$$C = A \exp(-Q_f / RT)$$

Ni: $E_v = 1.74 \text{ eV}$

n/N	0 K	300 K	900 K
Al	0	1.45×10^{-12}	1.12×10^{-4}
Ni	0	5.59×10^{-30}	1.78×10^{-10}

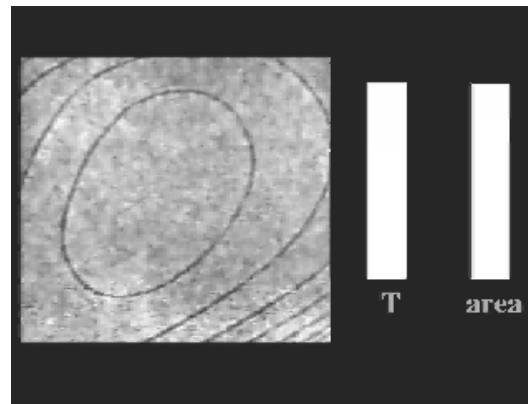
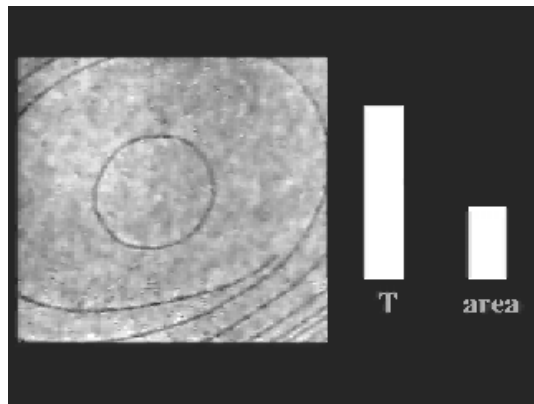
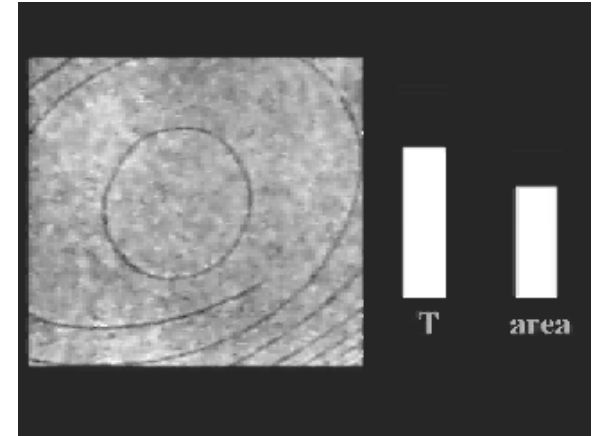
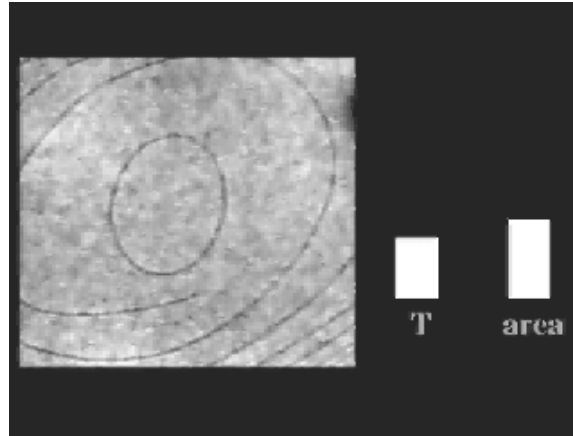
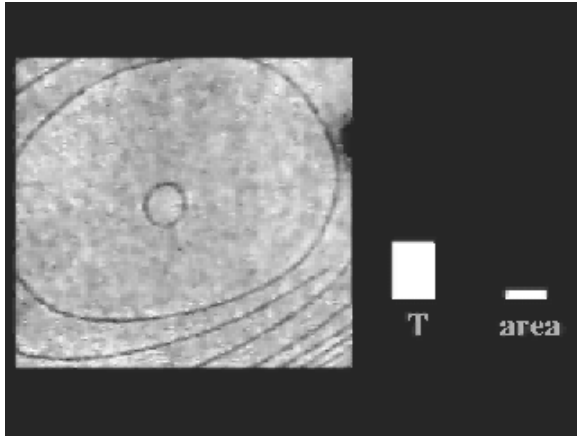
空位是热力学稳定的缺陷。

间隙原子的平衡浓度

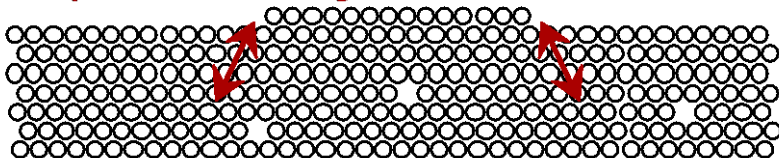
$$C' = A' \exp\left(-\frac{E'_v}{kT}\right)$$

缺陷类型	形成能(eV)	不同温度下的缺陷平衡浓度		
		573℃	1073℃	1573℃
空位	≈ 1	10^{-17}	10^{-7}	10^{-4}
间隙原子	≈ 4	10^{-67}	10^{-25}	10^{-15}

表面台阶与点缺陷的扩散



**Island grows/shrinks to maintain
equil. vacancy conc. in the bulk.**



Reprinted with permission from [Nature](#) (K.F. McCarty, J.A. Nobel, and N.C. Bartelt, "Vacancies in Solids and the Stability of Surface Morphology", *Nature*, Vol. 412, pp. 622-625 (2001). Image is 5.75 μm by 5.75 μm .) Copyright (2001) Macmillan Publishers, Ltd.

过饱和空位

淬火: 高温时晶体中的空位浓度很高, 经过淬火后, 空位来不及通过扩散达到平衡浓度, 在低温下仍保持较高的空位浓度。

冷加工: 金属在室温下进行压力加工时, 由于位错交割所形成的割阶发生攀移, 从而使金属晶体内空位浓度增加。

辐照: 当金属受到高能粒子 (中子、质子、氘核 (*dao*, 氢的同位素之一, 用于热核反应。旧称重氢)、 α 粒子、电子等) 辐照时, 晶体中的原子将被击出, 挤入晶格间隙中, 由于被击出的原子具有很高的能量, 因此还有可能发生连锁作用, 在晶体中形成大量的空位和间隙原子。

点缺陷的运动

□ 热力学稳定的缺陷：产生与消亡达致平衡（迁移和复合）

□ 点缺陷从一个平衡位置到另一个平衡位置，必须获得足够的能量来克服周围势垒的障碍，这一增加的能量为点缺陷的迁移能。

□ 点缺陷的迁移频率

$$\nu = \nu_0 z \exp(\Delta S_m / k) \exp(-\Delta E_m / kT)$$

ν_0 : 振动频率

z : 配位数

k : 波尔兹曼常数

T : 温度

ΔE_m : 空位迁移能

ΔS_m : 空位迁移熵

□ 空位与间隙原子不断地产生与复合，
布朗运动，自扩散

点缺陷浓度及对性能的影响

1、电阻

2、机械性能

3、原子扩散

4、体积



位错概念的提出

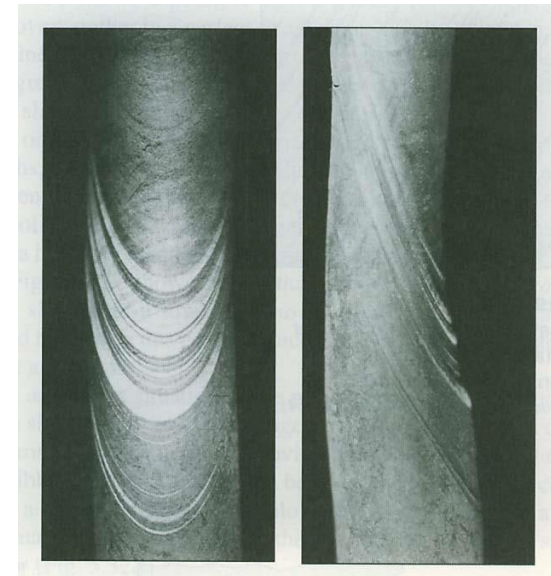
材料科学中的有关晶体的核心概念之一；

《材料科学基础》中最难懂的概念。

现象： 塑性变形的滑移痕迹，滑移线

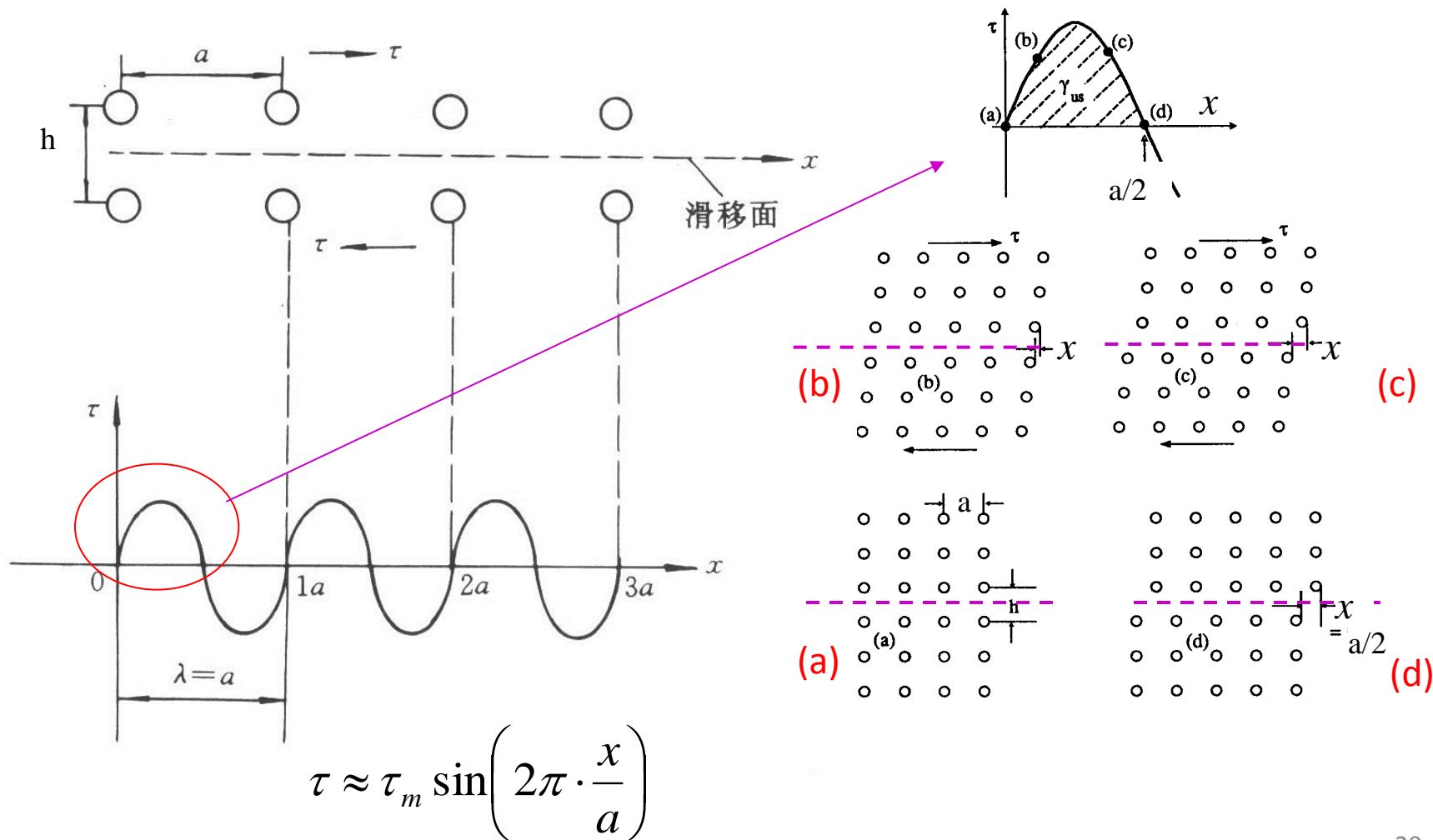
假说： Taylor, Orowan, Polanyi

证实： 上世纪50年代，电镜实验观察



缘起： 单晶体理论强度（滑移的临界剪切应力）
实验现象的理论假设

单晶体理论强度的计算 (一)



单晶体理论强度的计算 (二)

$$\tau = \tau_{\max} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \Rightarrow \frac{d\tau}{dx} = \frac{2\pi}{a} \tau_{\max} \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$$\therefore \frac{d\tau}{d\gamma} = G \quad \gamma = \frac{x}{h}$$

$$\therefore \frac{d\tau}{dx} = \frac{d\tau}{d\gamma} \frac{d\gamma}{dx} = G \cdot \frac{1}{h}$$

$$\left(\frac{d\tau}{dx}\right)_{x=0} = \frac{2\pi}{a} \tau_{\max}$$

$$\tau_{\max} = \frac{G}{2\pi} \cdot \frac{a}{h}$$

$$a \approx h \downarrow$$

$$\tau_{\max} \approx \frac{G}{2\pi} \propto 0.1G$$

计算中的假设

$$\tau_m \propto 0.01 - 0.1G$$

问题：一般金属材料 $G=10^{10} \sim 10^{11} \text{ pa}$

则 $\tau_M = 10^9 \sim 10^{10} \text{ pa}$ (理论)

而 $\tau_M = \sim 10^6 \text{ pa}$ (实测)

晶体的理论切应力与实验值的比较（单位：**MPa**）

金属	理论切应力	实验值	切变模量
Al	3830	0.786	24400
Ag	3980	0.372	25000
Cu	6480	0.490	40700
α-Fe	11000	2.75	68950
Mg	2630	0.393	16400

计算中的假设

$$\tau_m \propto 0.01 - 0.1G$$

问题：一般金属材料 $G=10^{10} \sim 10^{11} pa$

则 $\tau_M=10^9 \sim 10^{10} pa$ (理论)

而 $\tau_M=\sim 10^6 pa$ (实测)

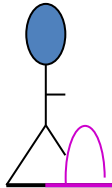
- 1.完整晶体，没有缺陷
- 2.整体滑动
- 3.正弦曲线 (0.01-0.1G)

