

本章重点

- 点缺陷的基本概念平衡浓度公式
- 位错的基本概念、柏氏矢量、柏氏回路
- 位错的几何相关性之：运动（滑移、攀移、交割）、增殖、合成与分解
- 位错的力学相关性质：应力场、能量、作用在位错上的力
- 几何与力学交互作用： $\tau = Gb/r$
- 实际晶体中的位错：全位错、层错、部分位错、扩展位错、面角位错
- 汤普森四面体
- 面缺陷：表面与界面的微观结构、能量特性及由其导致的其它性能
- 小角晶界的位错模型，大角晶界的重合位置点阵模型。
- 相界：共格，半共格（位错模型），非共格

位错密度

□ 位错密度：单位体积晶体中所含位错线的总长度。

$$\rho_1 = \frac{L}{V} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$$

□ 面积A中所见的位错线数目N：穿过单位面积的位错线数目

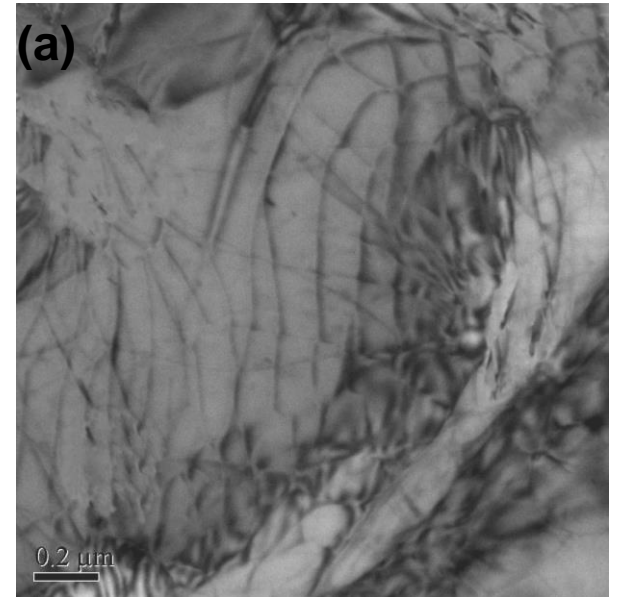
$$\rho_2 = \frac{N}{A} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$$

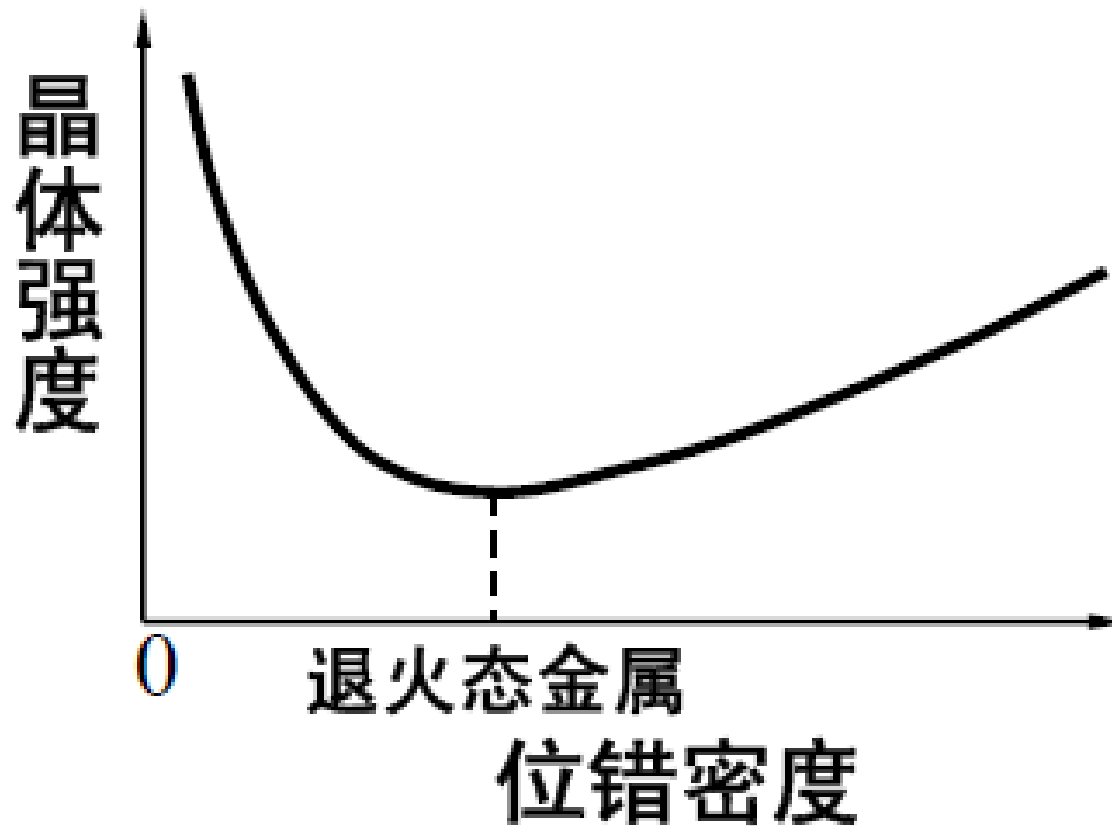
□ 金属晶体中的位错密度：

充分退火的金属多晶体： $10^6 \sim 10^8/\text{cm}^2$

超纯金属单晶体： $< 10^3/\text{cm}^2$

剧烈冷变形的金属： $10^{10} \sim 10^{12}/\text{cm}^2$





晶体强度与位错密度关系示意图

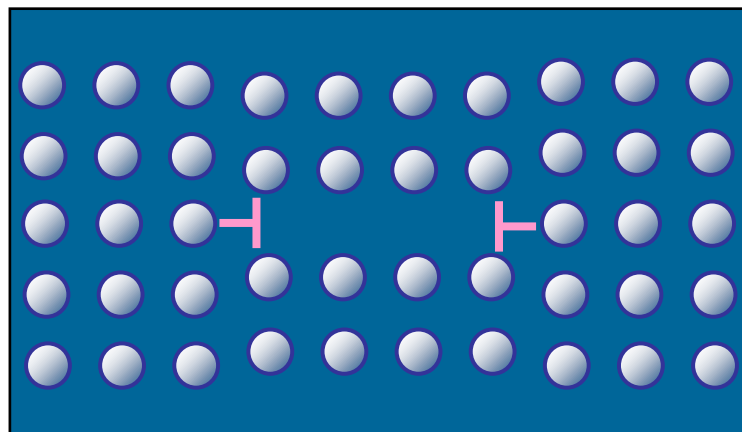
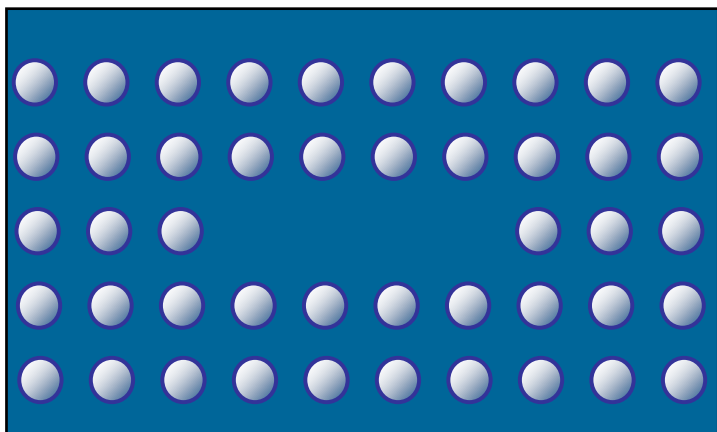
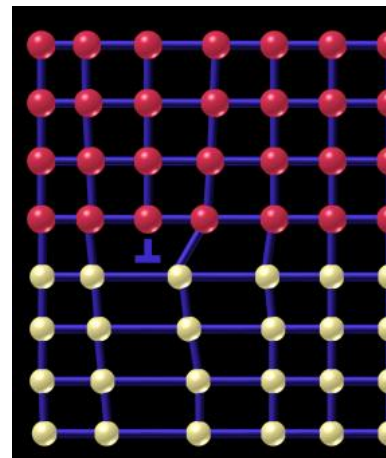
位错的生成

□ 晶体生长过程中产生的位错：

- 1、成分不同 \Rightarrow 晶块点阵常数不同 \Rightarrow 位错过渡
- 2、晶块偏转、弯曲 \Rightarrow 位相差 \Rightarrow 位错过渡
- 3、晶体表面受到影响 \Rightarrow 台阶或变形 \Rightarrow 产生位错

□ 快速凝固 \Rightarrow 过饱和空位 \Rightarrow 聚集 \Rightarrow 位错

□ 热应力和组织应力 \Rightarrow 界面和微裂纹处应力集中 \Rightarrow 局部滑移 \Rightarrow 位错



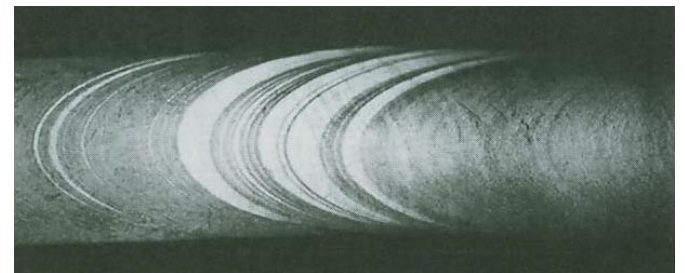
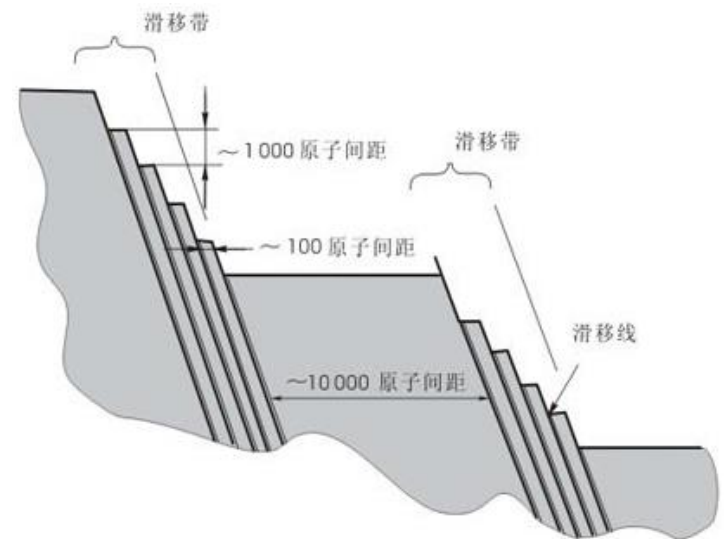
位错的增殖

位错滑移到表面=>宏观变形（减少？）

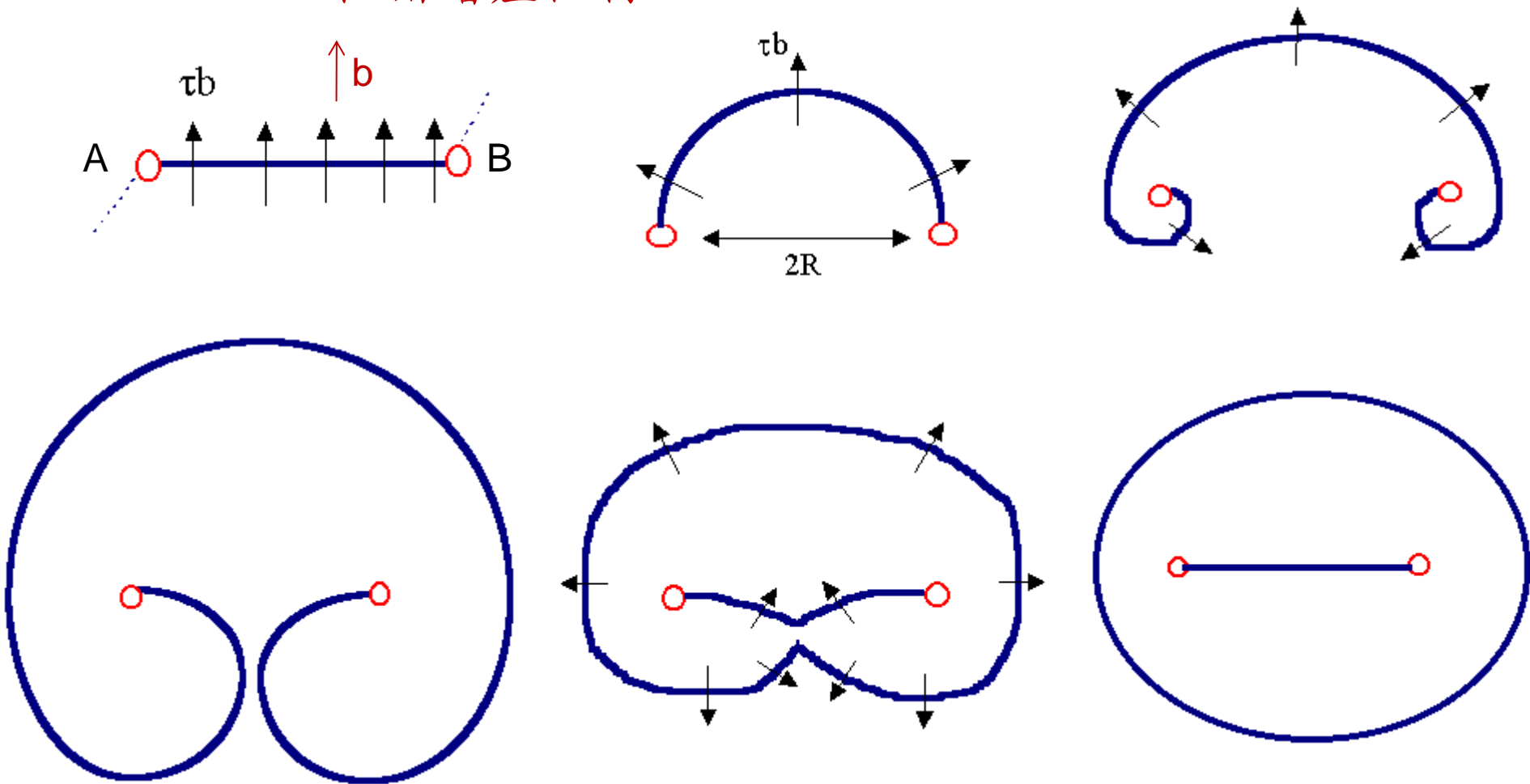
事实上：密度增加，可达4-5 个数量级位错必有增殖！

主要增殖机制：

- Frank-Read 位错源
- 双交滑移增殖机制
- 攀移增殖机制



Frank-Read 位错增殖机制

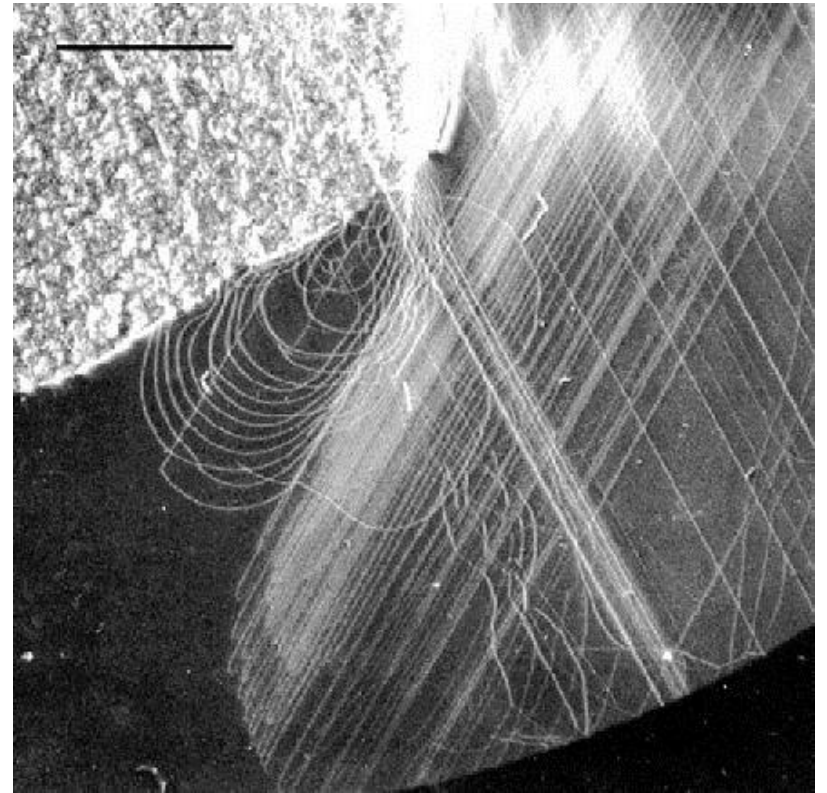
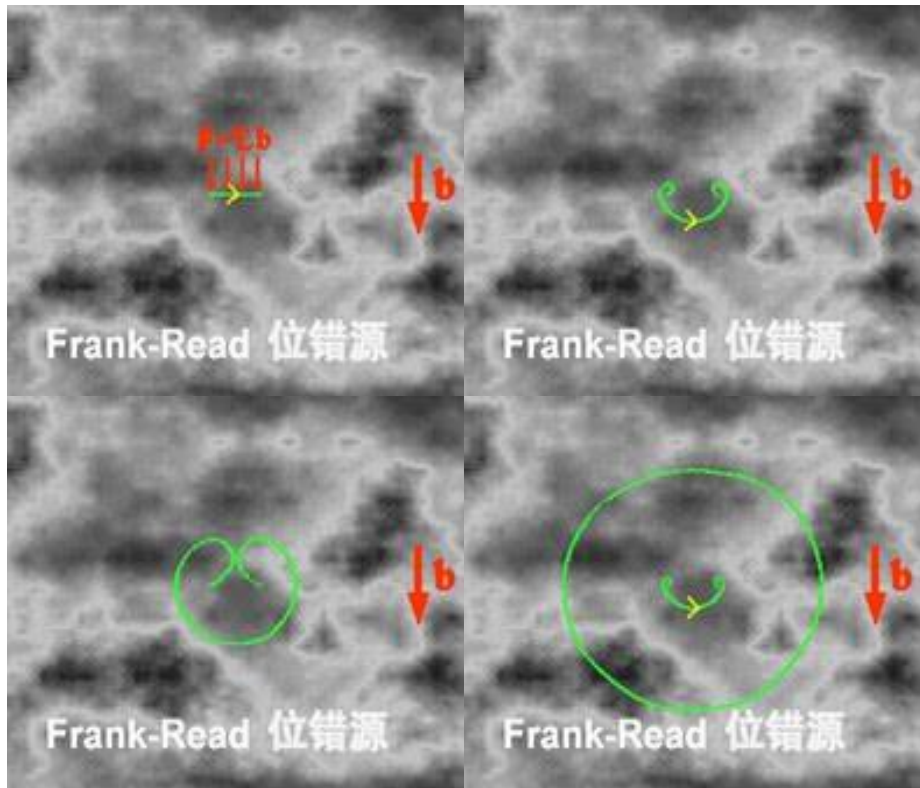