问题出在假设1和2上！ 应是局部滑移！



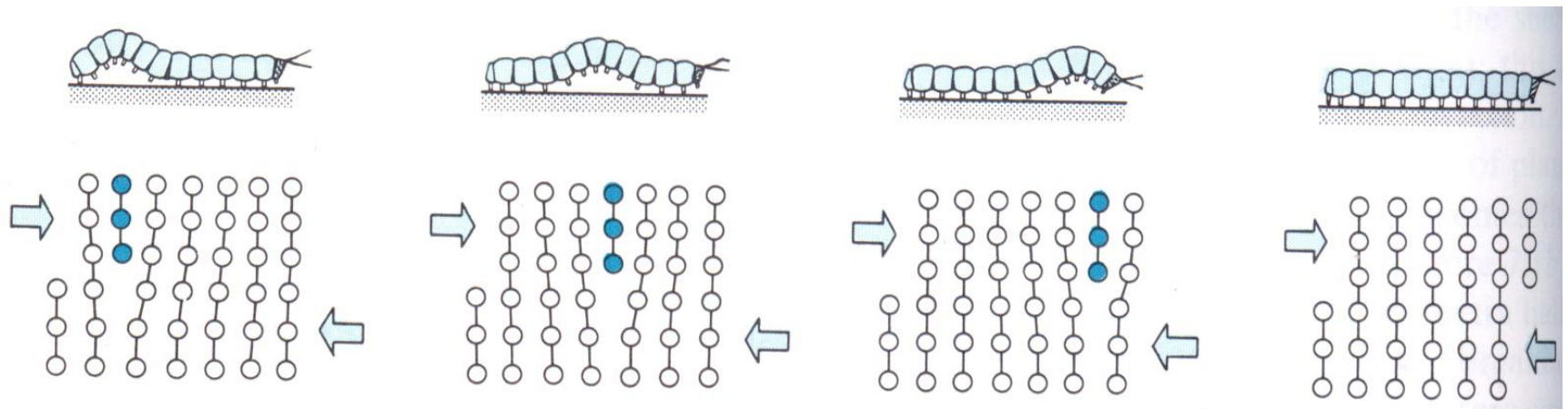
日常生活和大自然的启示= \rangle

有缺陷晶体的局部滑动



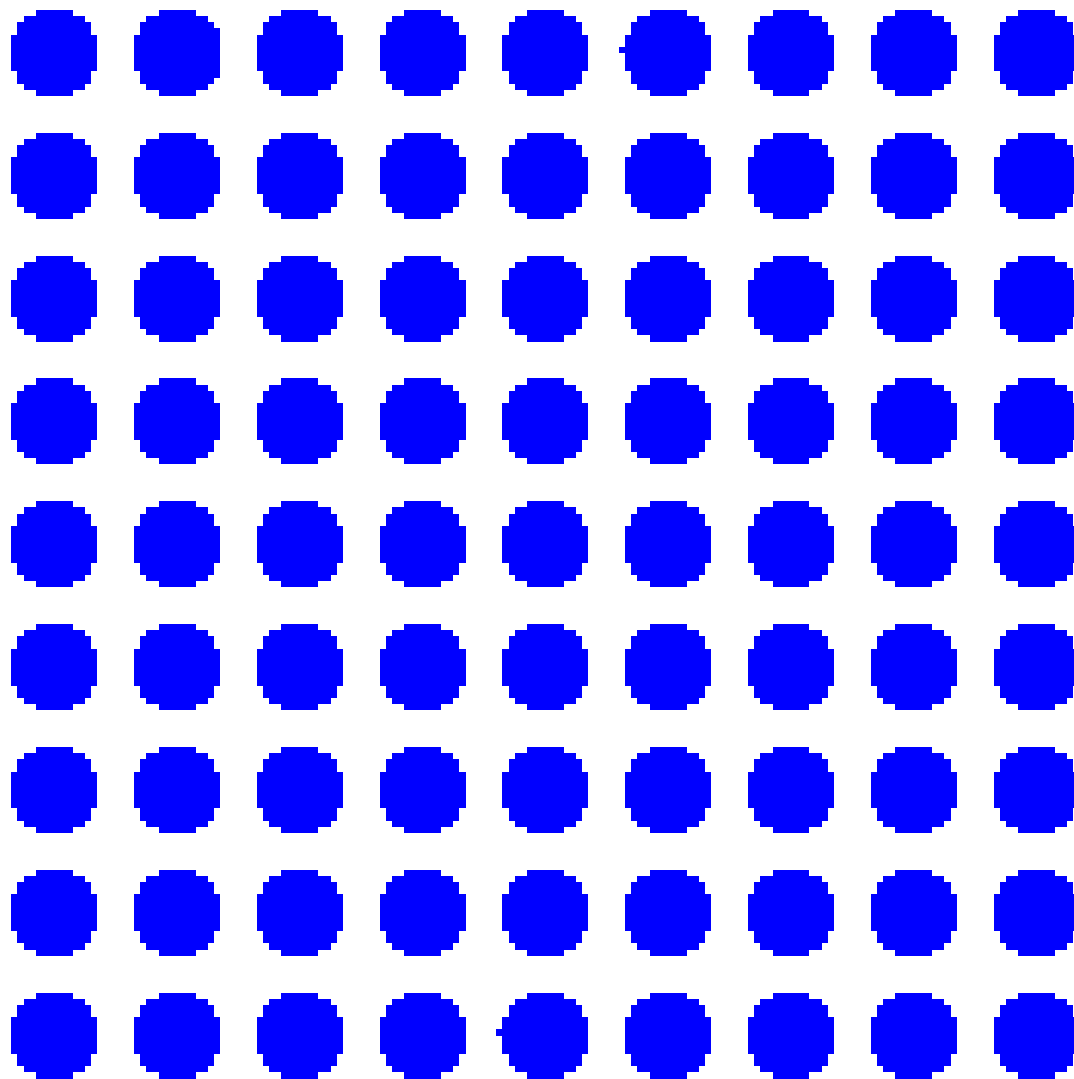
小宝移大毯！

毛毛虫的蠕动

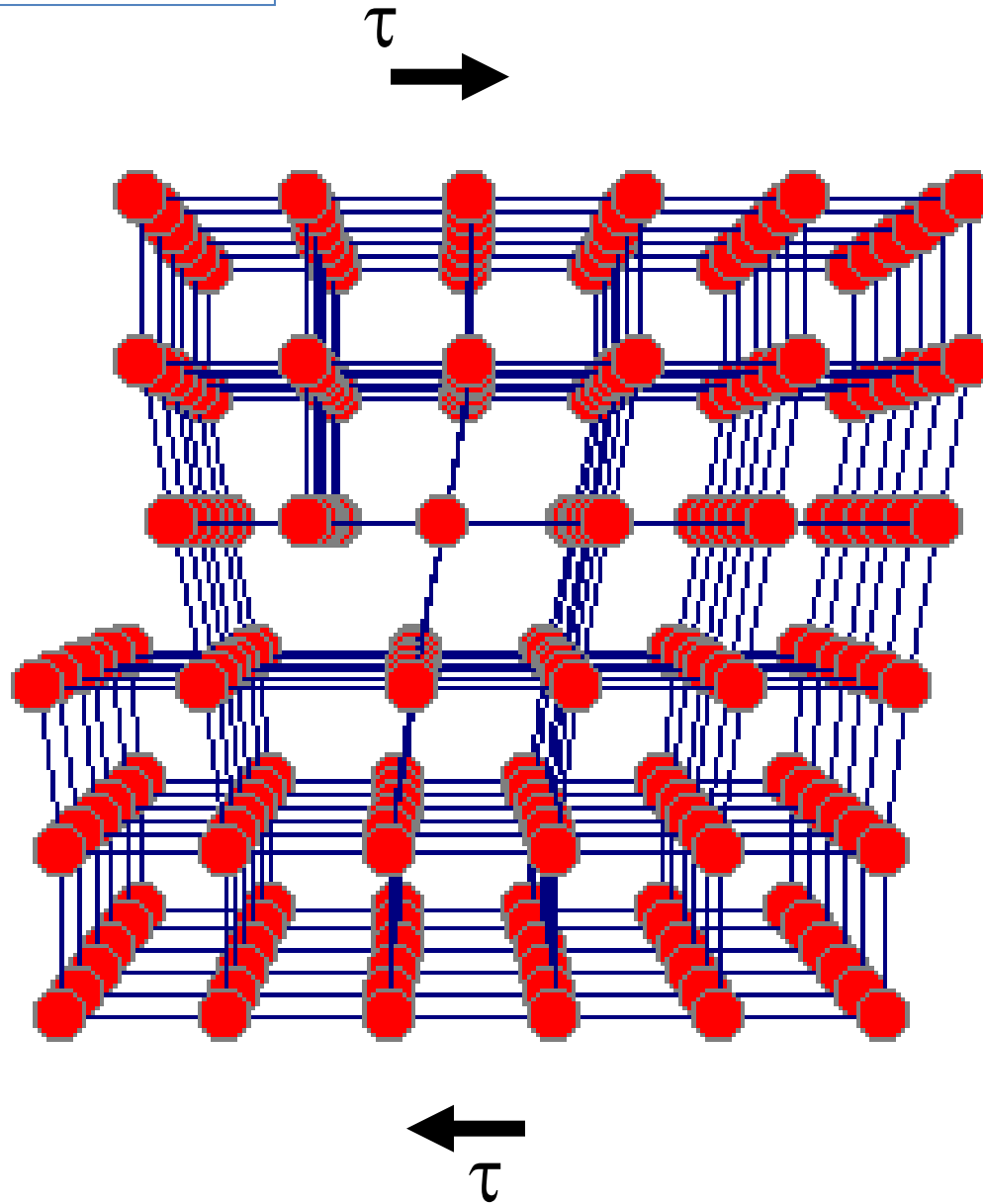


存在着某种缺陷---位错（dislocation）
位错的运动（逐步传递）=>晶体的逐步滑移

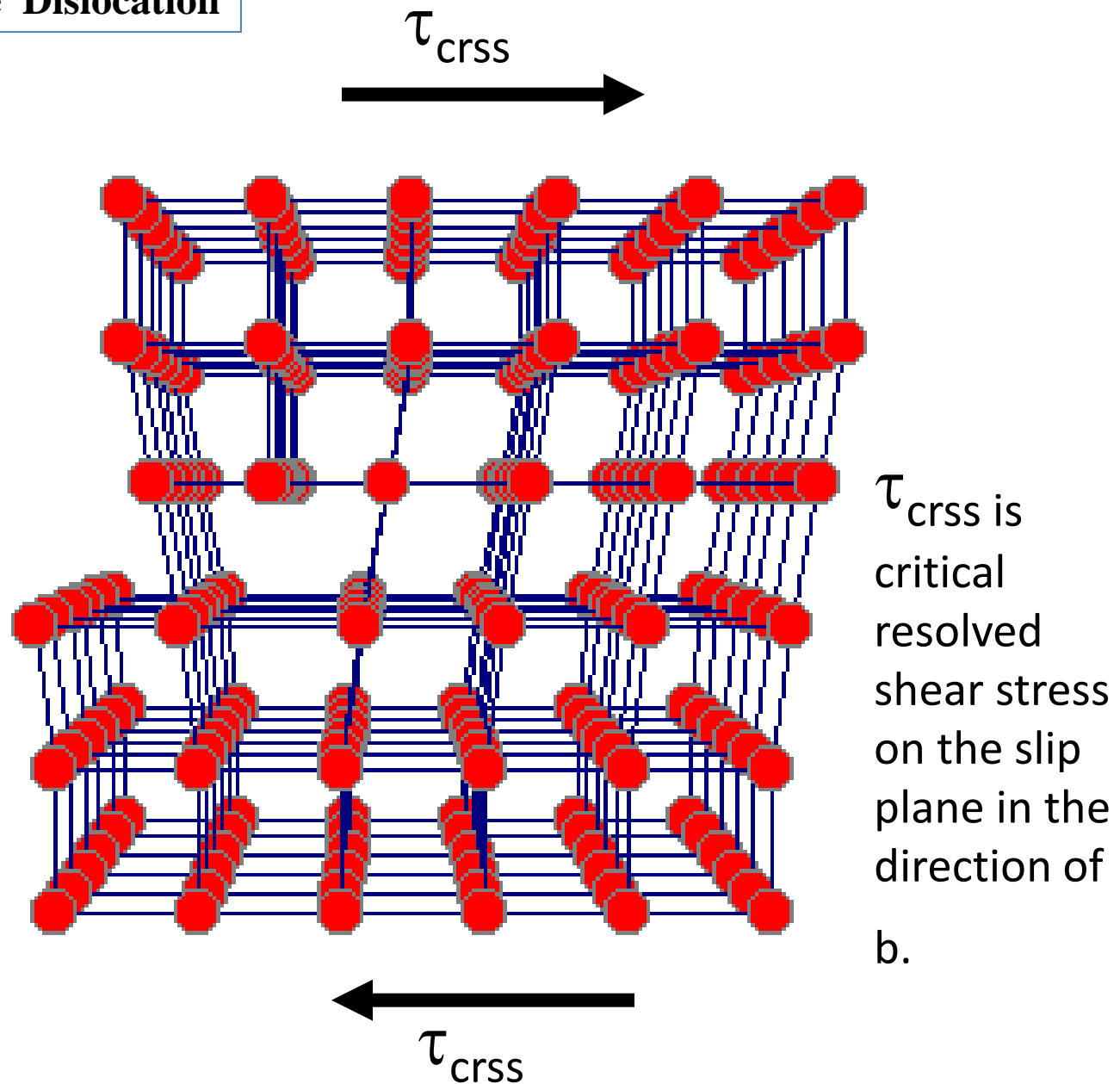
有缺陷晶体的局部滑动



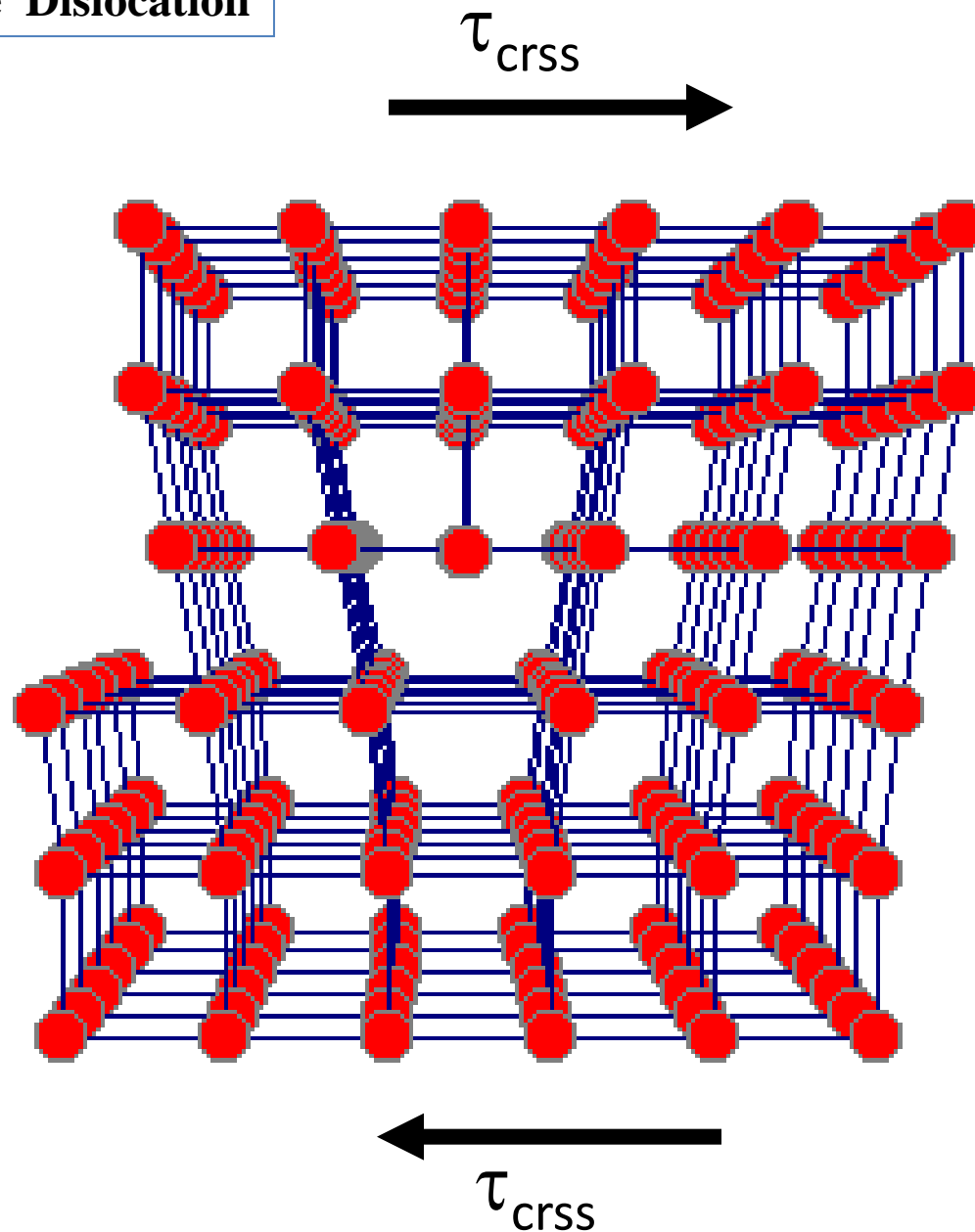
Glide of an Edge Dislocation



Glide of an Edge Dislocation

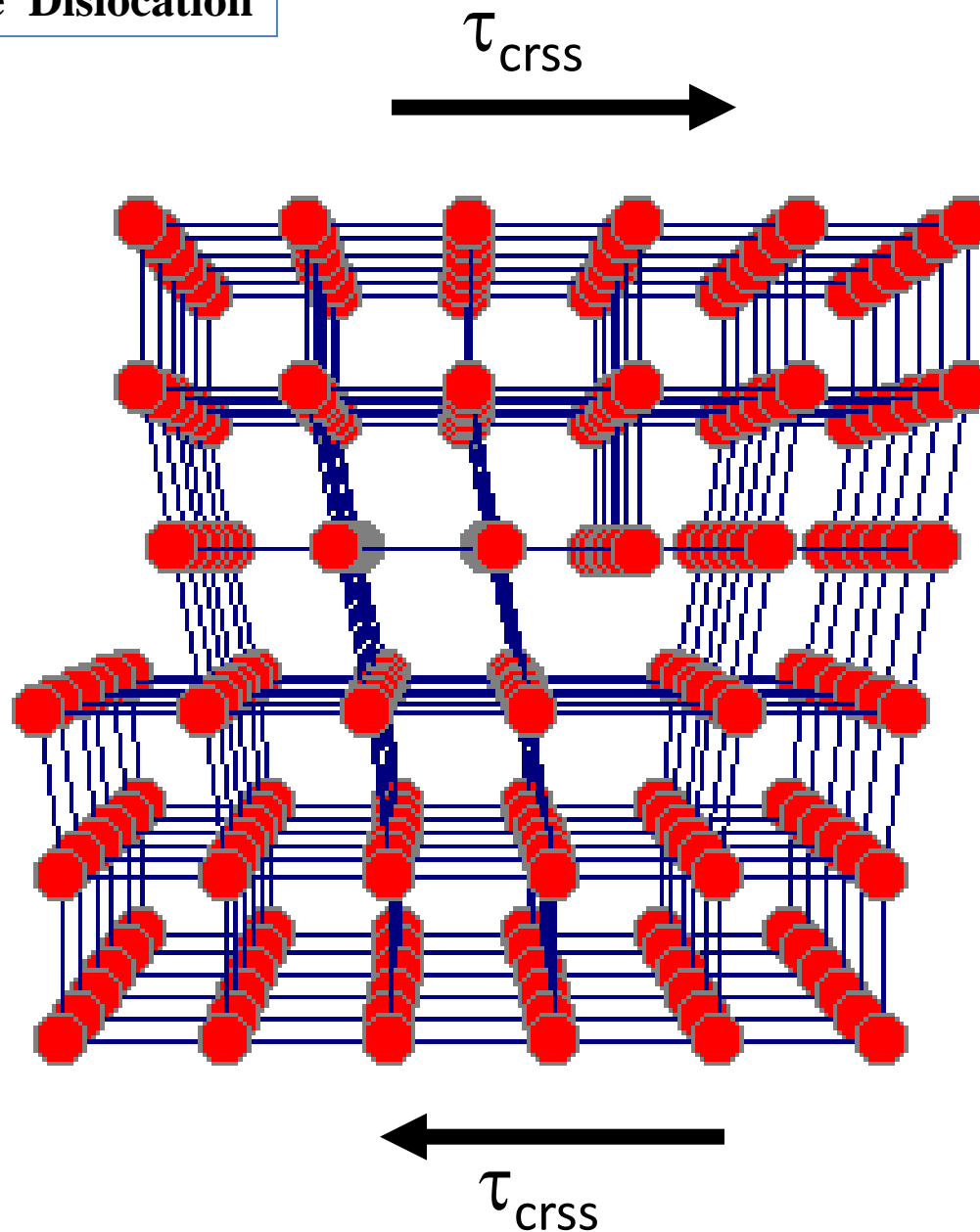


Glide of an Edge Dislocation



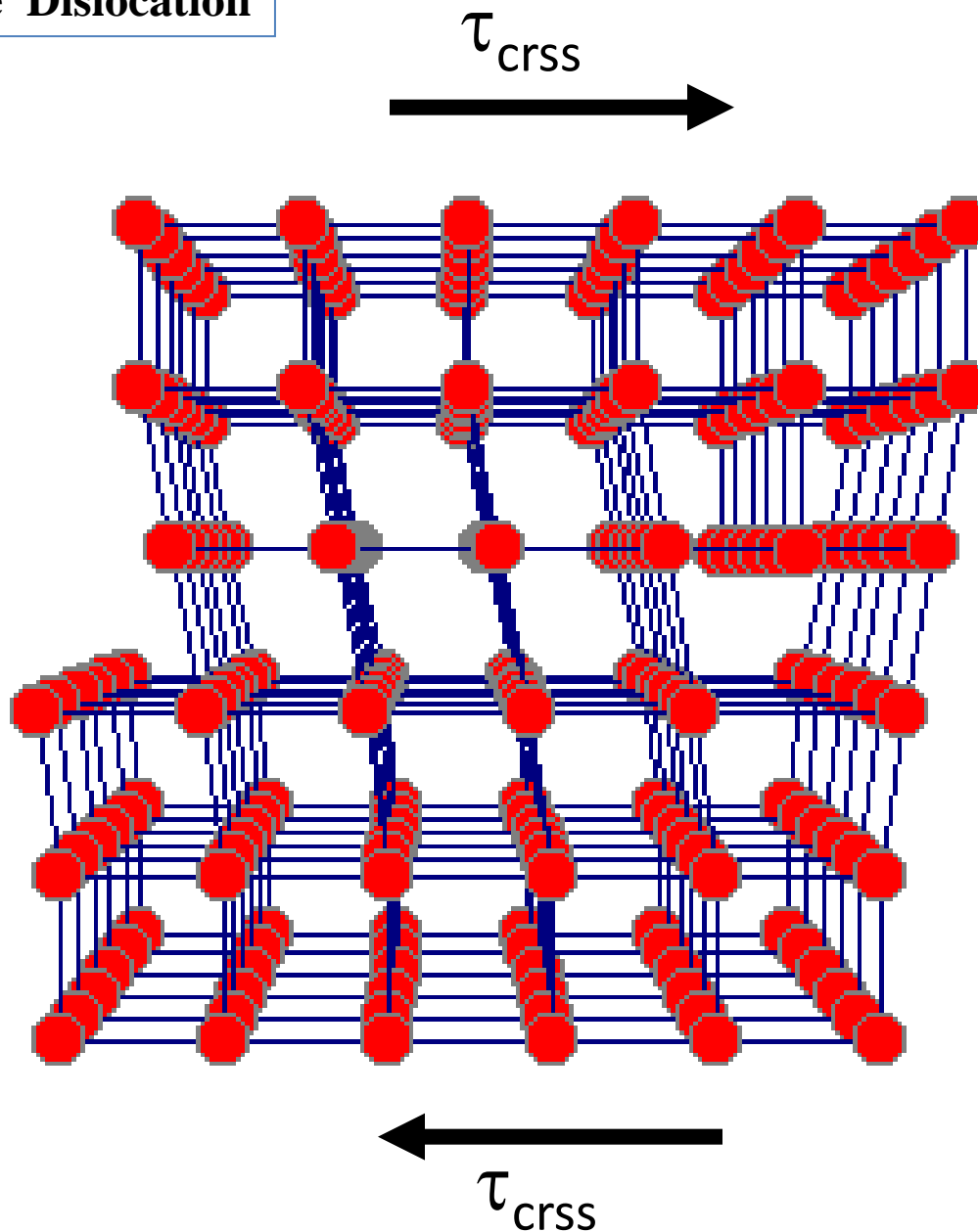
τ_{crss} is critical resolved shear stress on the slip plane in the direction of b.

Glide of an Edge Dislocation



τ_{crss} is critical resolved shear stress on the slip plane in the direction of b .

Glide of an Edge Dislocation



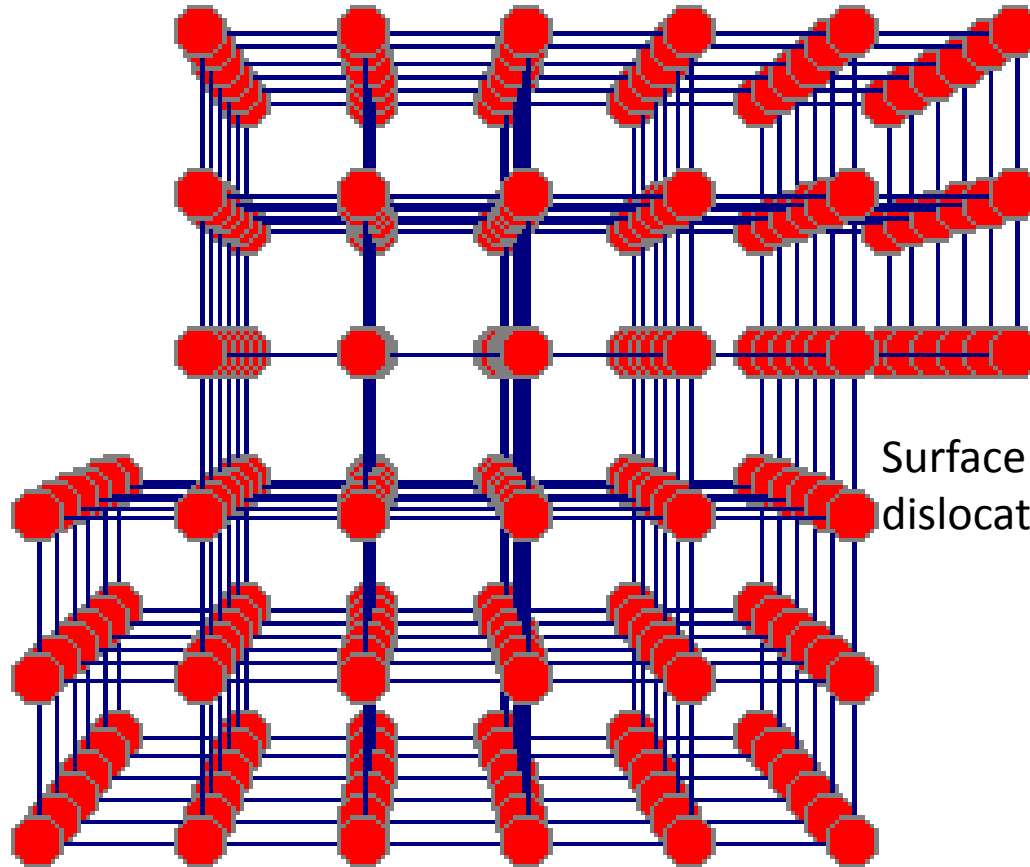
τ_{crss} is critical resolved shear stress on the slip plane in the direction of b.

Glide of an Edge Dislocation

τ_{crss}



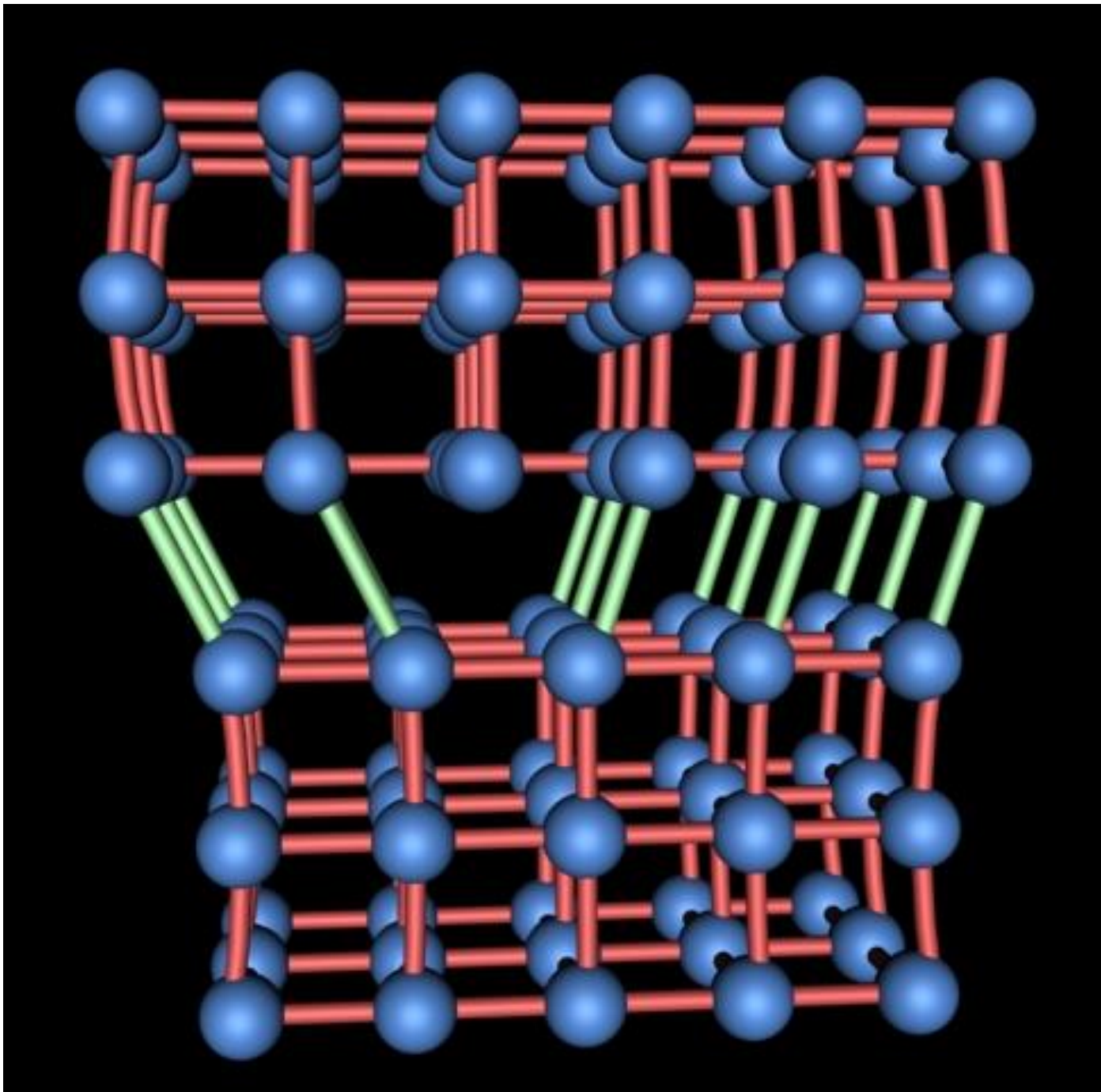
A surface step of b is created if a dislocation sweeps over the entire slip plane



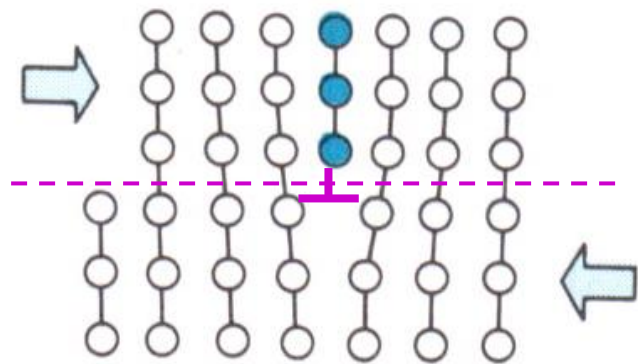
Surface step, not a dislocation



τ_{crss}



位错：滑移面上已滑动区域与未滑动区域的边界



晶体局部滑动的推进=位错运动

运动前方：未滑动区域

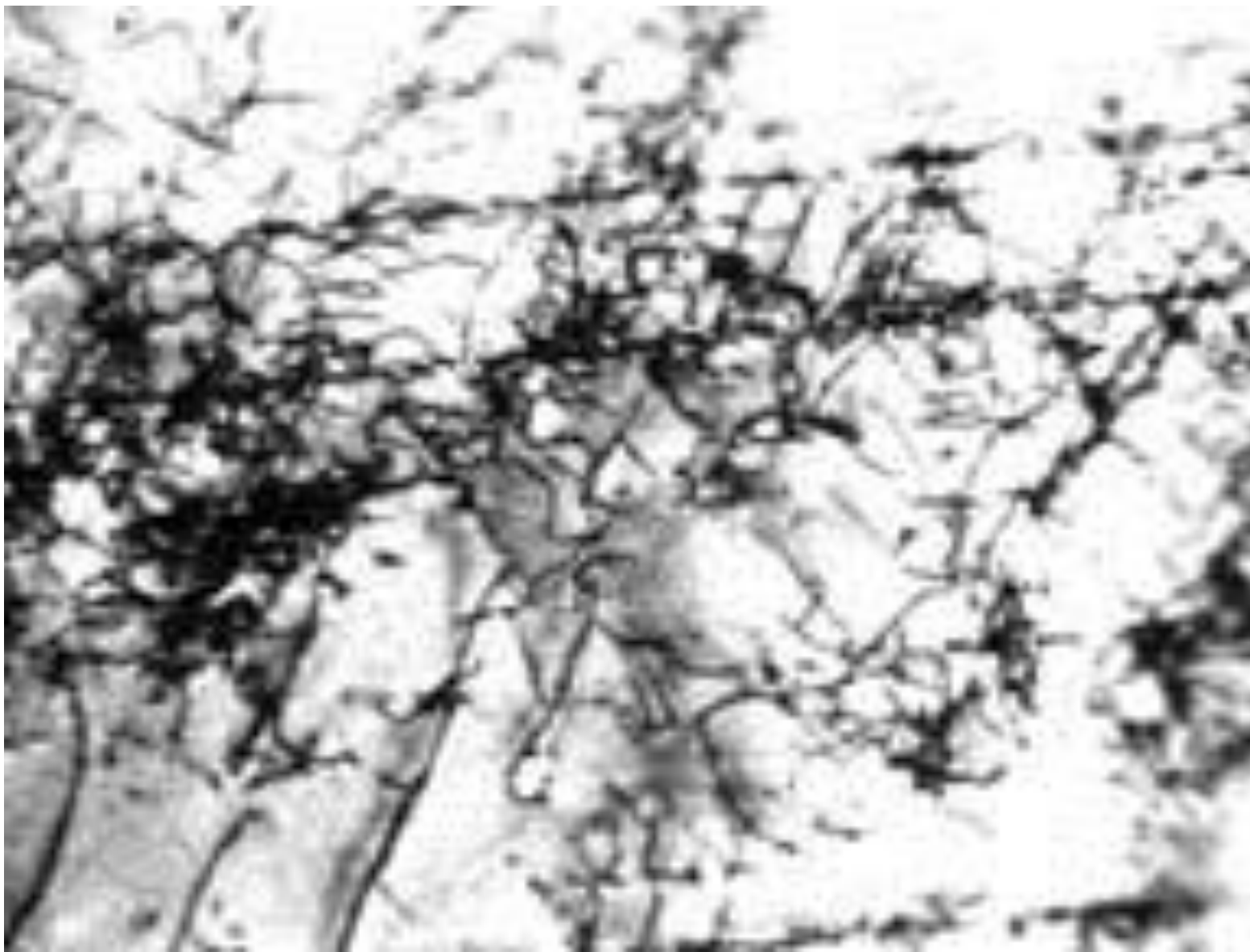
运动后方：已滑动区域

边界：位错所在位置，位错线

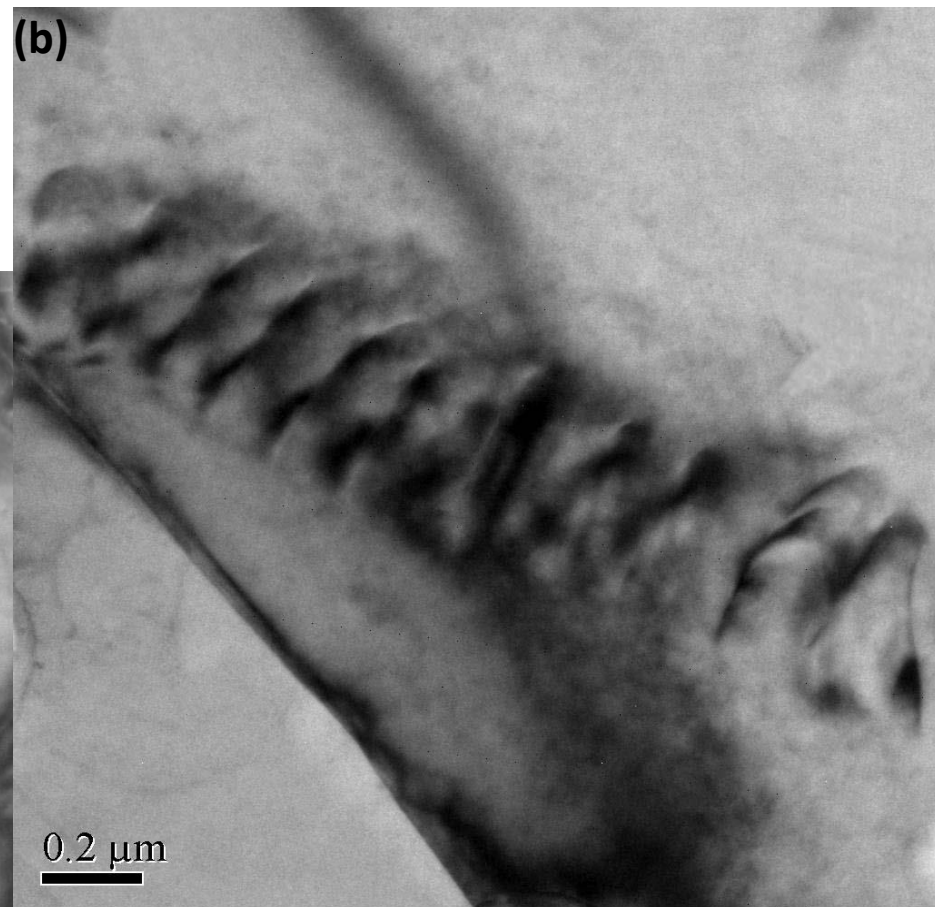
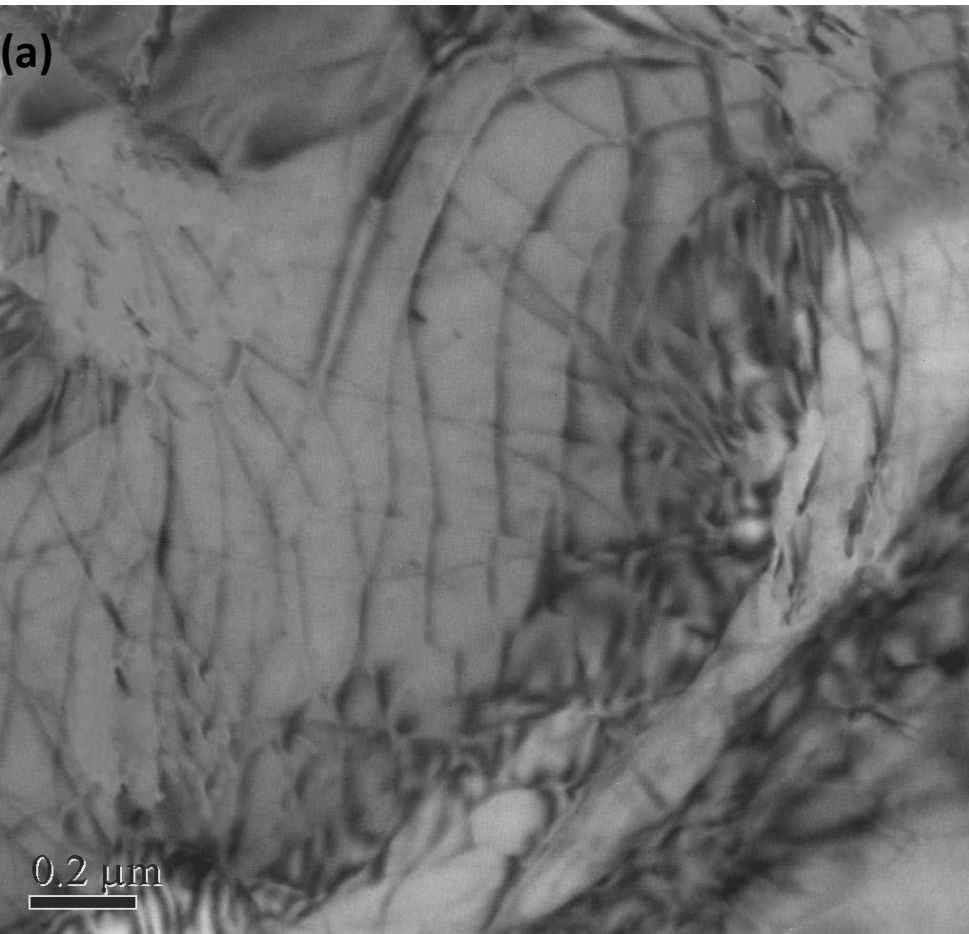
两个几何参量（矢量）表征位错的几何特征：

（不考虑位错核心结构）

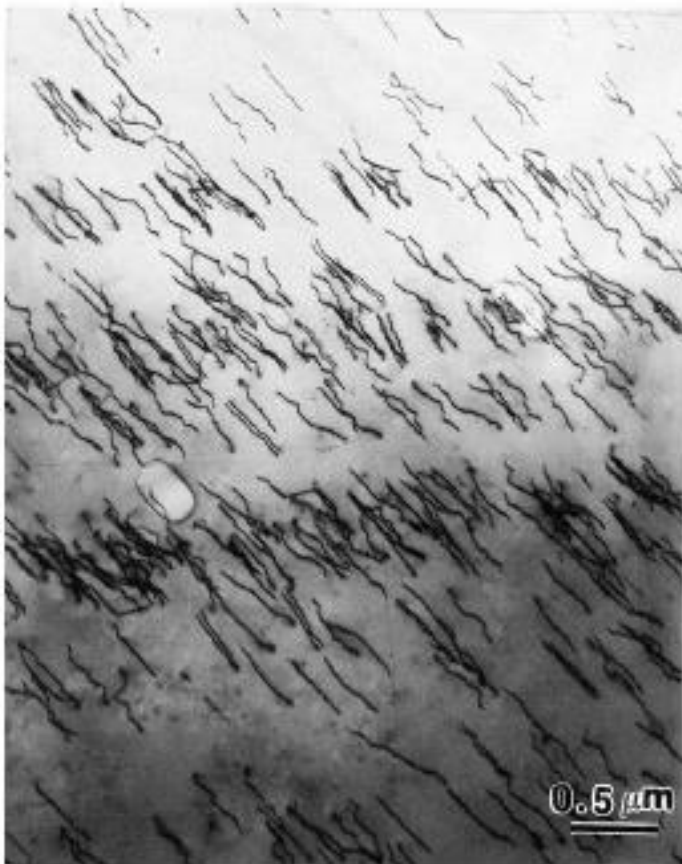
{ 位错线方向矢量（切矢量）
滑移矢量（柏氏矢量）



透射电子显微镜下观察到不锈钢316L ($00\text{Cr}17\text{Ni}14\text{Mo}2$)的位错线与位错缠结

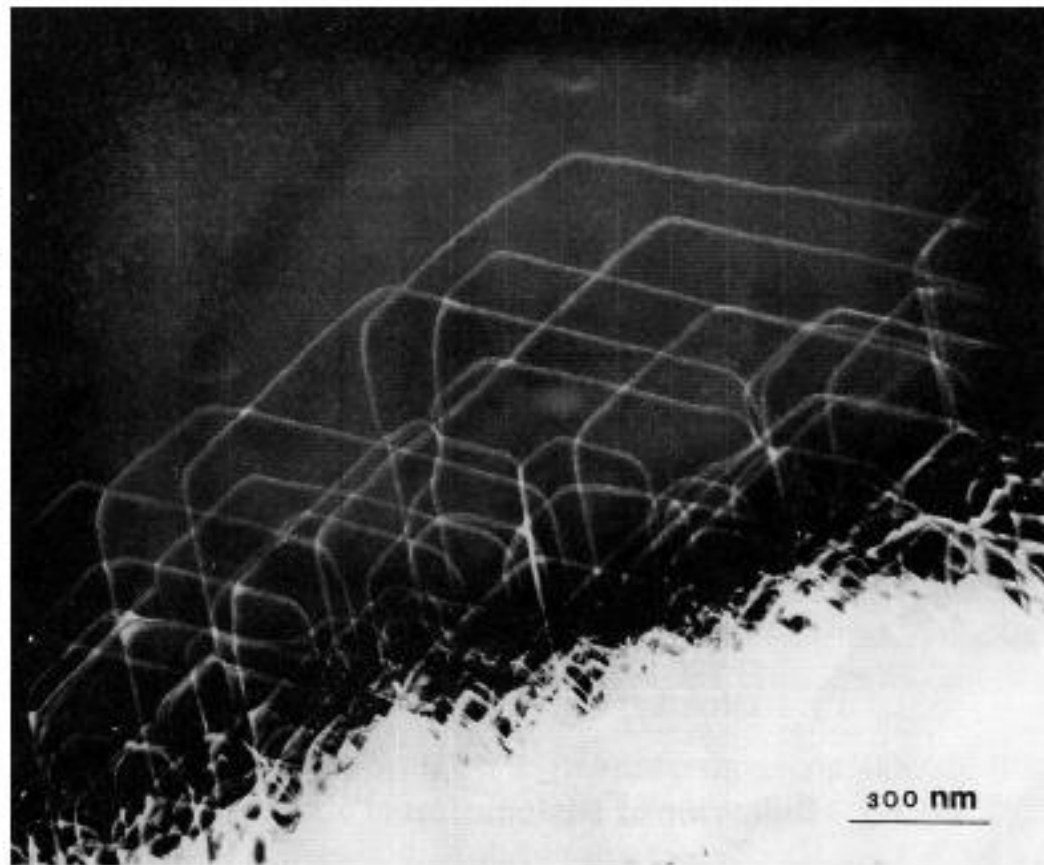


挤压态Mg-0.6Zr合金显微组织TEM像
(a) 位错缠结网；(b) 位错胞壁



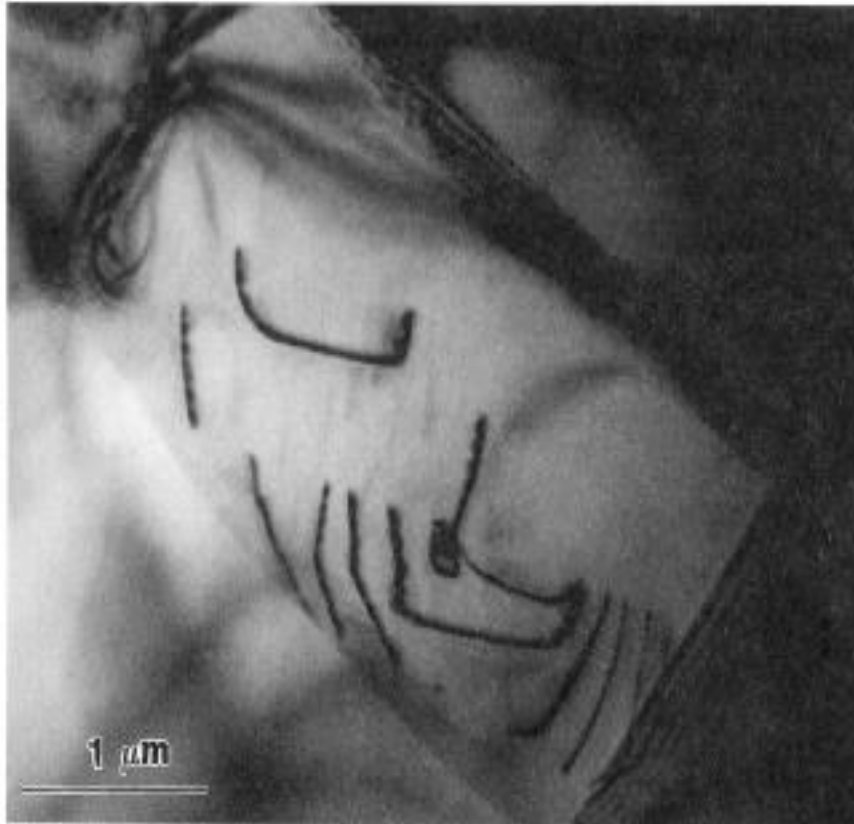
(a)

(a) Titanium

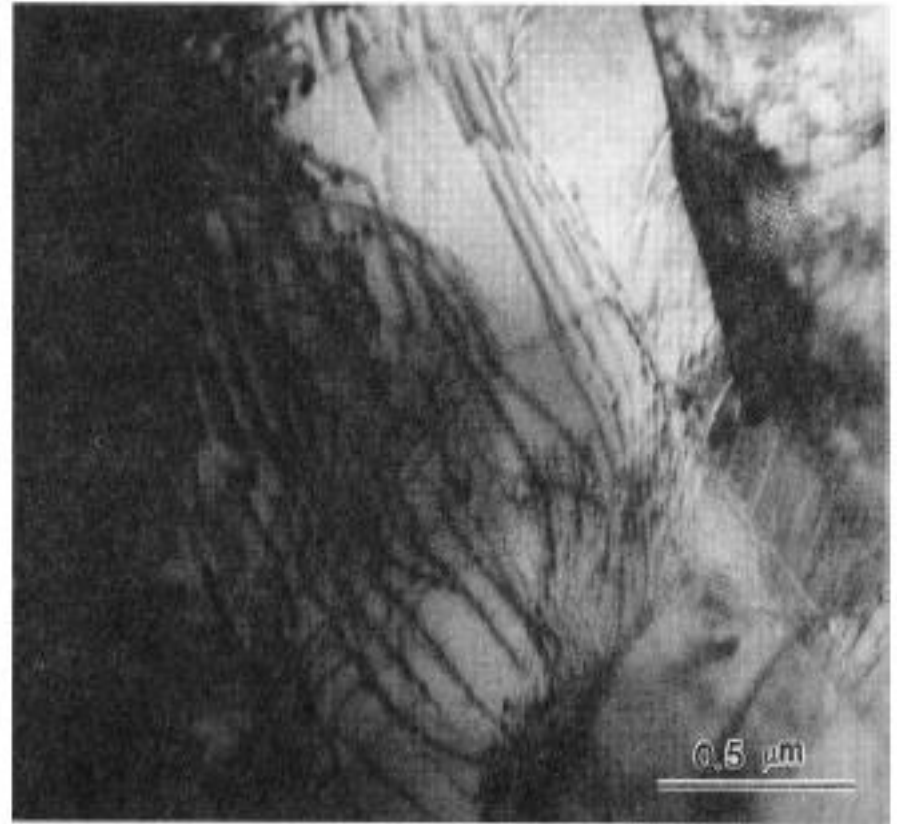


(b)

(b) Silicon.

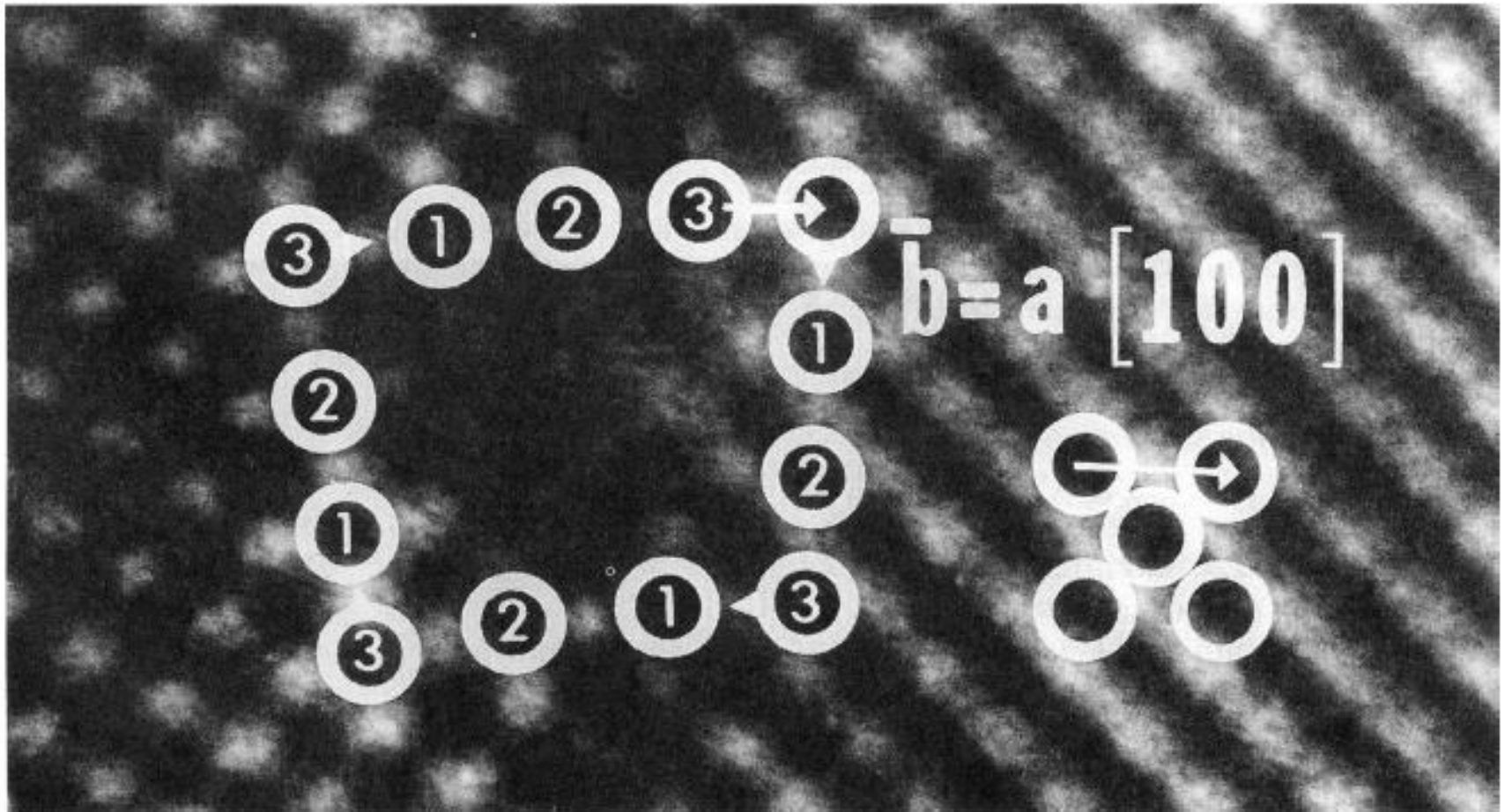


(a)



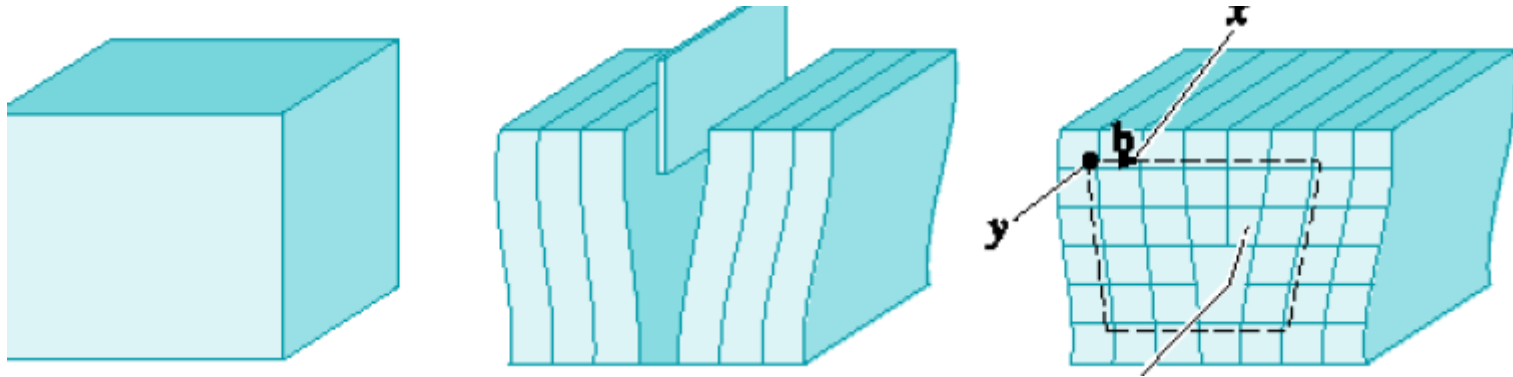
(b)

Dislocations in (a) Al_2O_3 and (b) TiC



Atomic resolution transmission electron micrograph of dislocation in molybdenum with a Burgers circuit around it. (Dislocation in Molybdenum)

刃型位错 edge dislocation

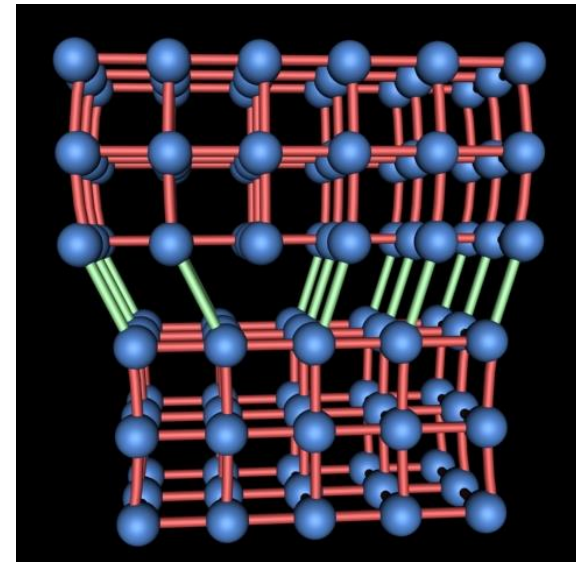


其形状类似于在晶体中插入一把刀刃而得名。

特征：

- 1) 有一额外原子面，额外半原子面刃口处的原子列称为位错线
- 2) 位错线垂直于滑移矢量，位错线与滑移矢量构成的面是滑移面，刃位错的滑移面是唯一的。

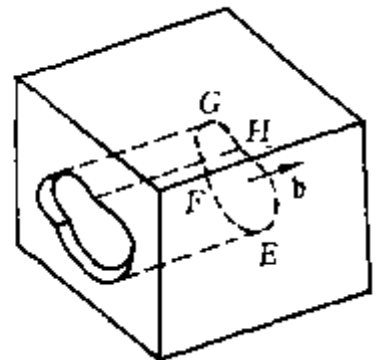
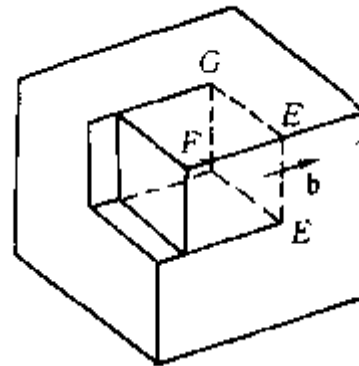
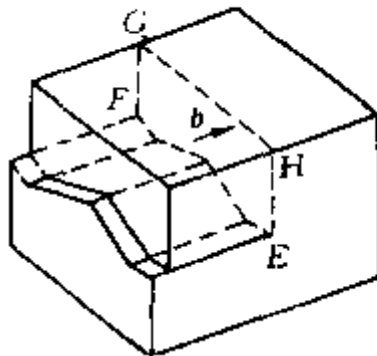
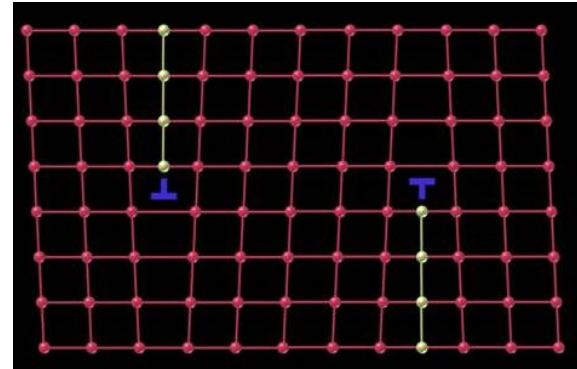
* 畸变区是狭长的管道，故位错可看成是线缺陷。

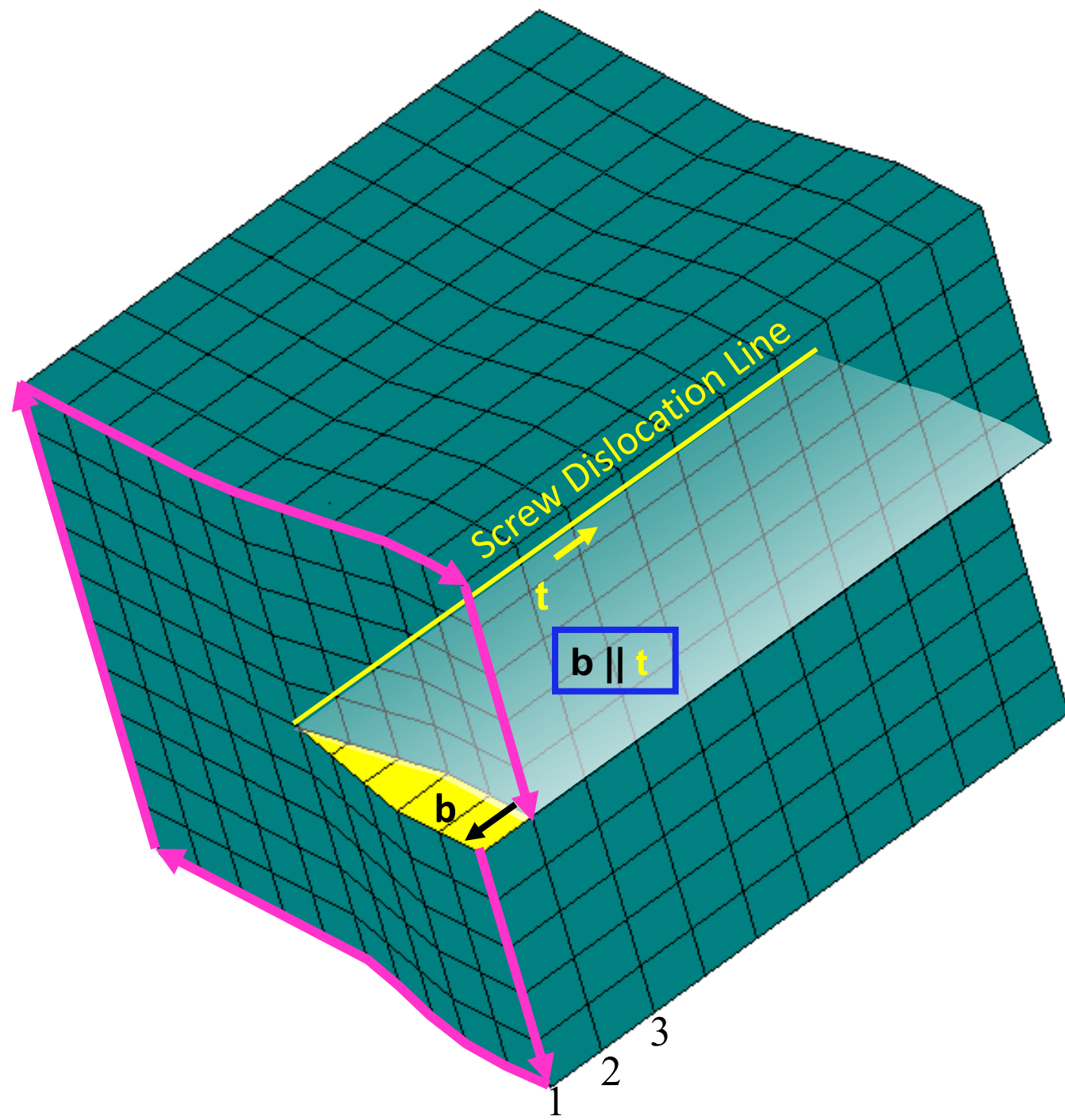


刃型位错 edge dislocation

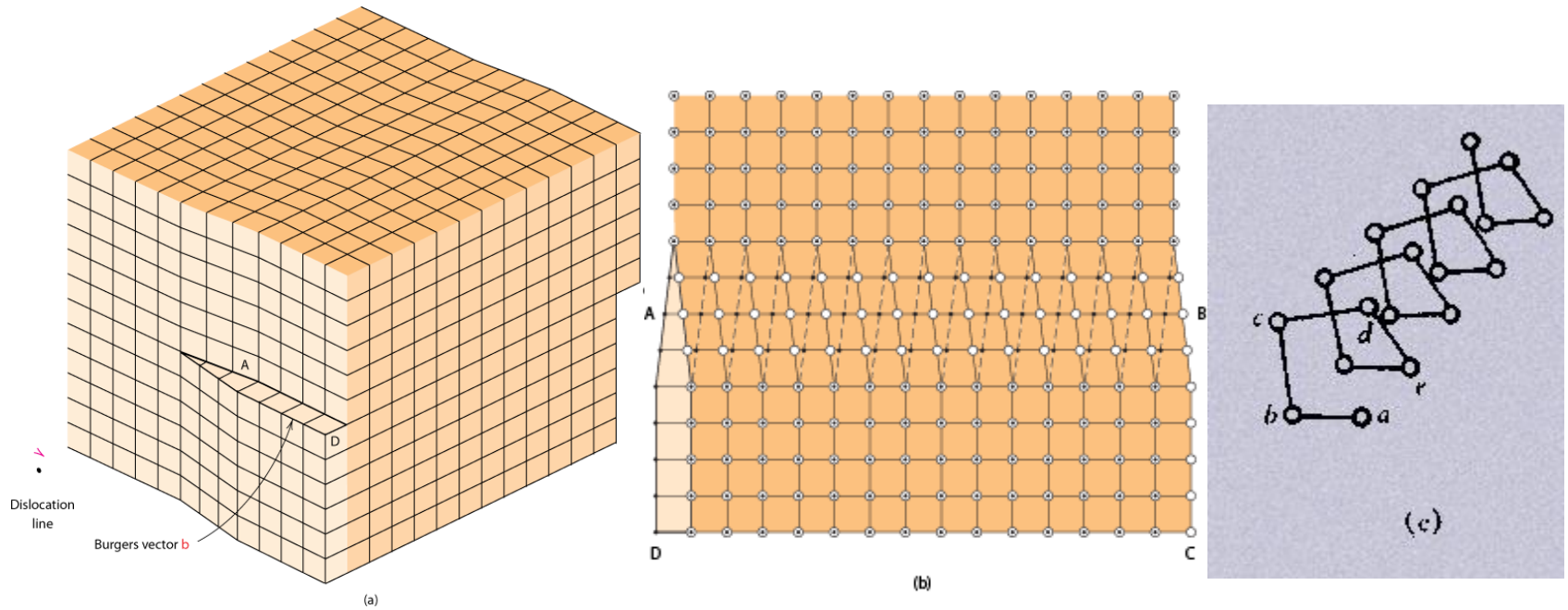
特征:

- 3) 半原子面在上,正刃型位错 \perp ; 在下,负刃型位错 \dashv
- 4) 刃位错的位错线不一定是直线, 可以是折线, 也可以是曲线, 但位错线必与滑移矢量垂直。
- 5) 刃型位错周围的晶体产生畸变, 上压, 下拉, 半原子面是对称的, 位错线附近畸变大, 远处畸变小。
- 6) 位错周围的畸变区一般只有几个原子宽 (一般点阵畸变程度大于其正常原子间距的1/4的区域宽度, 定义为位错宽度, 约2~5个原子间距。)



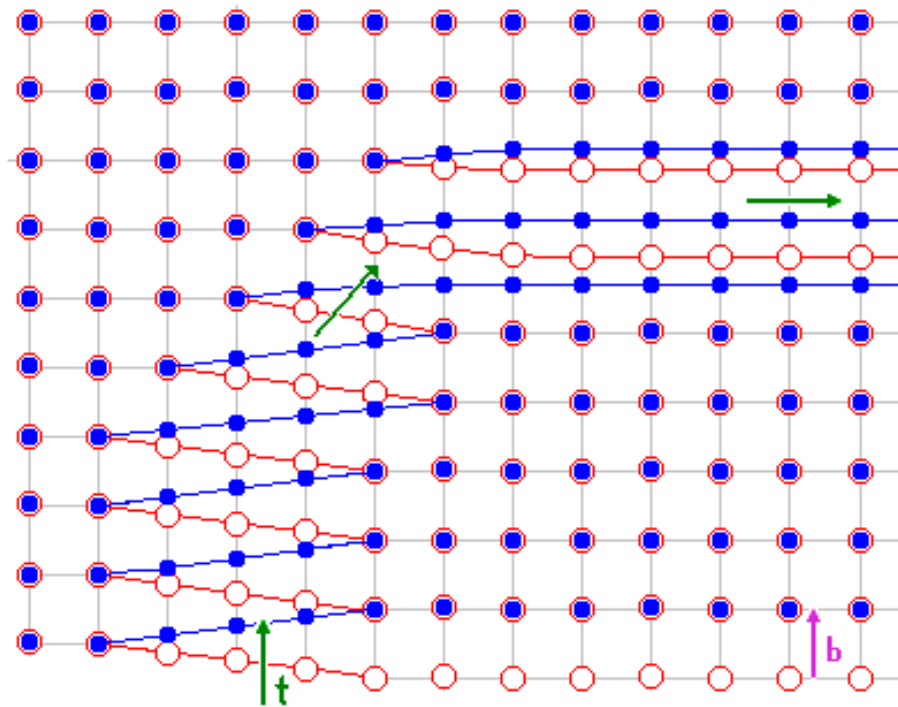
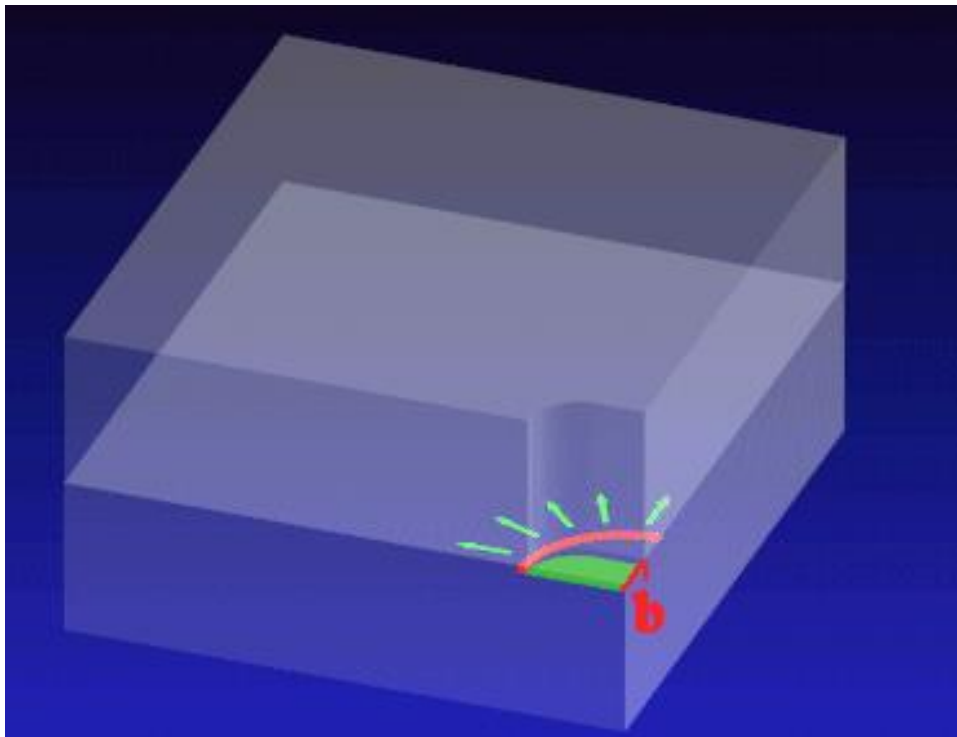


螺型位错 screw dislocation



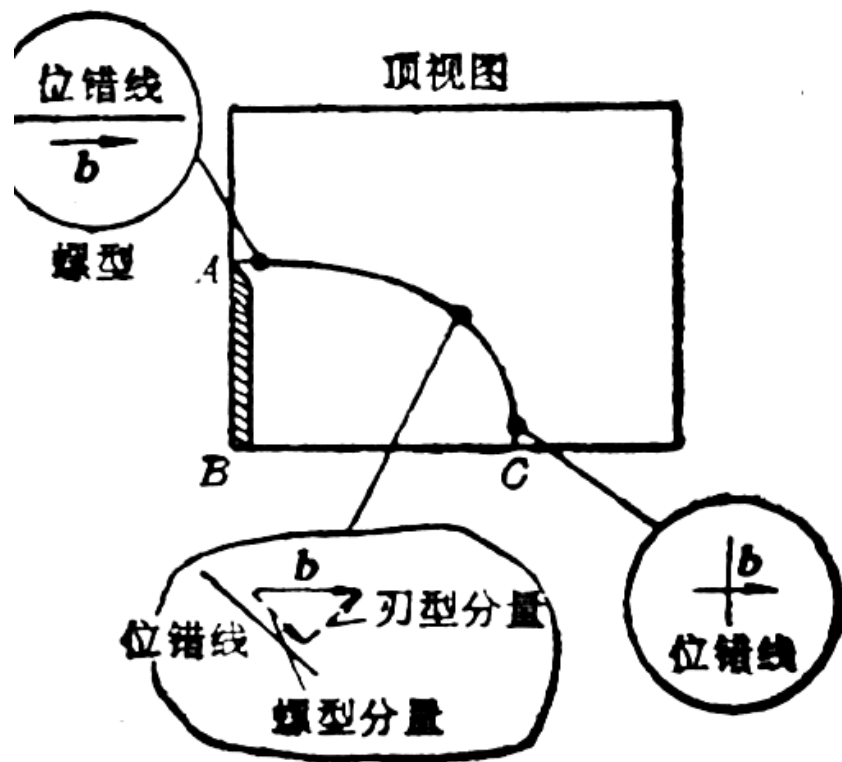
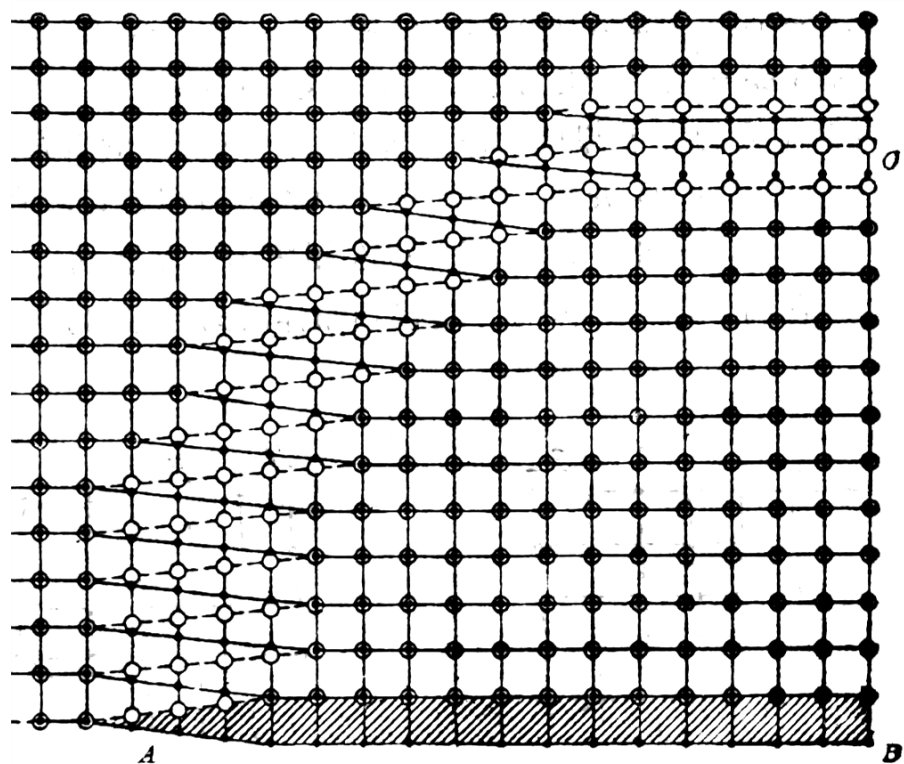
- 特征:**
- 1) 无额外半原子面，原子错排是轴对称的
 - 2) 位错线与滑移矢量平行，且为直线
 - 3) 凡是以螺型位错线为晶带轴的晶带由所有晶面都可以为滑移面。
 - 4) 螺型位错线的运动方向与滑移矢量相垂直
 - 5) 分左螺旋位错 left-handed screw 符合左手法则
右 right-handed screw 右
 - 6) 螺型位错也是包含几个原子宽度的线缺陷

混合位错

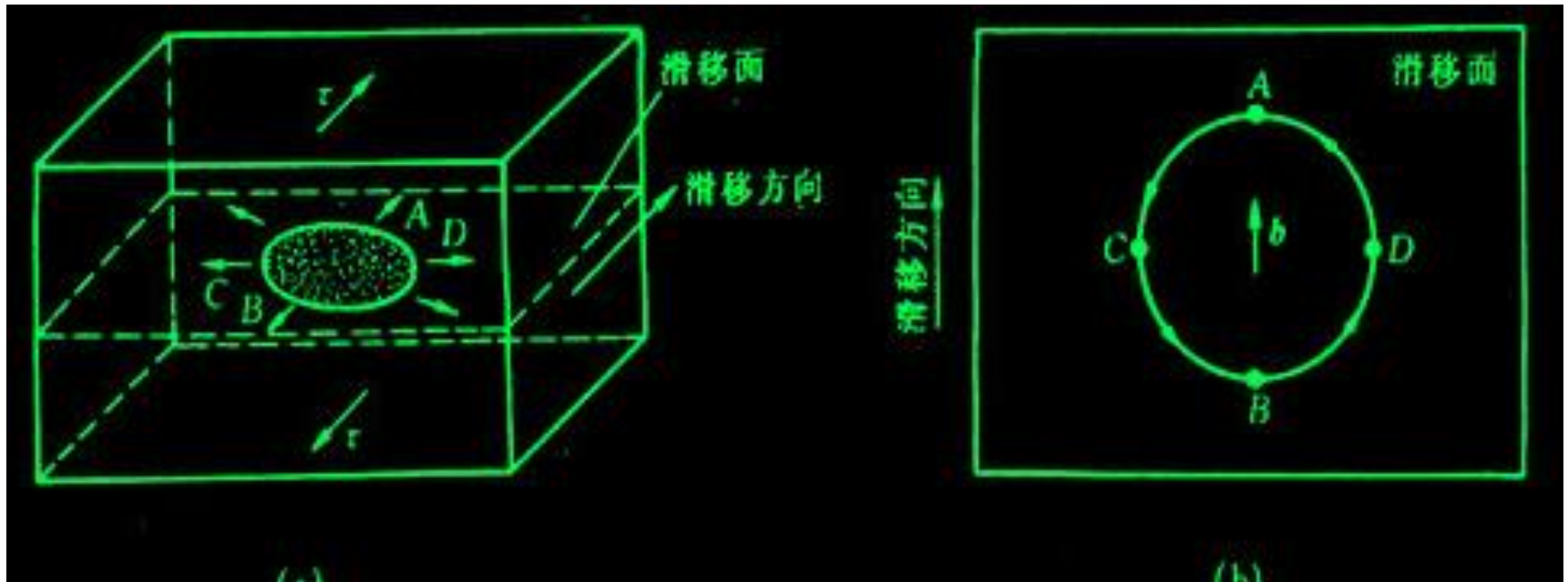


混合位错：滑移矢量既不平行也不垂直于位错线，而是与位错线相交成任意角度。

一般混合位错为曲线形式，故每一点的滑移矢量式相同的，但其与位错线的交角却不同。



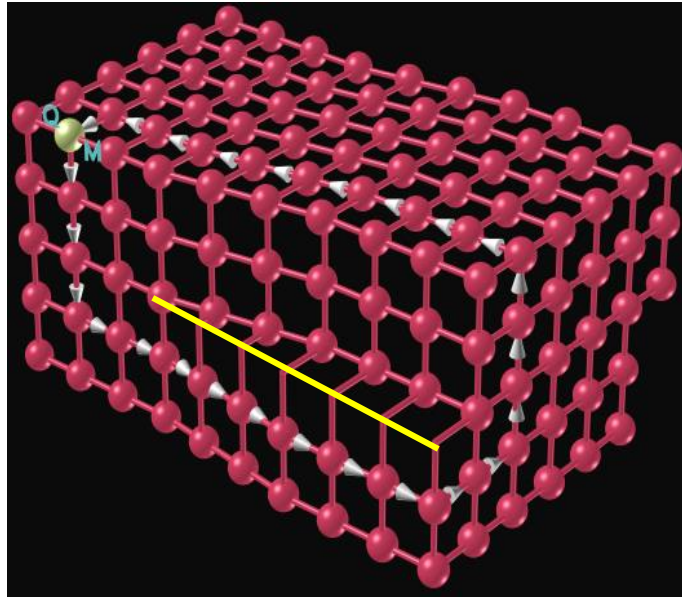
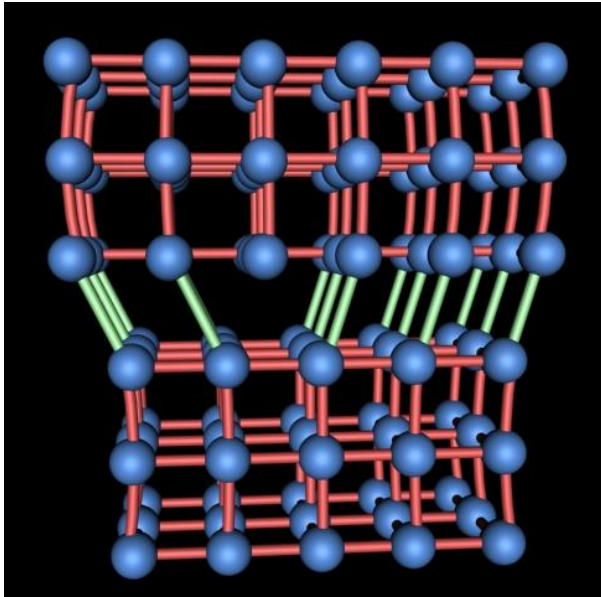
晶体中的位错环



- 由于位错线是已滑移区与未滑移区的边界线，因此，位错具有一个重要的性质，即一根位错线不能终止于晶体内部；
- 若位错线终止于晶体内部，则必与其它位错线相连接，或在晶体内部形成封闭线，即位错环。

柏氏矢量 (Burgers vector)