$$\tau_c = \frac{Gb}{2r} = \frac{Gb}{L}$$

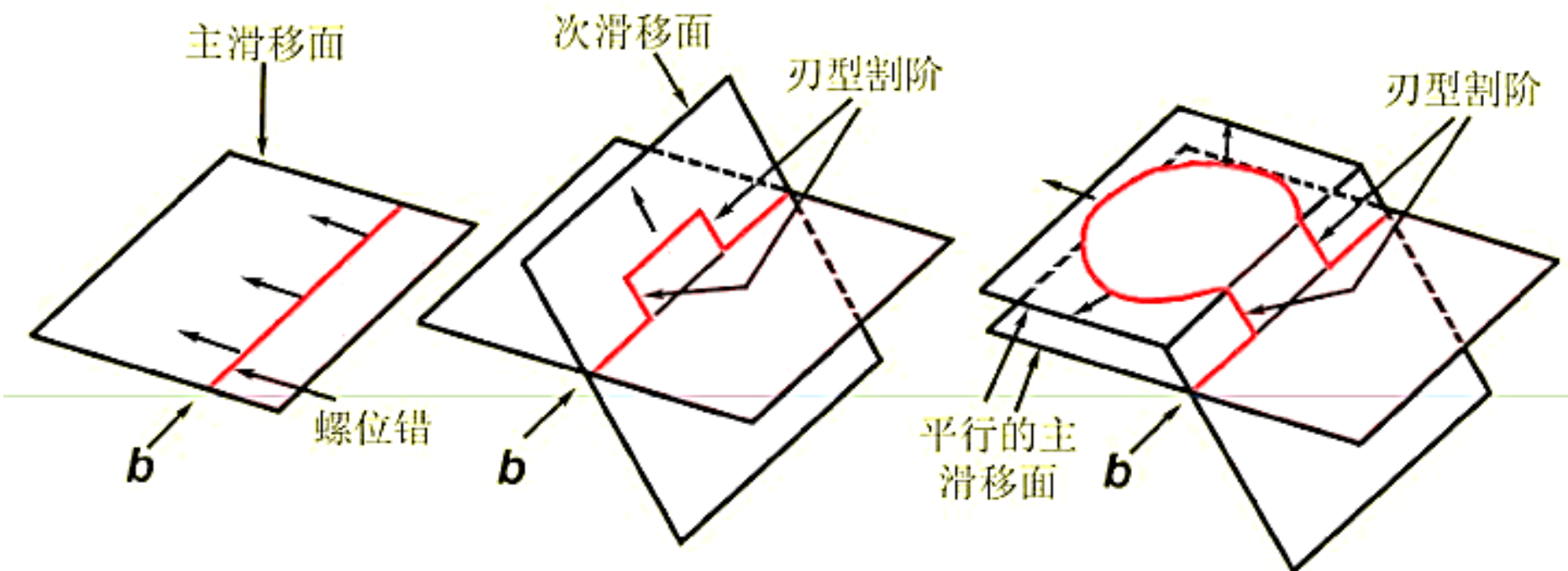
已为实验所证实：Si, Al-Cu... 晶体中观察到

Frank-Read 位错增殖机制

已为实验所证实：Si, Al-Cu... 晶体中观察到



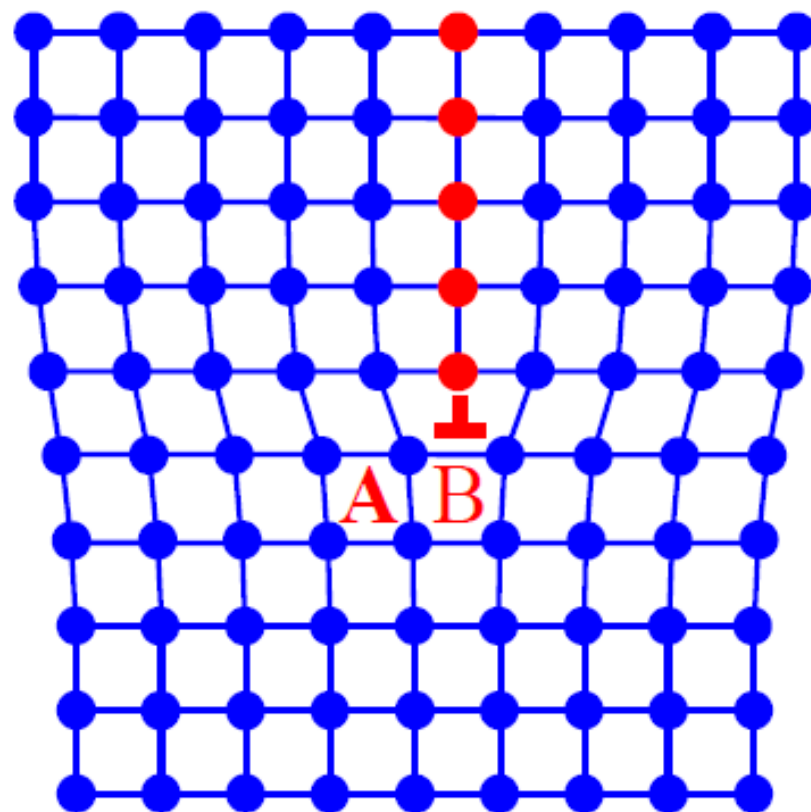
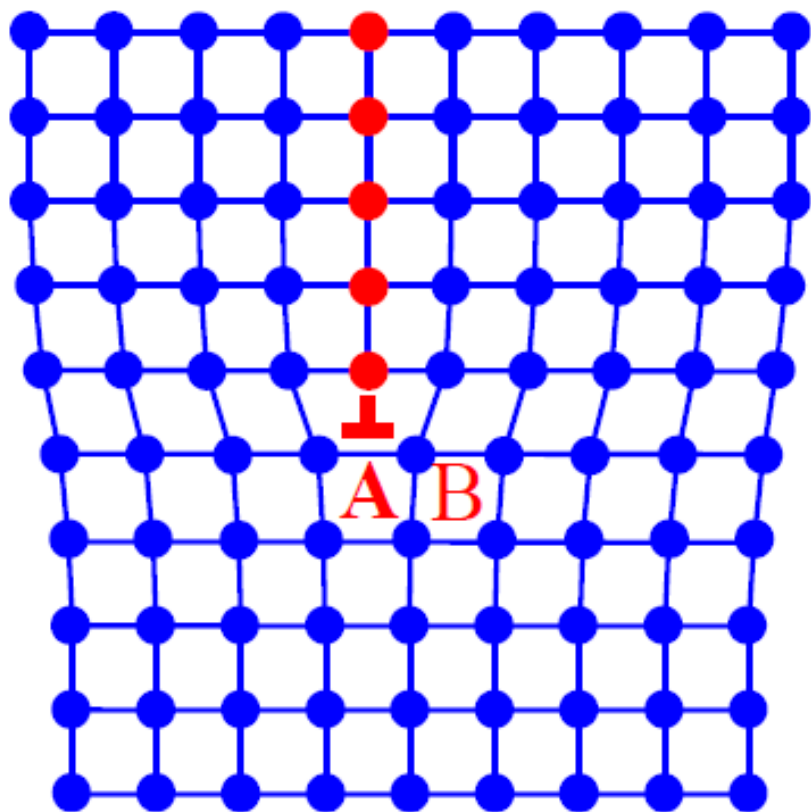
螺位错双交滑移增殖机制



螺型位错经双交滑移后形成了两个刃型割阶，由于此割阶不在原位错的滑移面上，因此它们不能随原位错线一起向前运动，从而对原位错产生“钉扎”作用，使原位错在新滑移面（111）上滑移时成为一个弗兰克-瑞德源。有时在第二个（111）面扩展出来的位错圈又可以通过交滑移转移到第三个（111）面上进行增殖，从而使位错迅速增加。

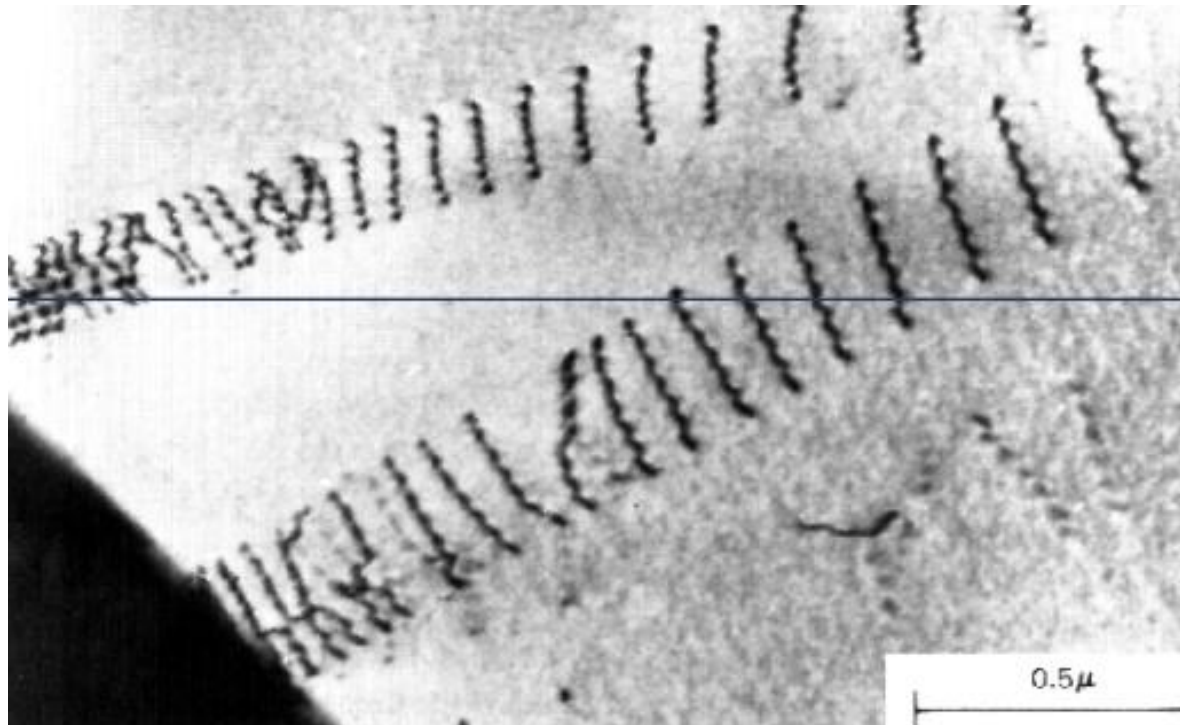
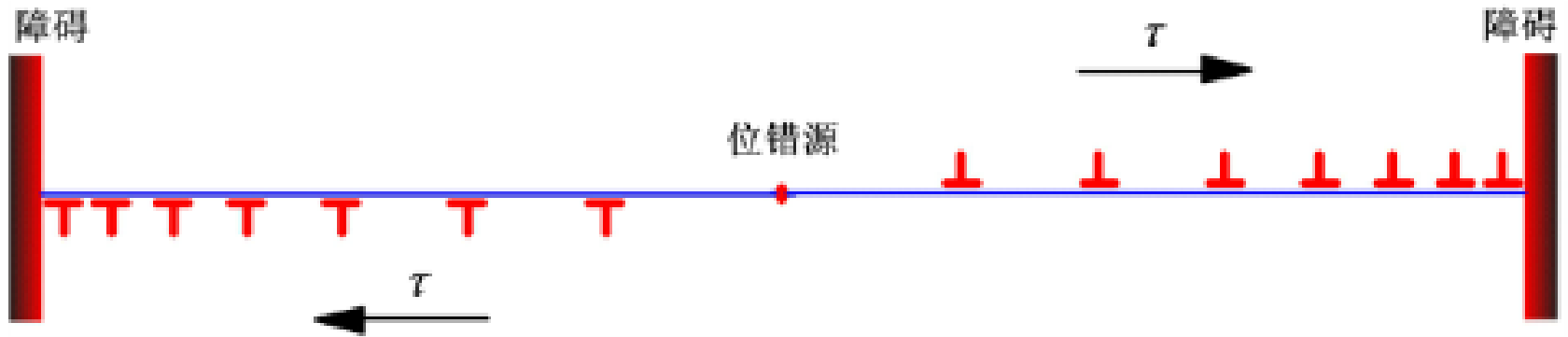
比Frank-Read源更有效!

位错运动的点阵阻力



$$\tau_{P-N} = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi w}{b}\right) = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left[-\frac{2\pi a}{b(1-\nu)}\right]$$

位错堆积



思考题：

- (1) 试计算铜晶体内单位长度位错线的应变能 。
- (2) 试计算单位体积的严重变形铜晶体内储存的位错应变能 。

提示：

- (1) 铜晶体的切变模量 $G=4 \times 10^{10} \text{N} \cdot \text{m}^{-2}$ ，
位错的柏氏矢量值等于原子间距，
 $b=2.5 \times 10^{-10} \text{m}$
- (2) 严重变形的金属，晶体中位错密度可达到 $10^{11} \text{cm} / \text{cm}^3$



例题 (1)试计算铜 晶体 内单位长度位错线的应变能。

(2)试计算单位体积的严重变形铜晶体内储存的位错应变能。

解：已知铜晶体的切变模量 $G=4 \times 10^{10} \text{N} \cdot \text{m}^{-2}$ ，位错的柏氏矢量值等于原子间距， $b=2.5 \times 10^{-10} \text{m}$ ，取 α 值为中限 $\alpha=0.750$

(1)单位长度位错线的应变能 U 为

$$U = \alpha G b^2 = 0.75 \times 4 \times 10^{10} \times (2.5 \times 10^{-10}) \text{Jm}^{-1} = 18.75 \times 10^{-10} \text{Jm}^{-1}$$

(2)对于严重变形的金属，晶体中位错密度可达到 10^{11}cm/cm^3 ，所以单位体积 (cm^3) 内位错应变能为

$$U = 18.75 \times 10^{-10} \text{Jm}^{-1} \times 10^{11} \text{cm} / \text{cm}^3 = 187.5 \text{Jcm}^{-3}$$

□ 铜的比热容 $C=0.385 \text{J} \cdot \text{g} \cdot ^\circ\text{C}$ ，位错能足以使晶体提高温度几十度至数百度。

但位错能并不是以热量的形式耗散在晶体中，而是储存在位错内。

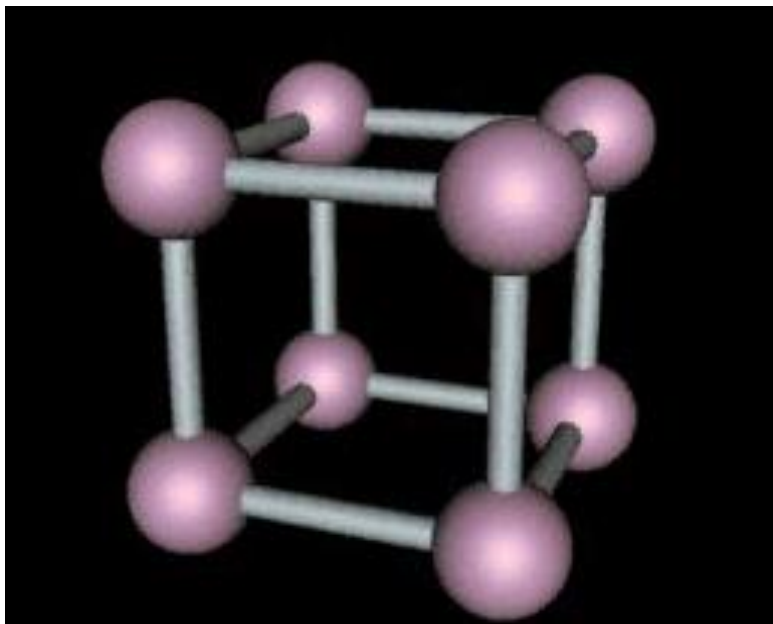
□ 降低位错能的驱动力会使位错发生反应，或与其他缺陷发生交互作用。

实际晶体中的位错

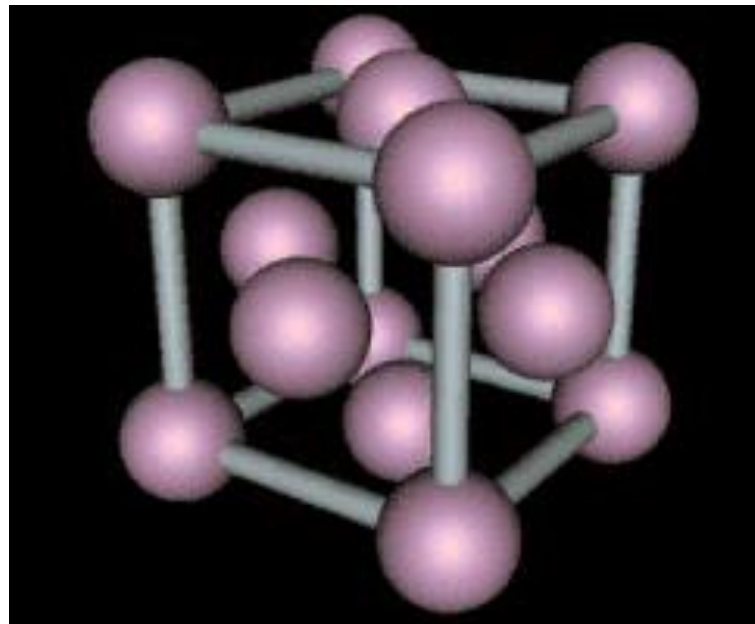
□ 实际晶体中的位错须满足两大条件：

(1) 结构条件：连接一个平衡位置与另一个平衡位置

(2) 能量条件： b 越小越稳定



简单立方晶体：柏氏矢量 = 点阵矢量



实际晶体：柏氏矢量 \neq 点阵矢量

面心立方晶体中的全位错

□ 可能位错的柏氏矢量:

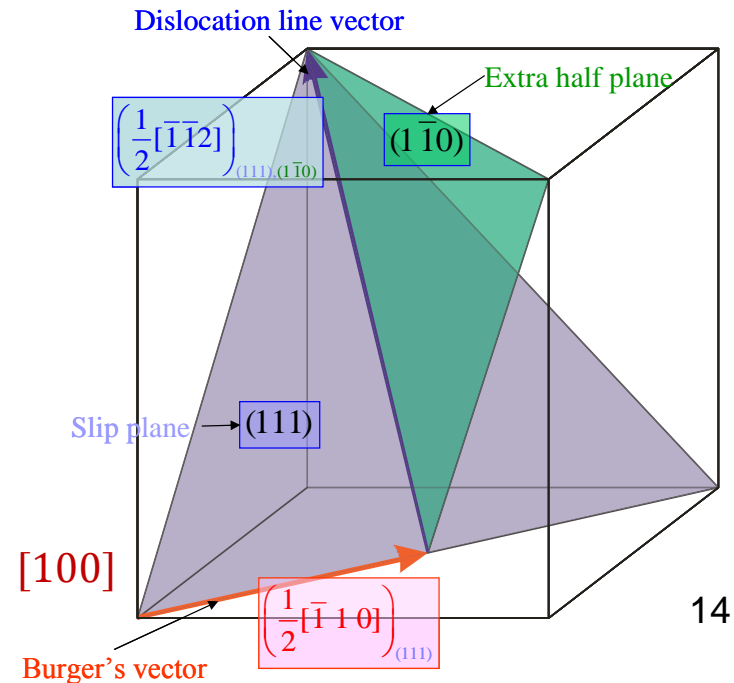
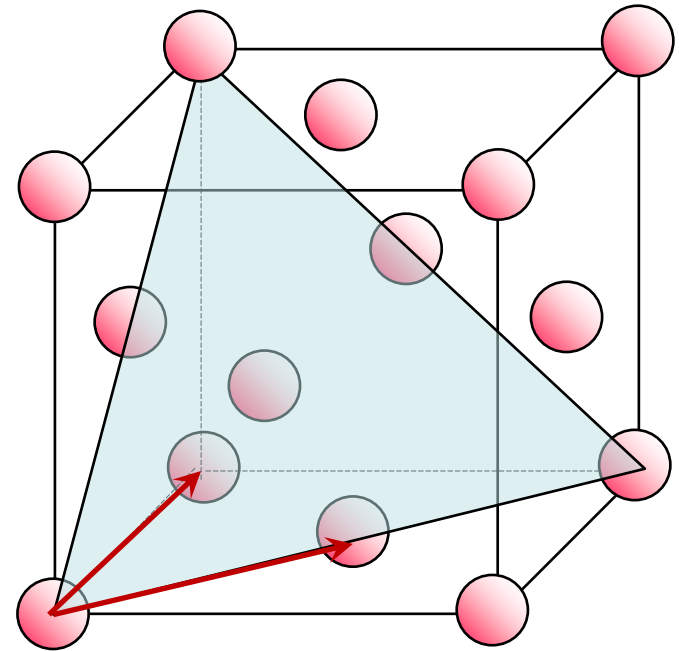
$$\langle 100 \rangle \quad \frac{1}{2} \langle 110 \rangle$$

$$E_{\langle 100 \rangle} = 2 E_{\frac{1}{2} \langle 110 \rangle}$$

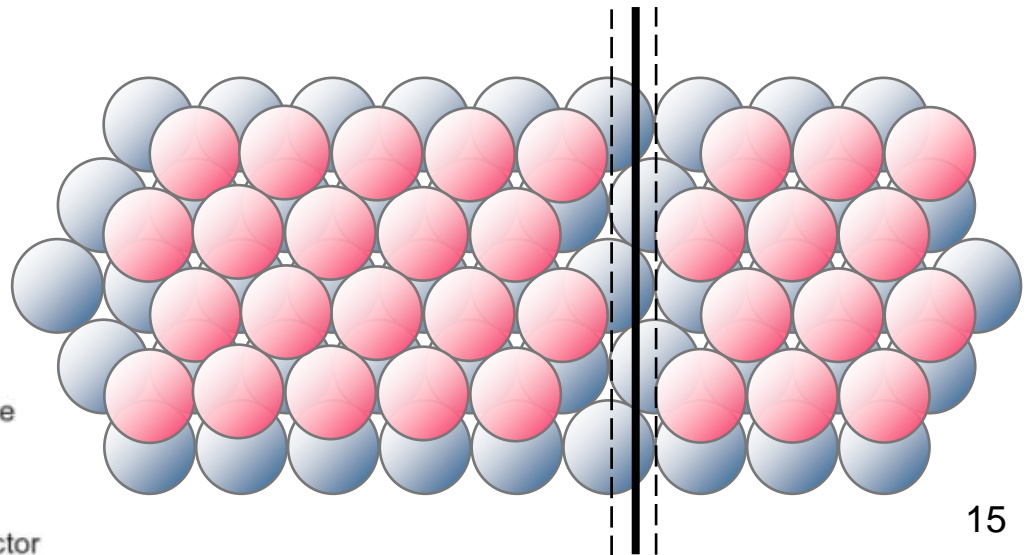
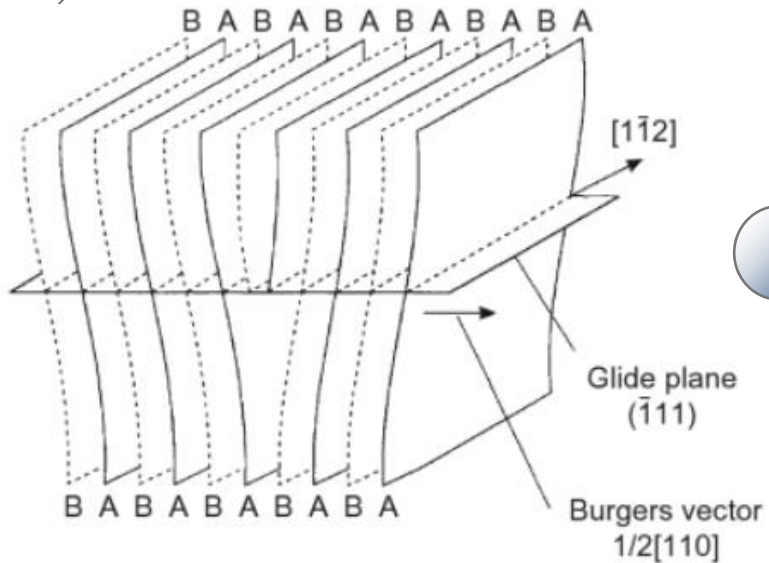
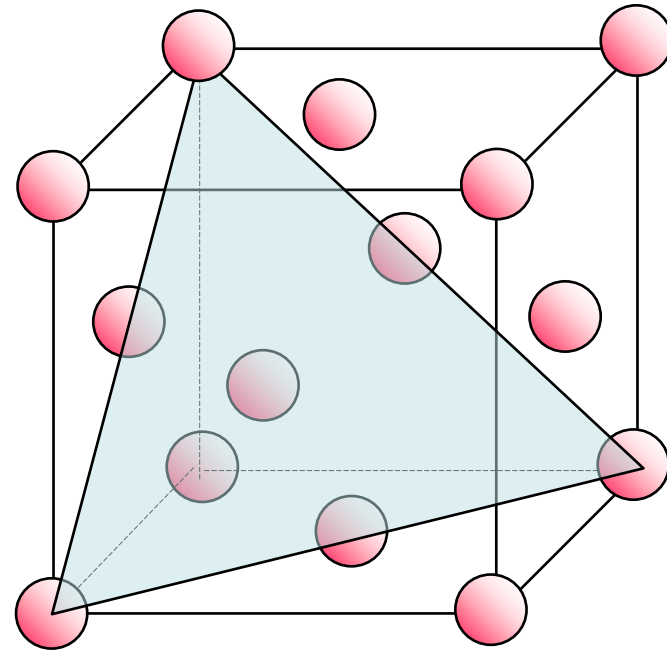
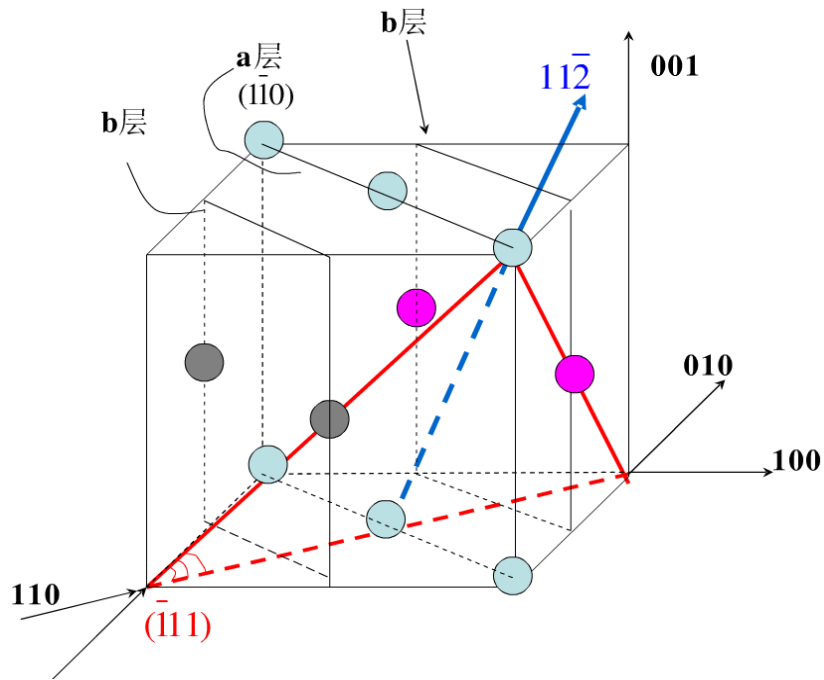
◆ 密排面: $\{111\}$

◆ 密排方向: $\langle 110 \rangle$

◆ 柏氏矢量: $\frac{a_0}{2} \langle 110 \rangle$?