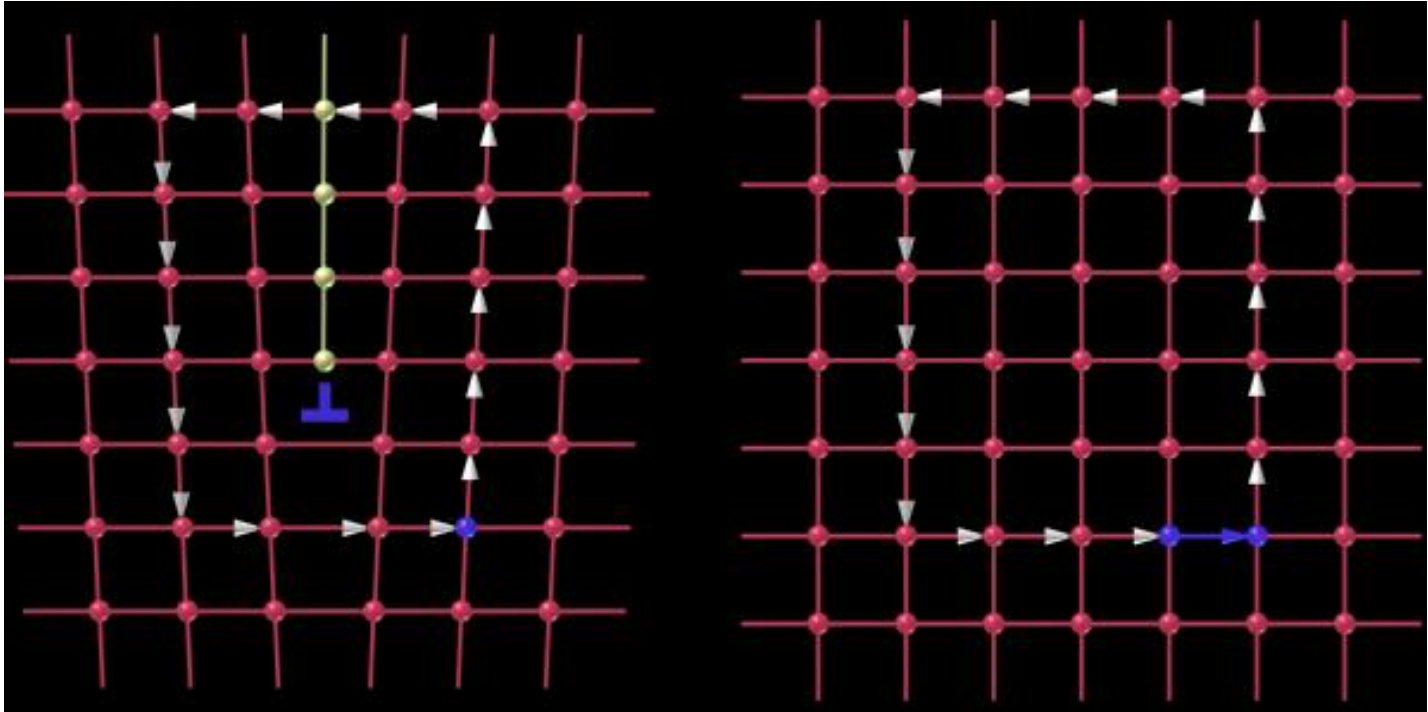
- 1、表征不同类型的位错
- 2、揭示位错的本质



Johannes Martinus
BURGERS

柏氏矢量的确定

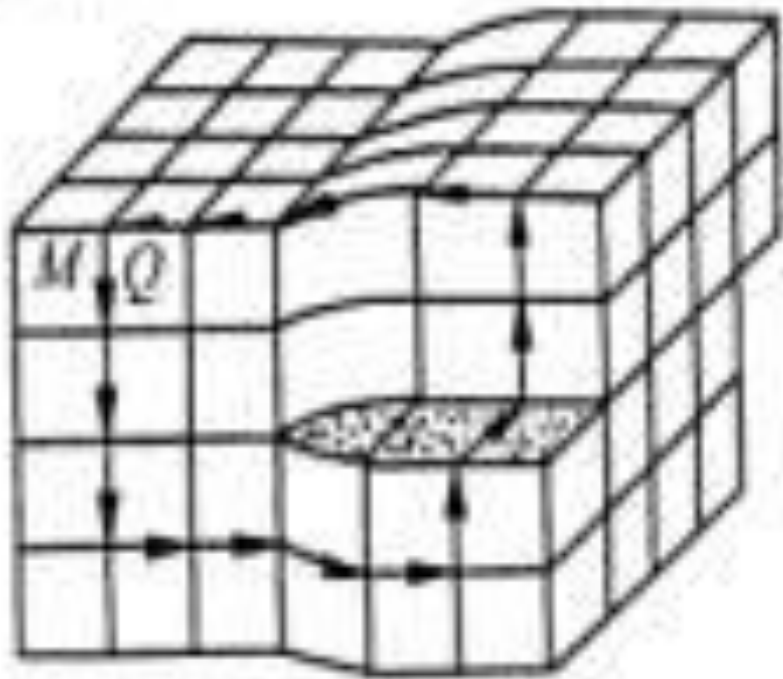
柏氏回路将位错正方向与滑移矢量（柏氏矢量）的正向关联起来！



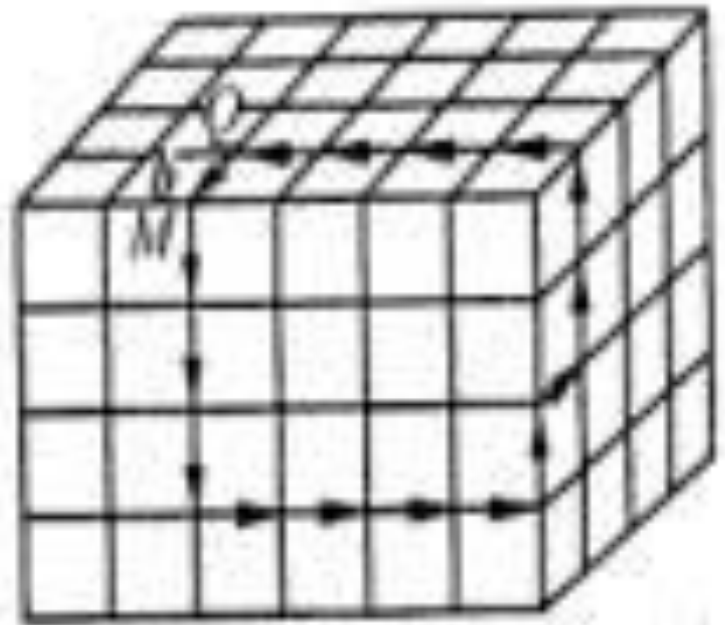
- 1、首先选定位错的正向 ξ ；
- 2、然后绕位错线周围作右旋（RH）闭合回路-----柏氏回路；在不含有位错的完整晶体中作同样步数的路径，
- 3、由终点向始点引一矢量，即为此位错线的柏氏矢量，记为 \vec{b}

FS/RH 规则

螺型位错柏氏矢量的确定



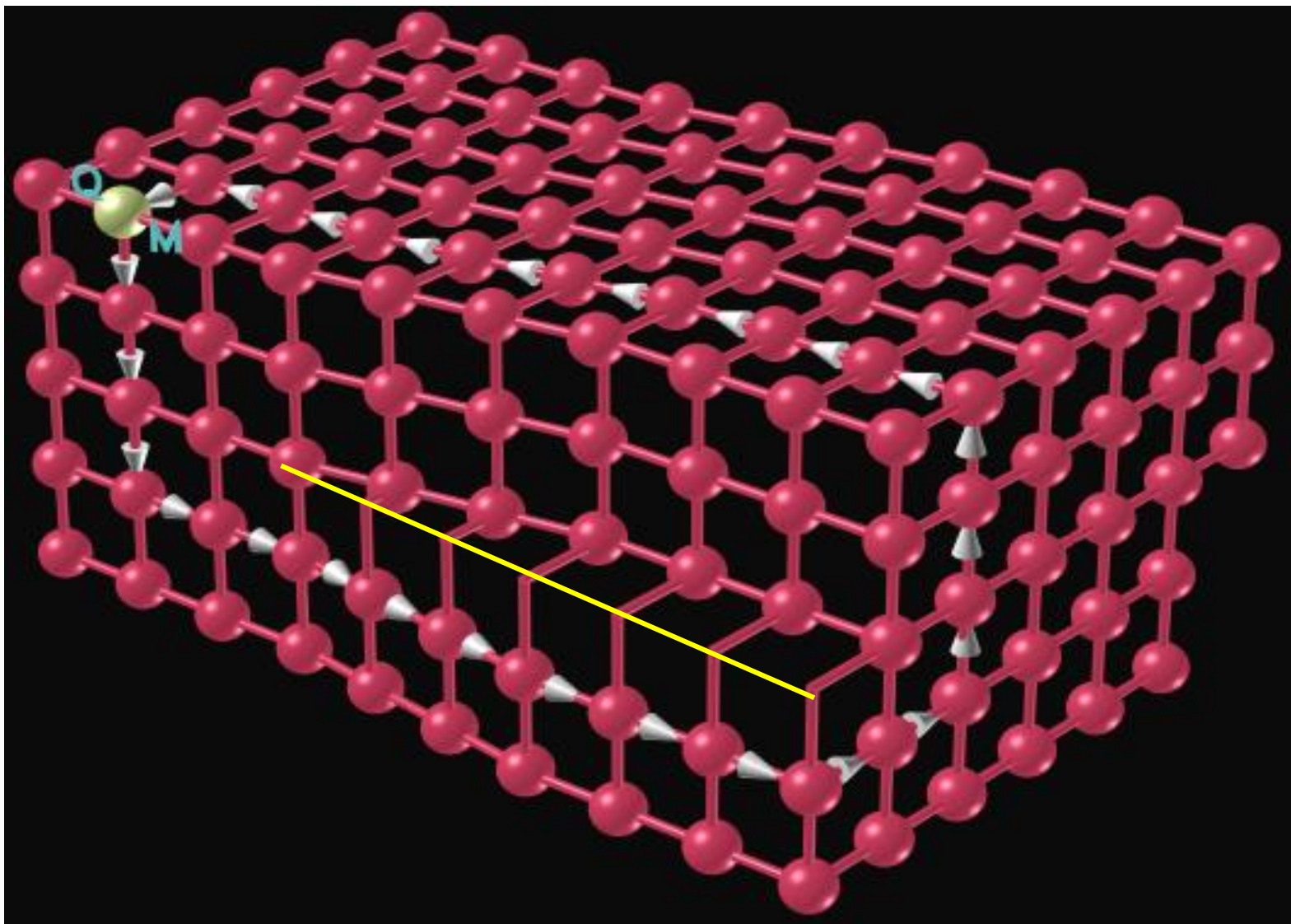
(a) 实际晶体的柏氏回路



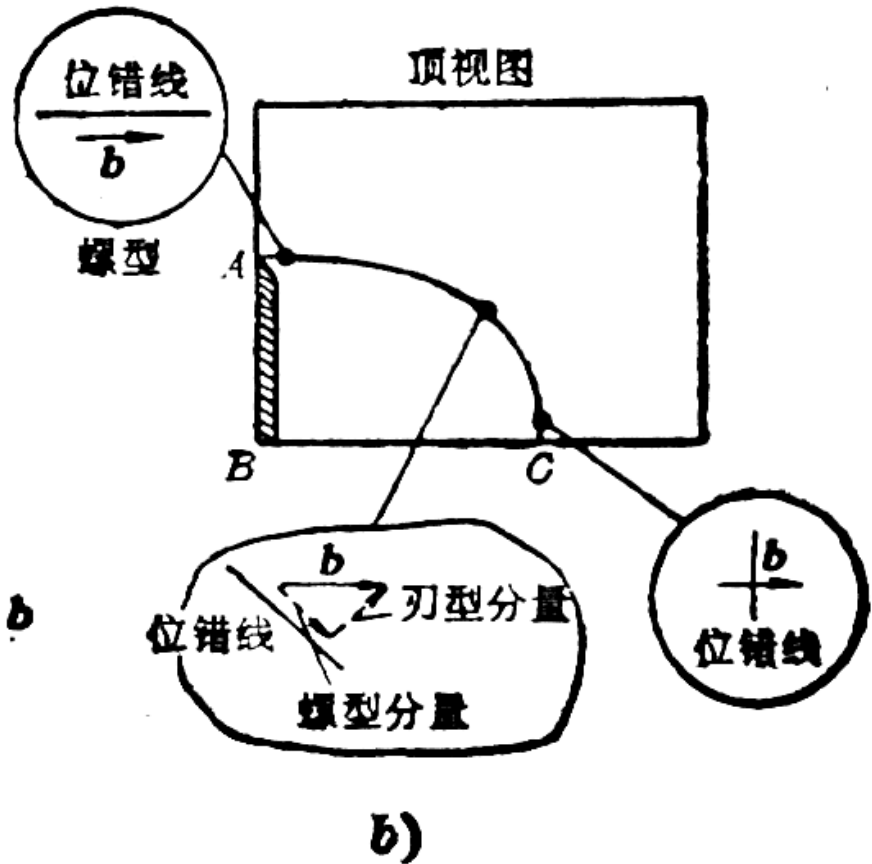
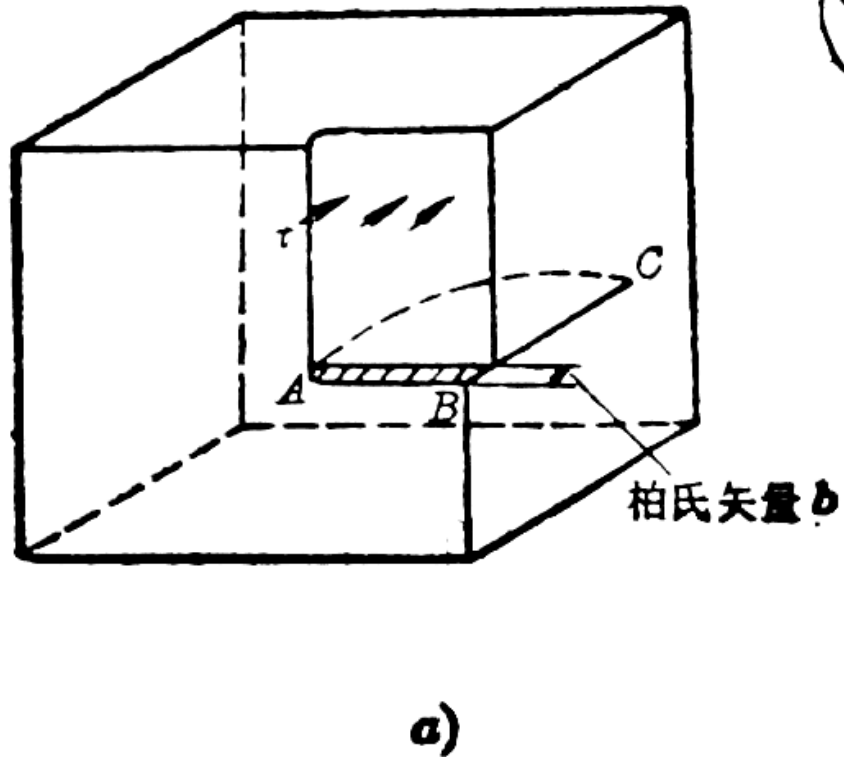
(b) 完整晶体的相应回路

图 1.44 螺型位错柏氏矢量的确定

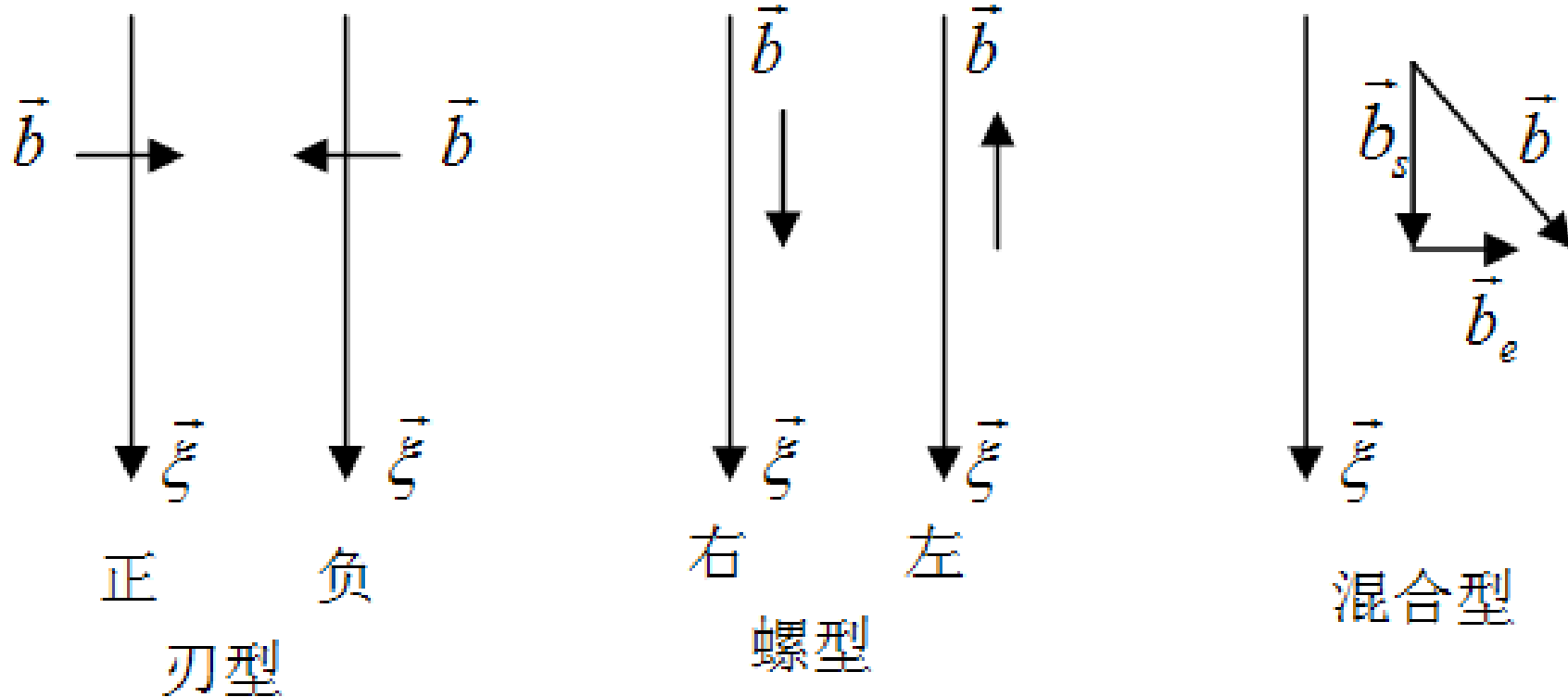
螺型位错的柏氏回路示意图



混合位错的柏氏矢量



各种位错的柏氏矢量



$$\vec{b} \cdot \vec{\xi} = 0$$

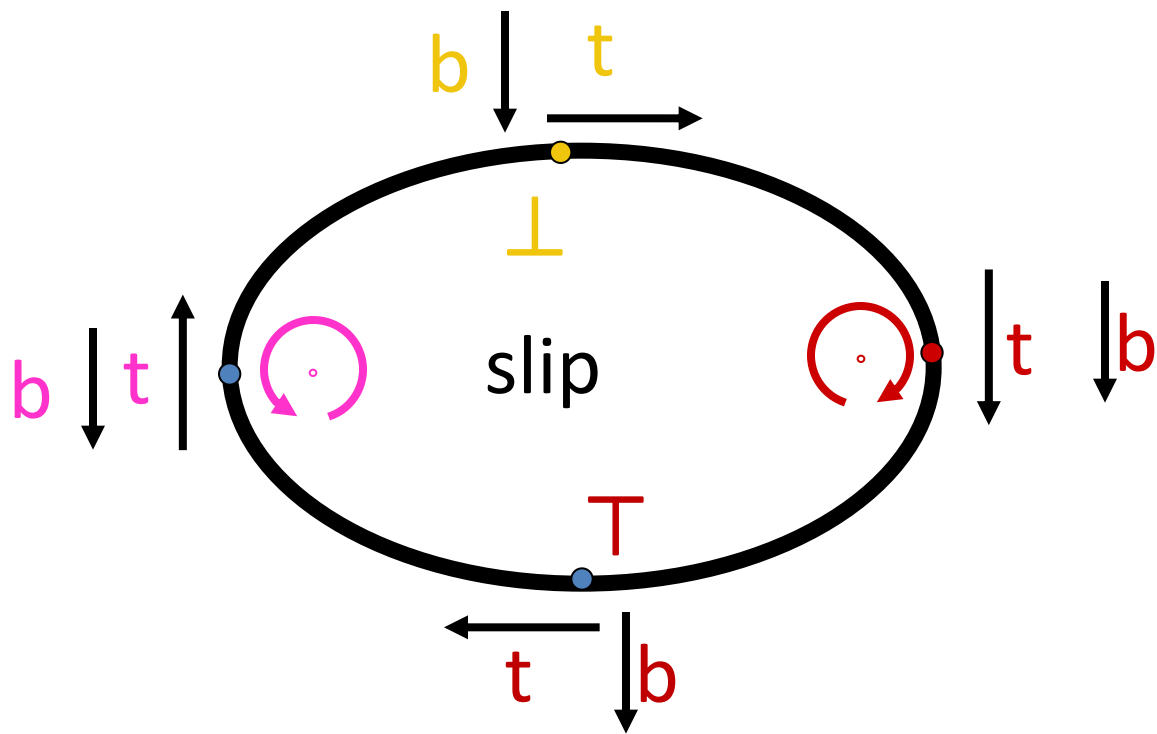
右: $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = b$

左: $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = -b$

$$b_s = b \cos \varphi$$

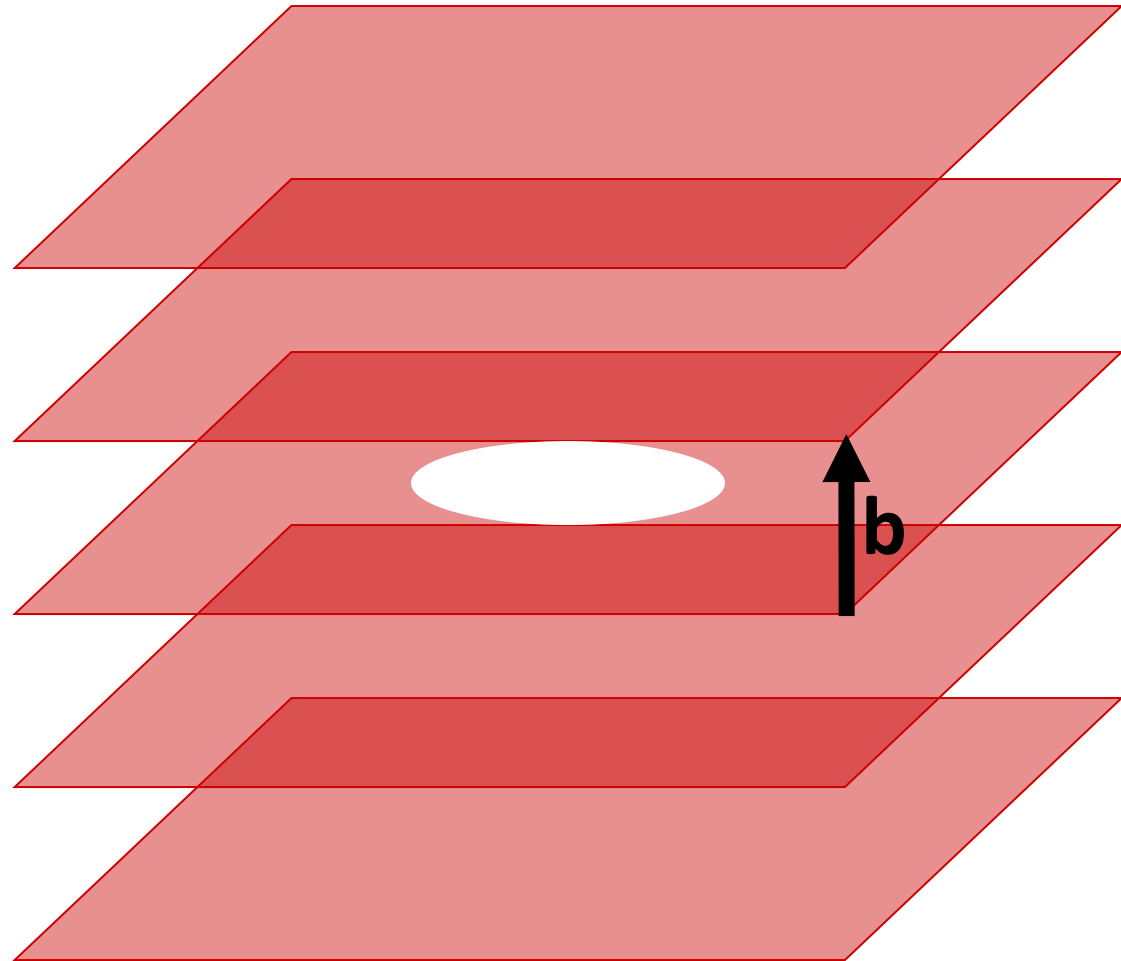
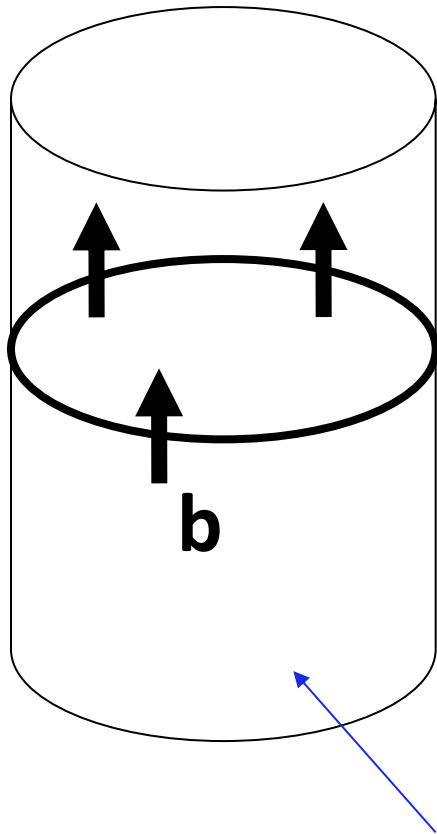
$$b_e = b \sin \varphi$$

位错环



刃型位错环？

刃型位错环

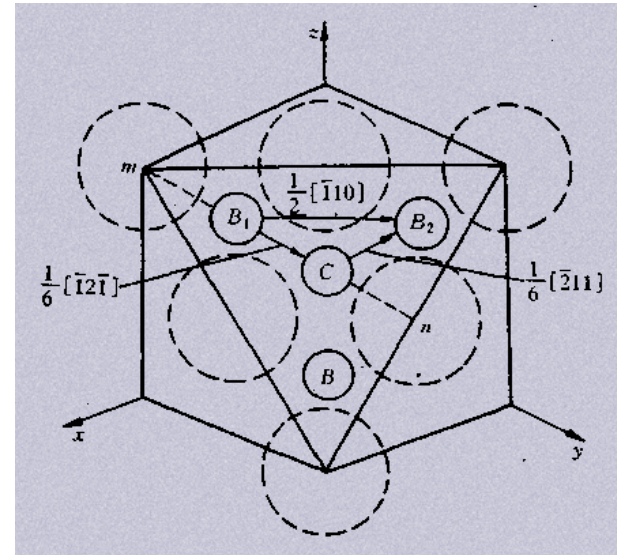
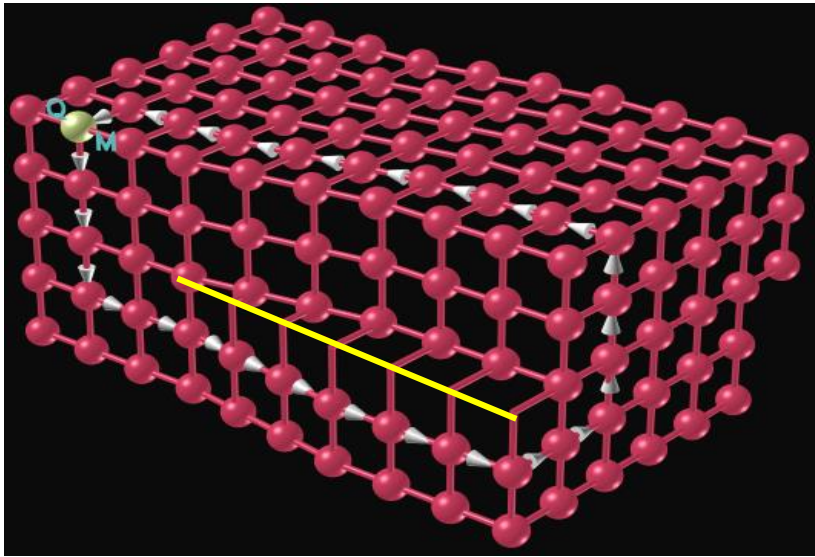


Cylindrical slip plane (surface)

柏氏矢量的特征

(1)、反映位错周围点阵畸变的**总积累**（包括强度和取向）

该矢量的方向表示位错运动导致晶体滑移的**方向**，而该矢量的模表示畸变的**程度**称为位错的强度。（strength of dislocation）

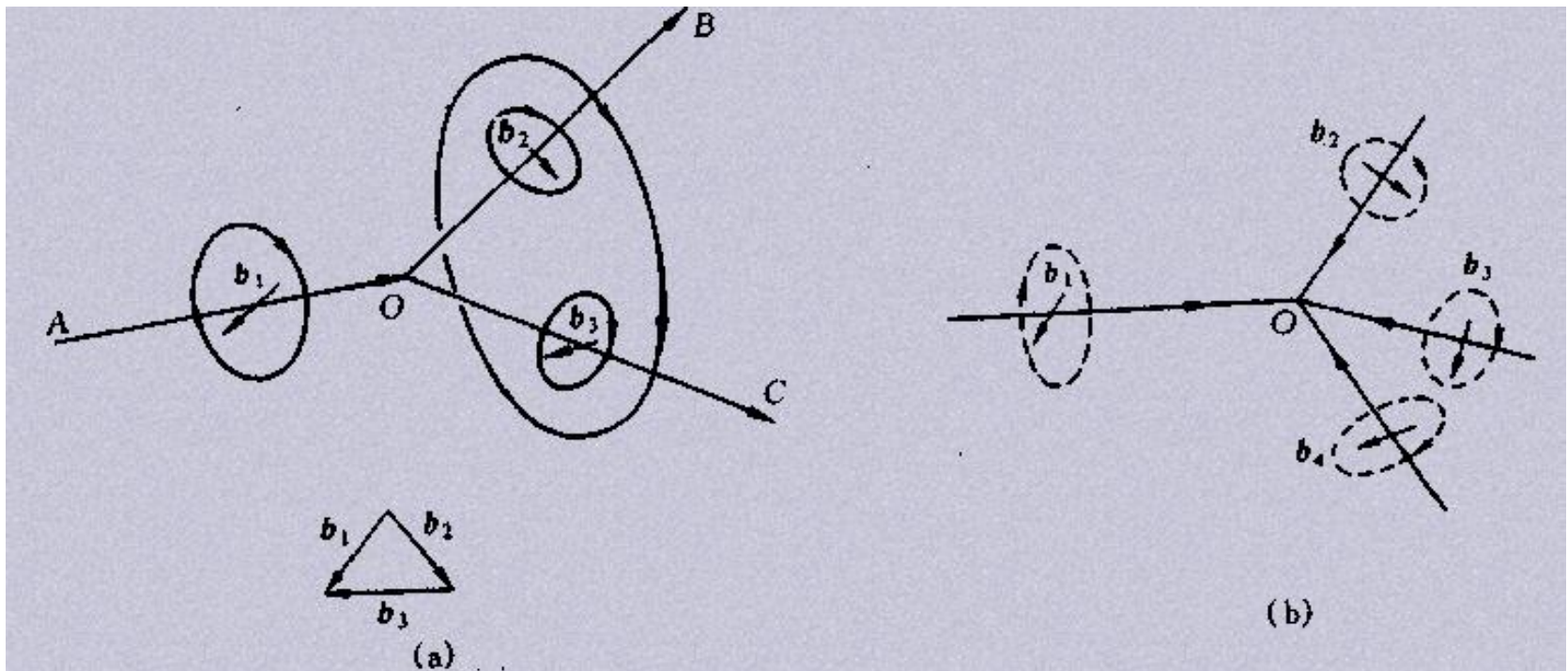


(2)、守恒性：与柏氏回路起点的选择无关，也与回路的具体途径无关

柏氏矢量的特征

(3)、一根位错线具有唯一的柏氏矢量，其各处的柏氏矢量都相同，且当位错运动时，其柏氏矢量也不变。

(4)、柏氏矢量的分解与柏氏矢量的和。



(5)、位错的连续性：位错线只能终止在晶体表面或界面上，而不能中止于晶体内部；在晶体内部它只能形成封闭的环线或与其他位错相交于结点上。

柏氏矢量的表示法

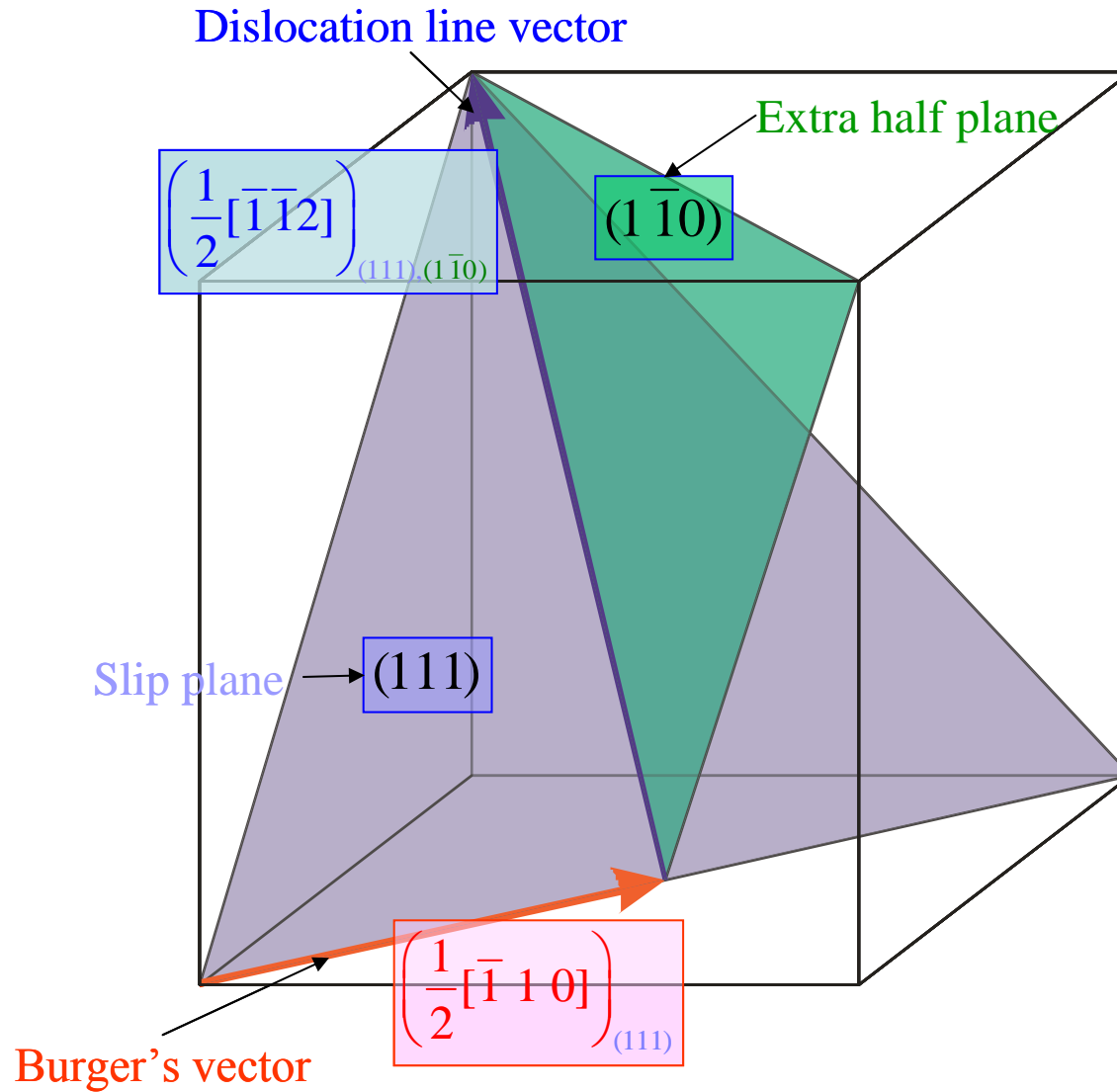
- 柏氏矢量的大小和方向可用它在晶轴上的分量-----点阵矢量 \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} 来表示
- 在立方晶体中, 可用于相同的晶向指数来表示:

$$b = \frac{a}{n} [uvw]$$

位错强度 $|b| = \frac{a}{n} \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$

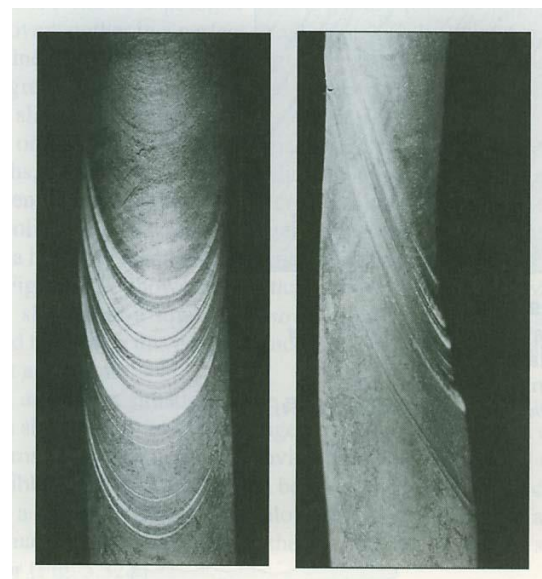
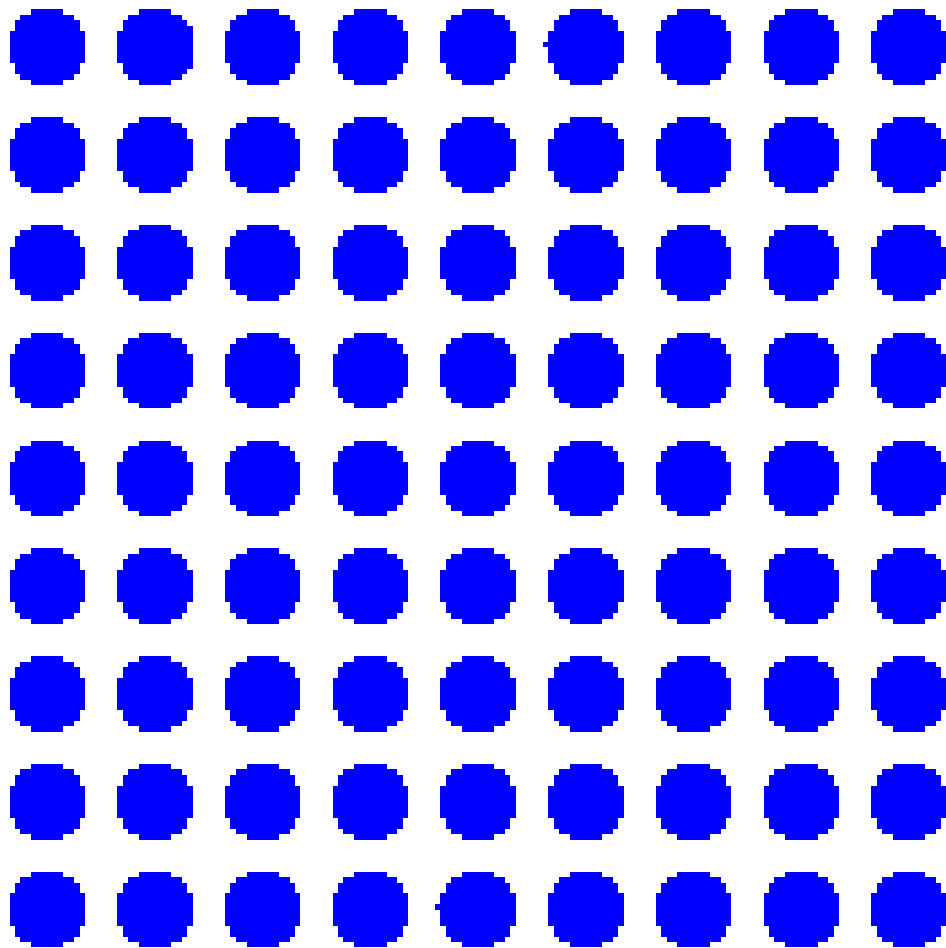
位错合并 $b_1 = \frac{a}{n} [u_1 v_1 w_1] \quad b_2 = \frac{a}{n} [u_2 v_2 w_2]$

$$b_1 + b_2 = \frac{a}{n} [(u_1 + u_2)(v_1 + v_2)(w_1 + w_2)]$$



位错的运动（一）

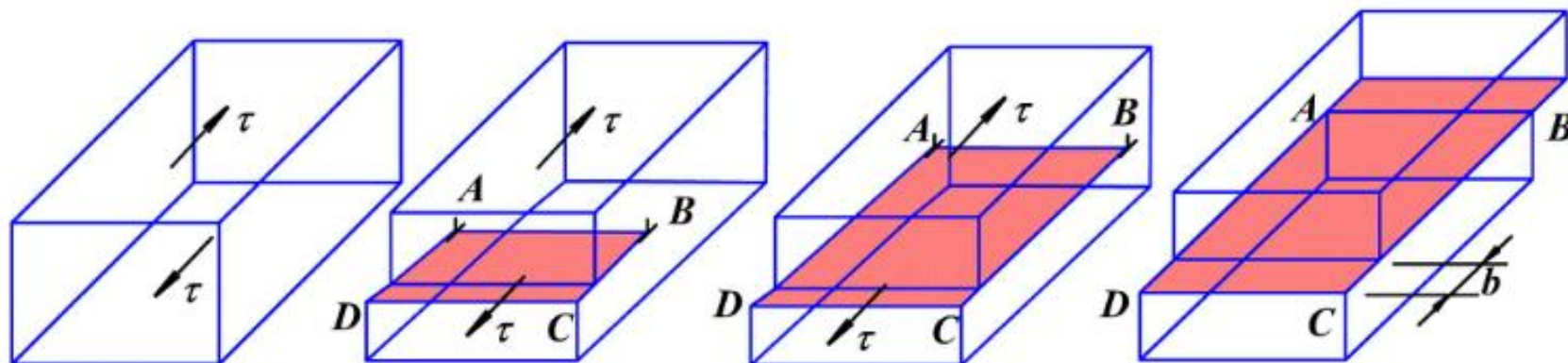
位错的滑移（Slip）：位错在滑移面上的运动。



刃型位错的滑移

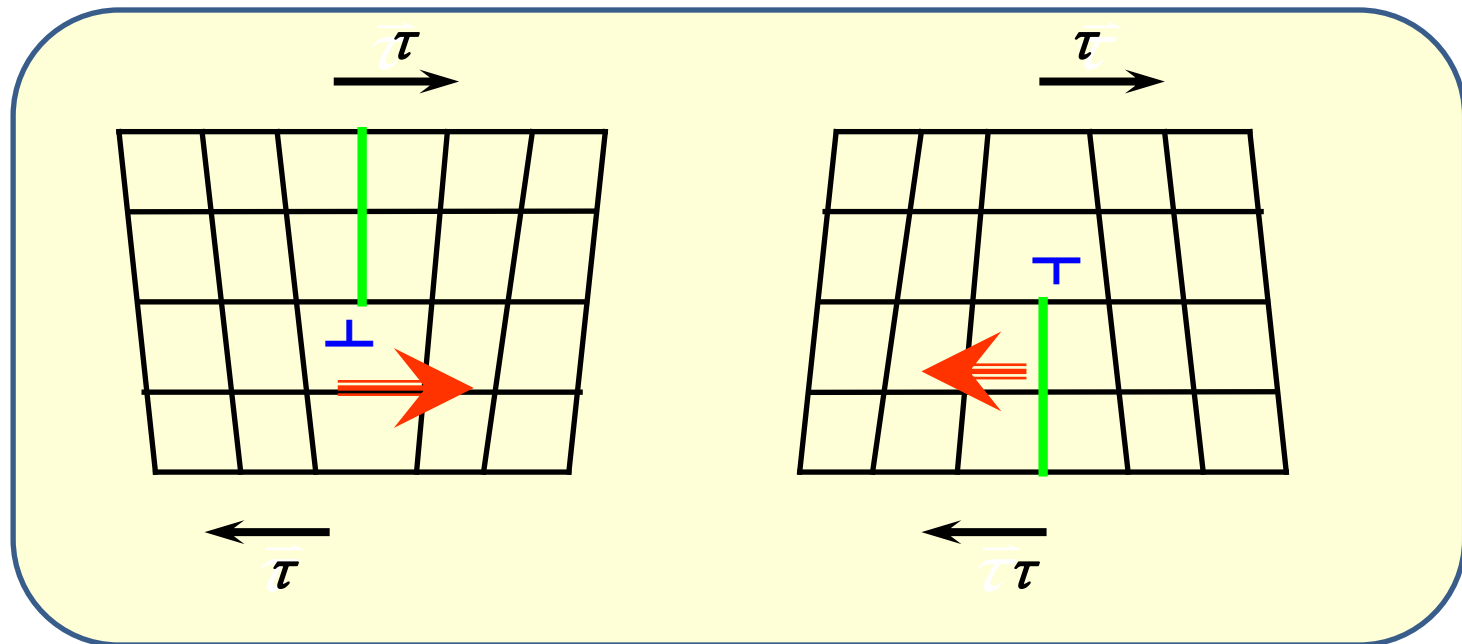
- 位错逐排依次前进，实现两原子面的相对滑移；
- 滑移量=柏氏矢量的模；

刃位错



刃型位错的滑移

- 外力 τ // b ，位错线 $\perp \tau$ ，位错线运动方向 // τ
- τ 一定时，正、负位错运动方向相反，但最终滑移效果相同；
- 滑移面唯一。

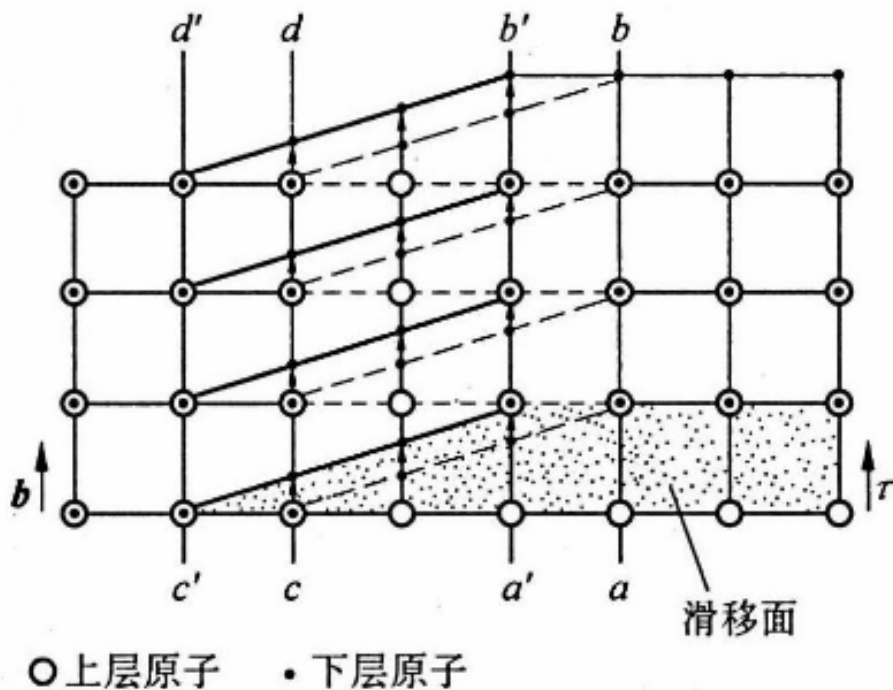


螺型位错的滑移

□ 位错逐排依次滑移，实现原子面的滑移；

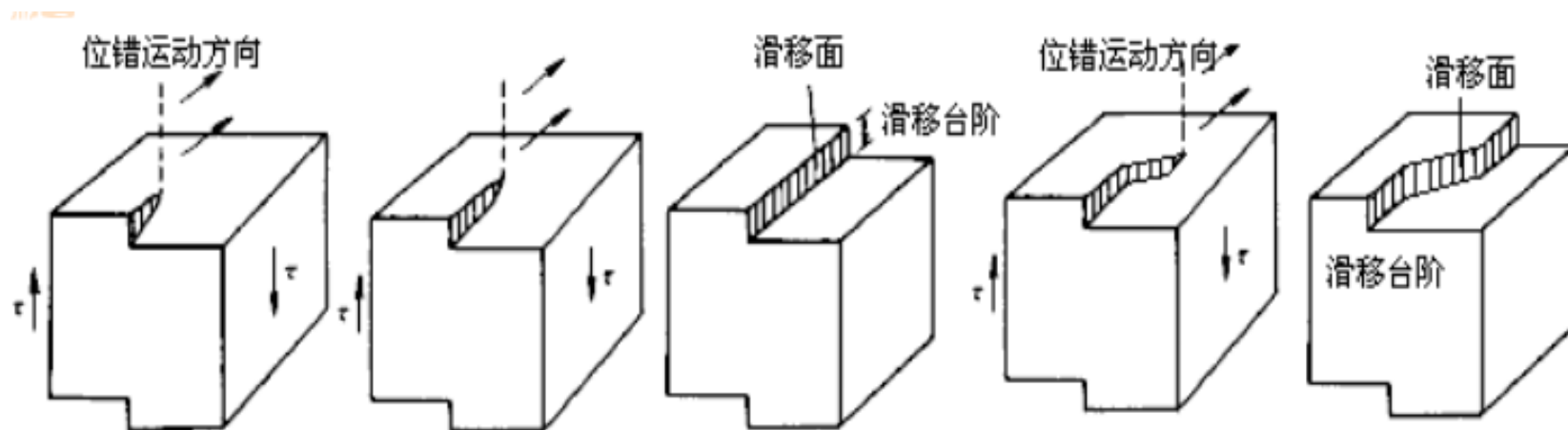
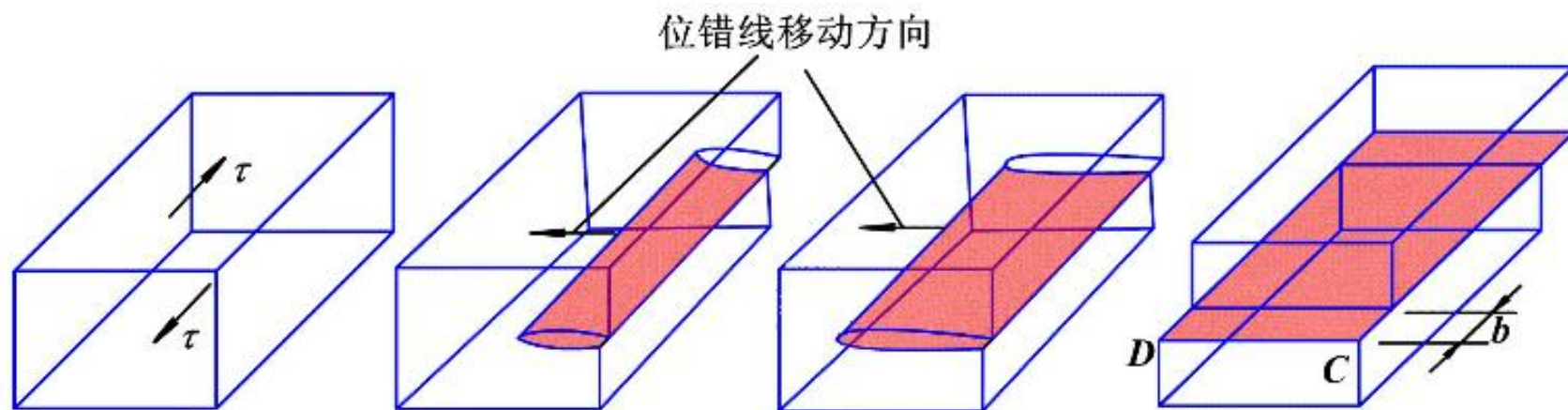
在切应力 τ 作用下，当原子做很小距离的移动时，螺位错本身向左移动了一个原子间距。

滑移台阶(阴影部分)亦向左扩大了一个原子间距。



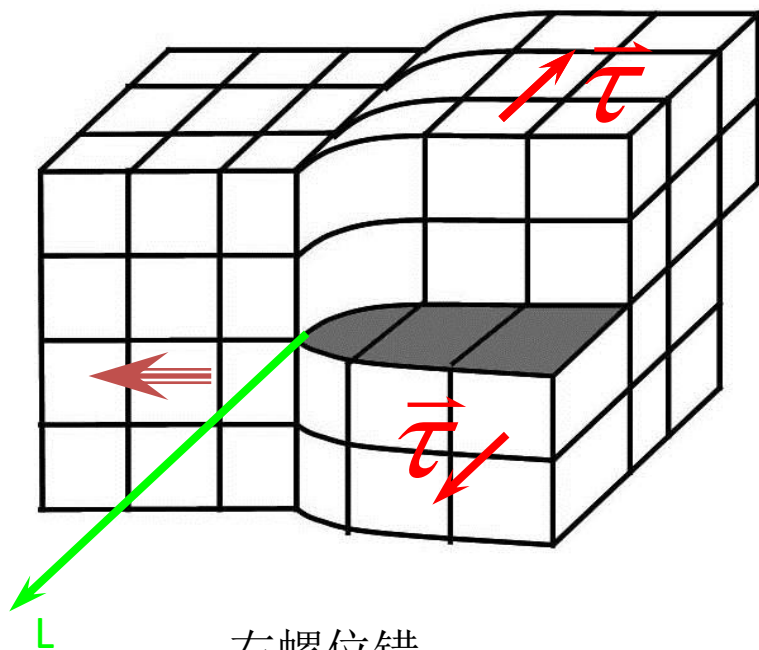
螺型位错的滑移

□ 滑移量=柏氏矢量的模;

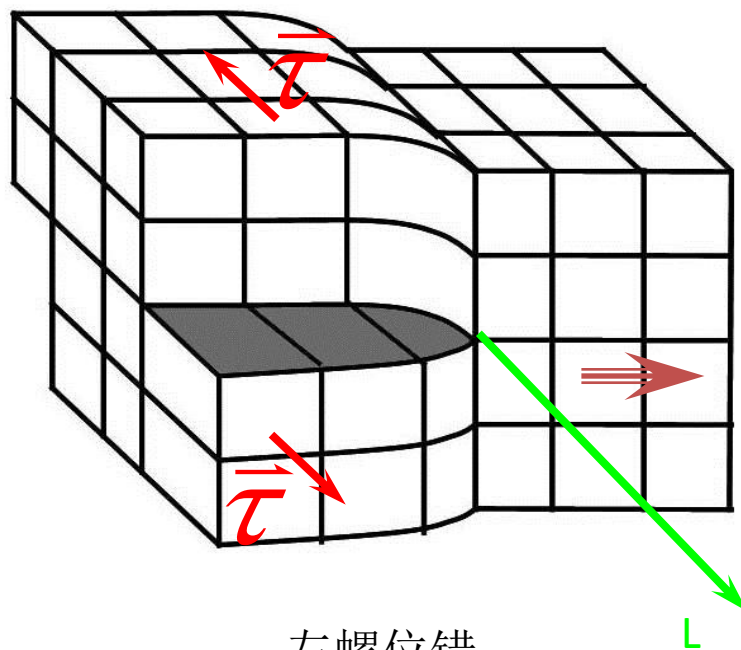


螺型位错的滑移

- $\tau \parallel b$, 位错线 $\parallel \tau$, 位错线运动方向 $\perp \tau$;
- τ 一定时, 左右螺位错运动方向相反, 但最终滑移效果相同;
- 滑移面不唯一。

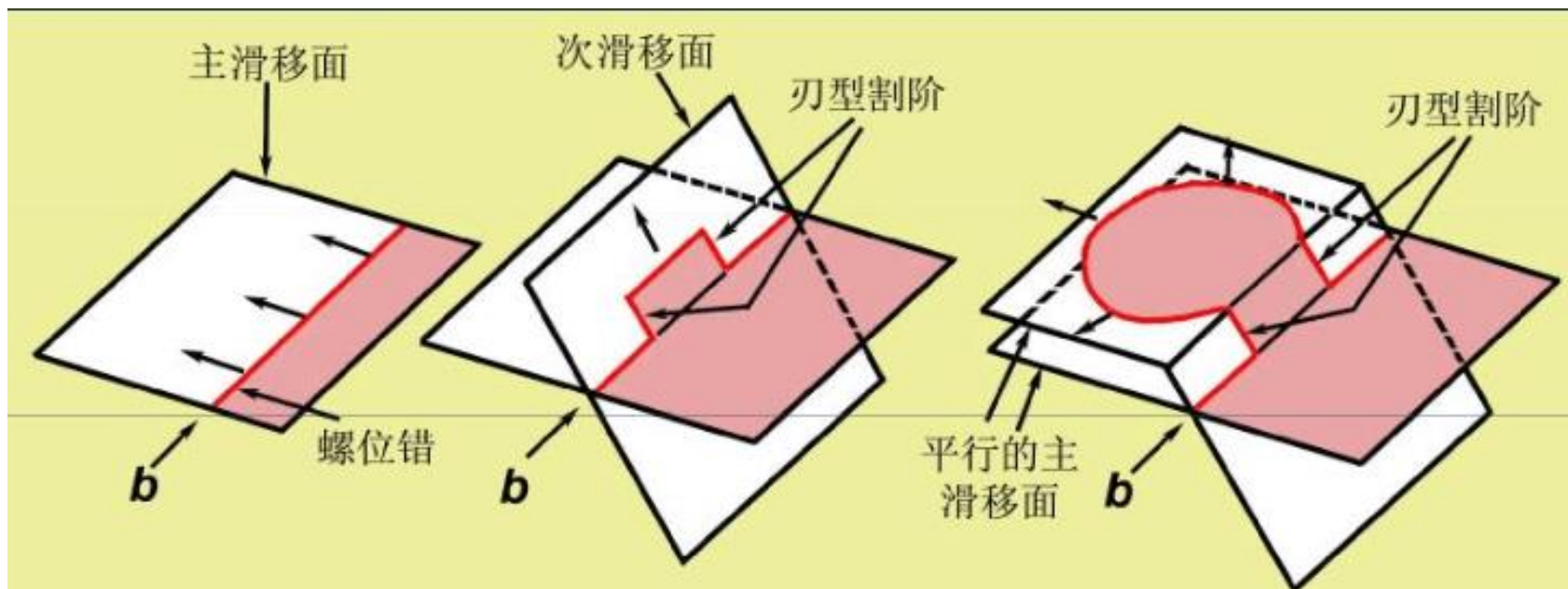


右螺位错



左螺位错

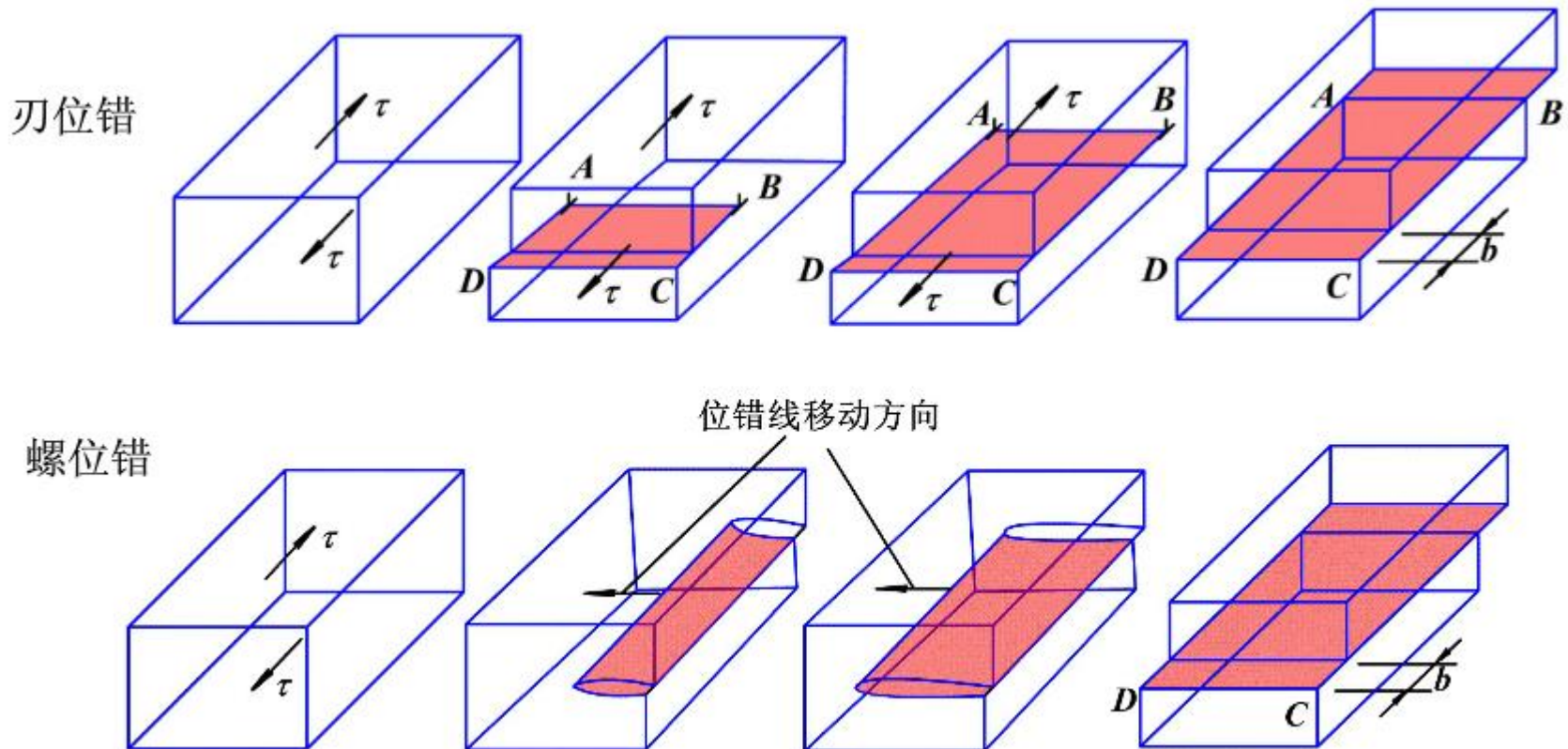
螺位错的交滑移：由于所有包含位错线的晶面都可以成为它的滑移面，因此当某一螺型位错在原滑移面上运动受阻时，有可能从原滑移面转移到与之相交的另一滑移面上继续滑移，这一过程称为**交滑移**。如果交滑移后的位错再转回和原滑移面平行的滑移面上继续运动，则称为**双交滑移**。