面心立方晶体中的全位错



典型晶体结构中的单位位错的柏氏矢量

- 全位错（perfect dislocation，滑移后晶体原子排列不变）

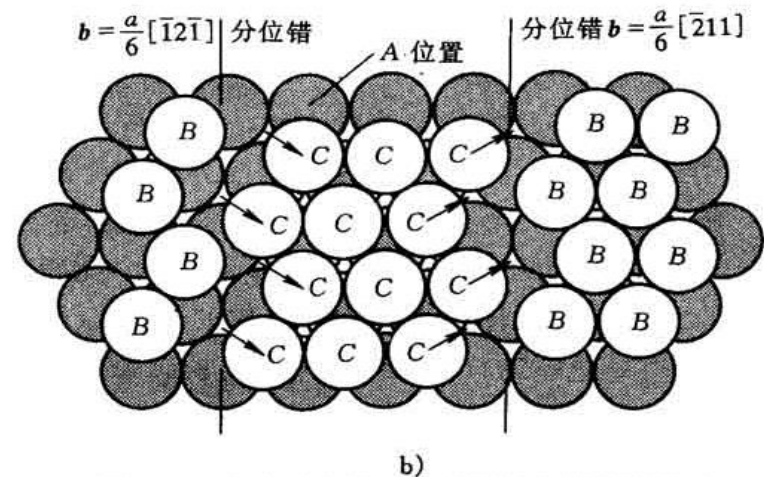
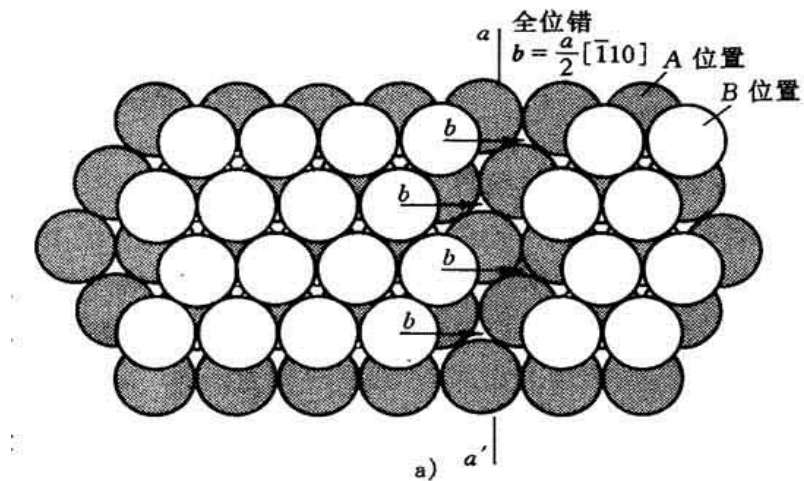
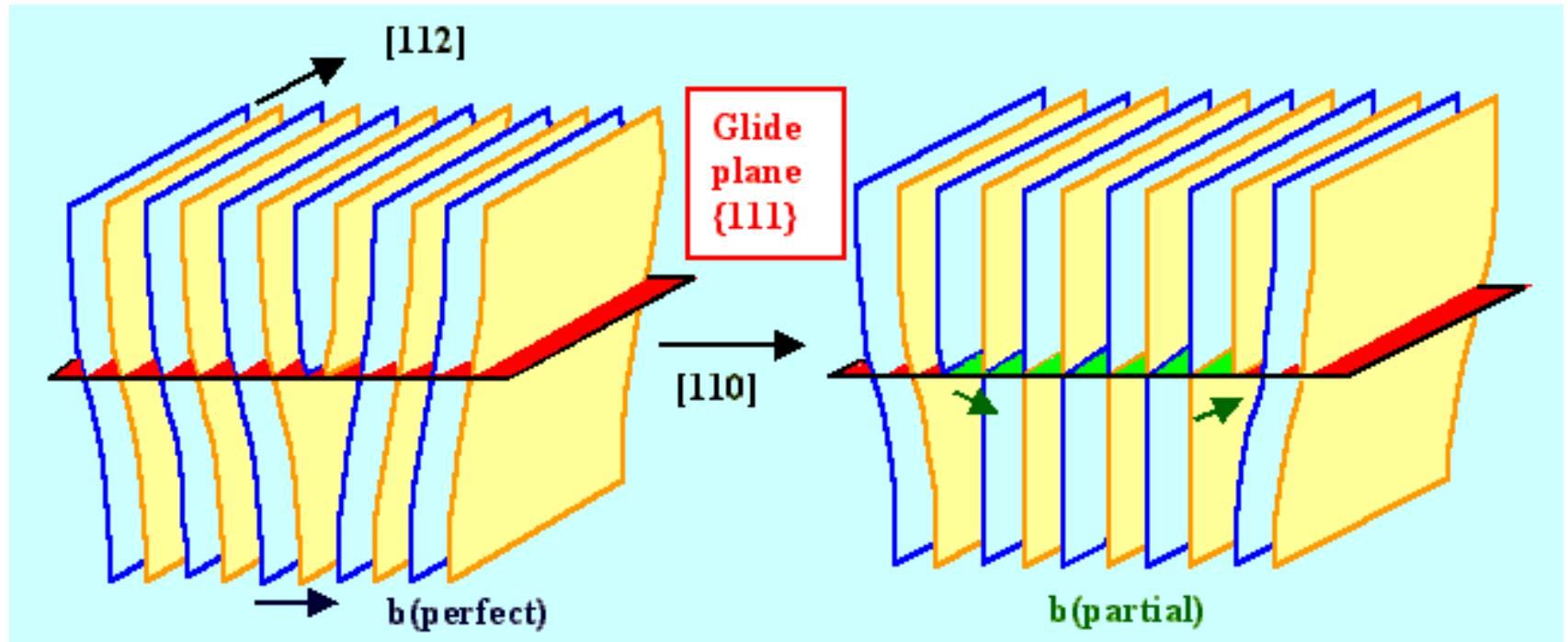
表 3.1 典型晶体结构中单位位错的柏氏矢量

结 构 类 型	柏 氏 矢 量	方 向	$ b $	数 量
简 单 立 方	$a\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	a	3
面 心 立 方	$\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\frac{1}{2}\sqrt{2}a$	6
体 心 立 方	$\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\frac{1}{2}\sqrt{3}a$	4
密 排 六 方	$\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	a	3

滑移面：密排面、

b 矢量：密排方向

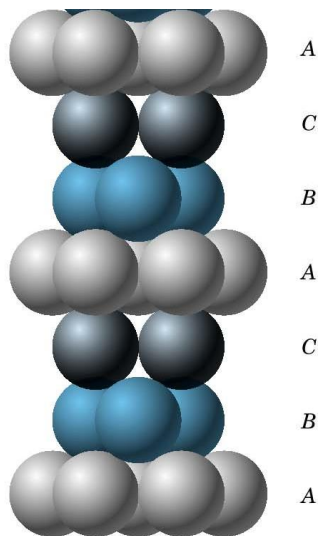
面心立方晶体中的不全位错



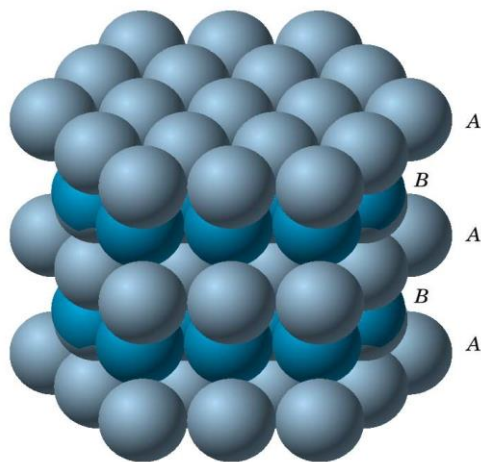
实际晶体中的堆垛层错

- 不全位错：与堆垛层错有关
- 堆垛层错：实际晶体中的密排面的正常堆垛顺序遭到破坏
- 实际晶体中的堆垛顺序：密排原子面按一定顺序堆垛而成。

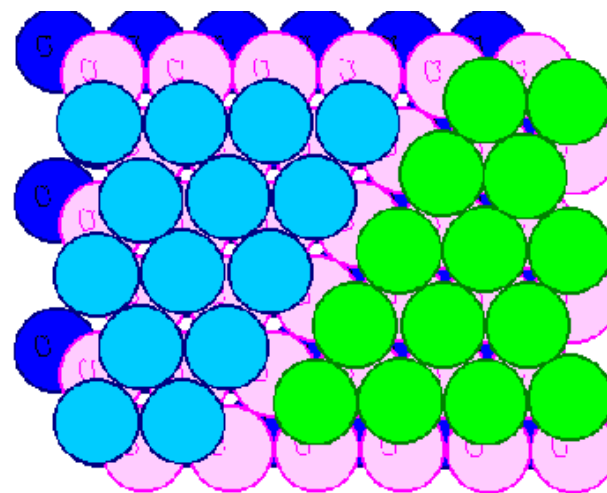
Δ 代表：AB, BC, CA; ∇ 代表：BA, AC, CB



面心立方：ABCABCABC...



密排六方：ABABABAB...



$\Delta\Delta\Delta\Delta\Delta...$

$\Delta\nabla\Delta\nabla...$

堆垛层错（一）

❑ 堆垛层错: 实际晶体中的密排面的正常堆垛顺序遭到破坏

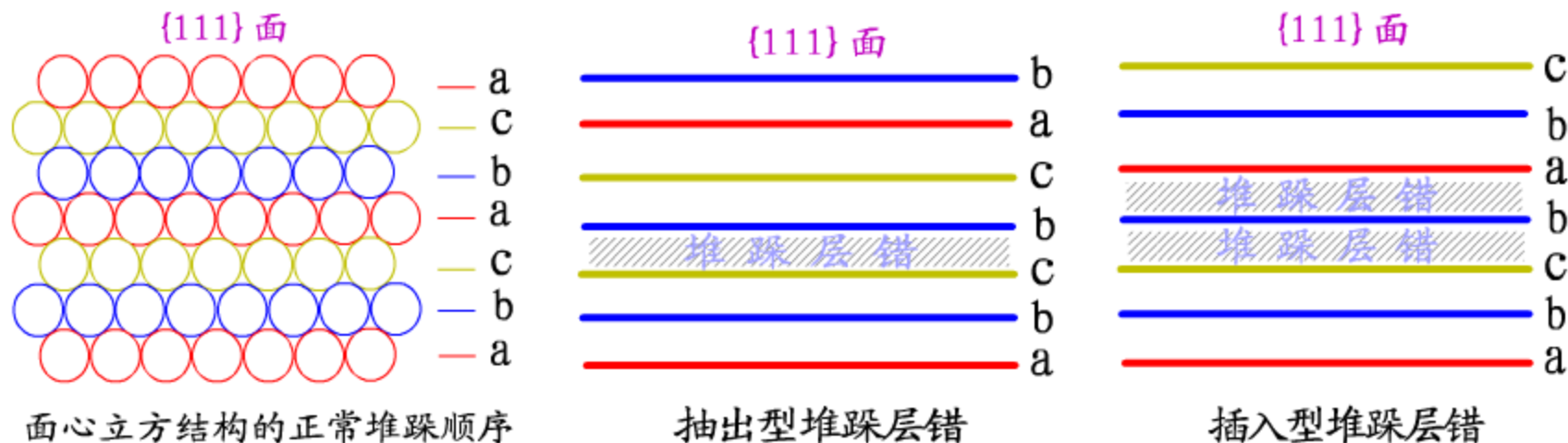
❑ 面心立方晶体中存在的层错

抽出型: $ABC \uparrow BCA$ $(\Delta\Delta \nabla \Delta\Delta)$

插入型: $ABC \downarrow B \downarrow ABCA$ $(\Delta\Delta \nabla \nabla \Delta\Delta)$

➤ 特点: 一个插入型层错相当于两个抽出型层错

➤ 面心立方晶体中存在抽出型层错时相当于在其间形成了一薄层的hcp晶体结构



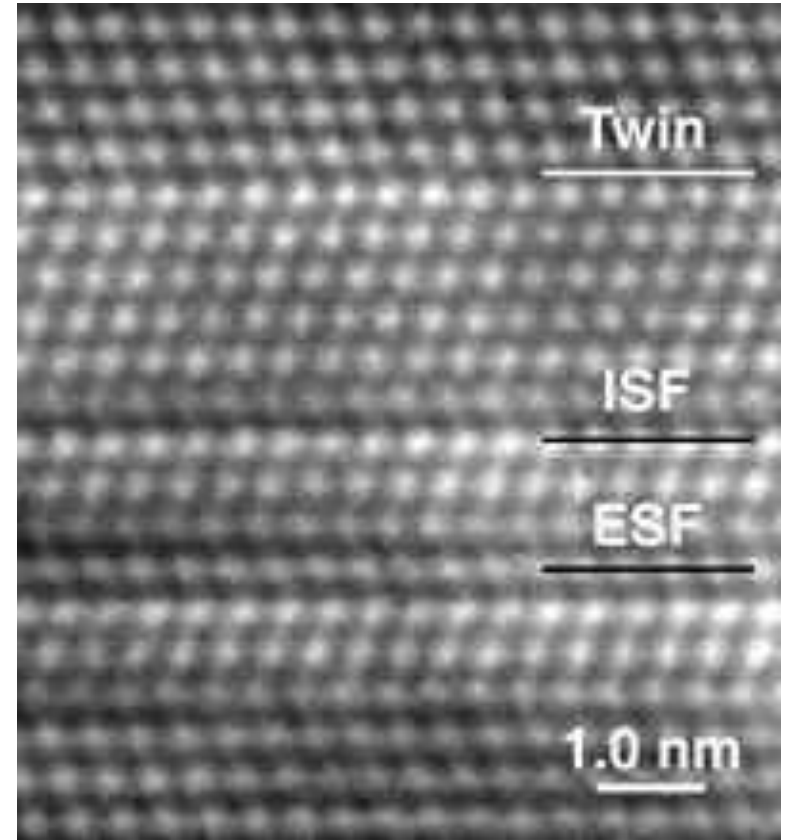
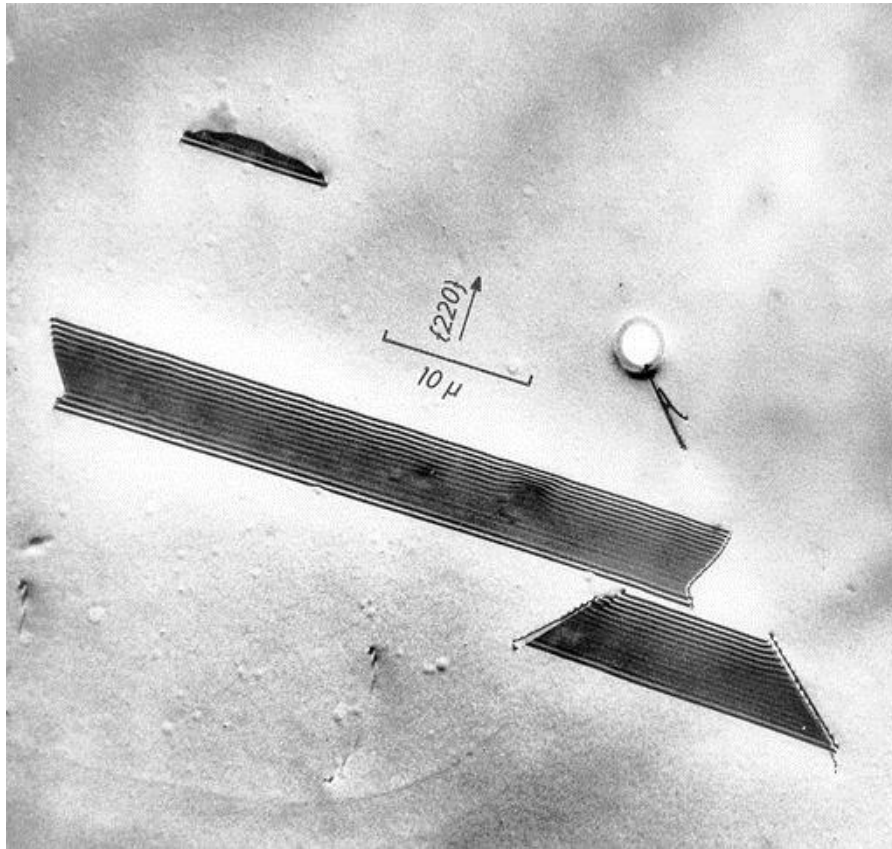


层错能

- 形成层错几乎不产生点阵畸变，但会破毁晶体的正常周期完整性，电子反常衍射=> 晶体能量升高
- 增加的能量称为“堆垛层错能 γ ”或“层错能”(J/m^2)
- 从能量观点来看，层错能越低，层错出现的几率越大，越易观察到：
例如铜的层错能很低 ($0.04 \text{ J}/\text{m}^2$)，大量的层错；
铝的层错能很高 ($0.20 \text{ J}/\text{m}^2$)，看不到层错。

Material	Ag	Si	Ni	Cu	Mg	Al
$\gamma \text{ (mJ m}^{-2}\text{)}$	20-30	>42	90	40	125	160-200

层错的观测



不全位错

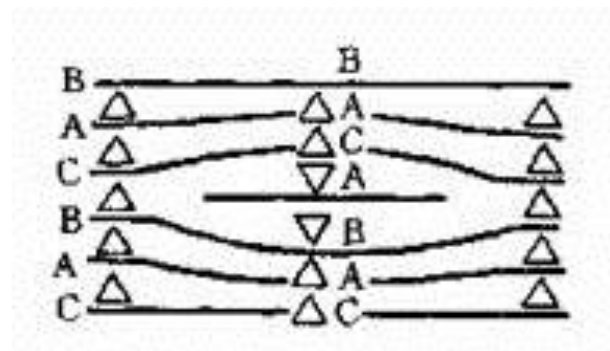
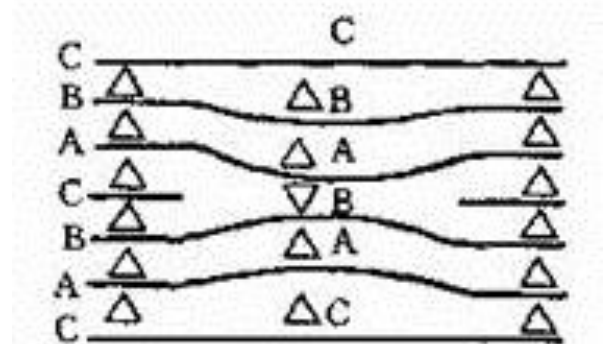
□ **不全位错**：若堆垛层错不是发生在晶体的整个原子面上而只是部分区域存在，那么，在层错与完整晶体的交界处就存在柏氏矢量 \mathbf{b} 不等于点阵矢量的不全位错。

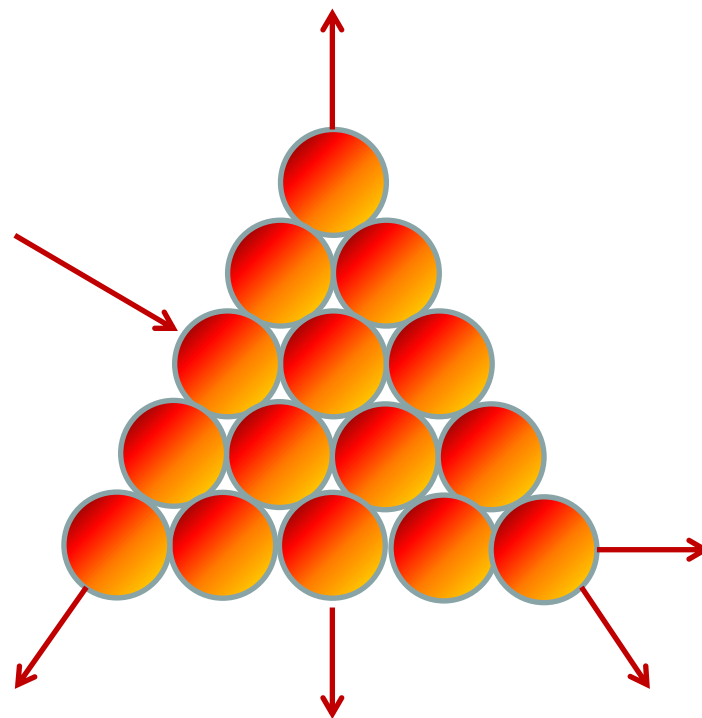
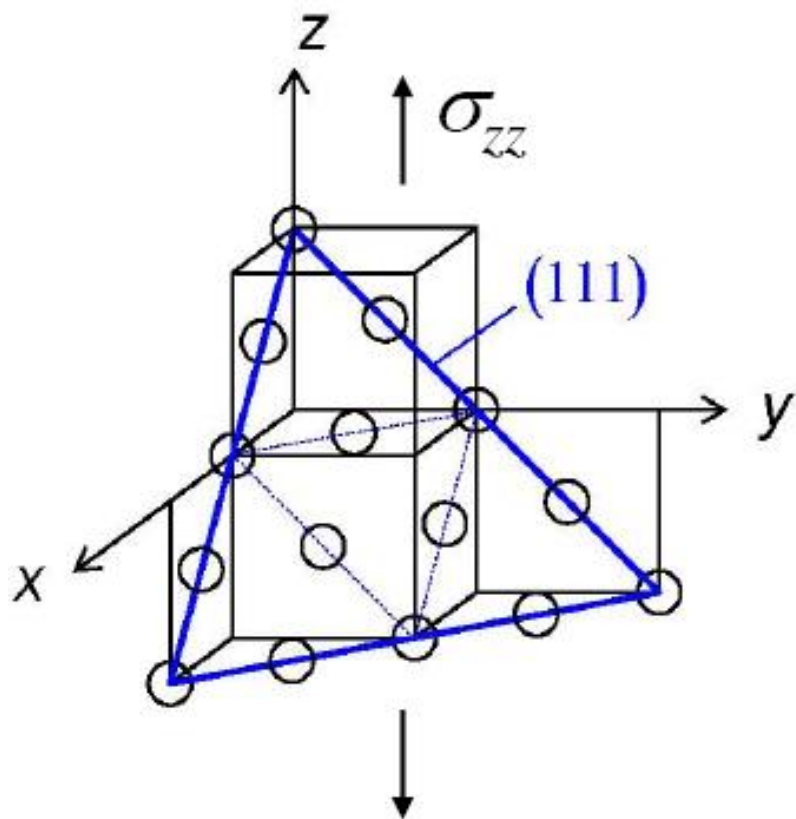
堆垛层错与完整晶体的分界线

(\mathbf{b} 矢量不等于点阵矢量)

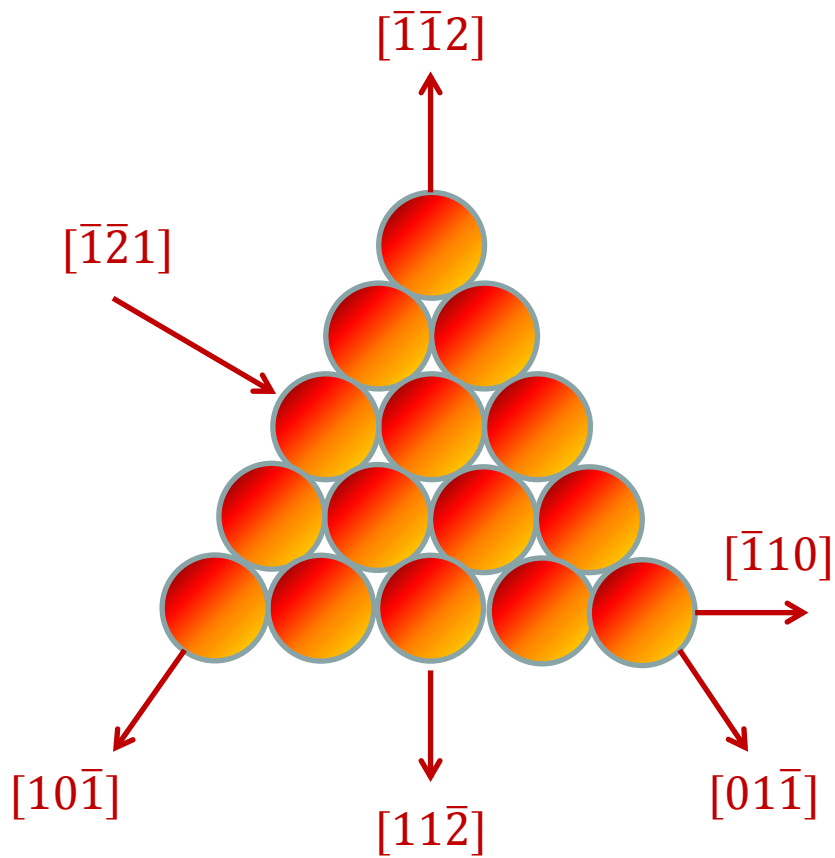
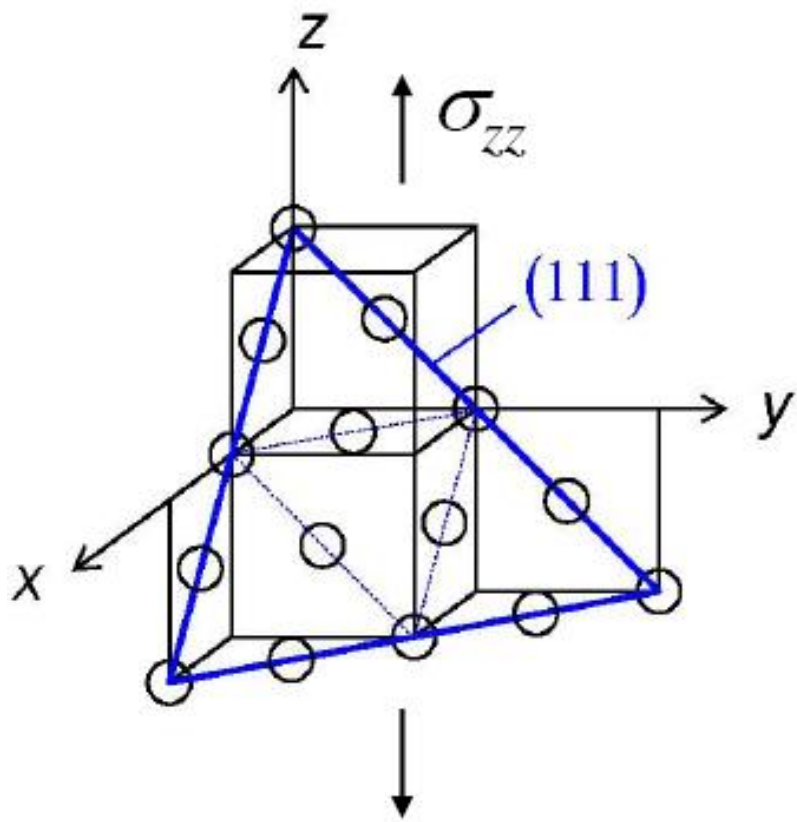
FCC晶体中两种重要的不全位错

- 肖克莱 (Shockley) 不全位错
- 弗兰克 (Frank) 不全位错

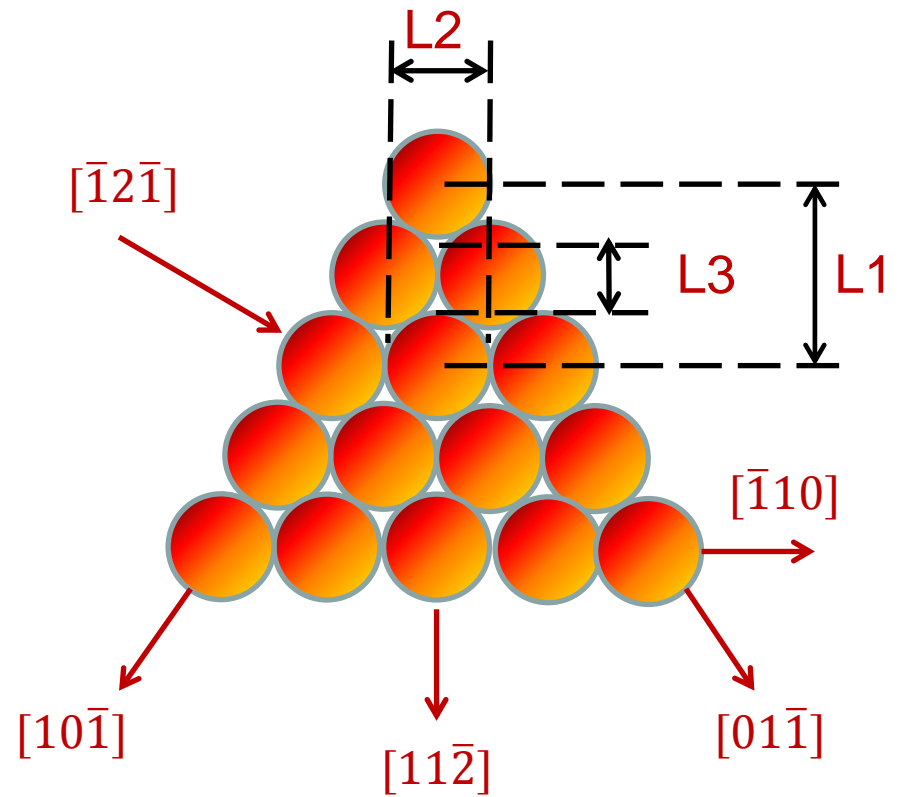
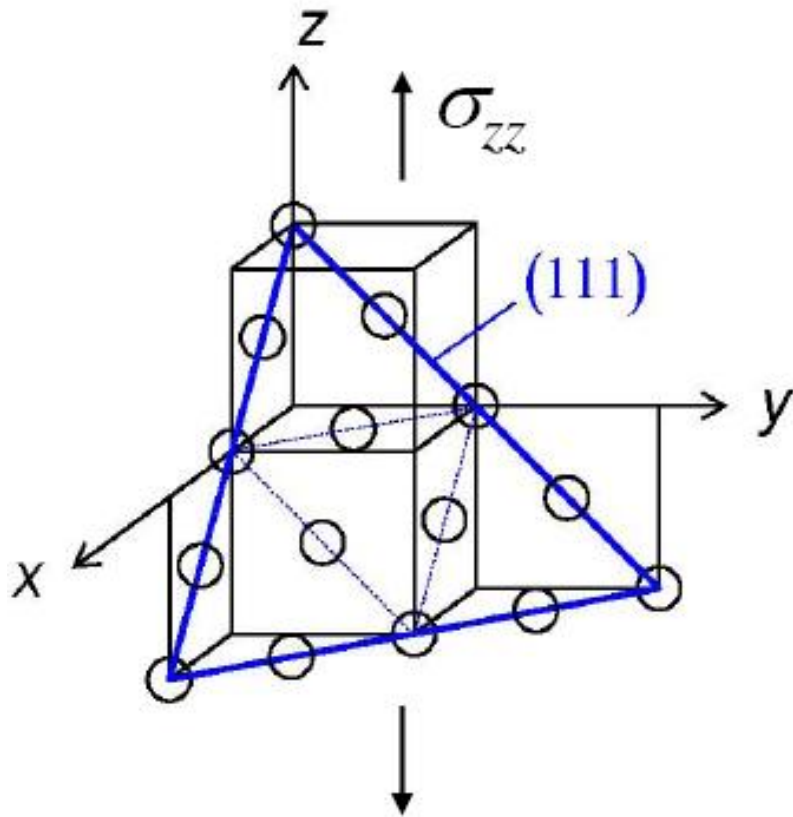




FCC的晶向指数



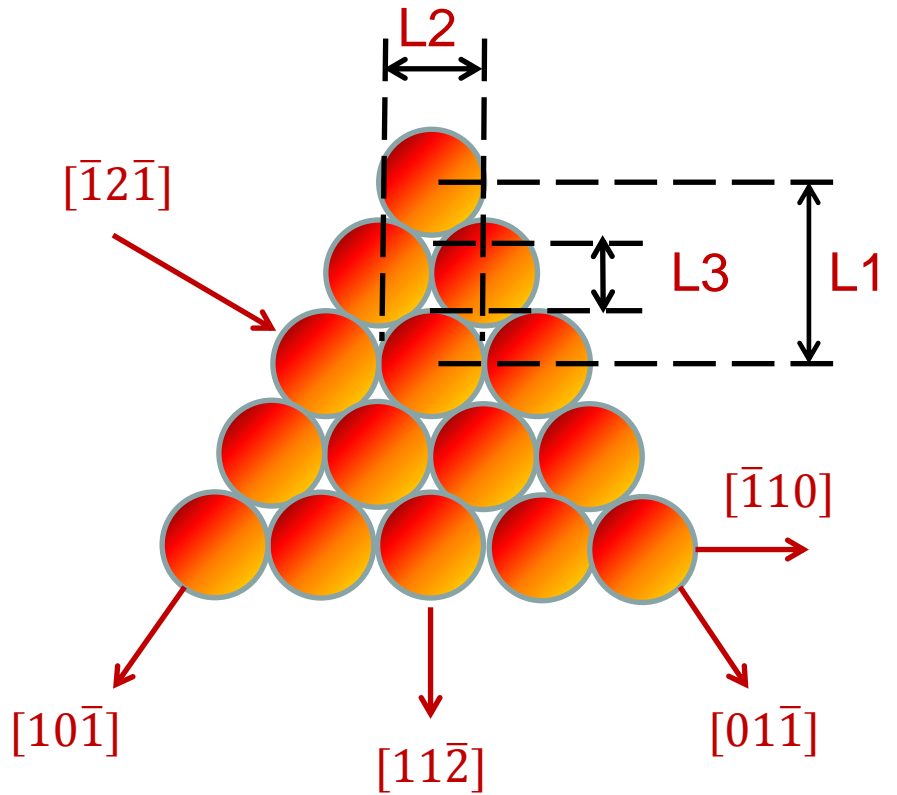
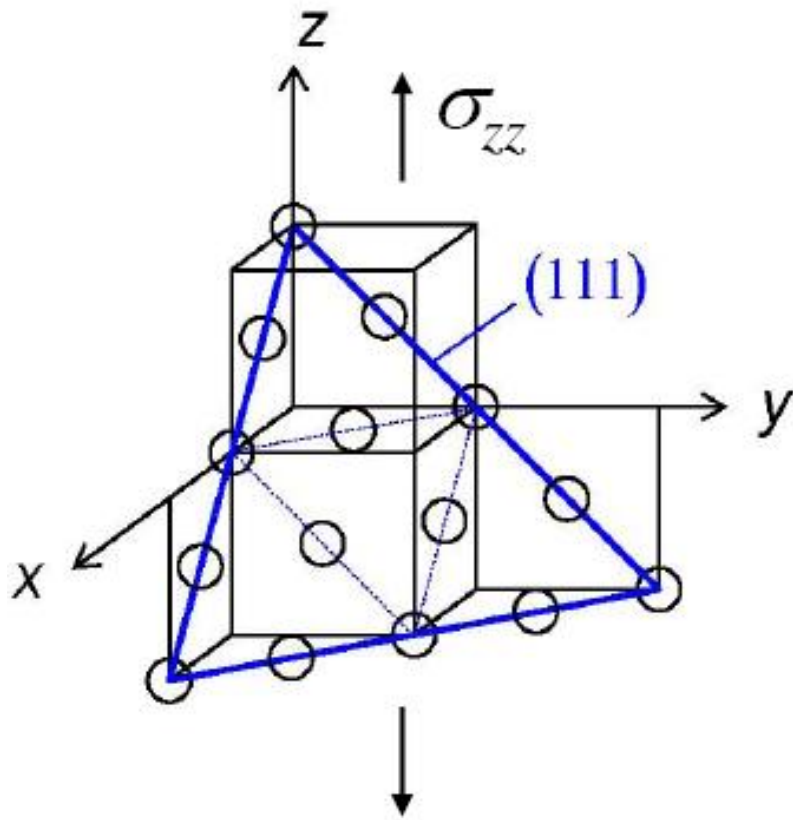
FCC的晶向指数



$L1=?$

$L2=?$

$L3=?$

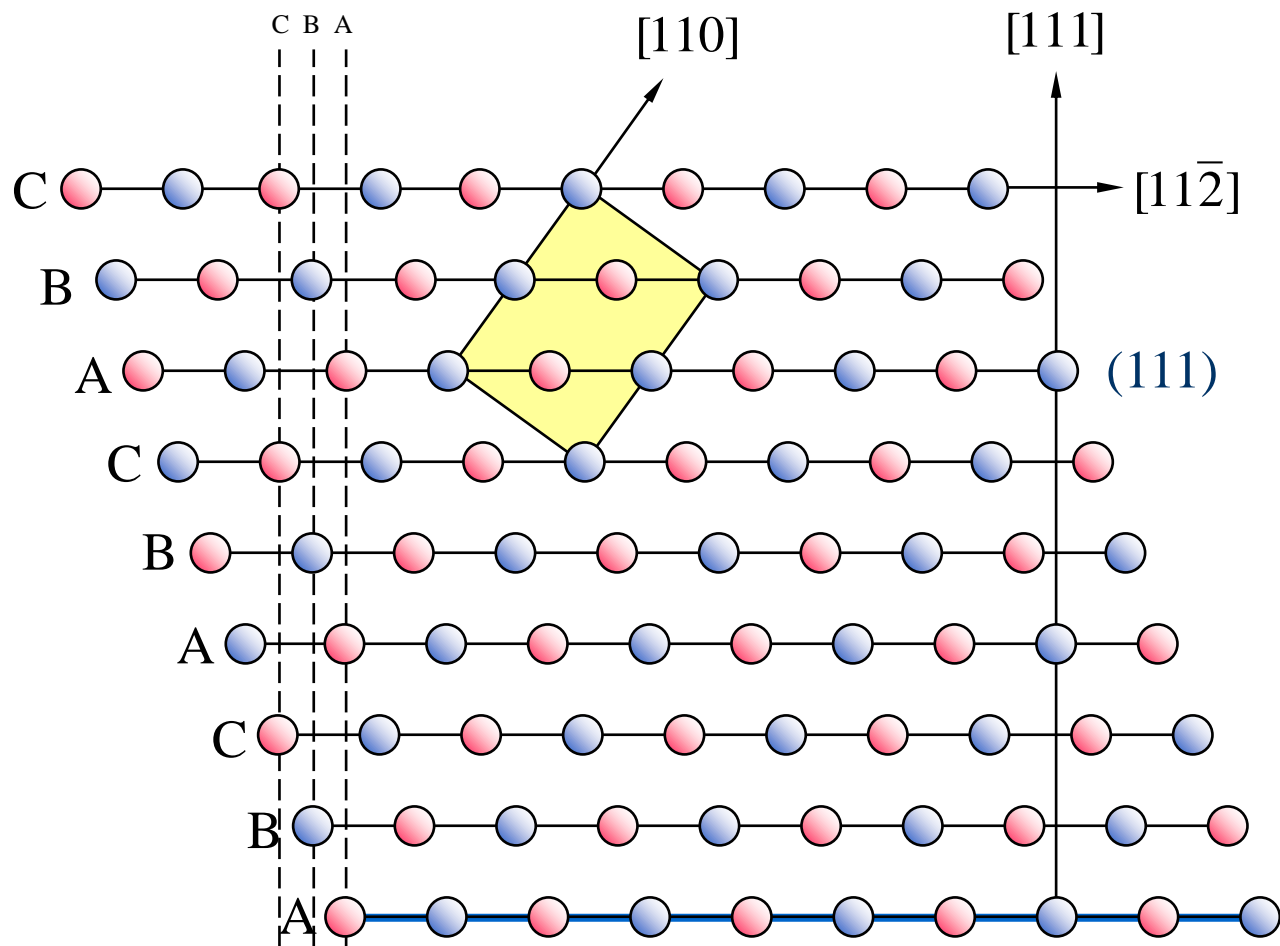
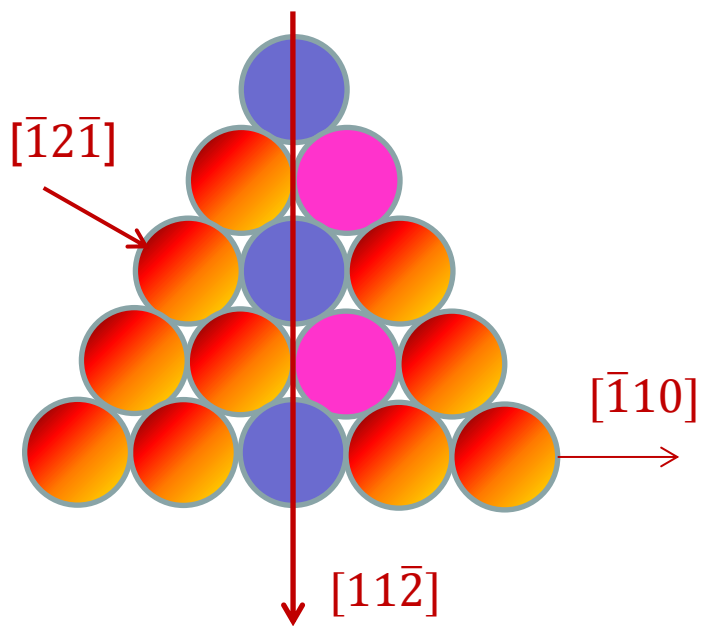
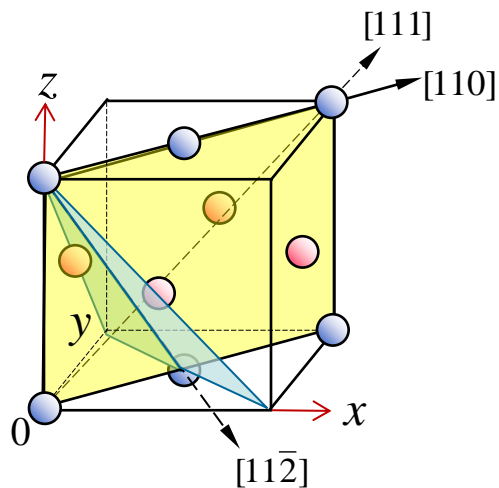