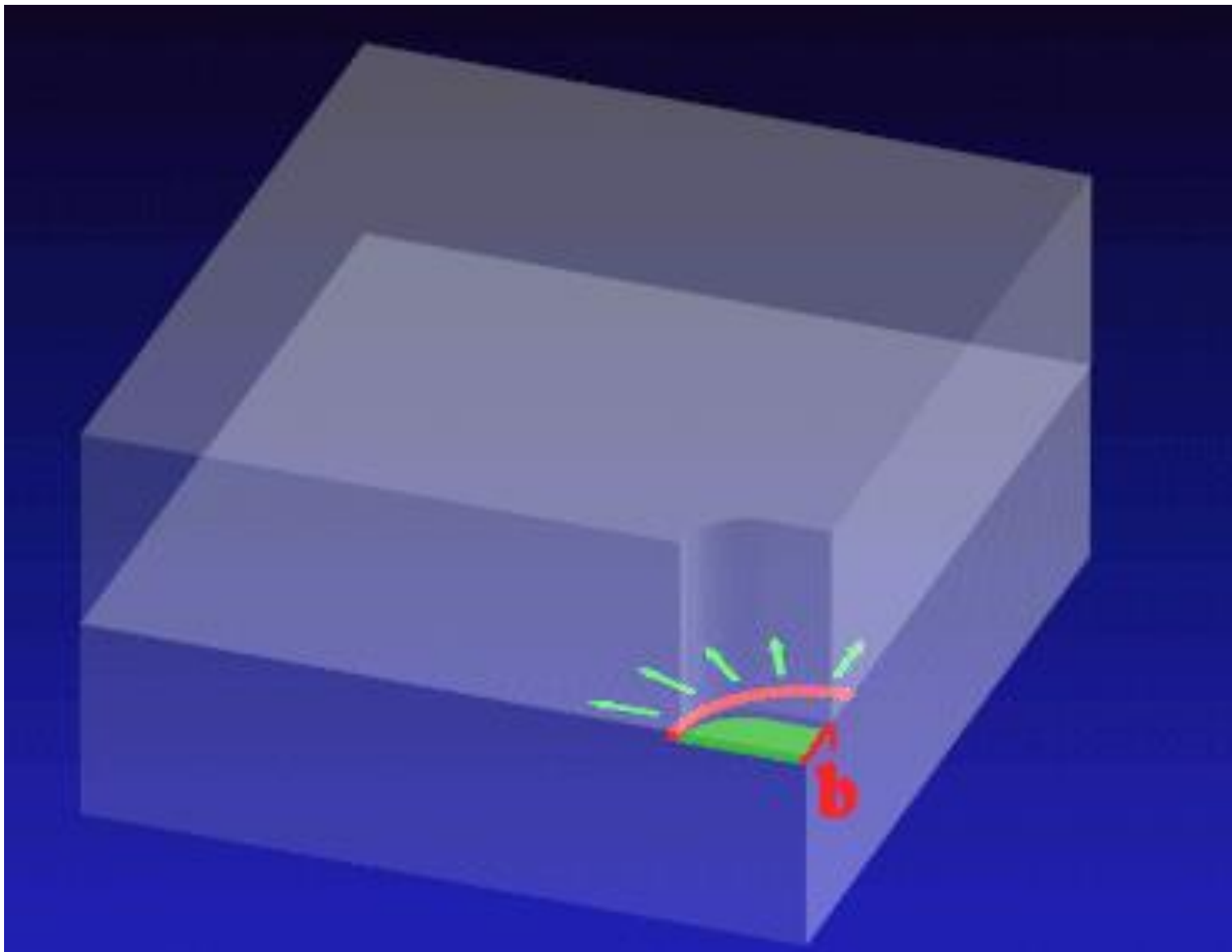


注意：交滑移只能是螺位错才能发生

位错滑移的特点

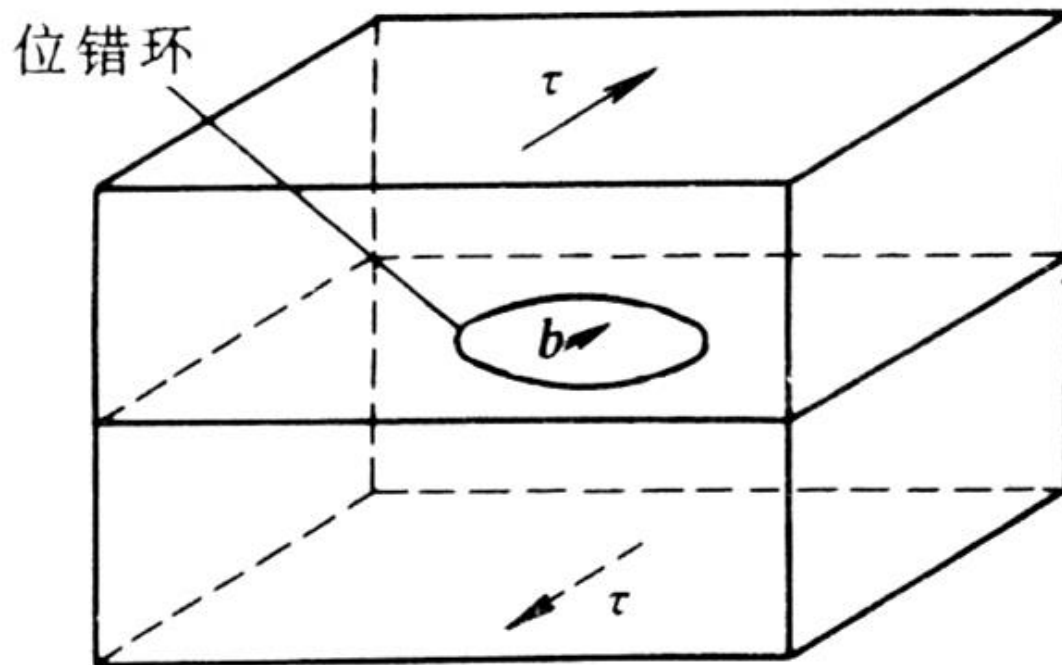
- (1) 刃位错滑移过程 $\tau // b$ 、 $b \perp \xi$ 、滑移方向 $\perp \xi$ 、滑移方向 $// b$ ，单一滑移面。
- (2) 螺型位错滑移过程 $\tau // b$ 、 $b // \xi$ 、滑移方向 $\perp \xi$ 、滑移方向 $\perp b$ ，非单一滑移面。可发生交滑移。
- (3) 混合位错的滑移过程沿位错线各点的法线方向在滑移面上扩展，滑动方向垂直于位错线方向。但滑动方向与柏氏矢量有夹角。



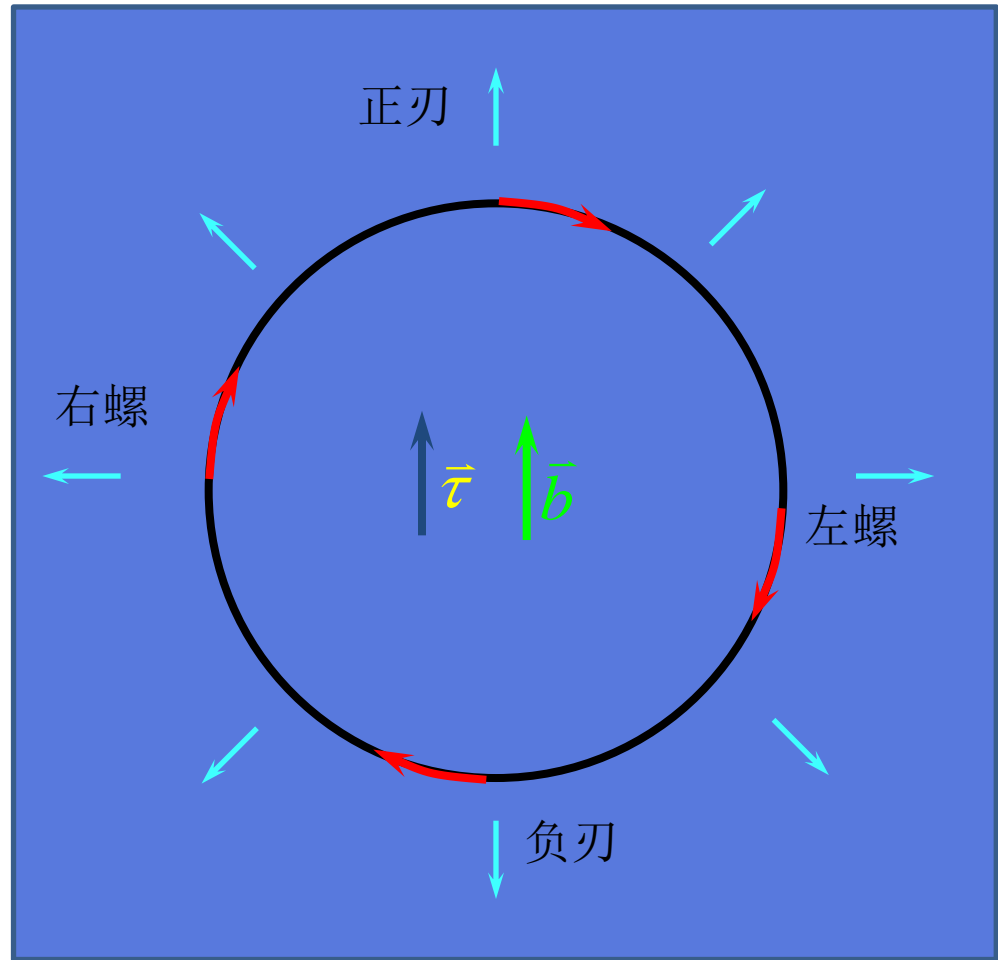
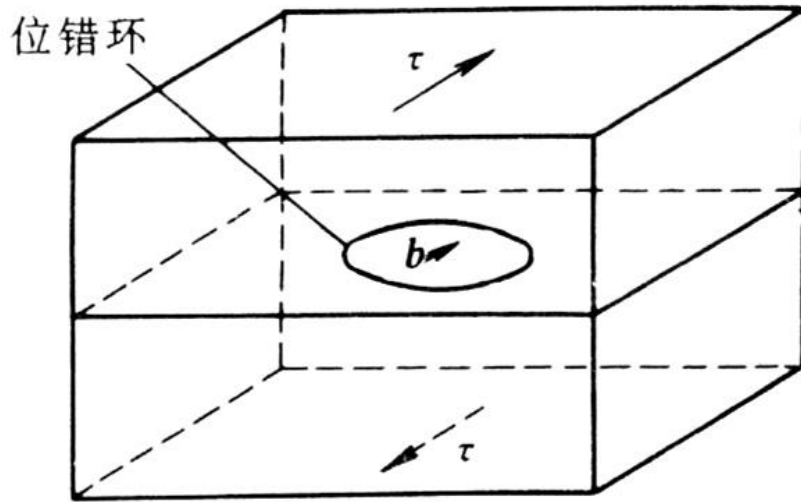


混合位错的滑移过程

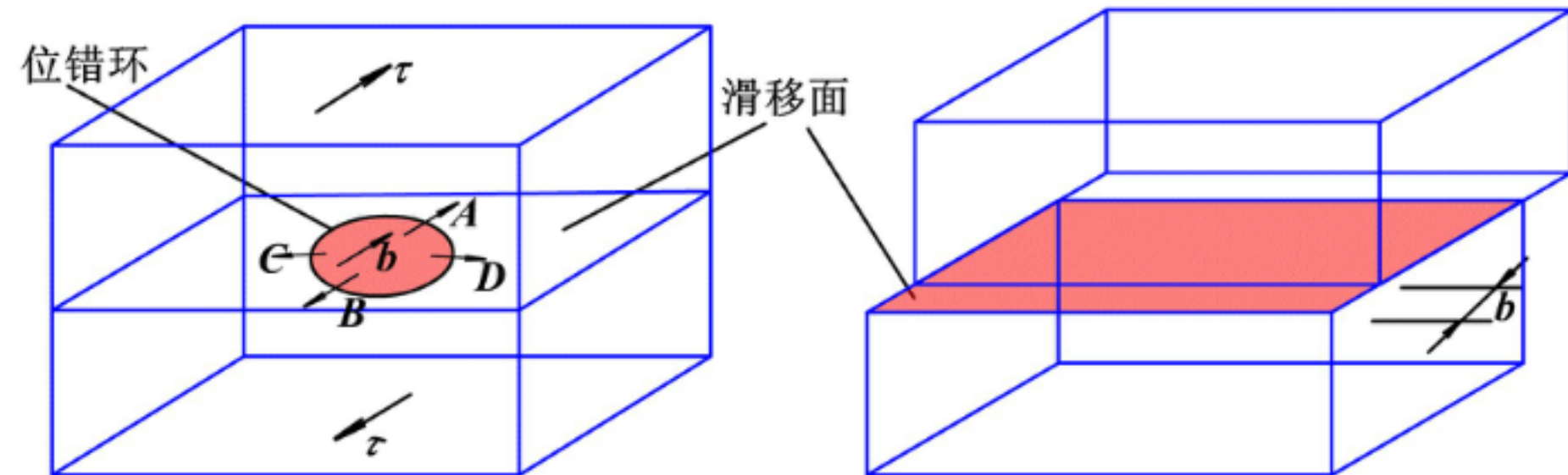
思考题：如图所示的位错环在外应力作用下如何运动？滑移量是多少？



混合位错的滑移



沿位错线各点的法线方向在滑移面上扩展，滑动方向垂直于位错线方向。但滑动方向与柏氏矢量有夹角。



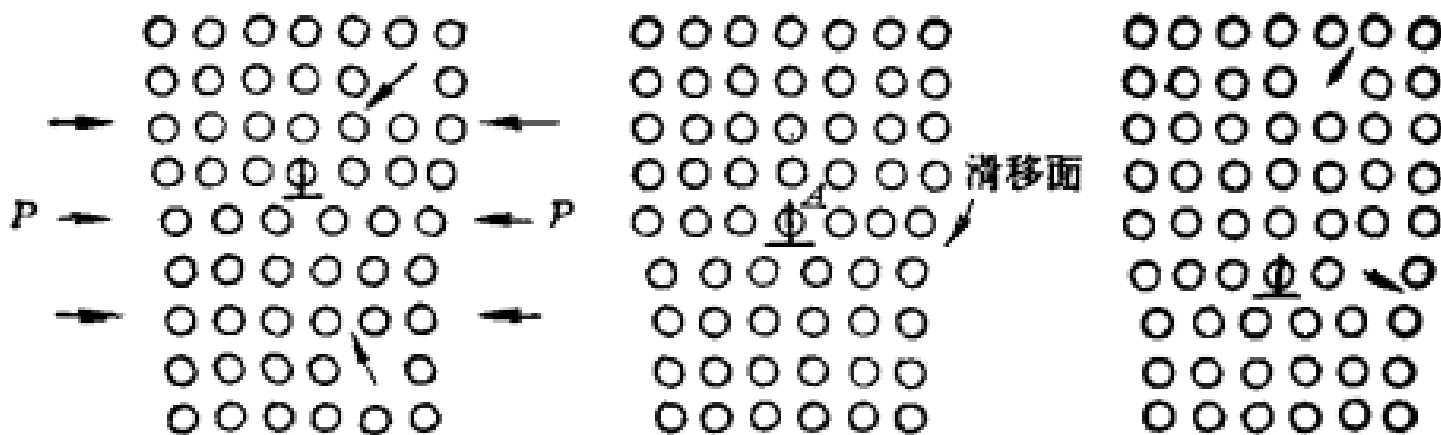
(a) 位错环

(b) 位错环运动后产生的滑移位错环的滑移

位错的运动（二）

位错的攀移（Climb）：

刃位错 \perp 滑移面（多余半原子面的扩大或缩小）

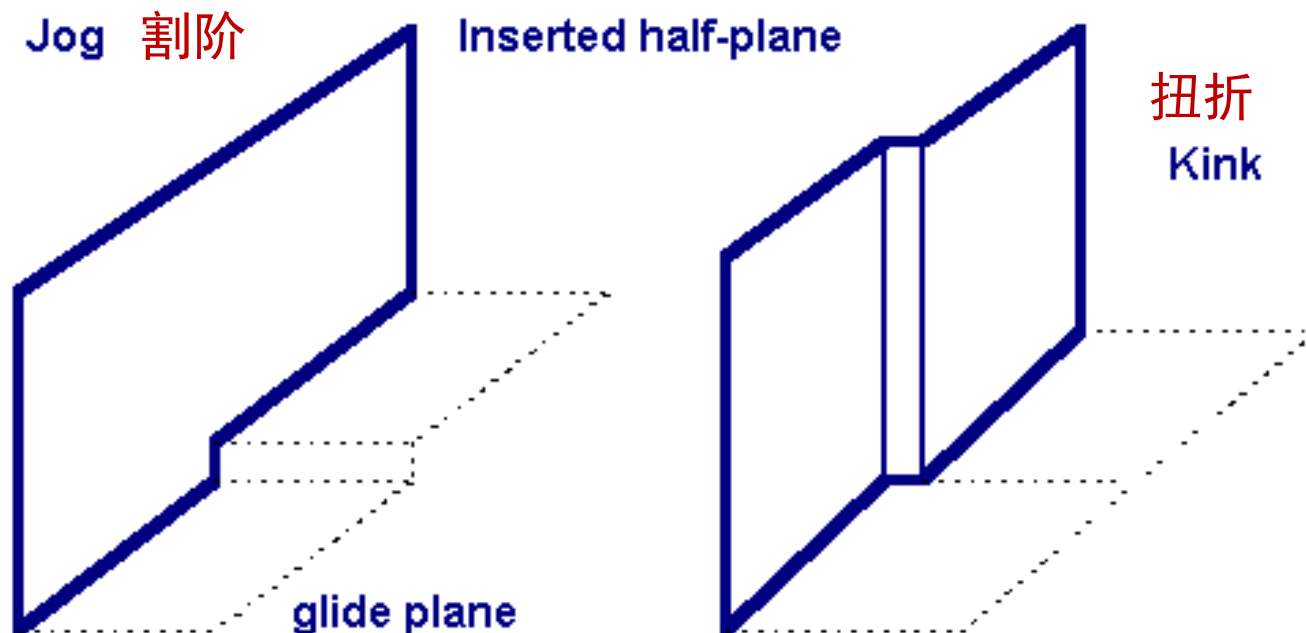


- 位错向上攀移一个原子间距，在晶体中产生一系列空位；反之则产生一系列间隙原子，从而引起体积的变化。所以，攀移运动需要外力做功。粗略地分析，攀移阻力约为 $Gb/5$ ，因此，攀移阻力很大，相当困难的。
- 螺型位错不止一个滑移面，它只能以滑移的方式运动，没有攀移运动的。

位错攀移的特点

- (1) 扩散需要热激活，比滑移需要更大的能量
- (2) 纯剪应力不能引起体积变化，对攀移不起作用
- (3) 过饱和空位的存在有利于攀移进行。
- (4) 只有刃型位错才能发生攀移：滑移不涉及原子扩散，而攀移必须借助原子扩散；外加应力对攀移起促进作用，压（拉）促进正（负）攀移；高温影响位错的攀移。

割阶和扭折



当位错在滑移面上运动时，可能在某处遇到障碍，这样，有可能其中一部分线段首先进行滑移，若由此造成的曲折线段就在位错的滑移面时，称为“扭折”。若该曲折线段垂直于位错的滑移面时，称为“割阶”。

显然，刃型位错中的割阶部分仍为刃型位错，而扭折则为螺型位错，而螺型位错中的扭折和割阶线段，均属于刃型位错（如图3-506所示）

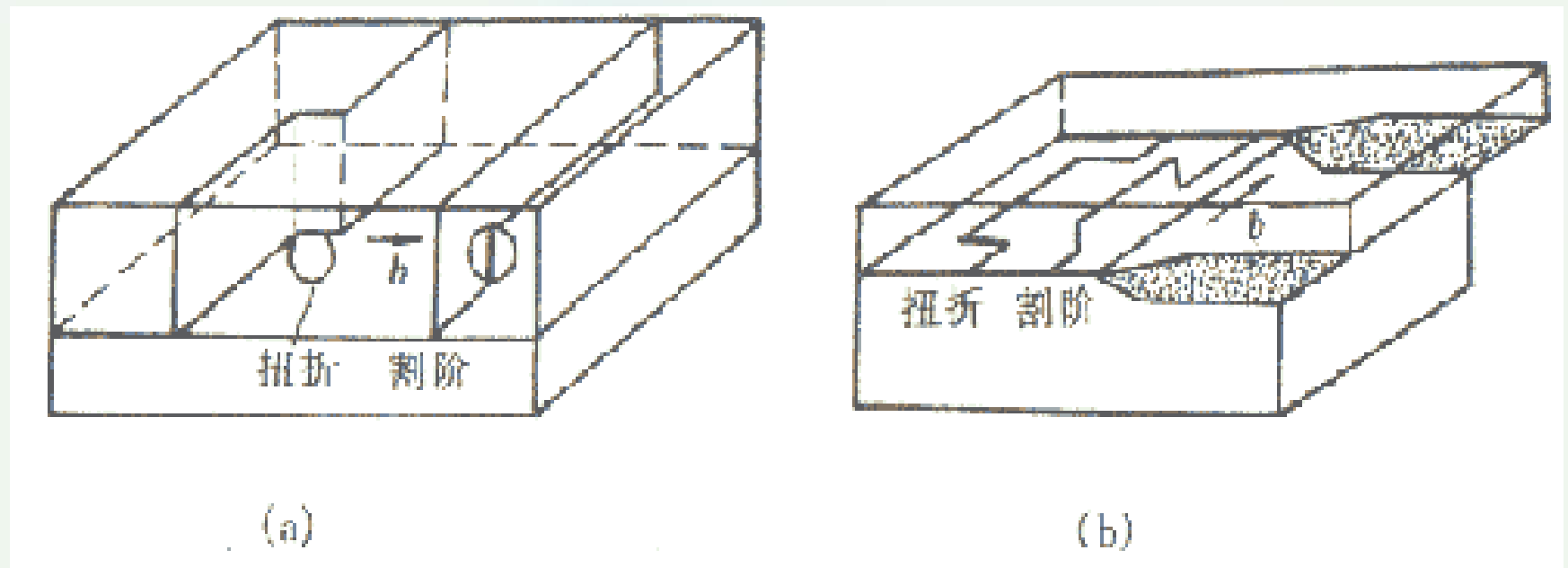
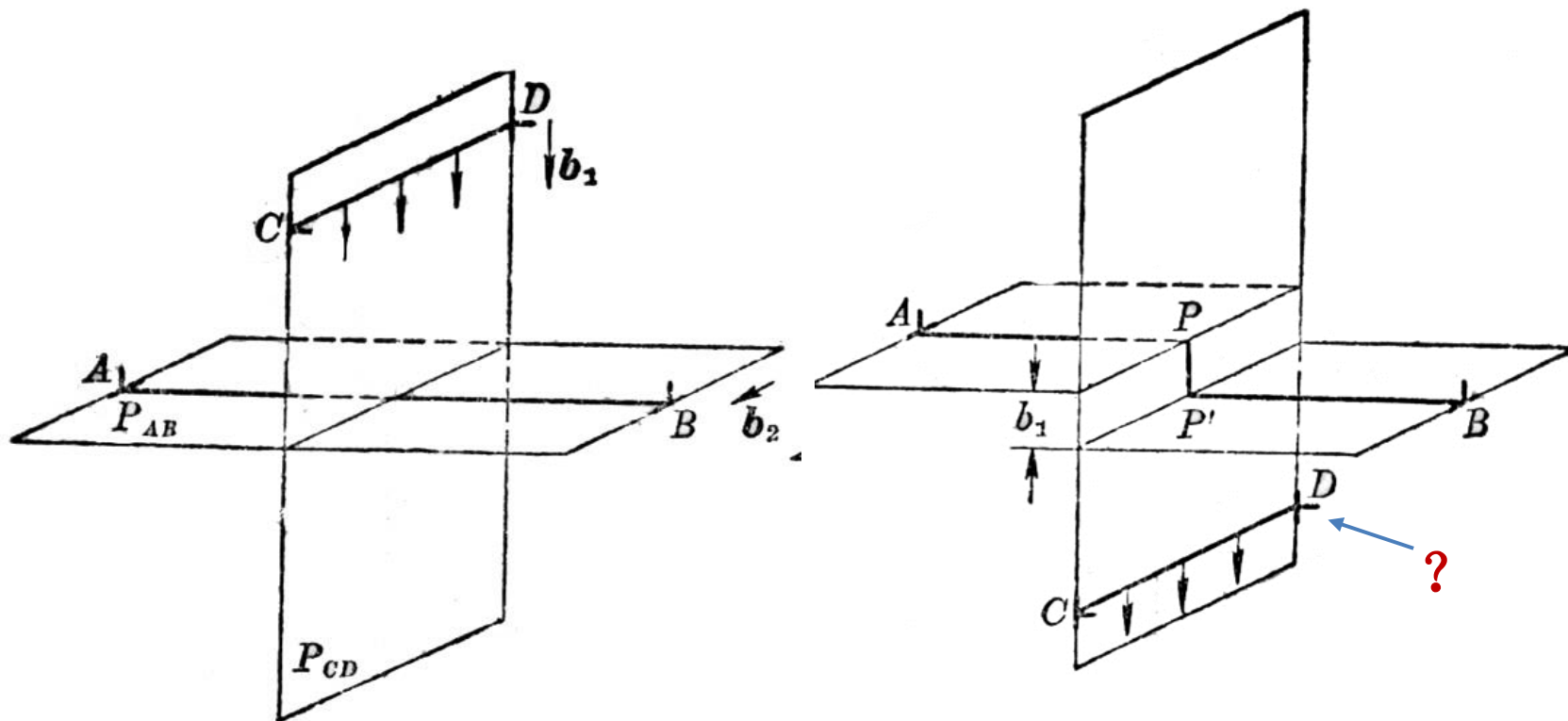


图3-506 位错运动中出现的割阶与扭折示意图

(a)刃型位错 (b)螺型位错

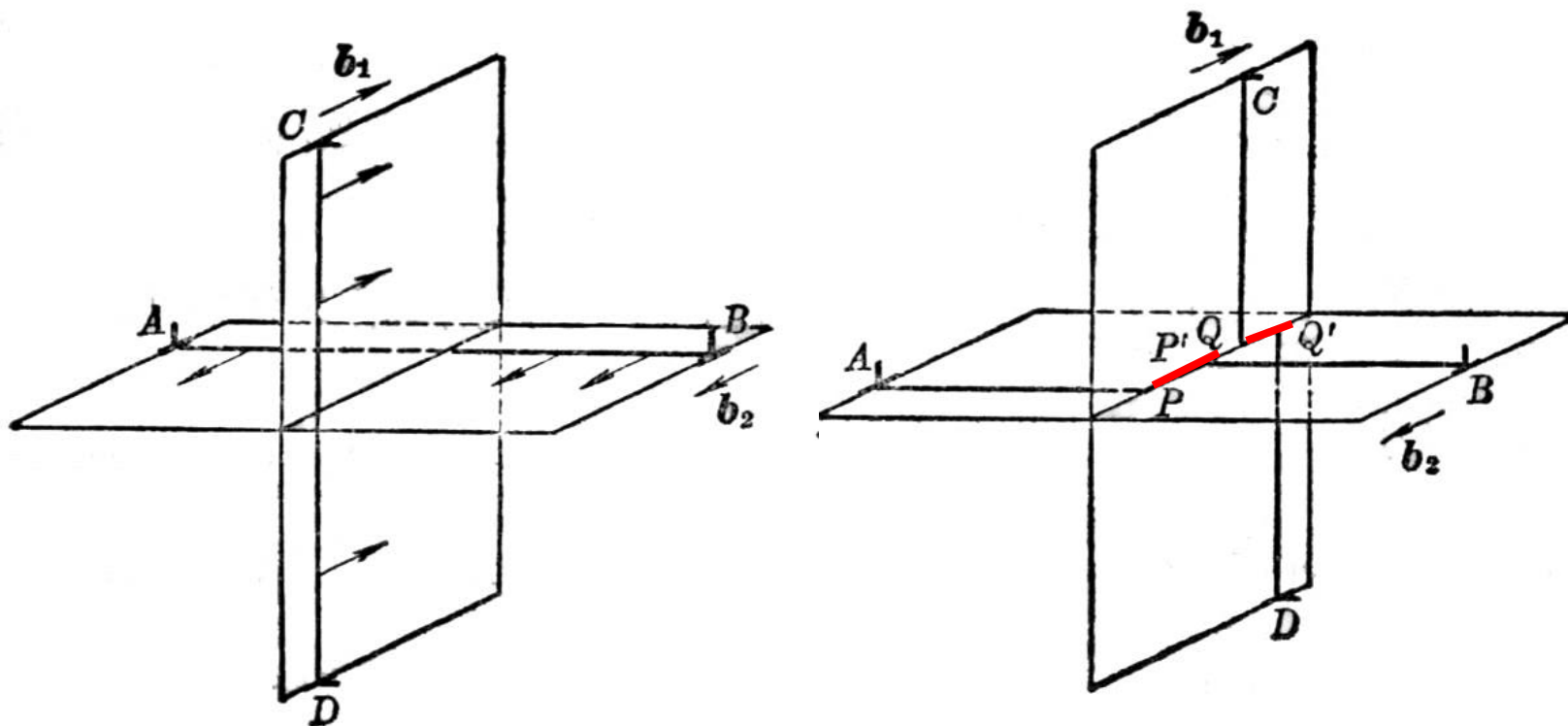
位错的交割 (一)

两柏氏矢量相互垂直的刃位错相互交截



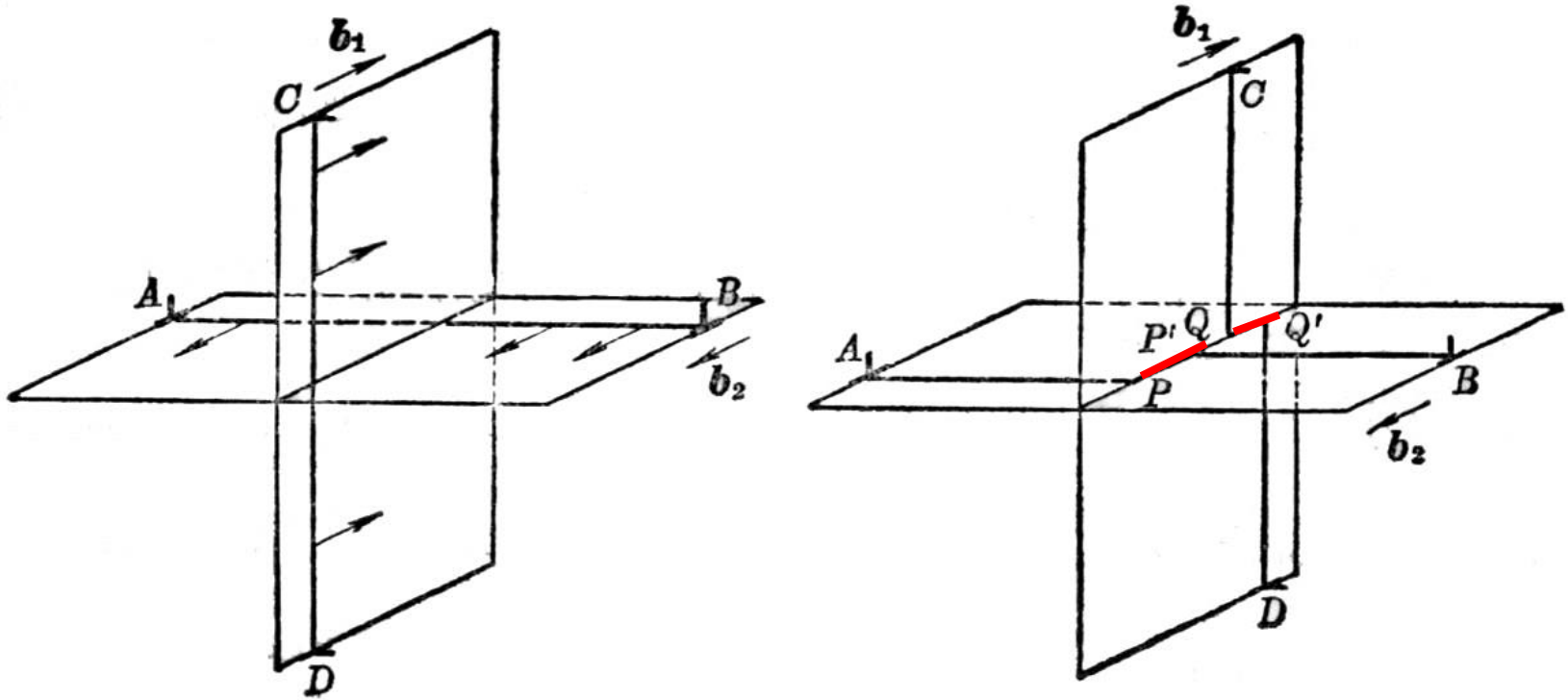
位错的交割 (二)

两柏氏矢量相互平行的刃位错相互交截

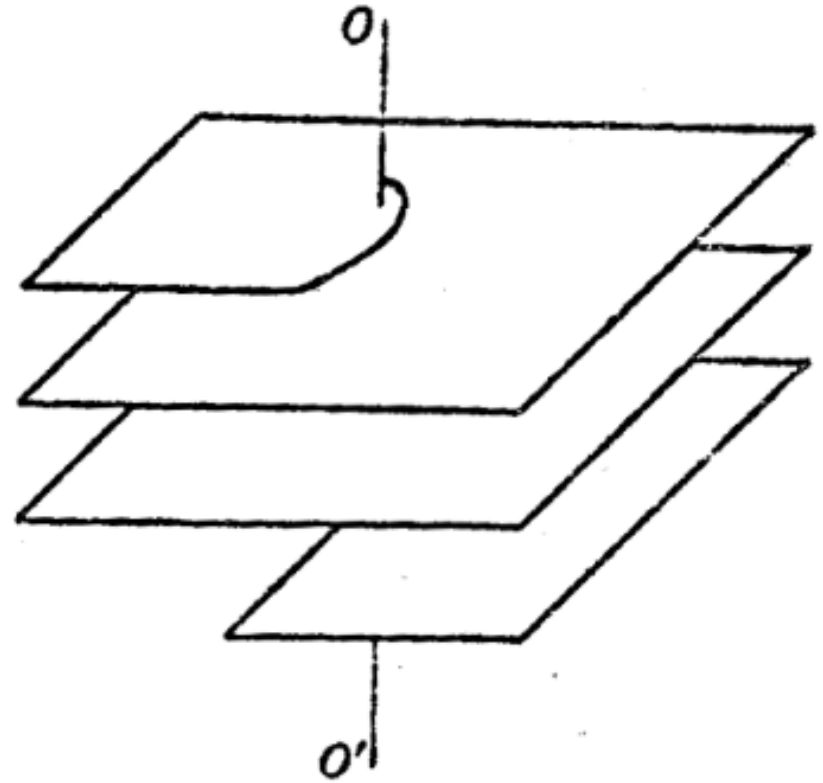
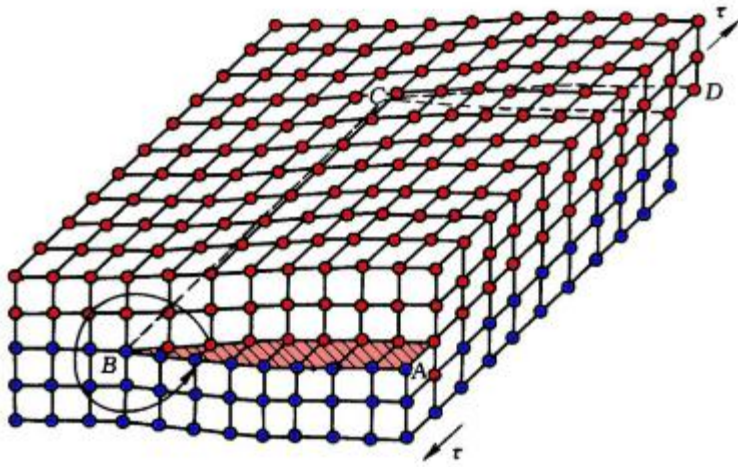