$$L1 = \sqrt{a^2 + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}a\right)^2} = \frac{\sqrt{6}}{2}a$$

$$L2 = \frac{\sqrt{2}}{2}a$$

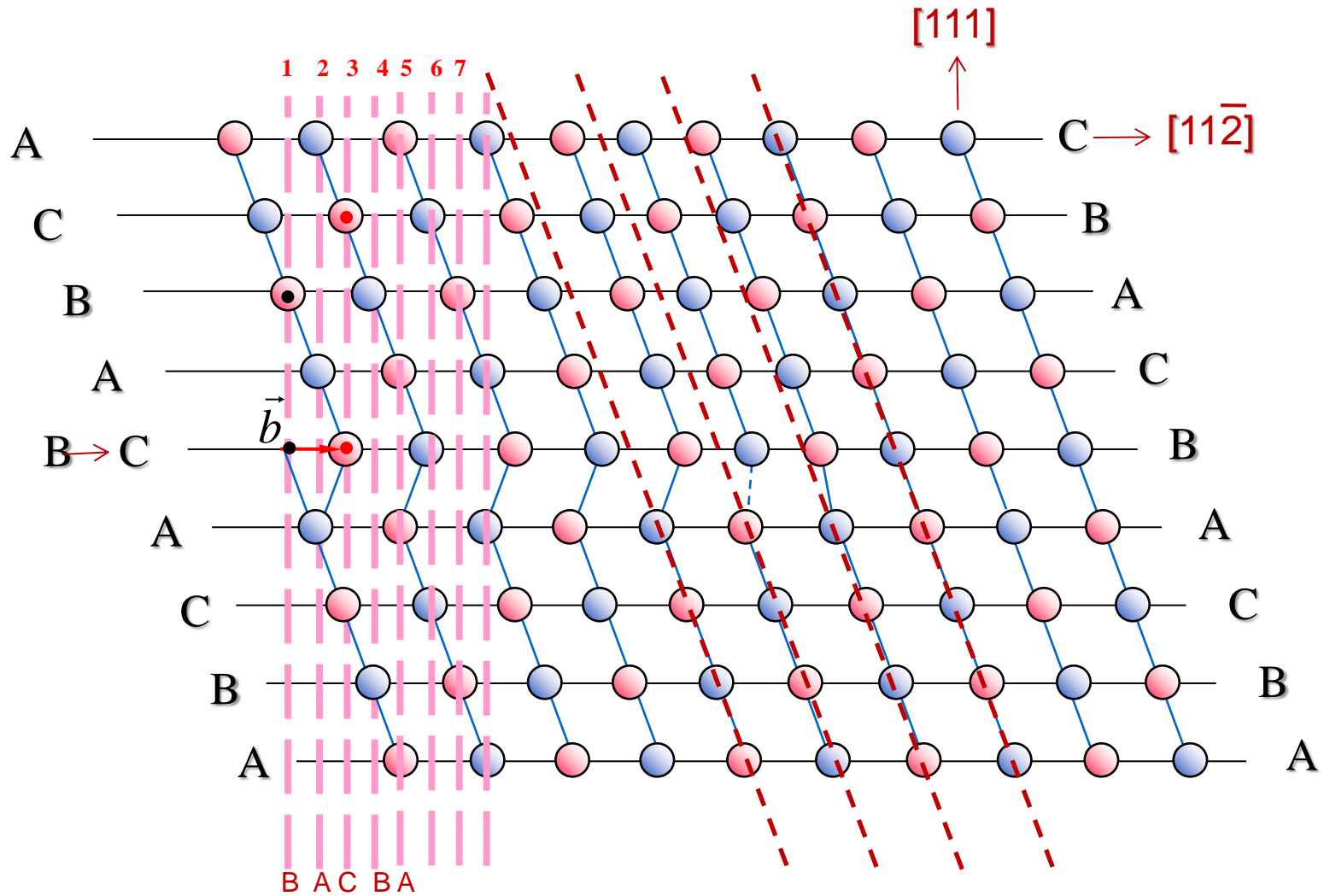
$$L3 = \frac{L1}{3} = \frac{\sqrt{6}}{6}a$$

FCC的(110)晶面

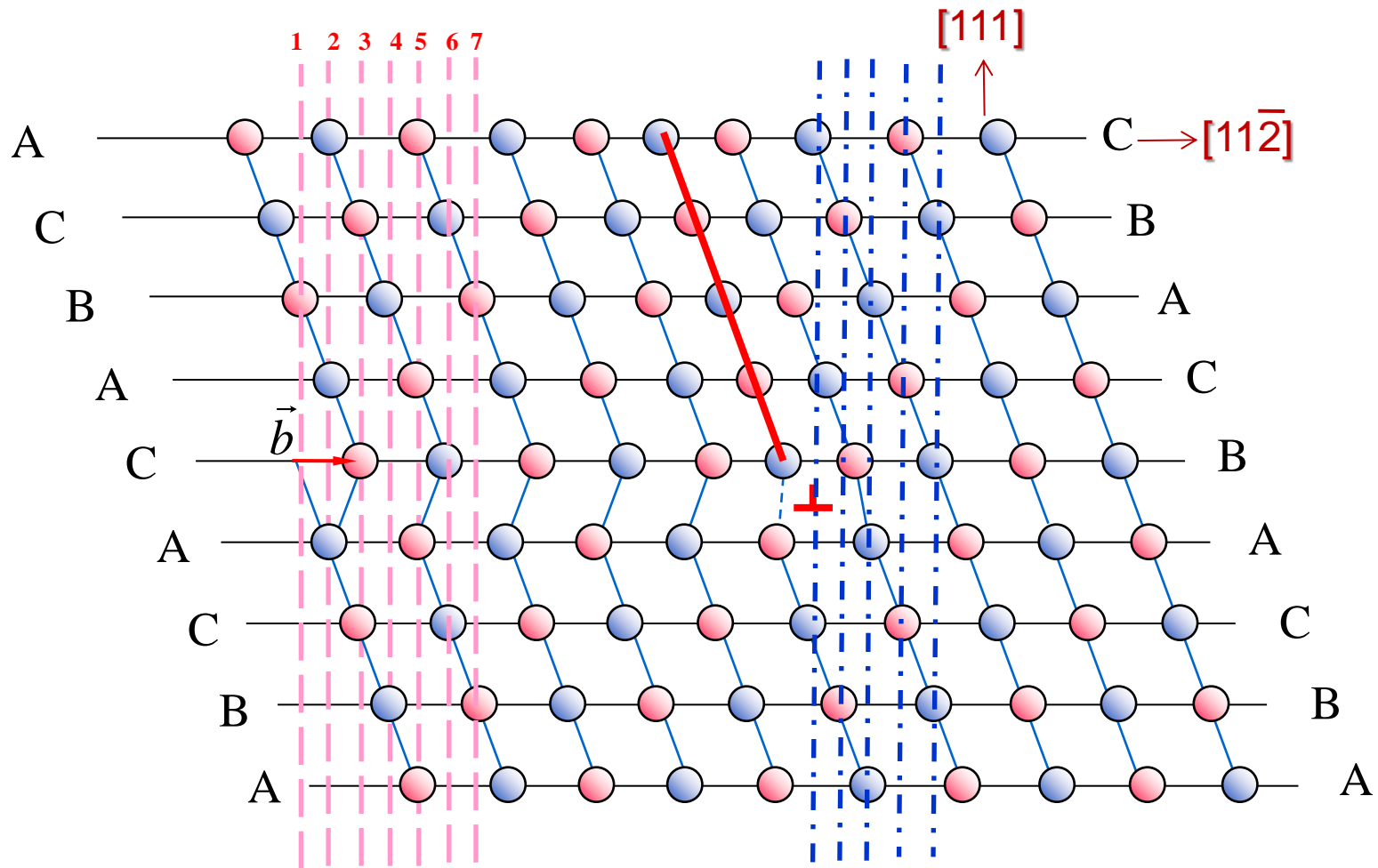


(110) is perpendicular to (111)

层错引起肖克莱不全位错

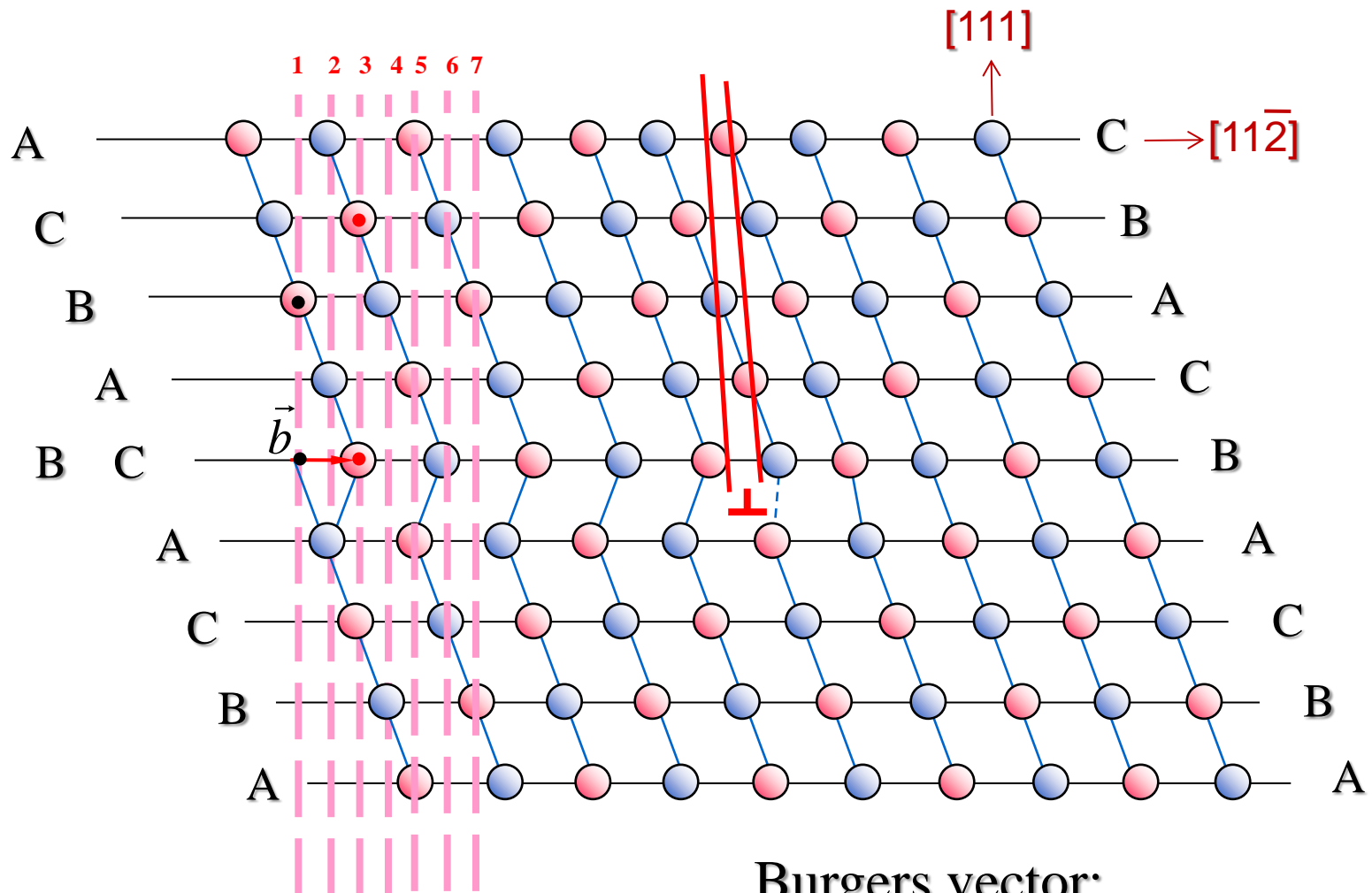


Stacking fault → Shockley dislocation



位错方向：？ 位错大小：？ 滑移面：？

Stacking fault → Shockley dislocation

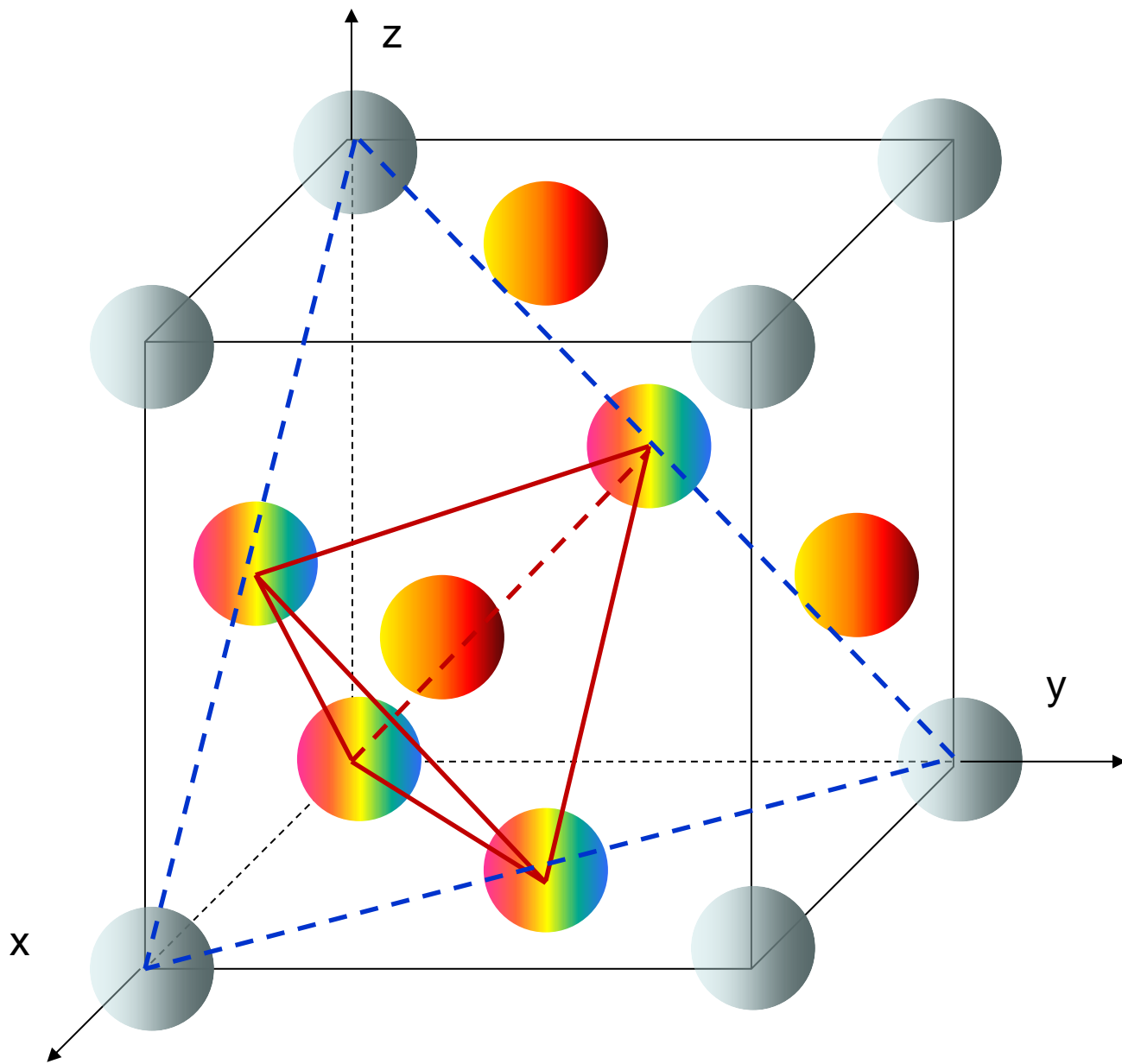


$$l = \frac{1}{3} \left(\frac{\sqrt{6}}{2} a \right) = \frac{\sqrt{6}}{6} a$$

Burgers vector:

$$\vec{b} = \frac{a}{6} [11\bar{2}]$$

Stacking fault \rightarrow Shockley dislocation



肖克莱 (Shockley) 不全位错

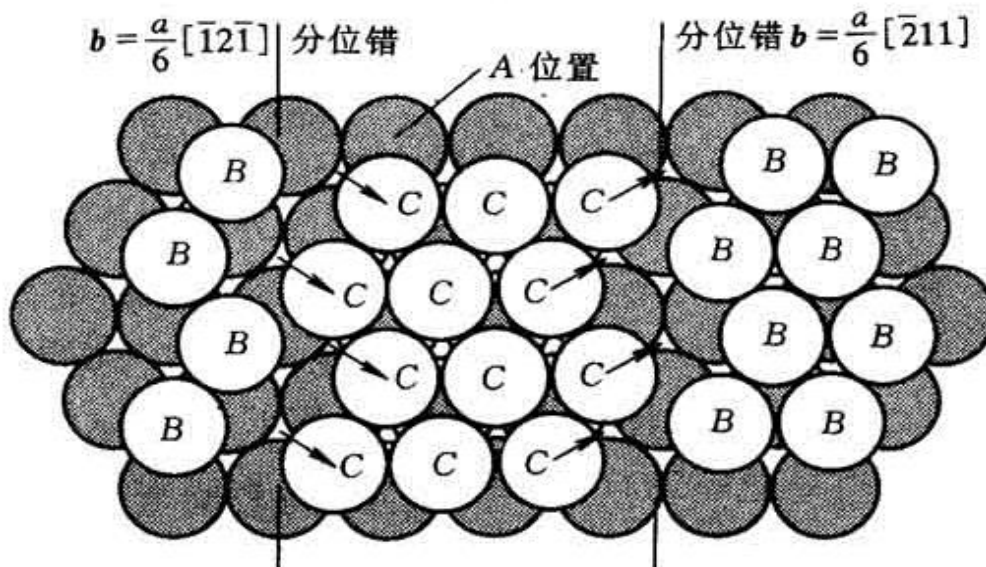
□ 柏氏矢量

$$\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 11\bar{2} \rangle$$

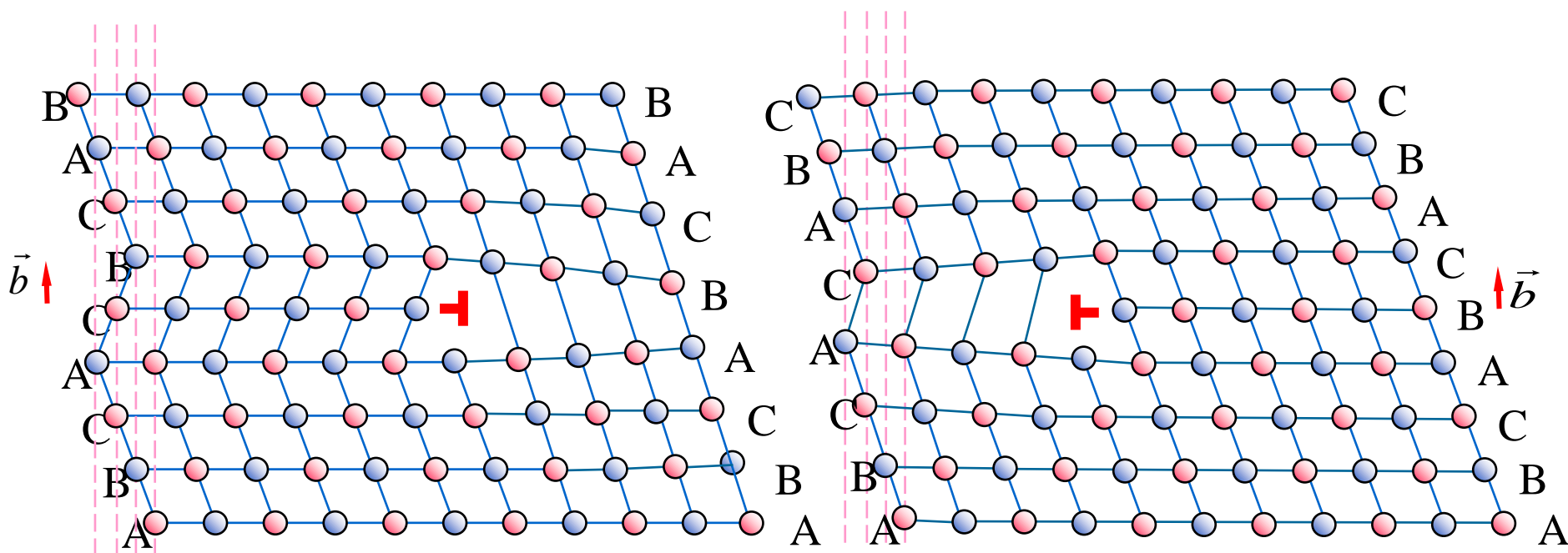
□ 滑移面 (111)

特点:

- 1) b 矢量永远平行于层错面
- 2) 层错为一平面 \Rightarrow 其边界在一平面内
- 3) 可以为刃型、螺形、混和位错
- 4) 滑移的结果是层错面的扩大或缩小。但不能攀移，因为它必须和层错始终相连