位错的交割 (二)

两柏氏矢量相互平行的刃位错相互交截



PP' 为扭折, $b_2 \parallel PP'$; QQ' 为扭折, $b_1 \parallel QQ'$
PP' 和QQ' 都是螺位错。



与螺位错垂直的晶面的形状

螺型位错形成后，所有原来与位错线相垂直的晶面，都将有平面变成以位错线为中心轴的螺旋面。

位错的交割 (三)

刃型位错和螺型位错的交割

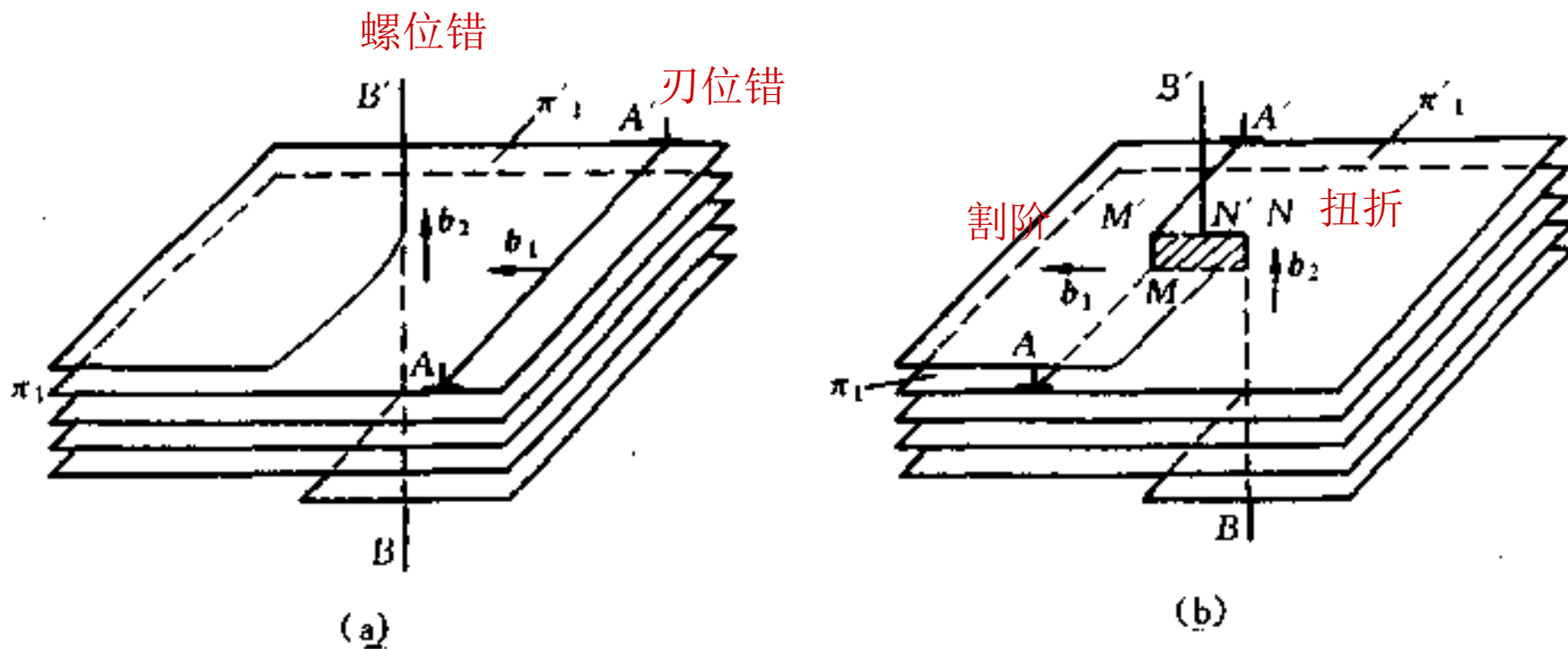
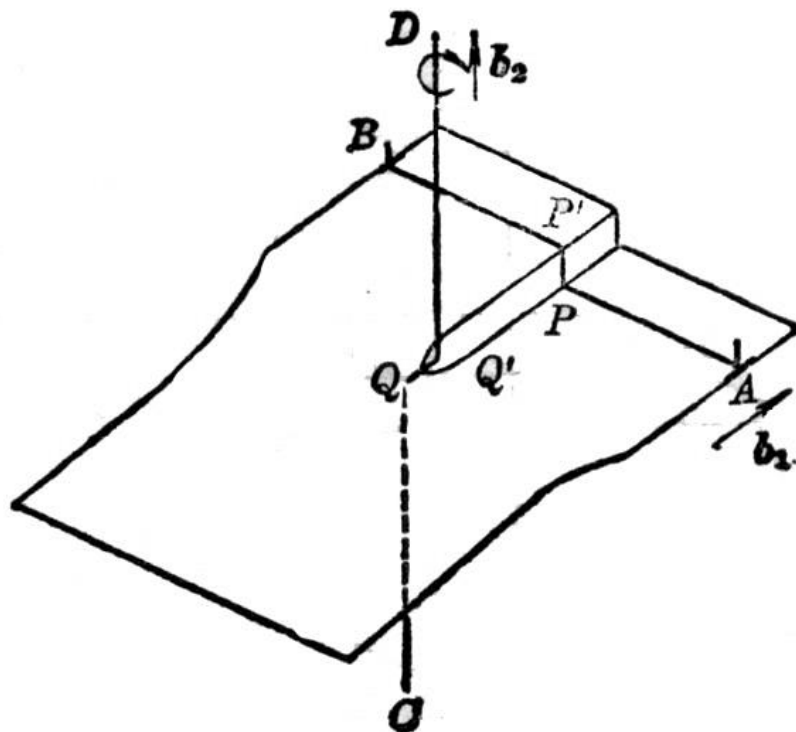
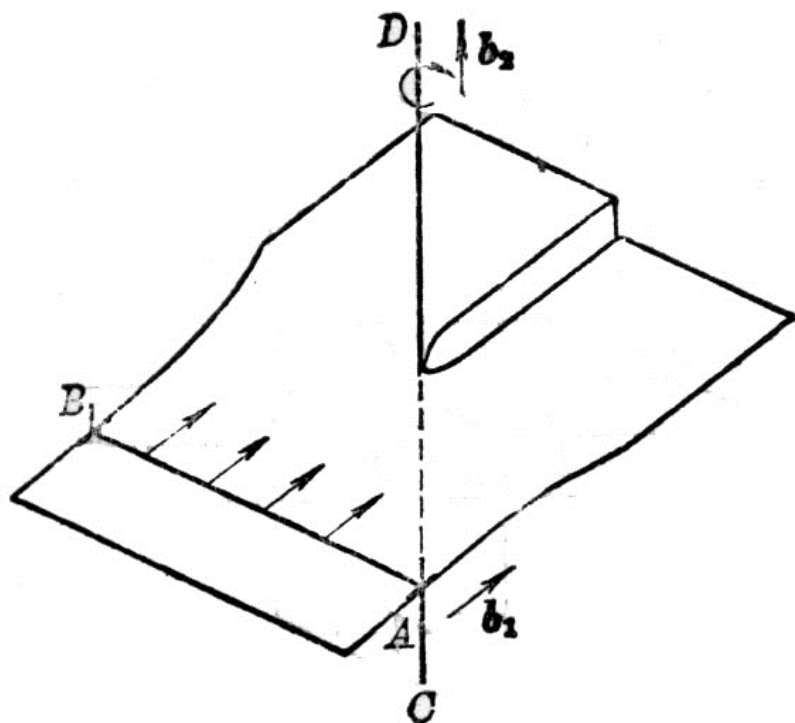


图 3.19 刃型位错和螺型位错的交割

(a) 交割前 (b) 交割后

刃位错和螺位错的交割：割阶+扭折

刃型位错和螺型位错的交割

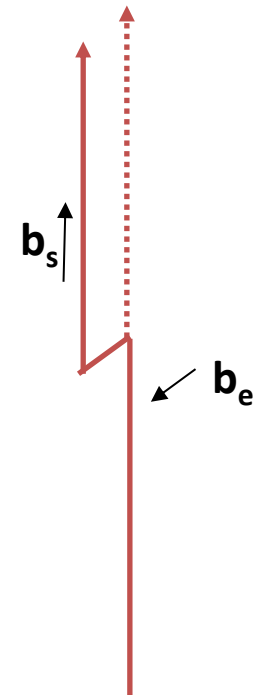
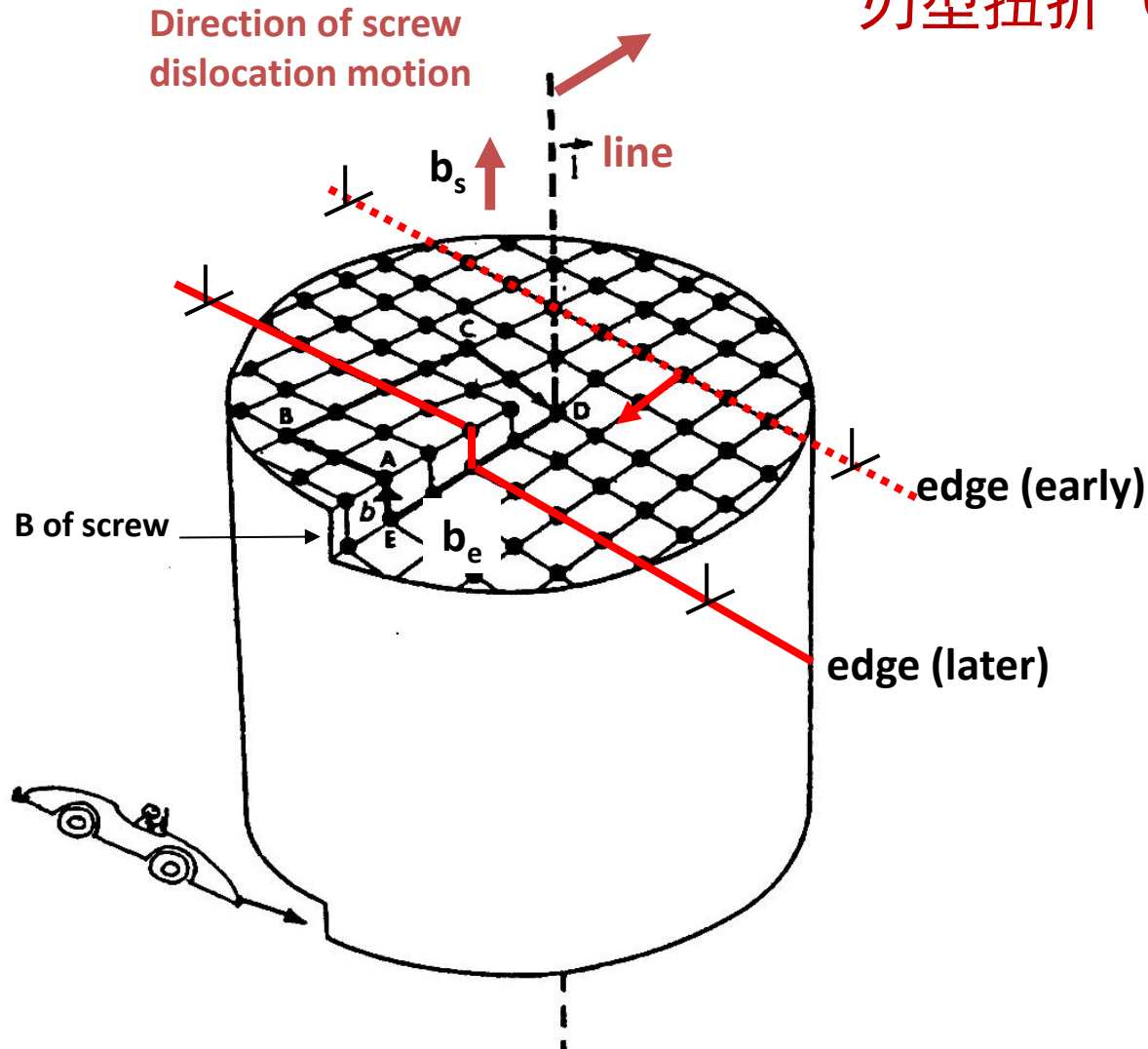


PP' 为割阶, $b_1 \perp PP'$, PP' 大小和方向取决于 b_2 , 为刃型位错。

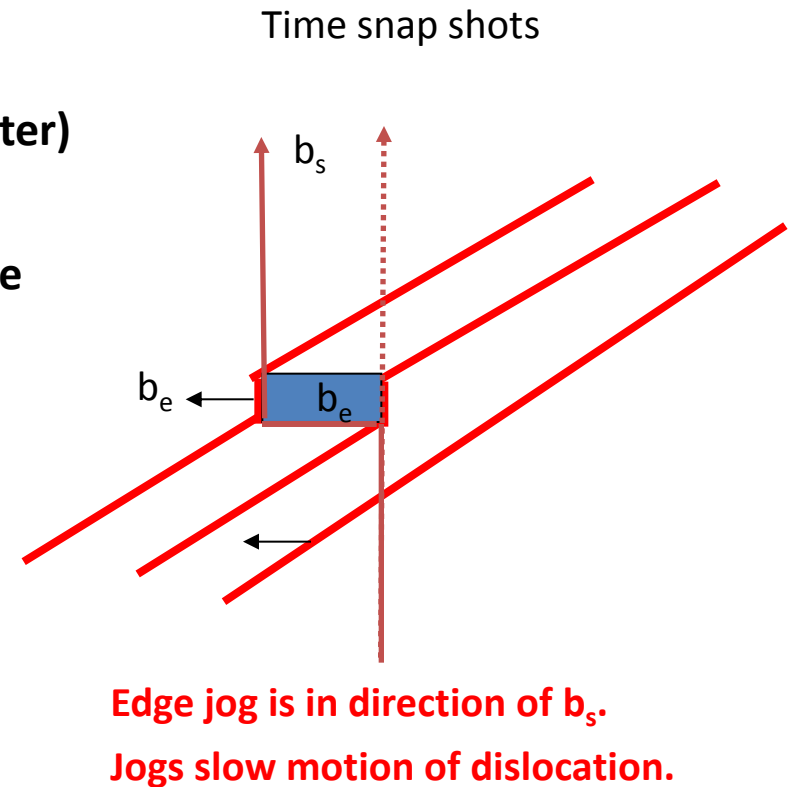
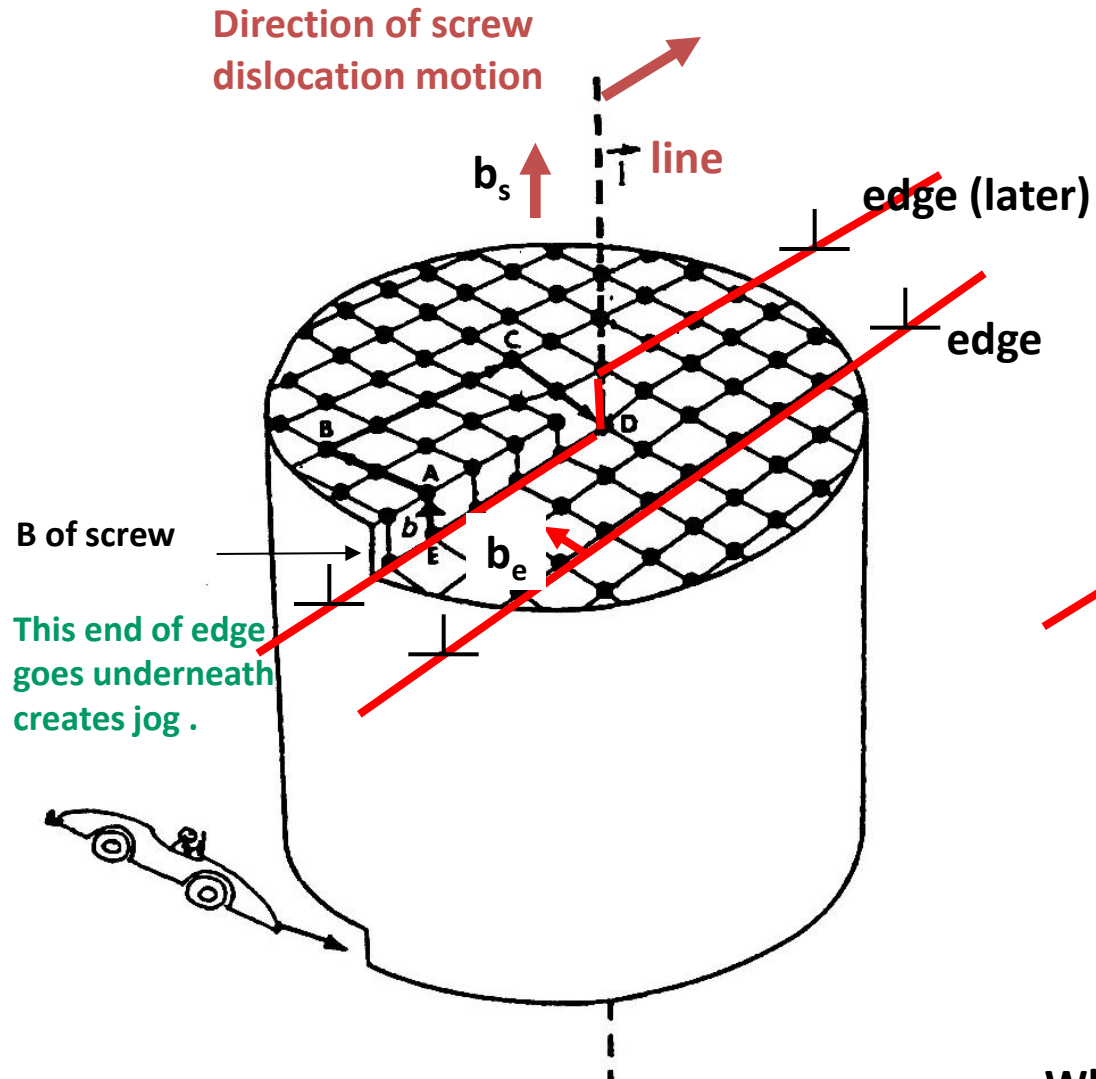
QQ' 为扭折, $b_2 \perp QQ'$, QQ' 大小和方向取决于 b_1 , 为刃型位错。

刃型位错和螺型位错的交割：刃型割阶 (Edge Jog)

刃型扭折 (Edge Kink)



刃型位错和螺型位错的交割：刃型割阶 (Edge Jog)



Why does screw also have jog?

位错的交割 (四)

两个互相垂直的螺位错的交割

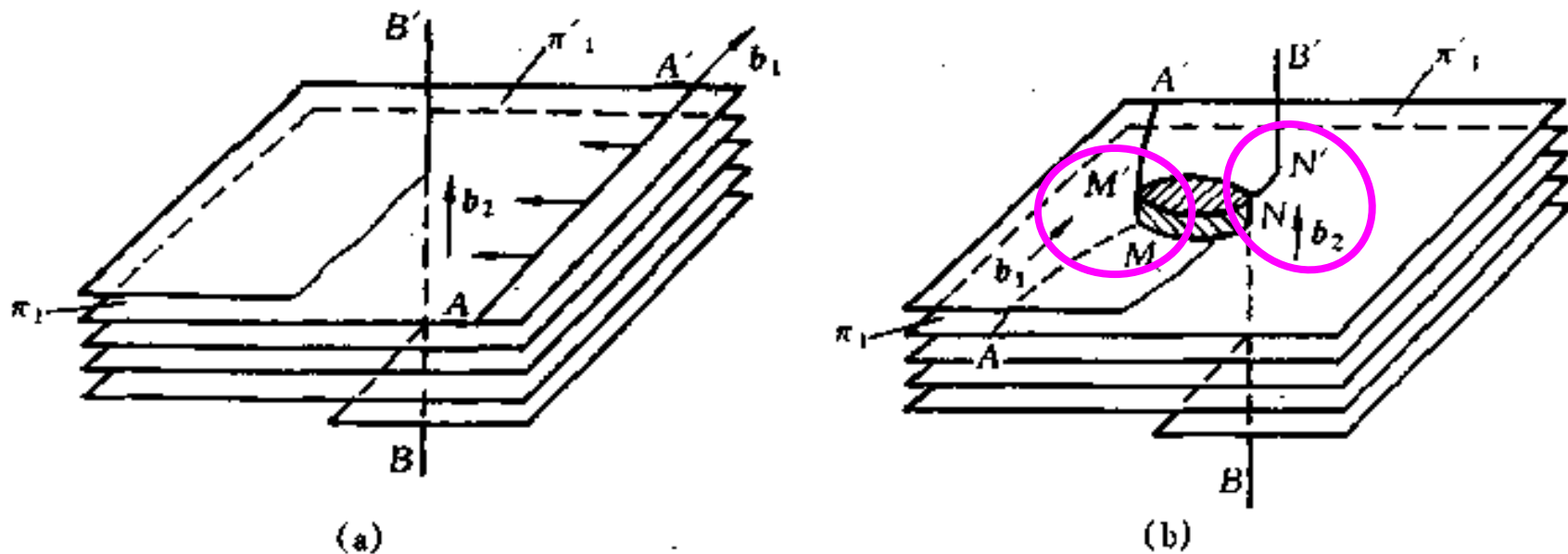


图 3.20 两个螺型位错的交割

(a) 交割前 (b) 交割后

产生两个刃型割阶，大小和方向各等于对方 b 矢量

位错的交割

- ① 运动位错交割后, 可以产生扭折或割阶, 其大小和方向取决与另一位错的柏氏矢量, 其方向平行, 大小为其模, 但具原位错的柏氏矢量。如果另一位错的柏氏矢量与该位错线平行, 则交割后该位错线不出现曲折。
- ② 所有割阶都是刃位错, 而扭折可以是刃位错, 也可以是螺位错。交割后曲折段的方向取决与位错相对滑移过后引起晶体的相对位移情况。相对位移可通过右手定则来判断。
- ③ 扭折与原位错在同一滑面上, 可随主位错线一起运动, 几乎不产生阻力, 且扭折在线张力作用下易与消失。
- ④ 割阶与原位错线不在同一滑移面上, 除攀移外割阶一般不能随主位错一起运动, 成为位错运动的障碍。

带割阶位错的运动

带割阶位错的运动

割阶：攀移，硬化

割阶的三种情况：

- 1、高度 $1-2b$ ，拖着走，一排点缺陷(螺位错)
- 2、几个 $b-20\text{nm}$ ，形成位错偶。
- 3、 $> 20\text{nm}$ ，各自旋转

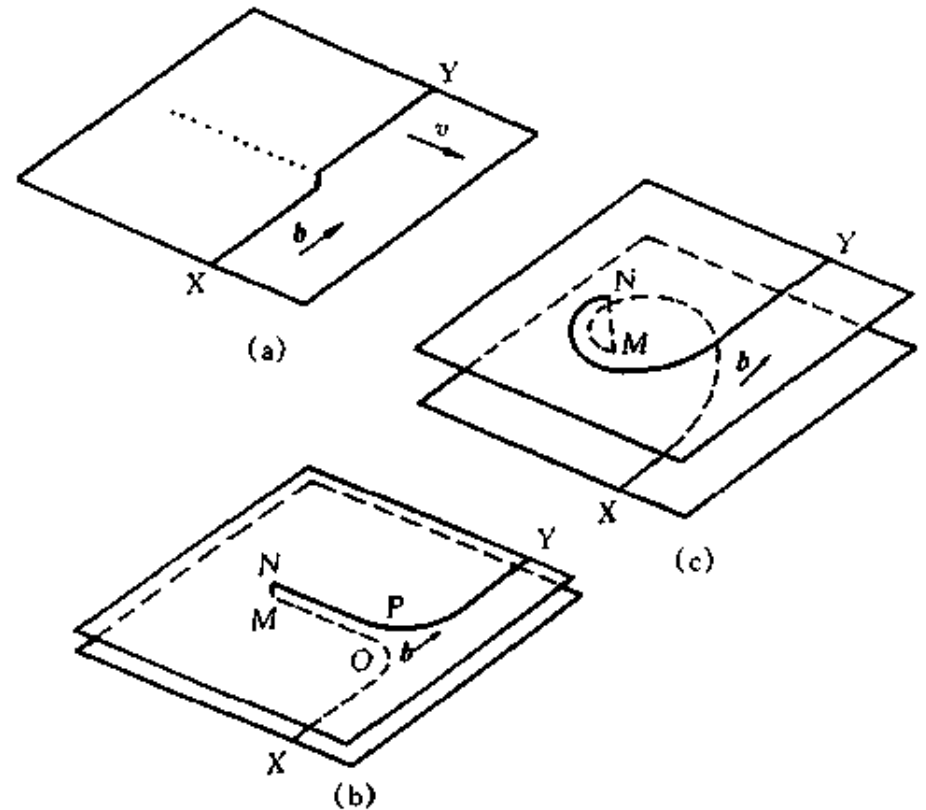
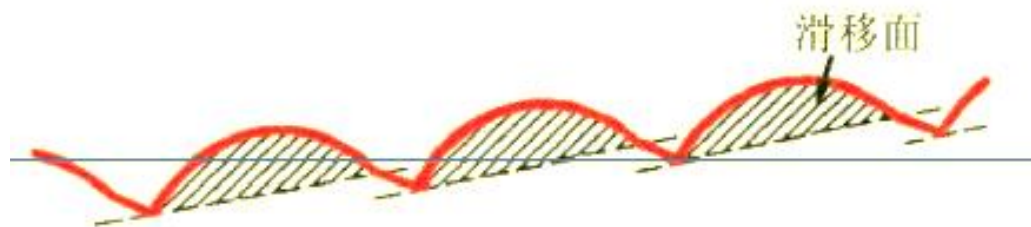
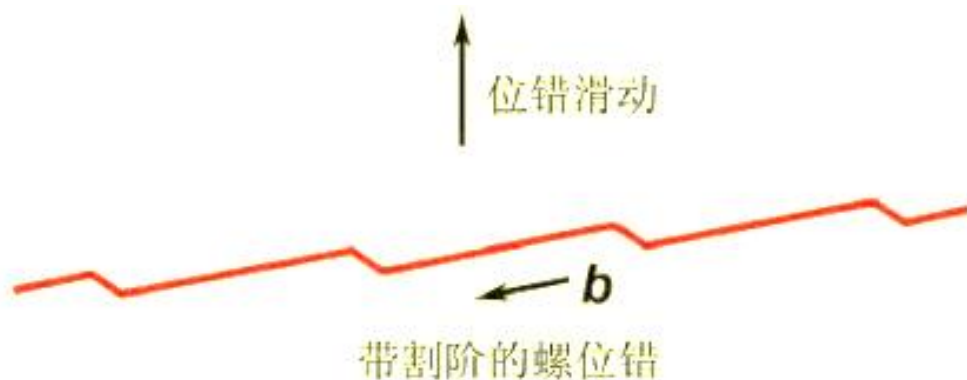
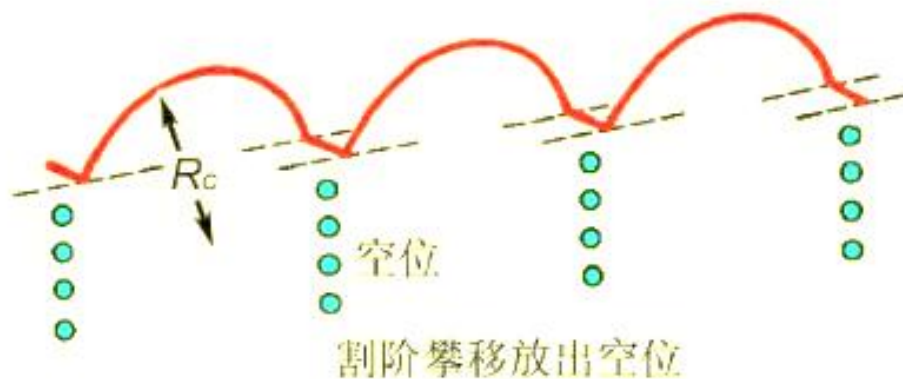
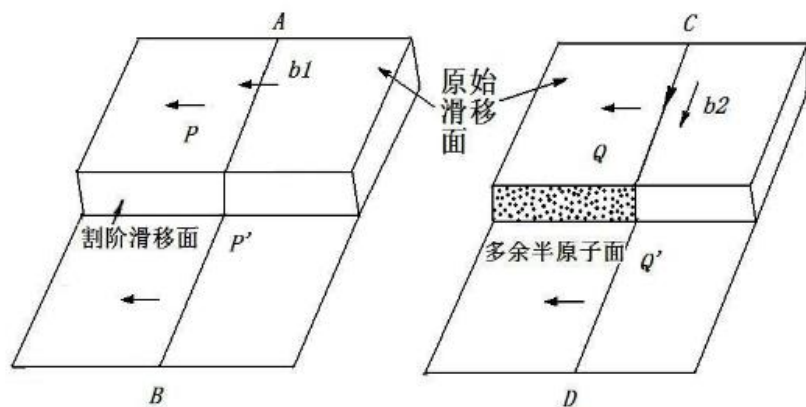


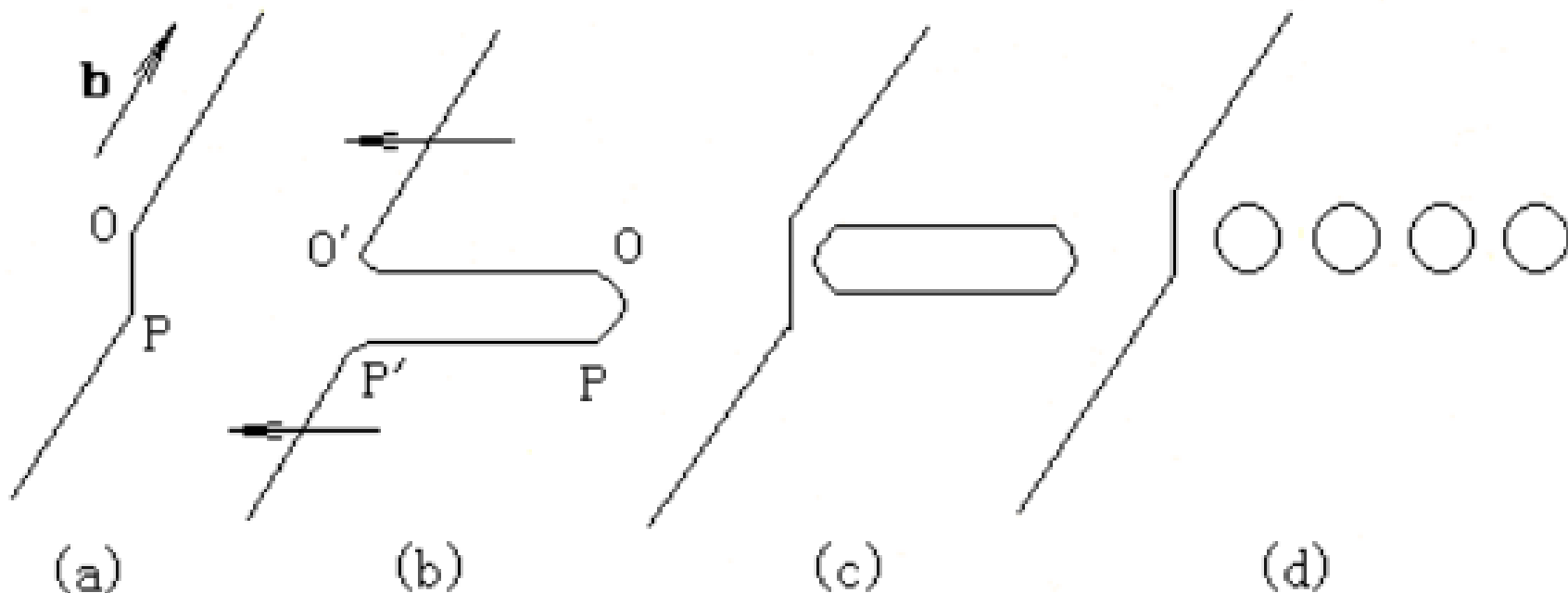
图 3.21 螺位错中不同高度的割阶的行为

高度 $1-2b$ ：拖着走，一
排点缺陷(螺位错)