层错引起弗兰克不全位错

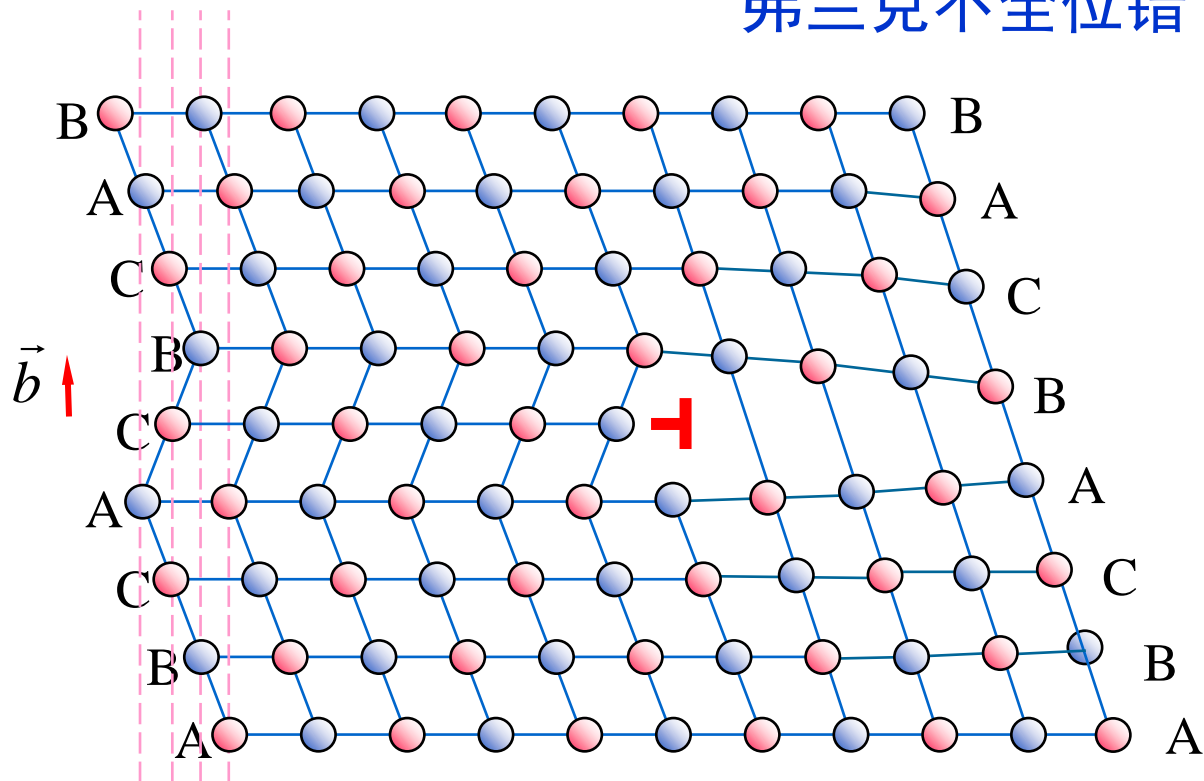


Frank dislocation (+)

Frank dislocation (-)

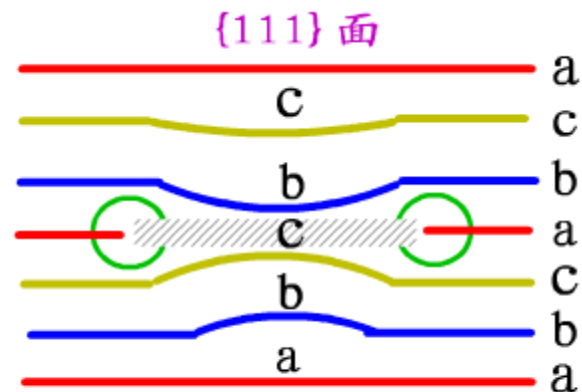
位错类型？滑移面？滑移矢量？

弗兰克不全位错

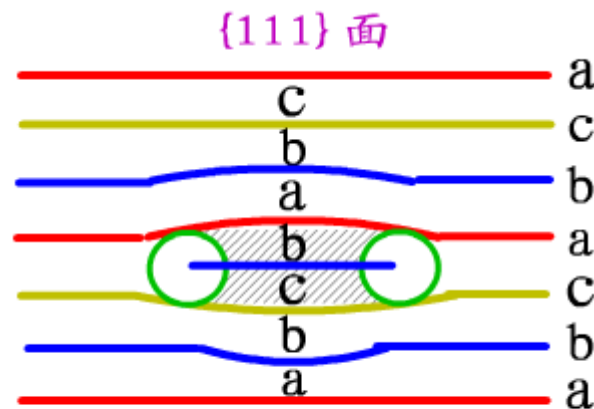


$$|b| = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{\sqrt{3}}{3}a \quad \vec{b} = \frac{a}{3}[111]$$

刃型位错，滑移面 $(11\bar{2})$



抽去型Frank不全位错



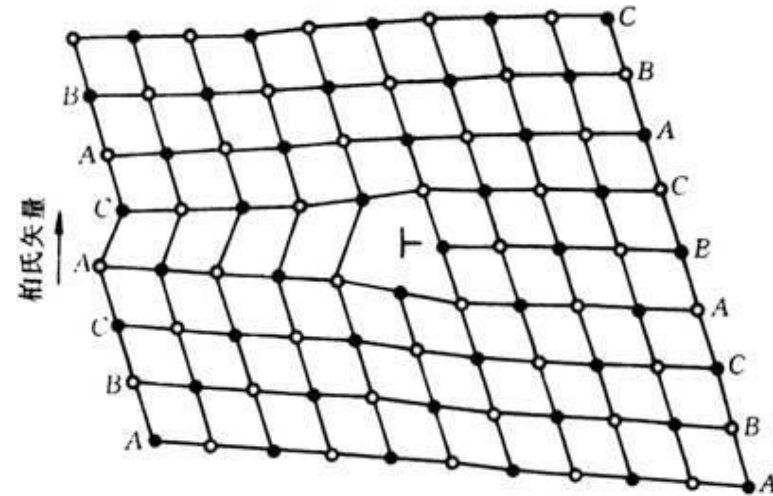
插入型Frank不全位错

弗兰克 (Frank) 不全位错

- 弗兰克 (Frank) 不全位错：插入或抽出半原子面所形成的层错与完整晶体的边界。
- 抽出：负弗兰克 (Frank) 不全位错
插入：正弗兰克 (Frank) 不全位错

特点：

- a) 纯刃型位错 $\vec{b} = \frac{a}{3} \langle 111 \rangle$
- b) 不能在滑移面上滑移，只能攀移
- c) 属不动位错 (sessile dislocation)



FCC晶体中的位错

	Unit-	Shockley-	Frank-
Type of the dislocation	E, S, M	E, S, M	E
Burgers vector	$\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$	$\frac{a}{6} \langle 112 \rangle$	$\frac{a}{3} \langle 111 \rangle$
Line of the dislocation	Any line in 3D	Any line in $\{111\}$	Any line in $\{111\}$
Possible motion	Slip, climb	slip	climb

FCC中的位错反应

- 位错反应：位错之间的合并与分解

$$\overrightarrow{b_1} = \overrightarrow{b_2} + \overrightarrow{b_2}$$

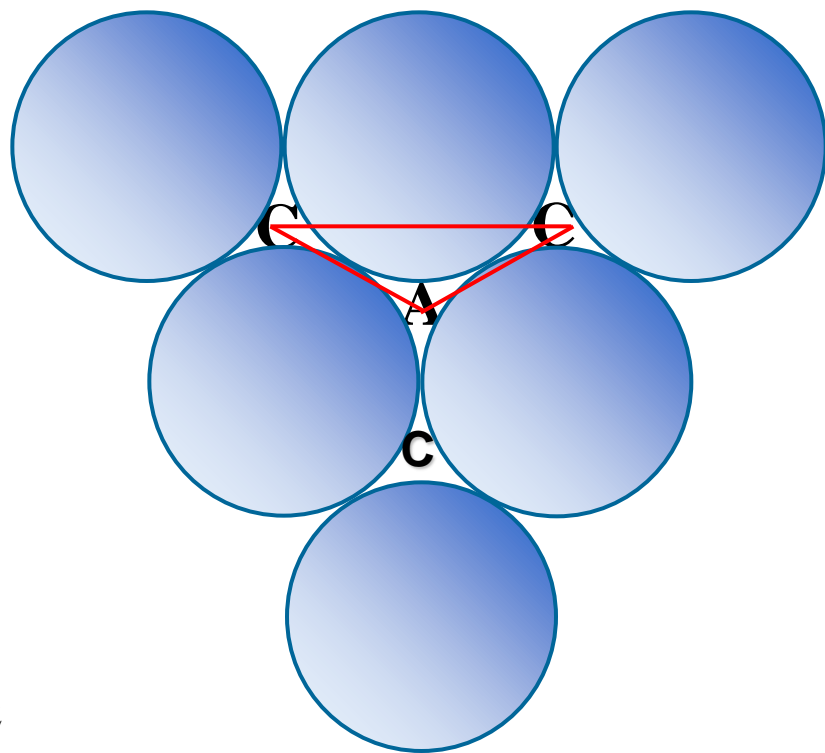
1) 几何条件：

b矢量总和不变

2) 能量条件：

反应降低位错总能量

$$\sum |b_{before}|^2 > \sum |b_{after}|^2$$



bcc 中, 当 $\vec{b}_1 = \frac{a}{2}[\bar{1} 1 1]$ 与 $\vec{b}_2 = \frac{a}{2}[1 1 \bar{1}]$ 相遇时, 能否合并为 $\vec{b}_3 = a[0 1 0]$

几何条件:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 + \vec{b}_2 &= \frac{a}{2}[\bar{1} 1 1] + \frac{a}{2}[1 1 \bar{1}] \\ &= \left(-\frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{c}\right) + \left(\frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b} - \frac{1}{2}\vec{c}\right) \\ &= 0 + \vec{b} + 0 = a[0 1 0]\end{aligned}$$

能量条件:

$$|\vec{b}_1|^2 = \frac{a^2}{4}(-1^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{3}{4}a^2$$

$$|\vec{b}_2|^2 = |\vec{b}_1|^2 = \frac{3}{4}a^2$$

$$|\vec{b}_3|^2 = a^2(0^2 + 1^2 + 0^2) = a^2$$

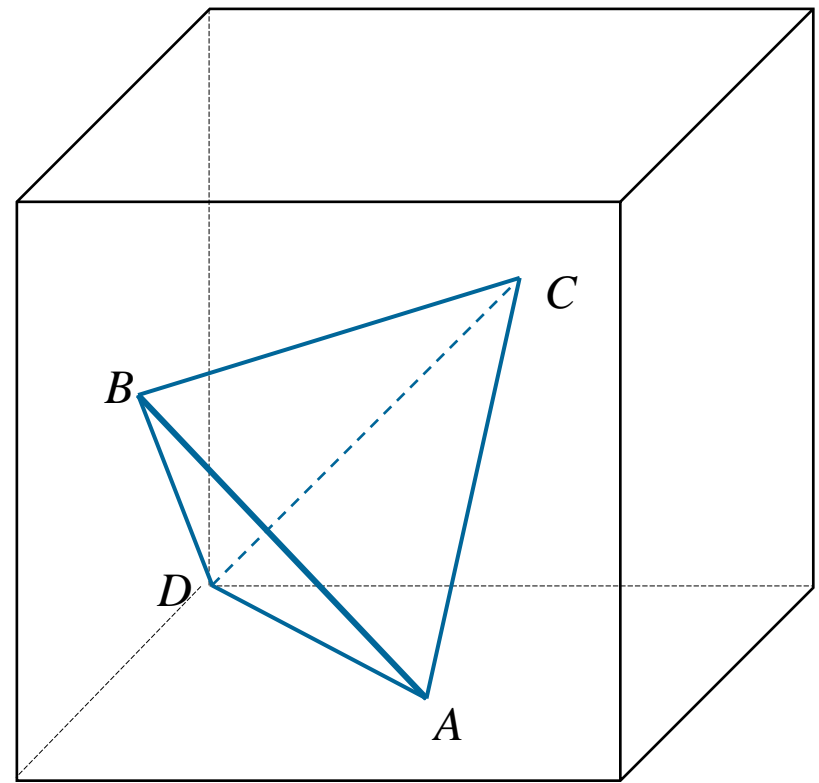
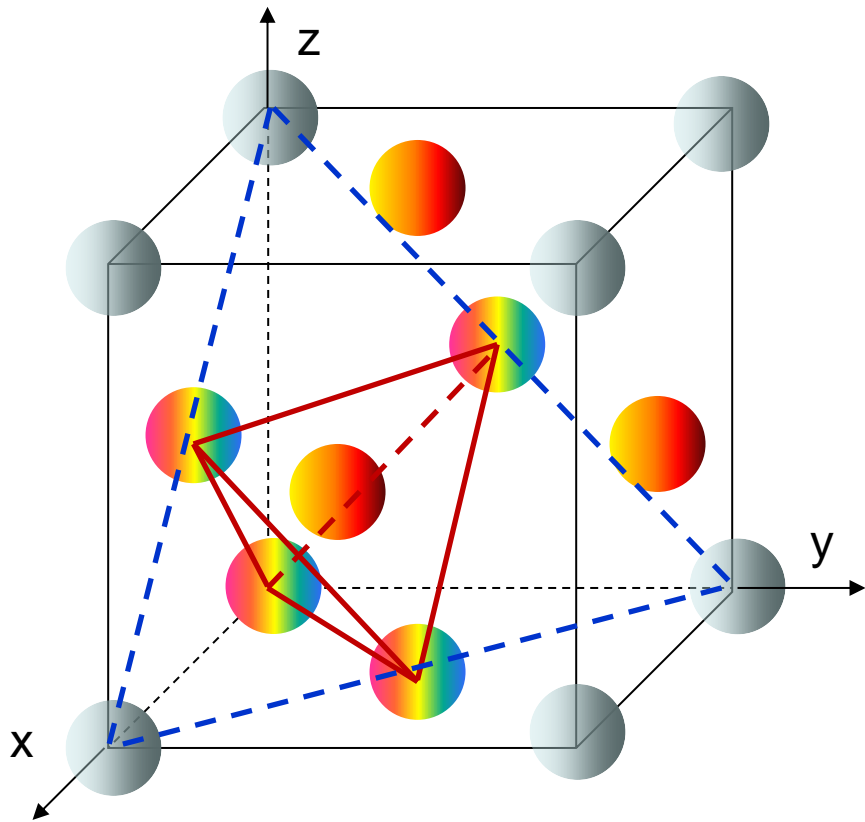
即: $\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \vec{b}_3$

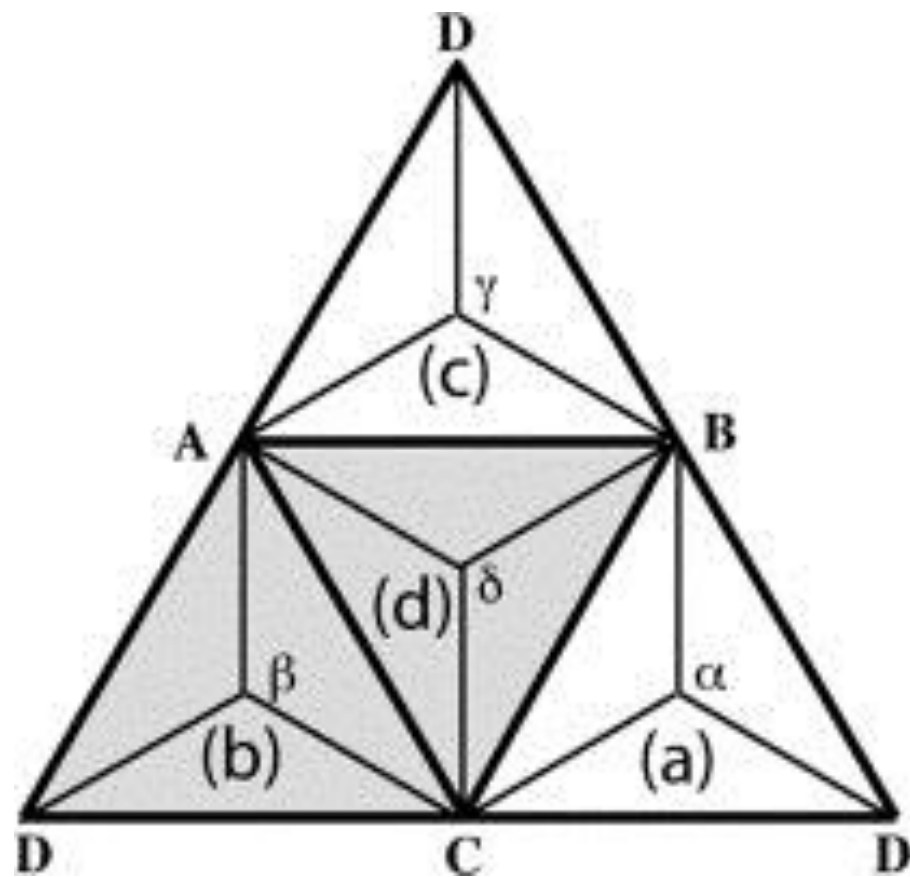
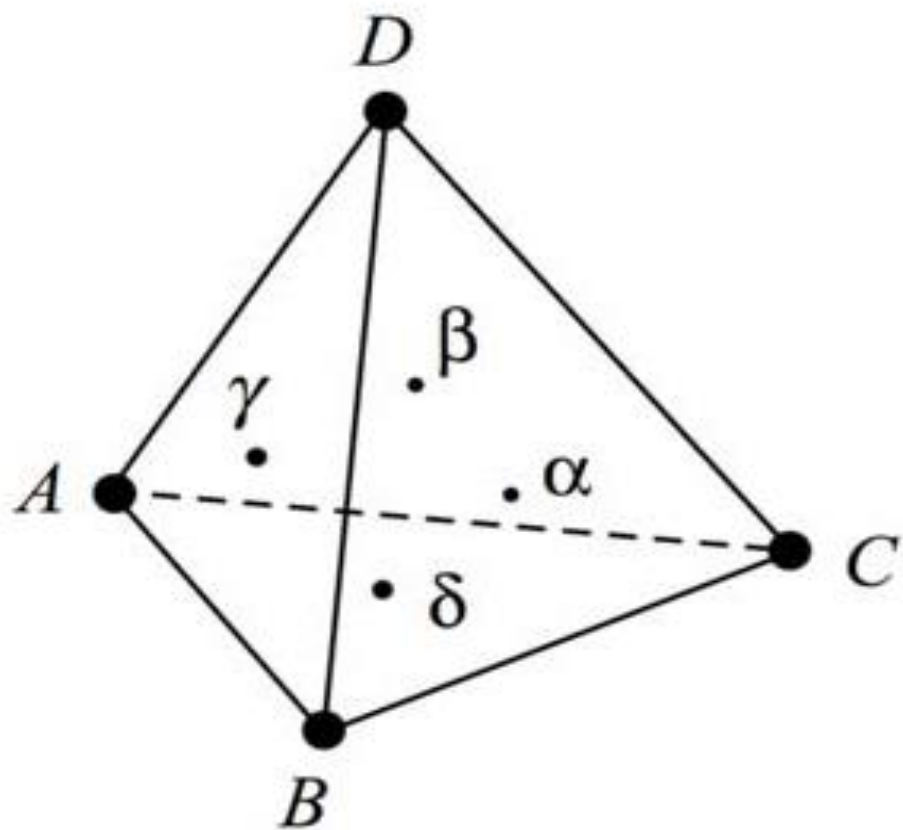
即: $|\vec{b}_1|^2 + |\vec{b}_2|^2 > |\vec{b}_3|^2$

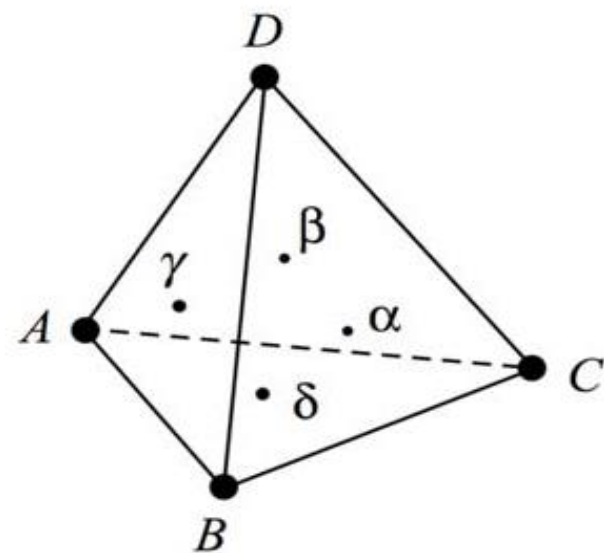
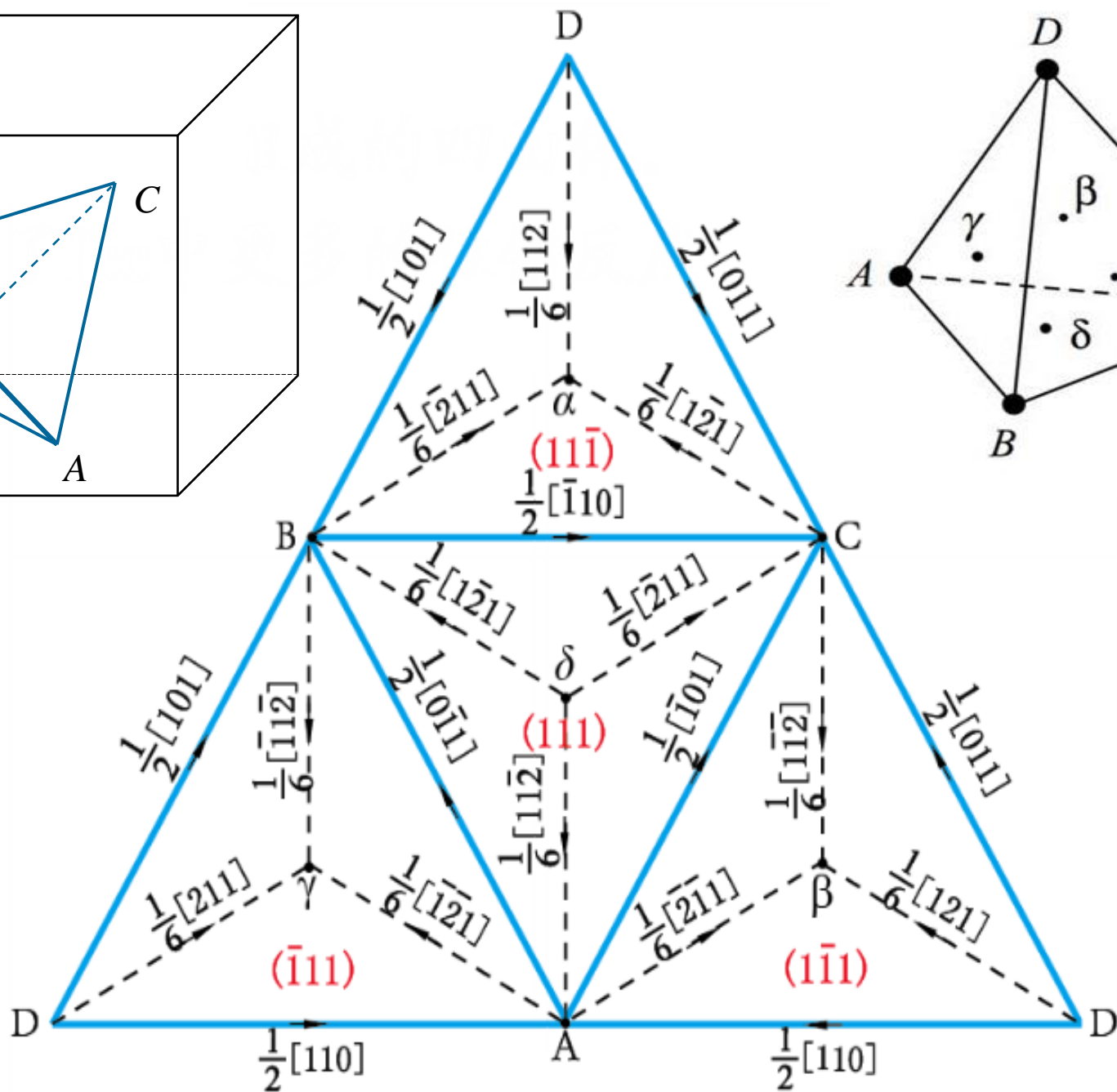
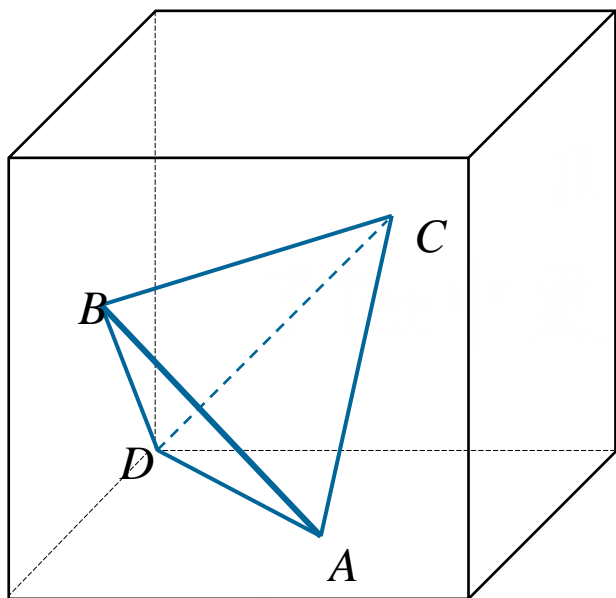
满足几何条件和能量条件, 反应可以发生 (自发进行)