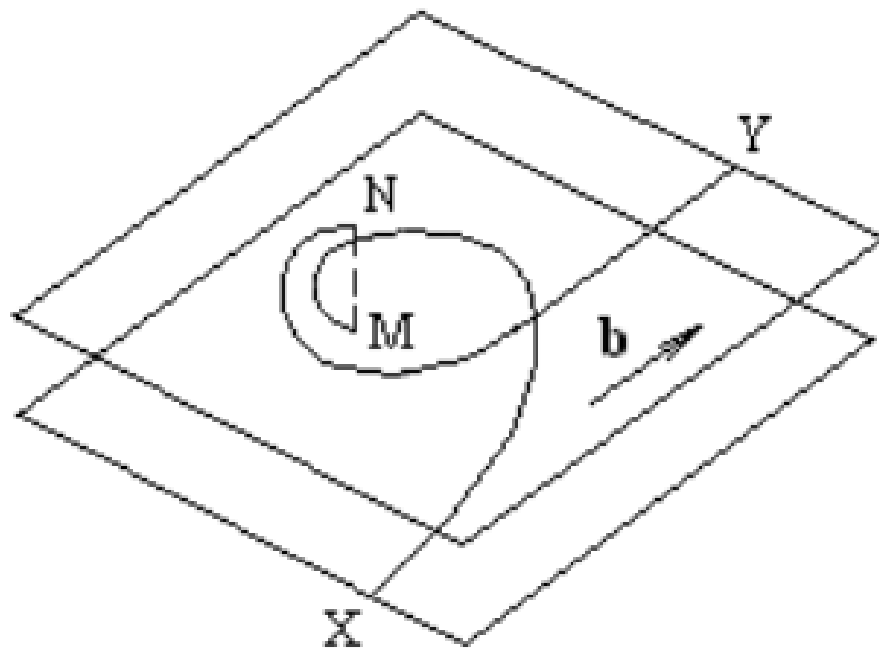
螺位错在它的滑移面上滑动





高度几个 b -20nm：在外应力作用下，割阶之间的位错线弯曲，位错前进就会在其身后留下一对拉长了的异号刃型位错线段（位错偶）。为降低应变能，位错偶会断裂形成成长的位错环，进一步分裂成小的位错环。

高度20 nm以上：此时割阶两端的位错相隔太远，它们之间的相互作用力太小，它们可以各自独立地在各自的滑移面上滑移，并以割阶为轴，在滑移面上旋转，这实际上也是晶体中产生位错的一种方式。



位错的弹性性质

弹性连续介质模型  弹性力学理论

- 假设晶体是完全弹性，服从胡克定律；
- 晶体各向同性；
- 近似地认为晶体内部由连续介质组成，没有空隙，因此晶体中的应力、应变、位移等量是连续的，可用连续函数表示。
- 对位错线周围 r_0 以内部分不适用（畸变严重，不符合上述基本假设）

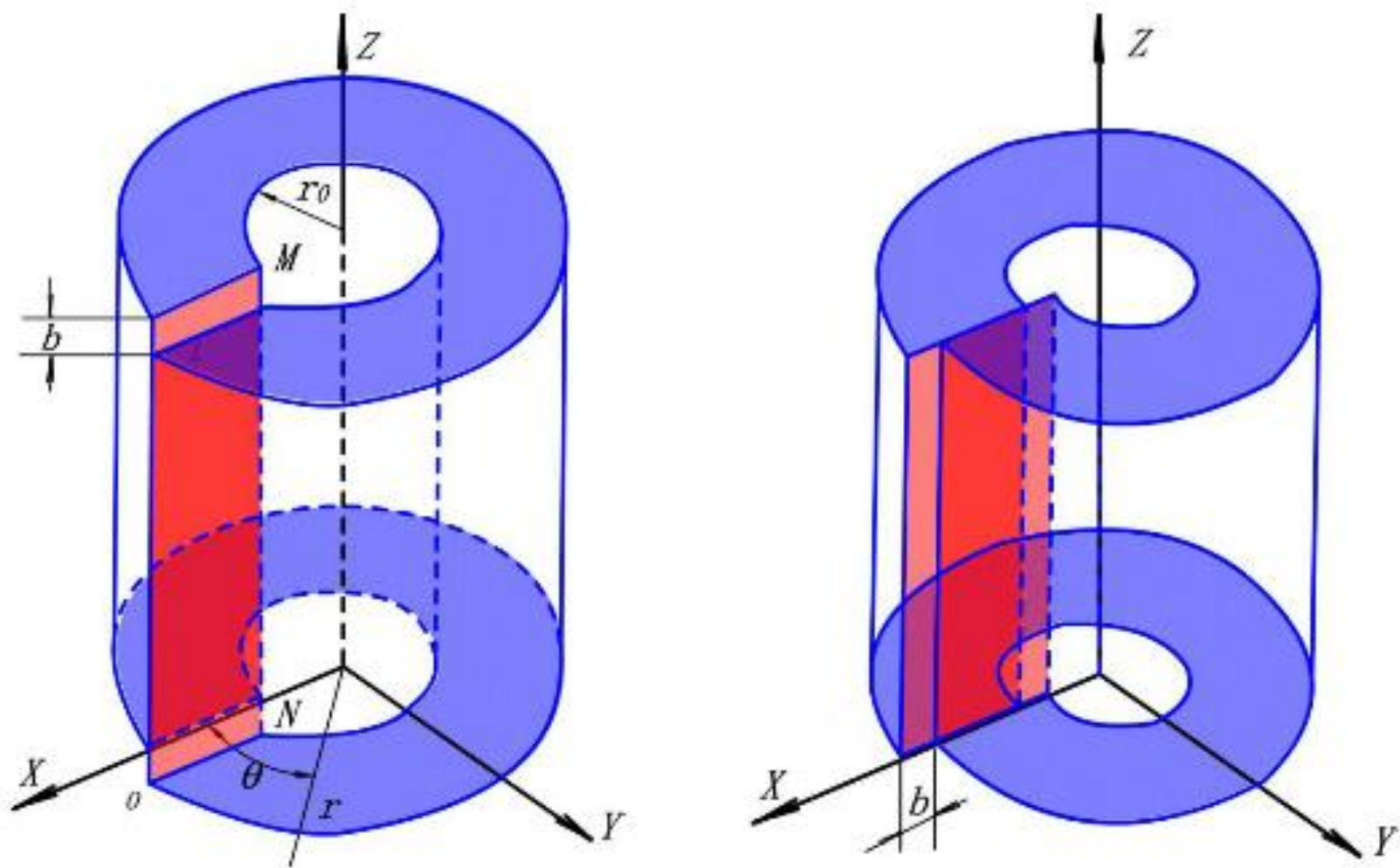
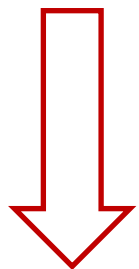


图 位错的连续介质模型
(a) 螺位错 (b) 刃位错

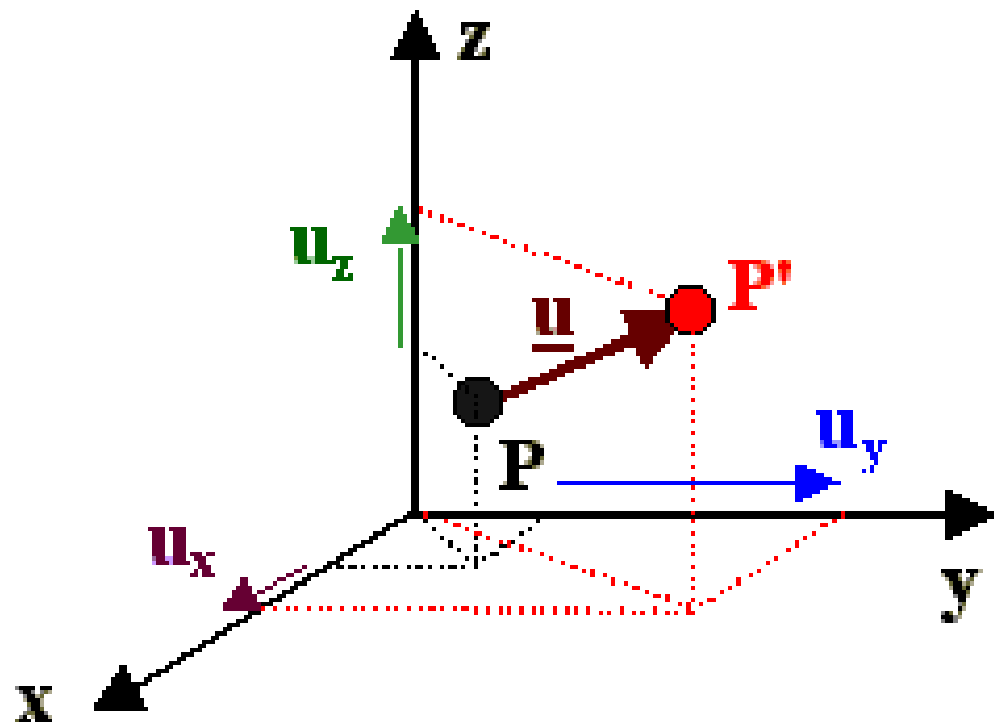
弹性力学理论

位移矢量

$$\underline{u}(x, y, z) = \begin{pmatrix} u_x(x, y, z) \\ u_y(x, y, z) \\ u_z(x, y, z) \end{pmatrix}$$



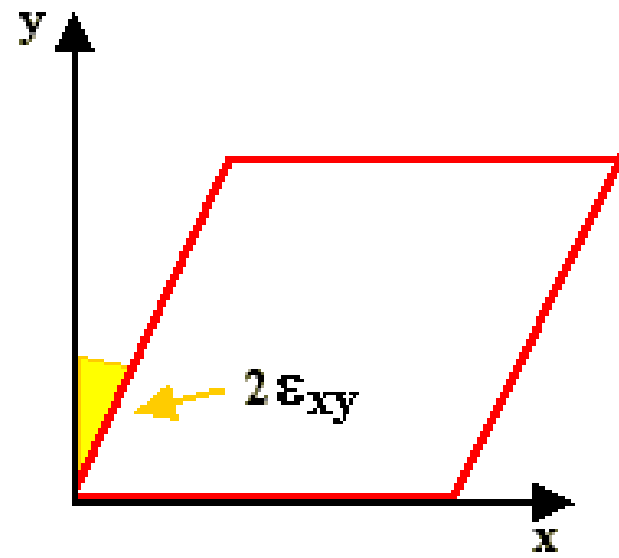
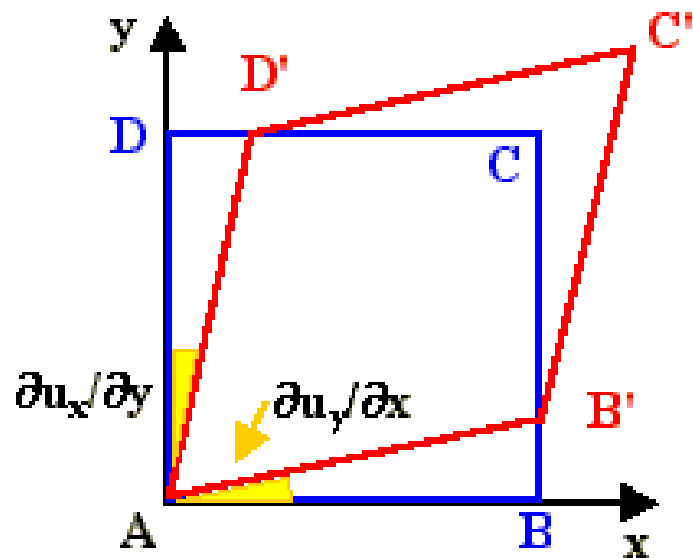
应变



$$\varepsilon_{xx} = \frac{du_x}{dx}$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{du_y}{dy}$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{du_z}{dz}$$



应变

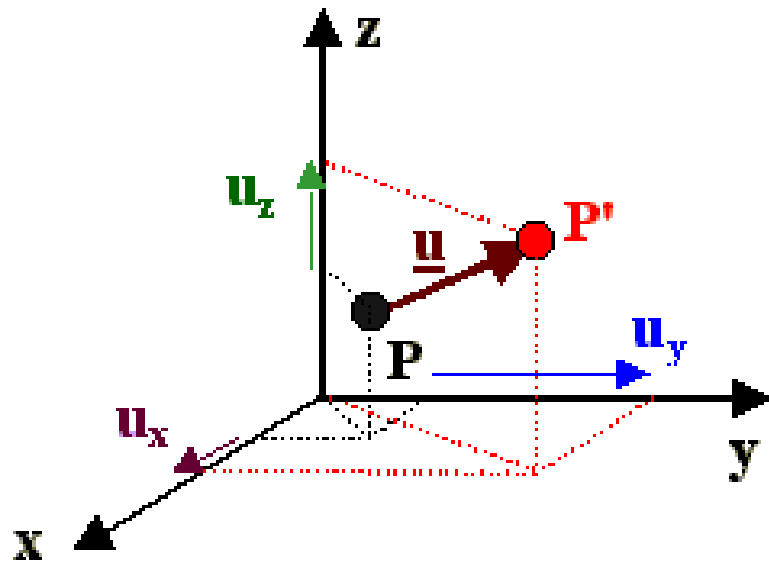
$$\underline{u}(x, y, z) = \begin{pmatrix} u_x(x, y, z) \\ u_y(x, y, z) \\ u_z(x, y, z) \end{pmatrix} \quad \longrightarrow$$

$$\epsilon_{yz} = \epsilon_{zy} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{du_y}{dz} + \frac{du_z}{dy} \right)$$

$$\epsilon_{zx} = \epsilon_{xz} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{du_z}{dx} + \frac{du_x}{dz} \right)$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{du_x}{dy} + \frac{du_y}{dx} \right)$$

弹性力学理论



$$\underline{u}(x, y, z) = \begin{pmatrix} u_x(x, y, z) \\ u_y(x, y, z) \\ u_z(x, y, z) \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_{xx} = \frac{du_x}{dx} \quad \epsilon_{yy} = \frac{du_y}{dy} \quad \epsilon_{zz} = \frac{du_z}{dz}$$

$$\epsilon_{yz} = \epsilon_{zy} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{du_y}{dz} + \frac{du_z}{dy} \right)$$

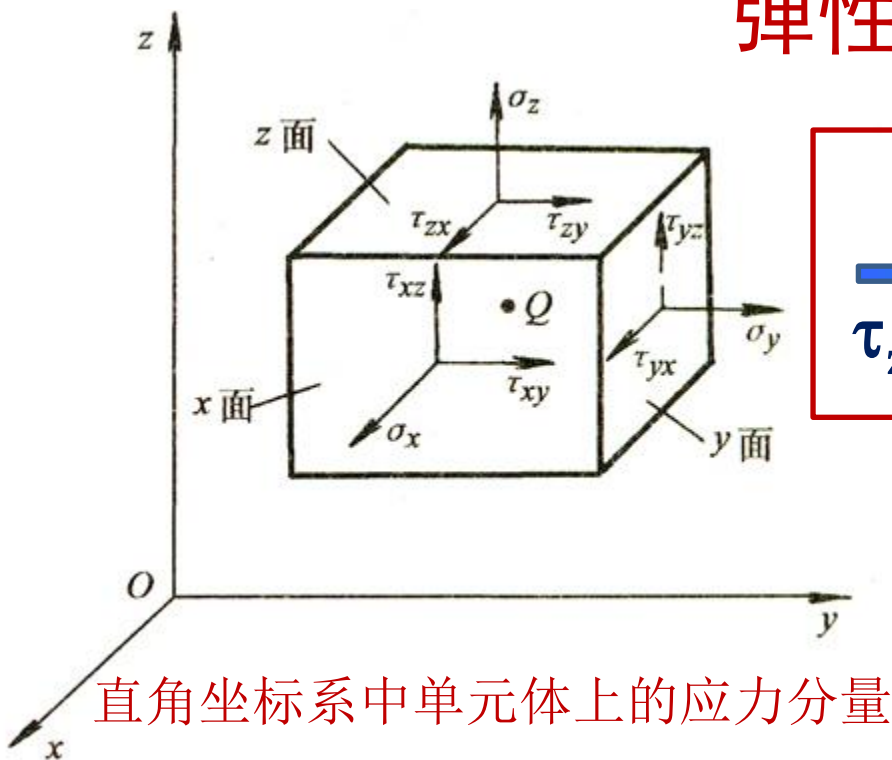
$$\epsilon_{zx} = \epsilon_{xz} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{du_z}{dx} + \frac{du_x}{dz} \right)$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{du_x}{dy} + \frac{du_y}{dx} \right)$$

$$V + \Delta V = V \cdot (1 + \epsilon_{xx}) \cdot (1 + \epsilon_{yy}) \cdot (1 + \epsilon_{zz})$$

$$\Delta = \frac{\Delta V}{V} = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$$

弹性力学理论



$$\begin{array}{c}
 \sigma_x \quad \sigma_y \quad \sigma_z \\
 \hline
 \tau_{zy} = \tau_{yz} \quad \tau_{zx} = \tau_{xz} \quad \tau_{xy} = \tau_{yx}
 \end{array}$$



胡克定律

胡克定律：在材料线弹性范围内，固体的单向拉伸变形与所受的外力成正比。

$$\begin{array}{c}
 \epsilon_{xx} \quad \epsilon_{yy} \quad \epsilon_{zz} \\
 \hline
 \epsilon_{zy} = \epsilon_{yz} \quad \epsilon_{zx} = \epsilon_{xz} \quad \epsilon_{xy} = \epsilon_{yx}
 \end{array}$$

弹性力学理论

材料的胡克定律

$$\sigma_x = 2G \cdot \varepsilon_{xx} + \lambda \cdot (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

$$\sigma_y = 2G \cdot \varepsilon_{yy} + \lambda \cdot (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

$$\sigma_z = 2G \cdot \varepsilon_{zz} + \lambda \cdot (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

$$\tau_{xy} = 2G \cdot \varepsilon_{xy}$$

$$\tau_{yz} = 2G \cdot \varepsilon_{yz} \quad \lambda: \text{ Lamé constants}$$

$$\tau_{zx} = 2G \cdot \varepsilon_{zx} \quad G: \text{ shear modulus}$$

弹性应变能

$$dE_{el} = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} \sigma_{ij} \cdot \varepsilon_{ij} \cdot dV$$

$$Y = 2G \cdot (1 + \nu)$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2 \cdot (\lambda + G)}$$

$$K = \frac{Y}{3 \cdot (1 - 2\nu)}$$

Young's modulus, Y

Poisson's ratio, ν

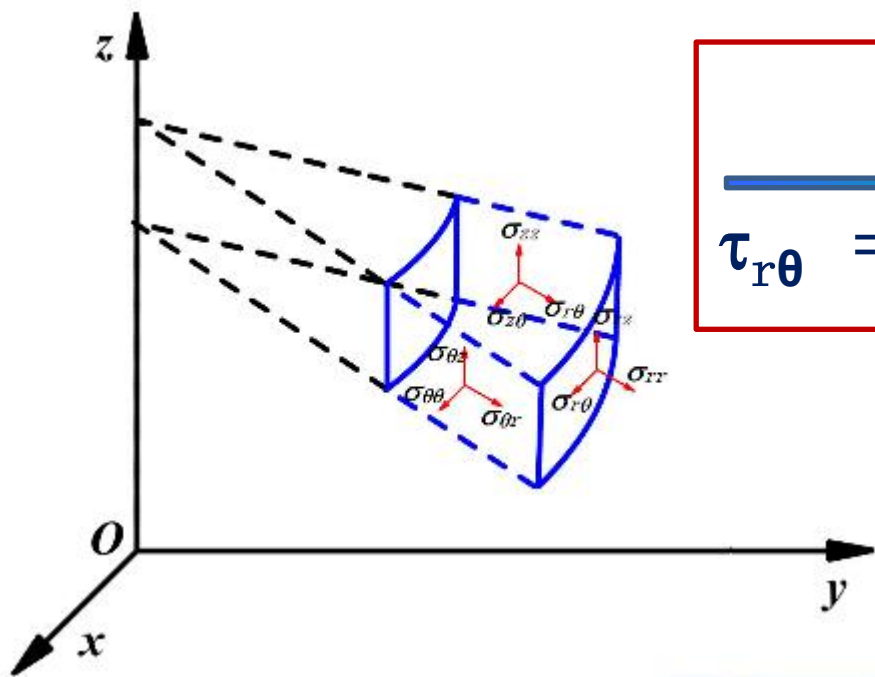
bulk modulus, K .

Y and ν for metallic and ceramic:

$$Y = (40-600) \text{ GNm}^{-2}$$

$$\nu = (0.2 - 0.45),$$

弹性力学理论



圆柱坐标系中单元体上的应力分量

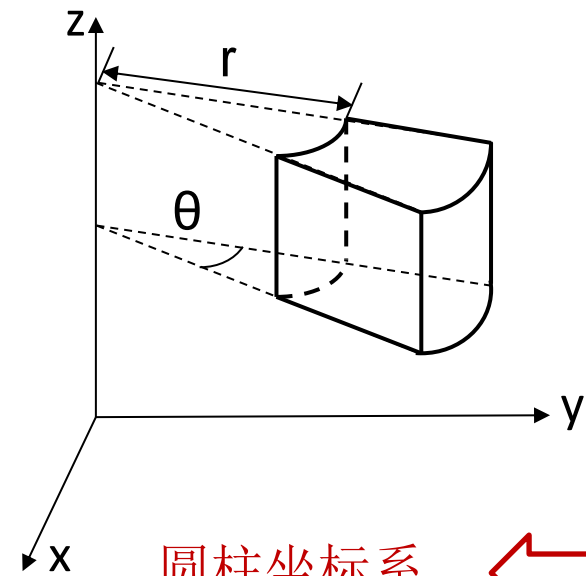
$$\begin{array}{c}
 \sigma_{rr} \quad \sigma_{\theta\theta} \quad \sigma_{zz} \\
 \hline
 \tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} \quad \tau_{z\theta} = \tau_{\theta z} \quad \tau_{zr} = \tau_{rz}
 \end{array}$$



胡克定律

$$\begin{array}{c}
 \epsilon_{rr} \quad \epsilon_{\theta\theta} \quad \epsilon_{zz} \\
 \hline
 \epsilon_{r\theta} = \epsilon_{\theta r} \quad \epsilon_{z\theta} = \epsilon_{\theta z} \quad \epsilon_{zr} = \epsilon_{rz}
 \end{array}$$

弹性力学理论



$$x = r \cdot \cos \theta$$

$$y = r \cdot \sin \theta$$

$$z = z$$

圆柱坐标系

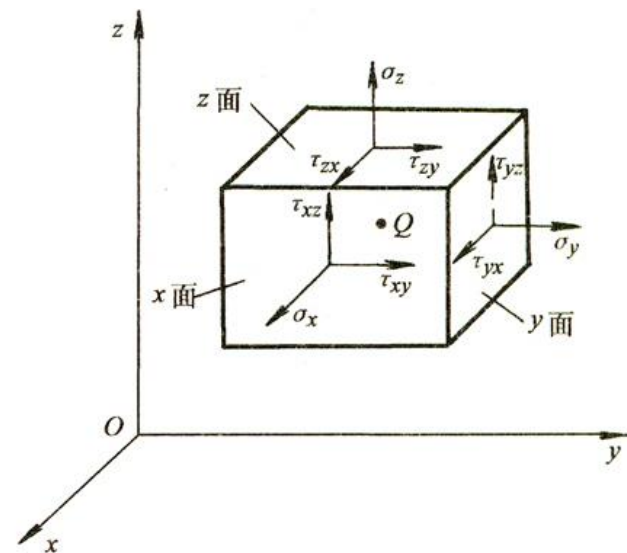


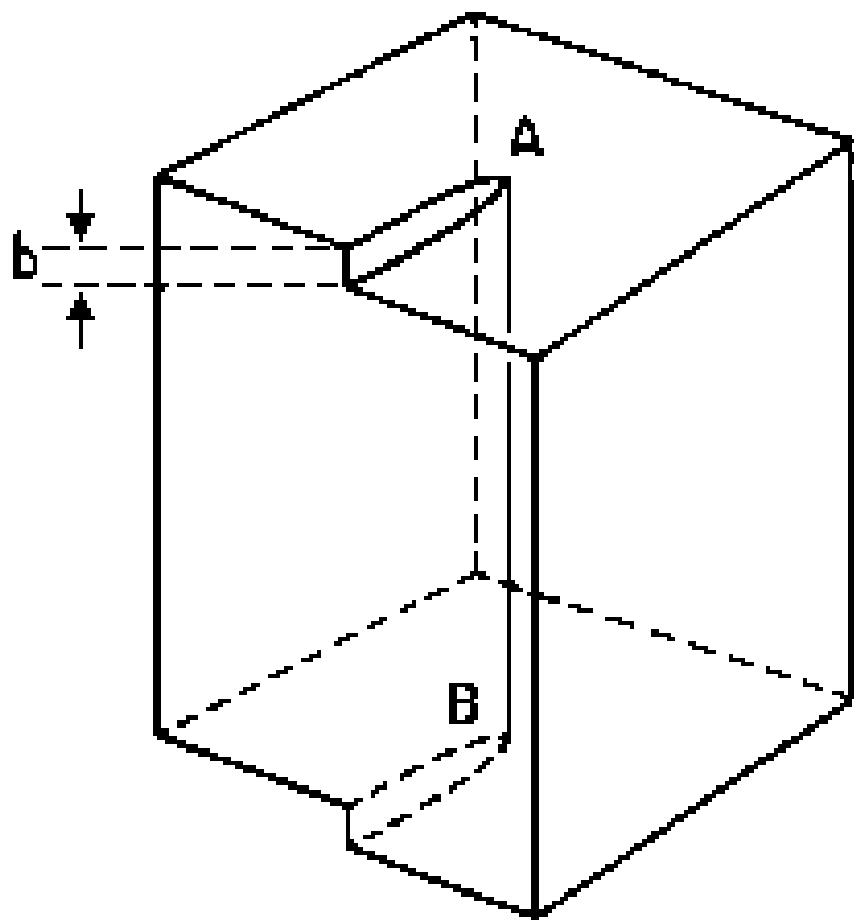
直角坐标系

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

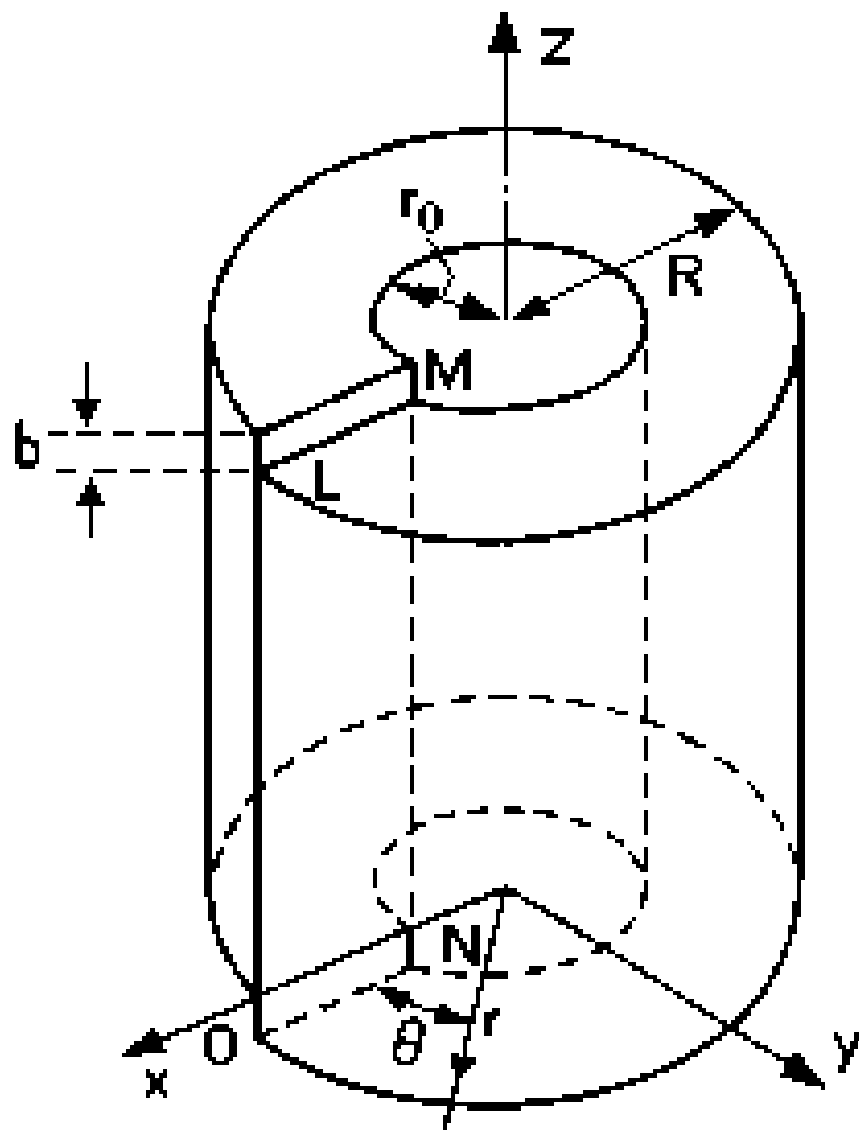
$$\theta = \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

$$z = z$$





(a)



(b)

螺型位错的连续介质模型

螺型位错的应力场

连续介质模型：

中空圆柱（不考虑位错中心区）

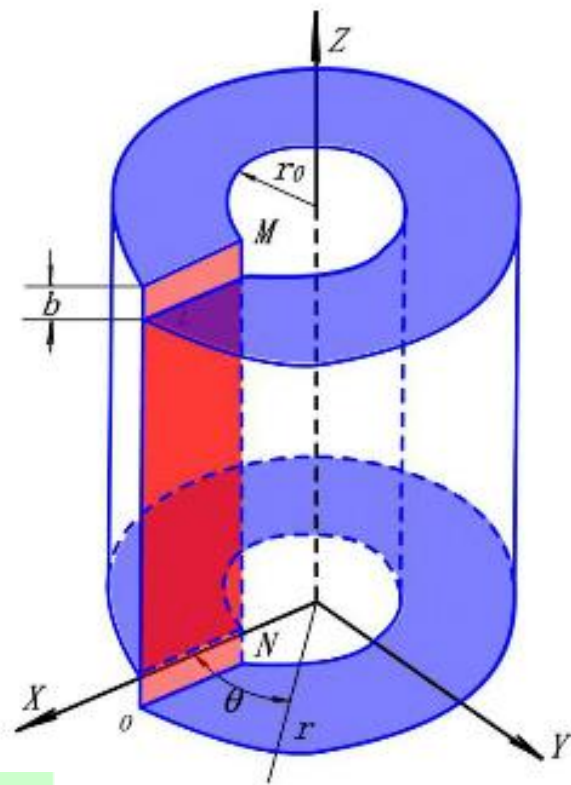
圆柱坐标：方便（利用其轴对称特性！）

位移： $U_z = \frac{b\theta}{2\pi}$ 其余分量为零

应变： $\varepsilon_{\theta z} = \varepsilon_{z\theta} = \frac{b}{4\pi r}$ $\varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{rr} = \varepsilon_{zz} = 0$

$$\varepsilon_{\theta r} = \varepsilon_{r\theta} = \varepsilon_{zr} = \varepsilon_{rz} = 0$$

应力： $\tau_{\theta z} = \tau_{z\theta} = \frac{Gb}{2\pi r}$ 其余分量为零。

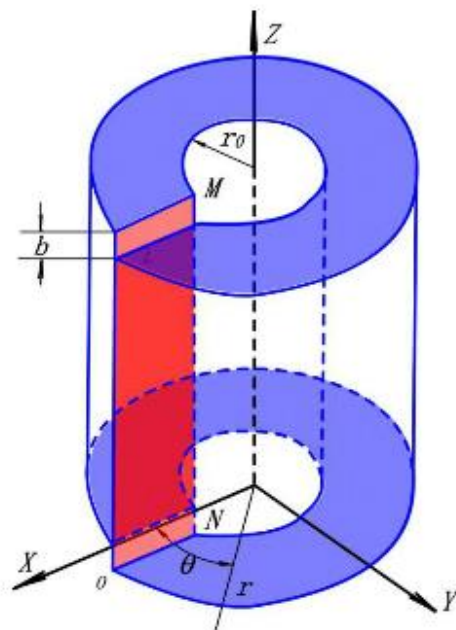


螺型位错的应力场

$$(1) u_x = u_y = 0$$

$$(2) u_z = \frac{b\theta}{2\pi} \quad \theta = \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

$$(3) u_z = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x}$$



$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = 0$$

$$\epsilon_{xz} = \epsilon_{zx} = -\frac{b}{4\pi} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{b}{4\pi} \cdot \frac{\sin \theta}{r}$$

$$\epsilon_{yz} = \epsilon_{zy} = \frac{b}{4\pi} \cdot \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{b}{4\pi} \cdot \frac{\cos \theta}{r}$$

$$\epsilon_{xz} = \epsilon_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right)$$

$$\epsilon_{yz} = \epsilon_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right)$$

螺型位错的应力场

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = 0$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = -\frac{G \cdot b}{2\pi} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{G \cdot b}{2\pi} \cdot \frac{\sin \theta}{r}$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \frac{G \cdot b}{2\pi} \cdot \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{G \cdot b}{2\pi} \cdot \frac{\cos \theta}{r}$$

螺型位错的应力场的特点

$$\tau_{\theta z} = \tau_{z\theta} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} = \tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = \tau_{rz} = \tau_{zr} = 0$$

- 只有切应力分量，无体积变化
- 应变、应力场为轴对称
- $1/r$ 规律； $r \rightarrow 0$ ，应力无穷大，不合实际情况，不适合中心严重畸变区。此规律适用于所有位错！