汤普森四面体

Thompson tetrahedron







面心立方晶体中的位错

➤ FCC 中所有重要的位错和位错反应均可用Thompson四面体表示。

(1) 四个面即为4个可能的滑移面(111), $(-1, 1, 1)$, $(1, -1, 1)$, $(1, 1, -1)$;

(2) 6条棱边代表12个晶向, 即FCC中所有可能的12个全位错的柏氏矢量;

(3) 每个顶点与其中心的连线共代表24个

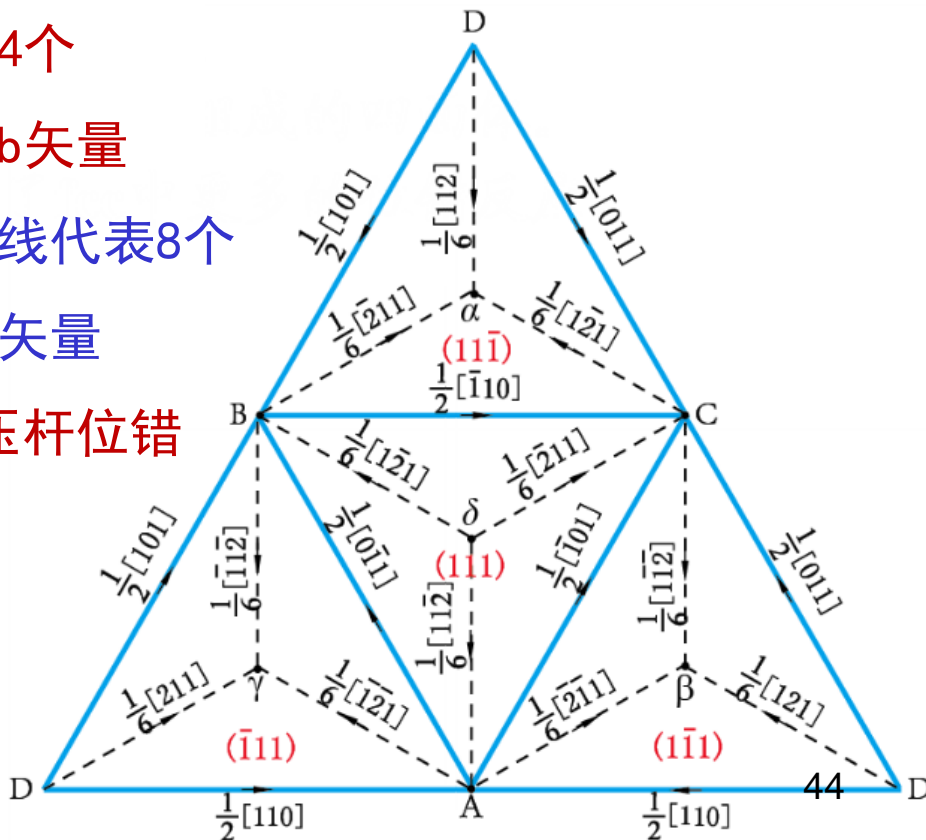
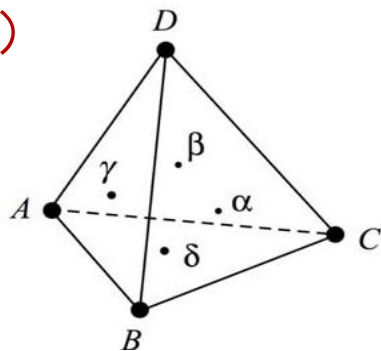
$(a/6)\langle 112 \rangle$ 肖克莱不全位错的b矢量

(4) 4个顶点到它所对的三角形中点连线代表8个

$(a/3)\langle 111 \rangle$ 弗兰克不全位错的b矢量

(5) 4个面中心相连即为 $(a/6)\langle 110 \rangle$ 压杆位错

(stair rod)



扩展位错

扩展位错：一种特殊的位错组态，系由两个不全位错以及在两个不全位错之间的一片层错所构成。一般由全位错分解而成。

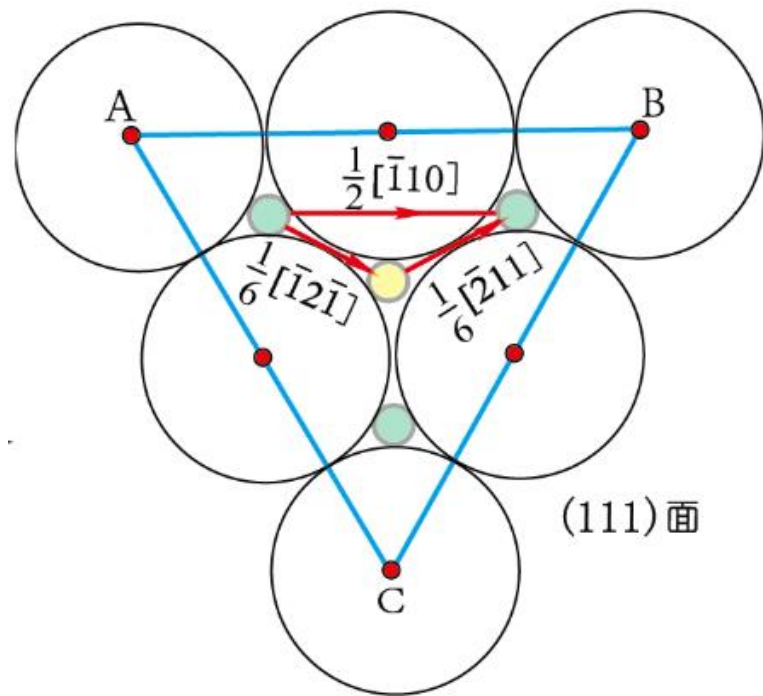
$$\frac{a}{2} [\bar{1}10] \leftrightarrow \frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6} [\bar{2}11]$$

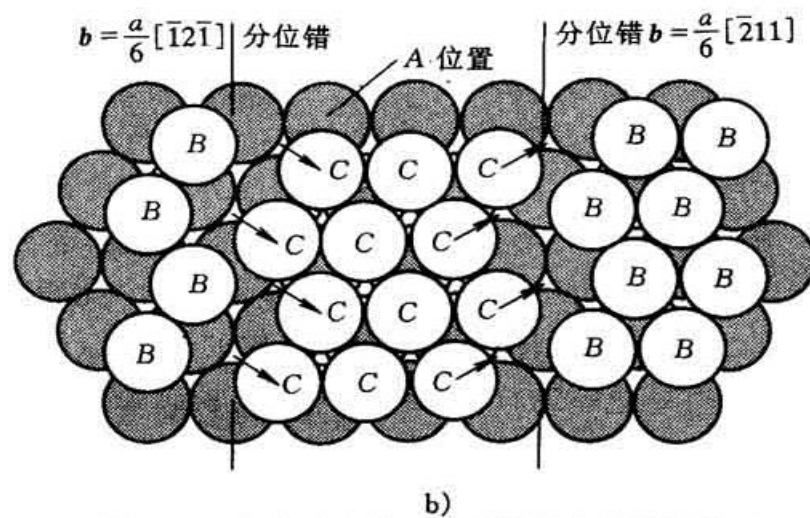
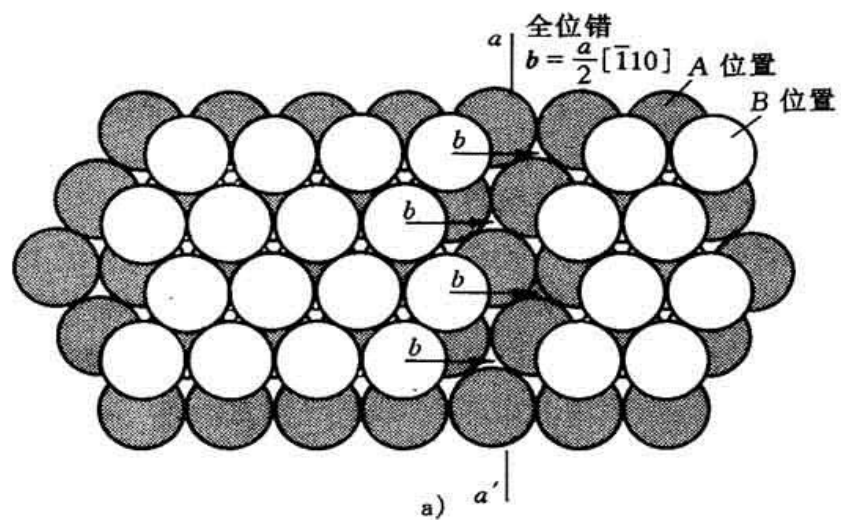
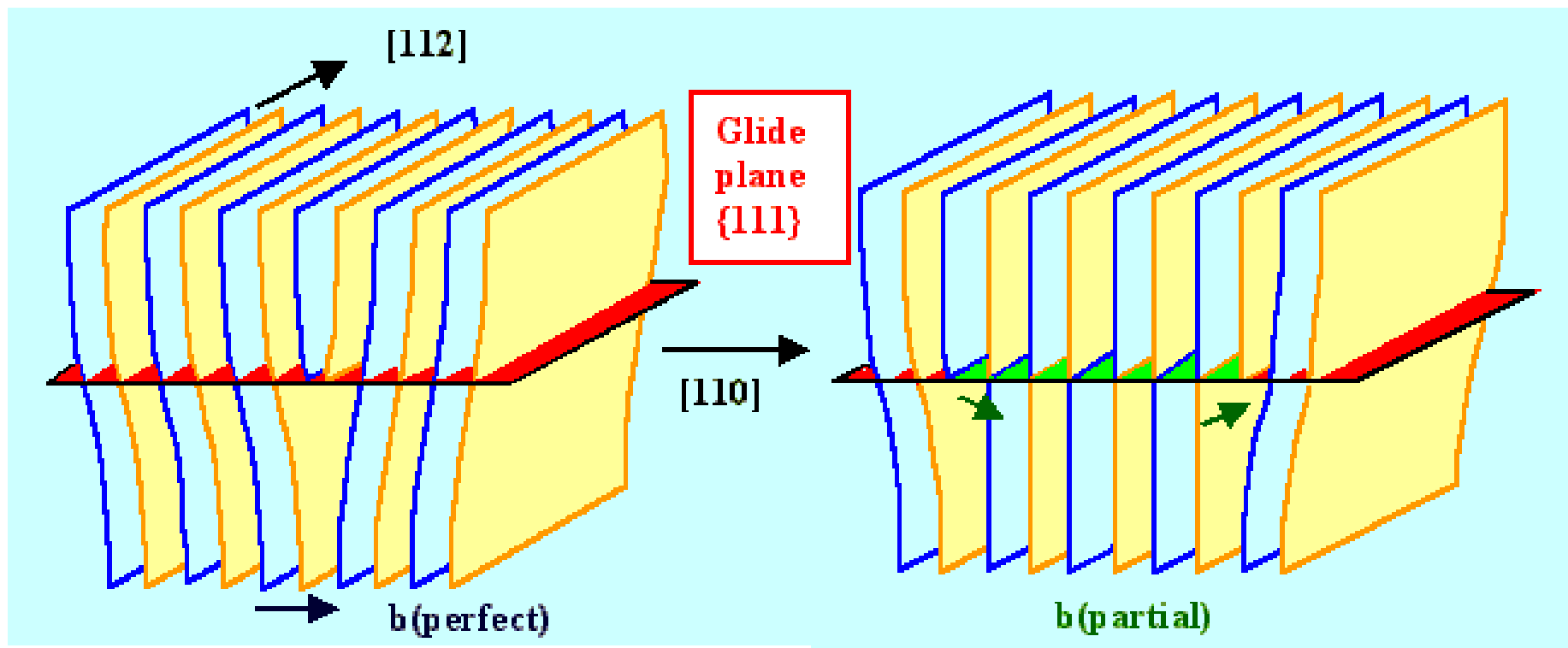
$\frac{a^2}{2}$ $\frac{a^2}{6}$ $\frac{a^2}{6}$

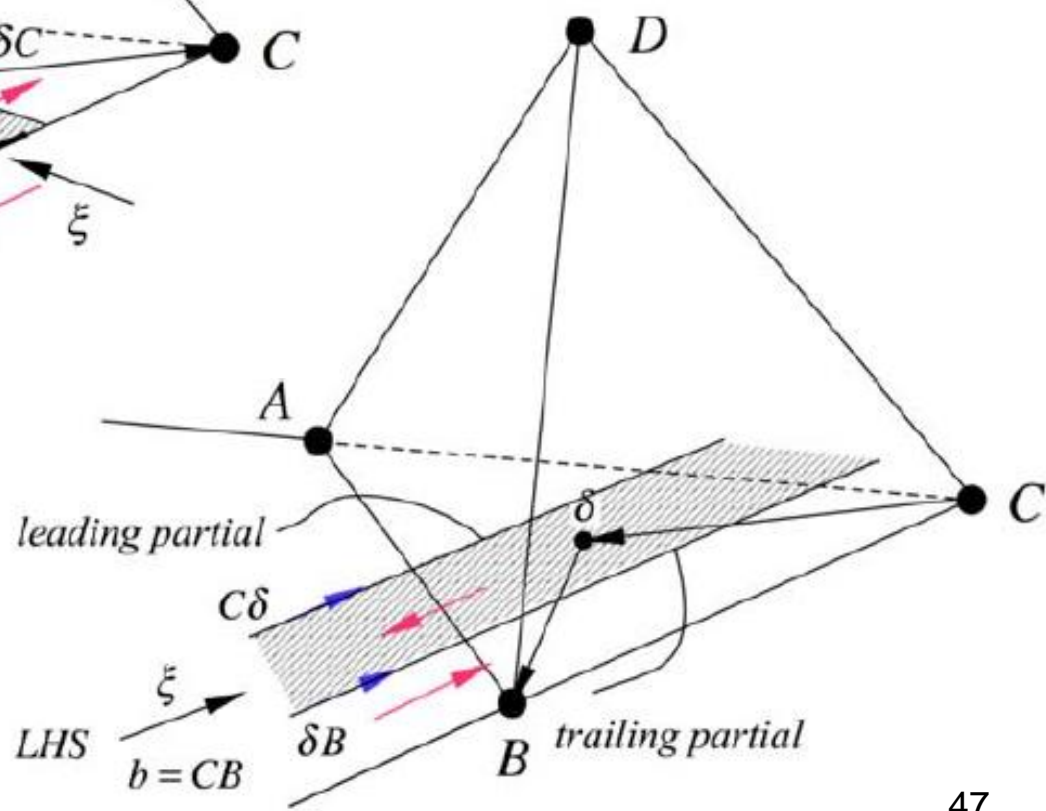
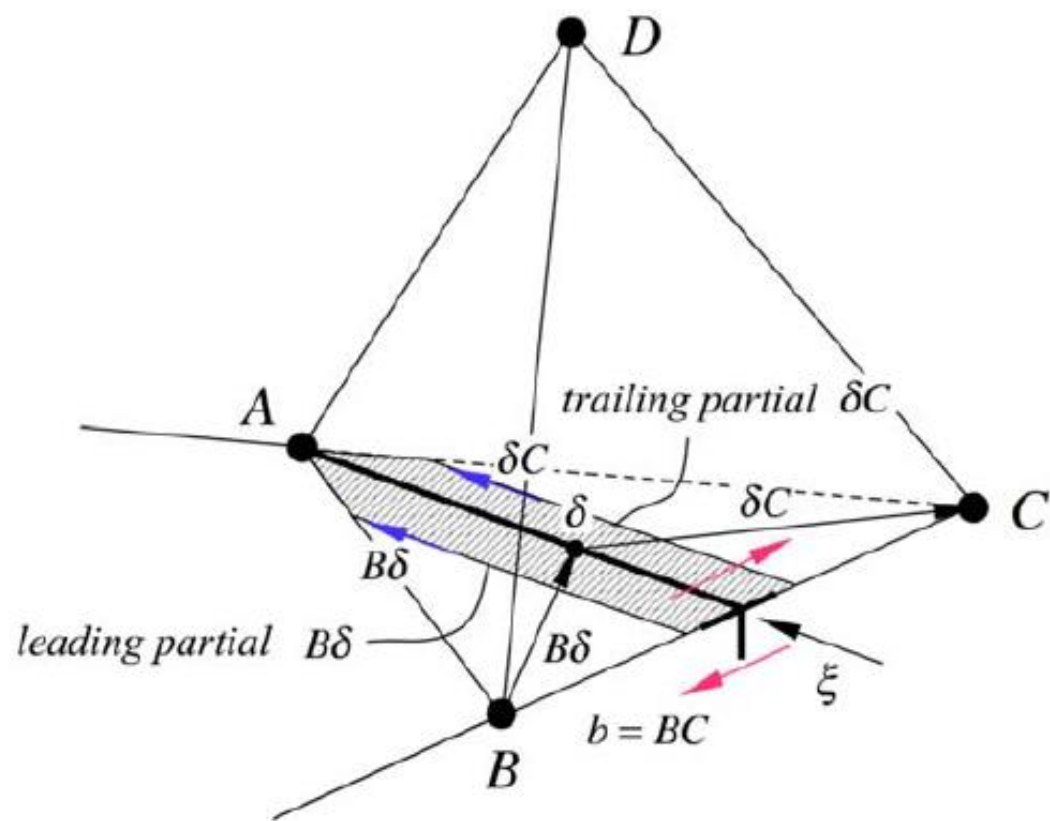
$$BC \rightarrow B\delta + \delta C$$

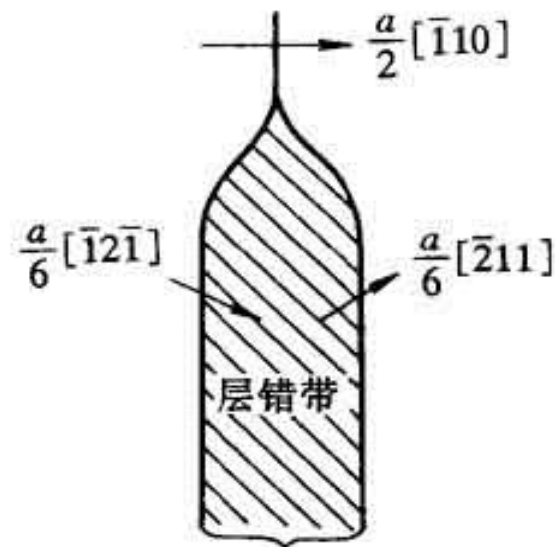
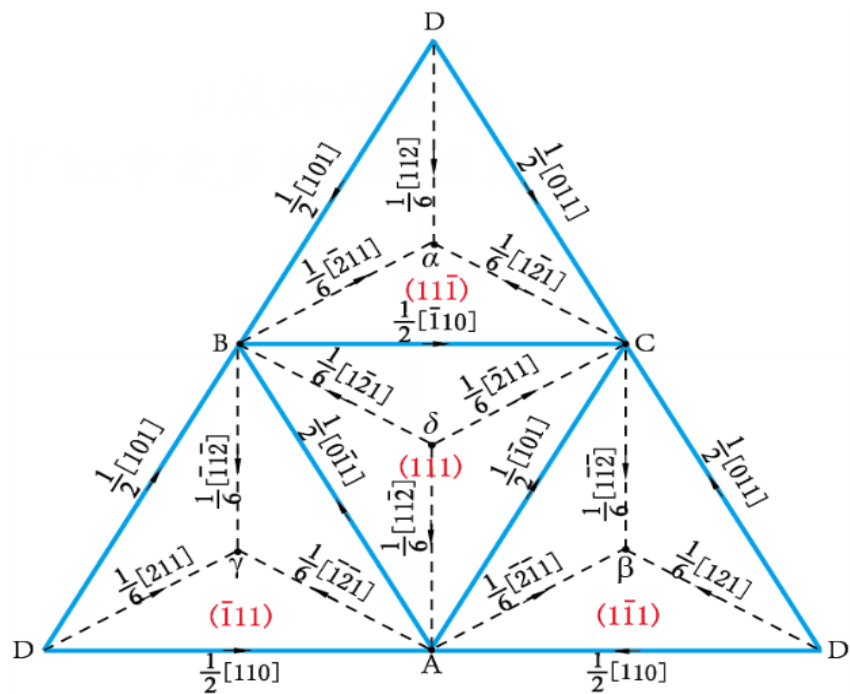
几何条件+能量条件

由于这两个不全位错位于同一滑移面上，彼此同号且其柏氏矢量的夹角为60度，故它们必然相斥并分开，其间夹着一片堆垛夹错区。









(111) 面上的扩展位错

$$\frac{a}{2} [\bar{1}10] \leftrightarrow \frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6} [\bar{2}11]$$



➤ 扩展位错的宽度

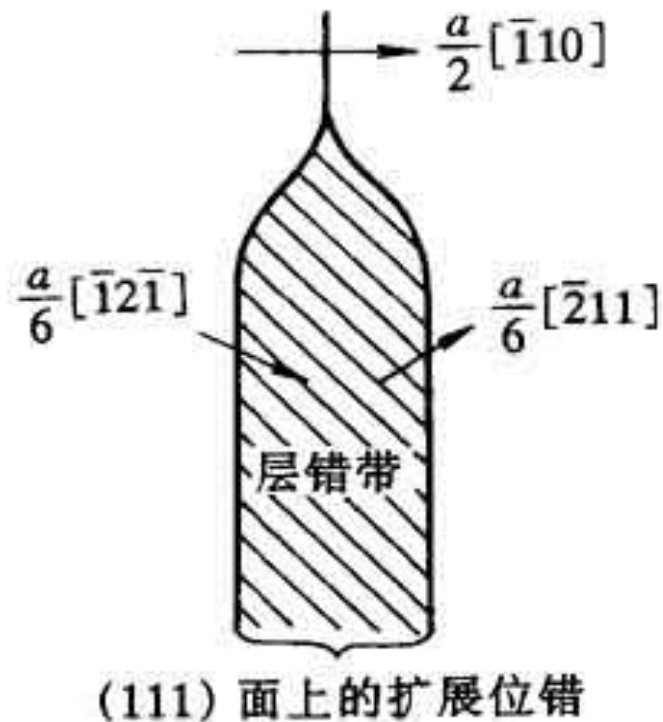
吸引力：层错能， γ

排斥力：两位错间的斥力

$$f = \frac{G(\bar{b}_1 \bullet \bar{b}_2)}{2\pi d} = \gamma$$

$$d = \frac{G(\bar{b}_1 \bullet \bar{b}_2)}{2\pi\gamma}$$

可见： d 与 γ 成反比，与 G 成正比

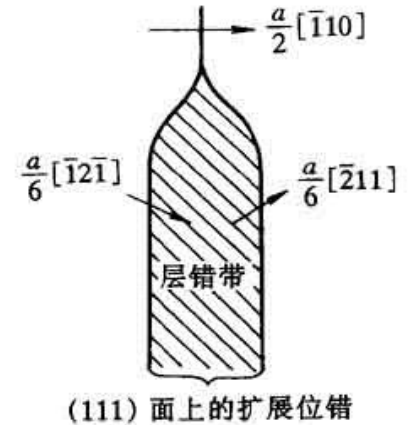


已知：铜晶体 $a = 3.6 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$, $G = 40 \text{ GPa}$ 和 $E_{\text{SF}} = 7 \cdot 10^{-6} \text{ J/cm}^2$

求：当发生 $\langle 110 \rangle a/2 \rightarrow 2 \cdot \langle 112 \rangle a/6 + \text{SF}$, 层错的宽度?

位错应变能: $E = \alpha G b^2$

层错能: E_{SF}



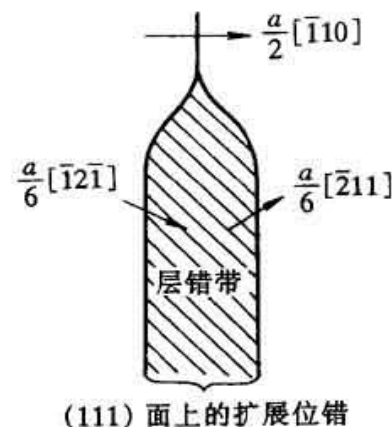
已知：铜晶体 $a = 3.6 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$, $G = 40 \text{ GPa}$ 和 $E_{\text{SF}} = 7 \cdot 10^{-6} \text{ J/cm}^2$

求：当发生 $\langle 110 \rangle a/2 \rightarrow 2 \cdot \langle 112 \rangle a/6 + \text{SF}$ ，层错的宽度？

位错应变能: $E = \alpha G b^2$ 层错能: E_{SF}

$$\frac{a}{2} [10\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6} [11\bar{2}] + \frac{a}{6} [2\bar{1}\bar{1}] + \text{SF}$$

$$\alpha G b_1^2 \quad \alpha G b_2^2 \quad \alpha G b_3^2 \quad E_{\text{SF}}$$



能量平衡时

$$\alpha G b_1^2 = \alpha G b_2^2 + \alpha G b_3^2 + E_{\text{SF}} L$$

$$E_{\text{SF}} L = \alpha G (b_1^2 - b_2^2 - b_3^2)$$

$$E_{\text{SF}} L = \alpha G a^2 \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^2 - 2 \left(\frac{\sqrt{6}}{6} \right)^2 \right]$$

$$E_{\text{SF}} L = \frac{\alpha G a^2}{6}$$

$$G a^2 / 6 = (1/6) \times 4 \cdot 10^{10} \text{ (Pa)} \times 3.6^2 \cdot 10^{-16} \text{ (cm}^2\text{)}$$

$$= 8.7 \cdot 10^{-10} \text{ N} = 8.7 \cdot 10^{-12} \text{ J/cm}$$

因此

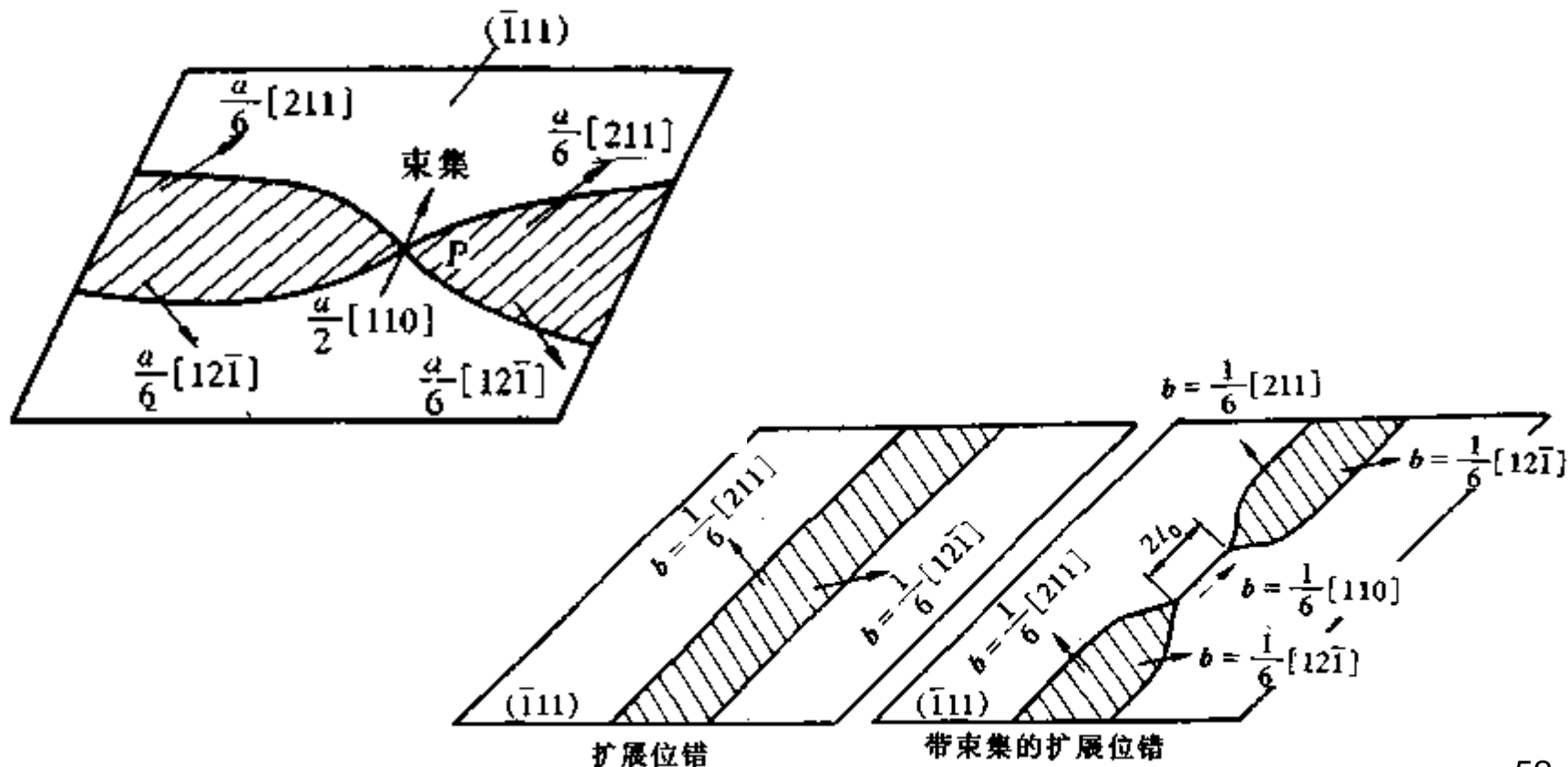
$$L = \frac{\alpha G a^2 / 6}{E_{\text{SF}}} = \frac{\alpha (8.7 \cdot 10^{-12}) \text{ (J/cm)}}{7 \cdot 10^{-6} \text{ (J/cm}^2\text{)}}$$

$$= \alpha (1.2 \cdot 10^{-6}) \text{ (cm)} = 6 \sim 12 \text{ (nm)}$$

$$\alpha = 0.5 \sim 1$$

➤ 扩展位错的束集

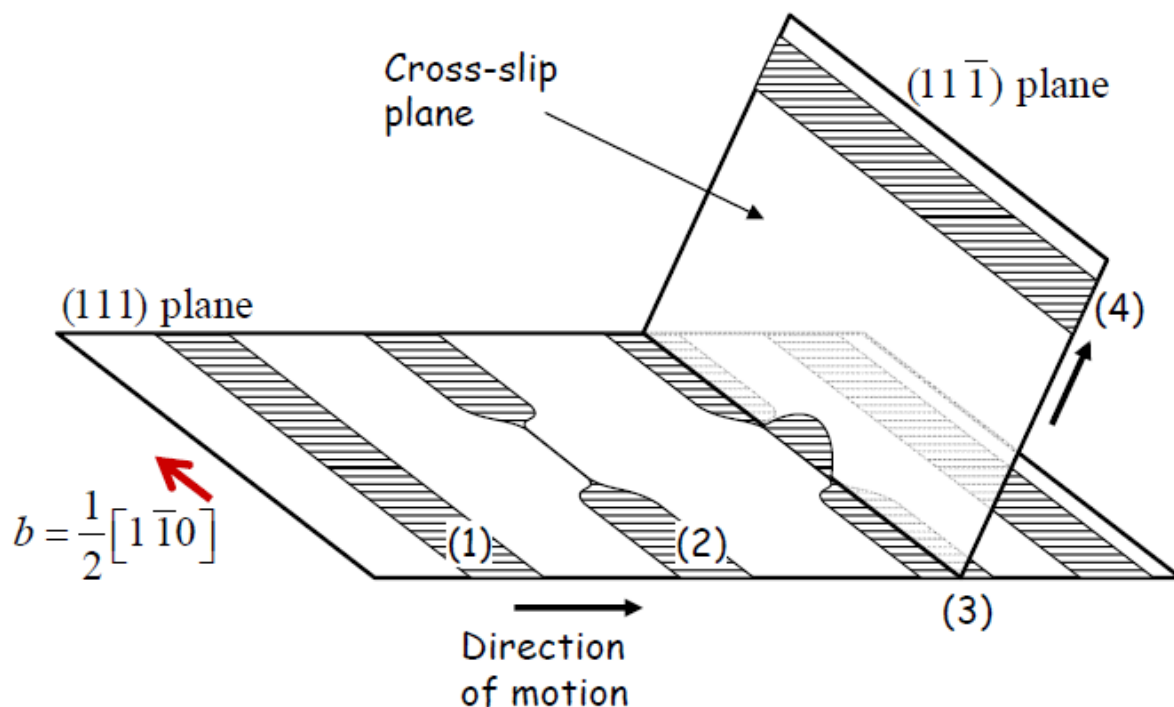
- 束集：在外切应力作用下，层错宽度减小至零，局部收缩成原来的全位错：位错扩展的反过程



➤ 扩展位错的交滑移

扩展位错交滑移前，必须先束集

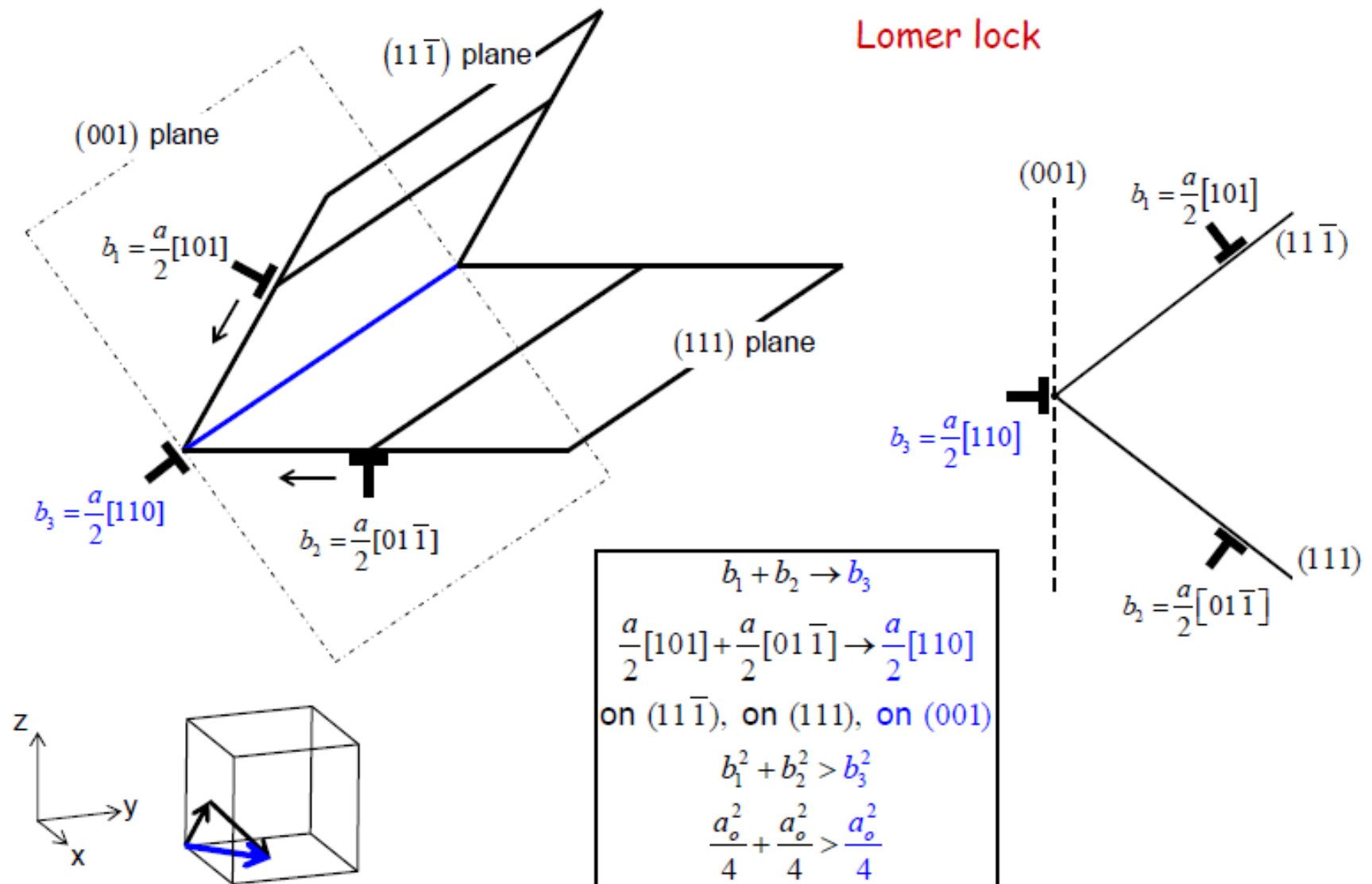
Schematic illustration



- 扩展位错=>束集=>交滑移=>重新扩展（在新滑移面上）
- 扩展位错的交滑移比全位错困难，层错能越低，扩展位错越宽，交滑移越困难。

面角位错

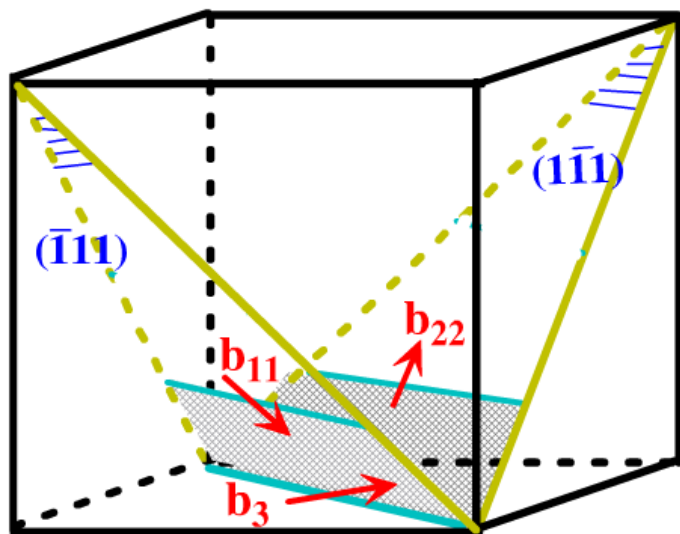
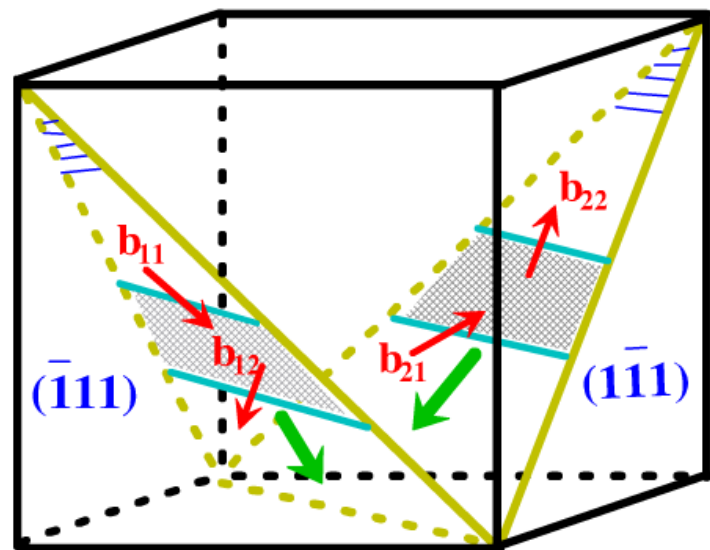
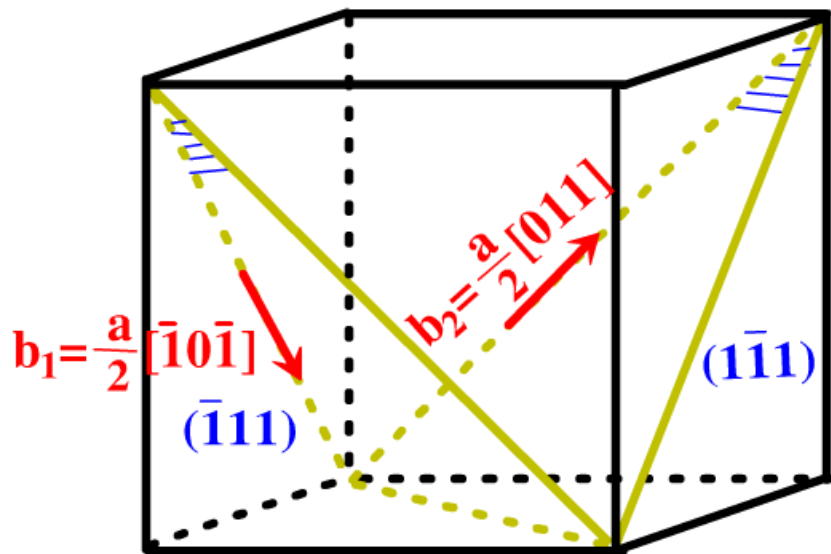
Lomer lock



($\bar{1}11$)面: $\frac{a}{2}[\bar{1}0\bar{1}] = \frac{a}{6}[\bar{1}1\bar{2}] + \frac{a}{6}[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$
 $b_1 = b_{11} + b_{12}$

($1\bar{1}1$)面: $\frac{a}{2}[011] = \frac{a}{6}[112] + \frac{a}{6}[\bar{1}21]$
 $b_2 = b_{21} + b_{22}$

交截时: $\frac{a}{6}[\bar{2}\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[112] = \frac{a}{6}[\bar{1}0\bar{1}]$
 $b_{12} + b_{21} = b_3$



$b_3 = b_{12} + b_{21}$

面角位错 (Lomer-Cottrell 位错)

(111) 面上

$$\begin{cases} \frac{a}{2}[10\bar{1}] = \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[11\bar{2}], \text{ 即 } CA = C\delta + \delta A \\ \frac{a}{2}[011] = \frac{a}{6}[112] + \frac{a}{6}[\bar{1}21], \text{ 即 } DC = D\alpha + \alpha C \end{cases}$$

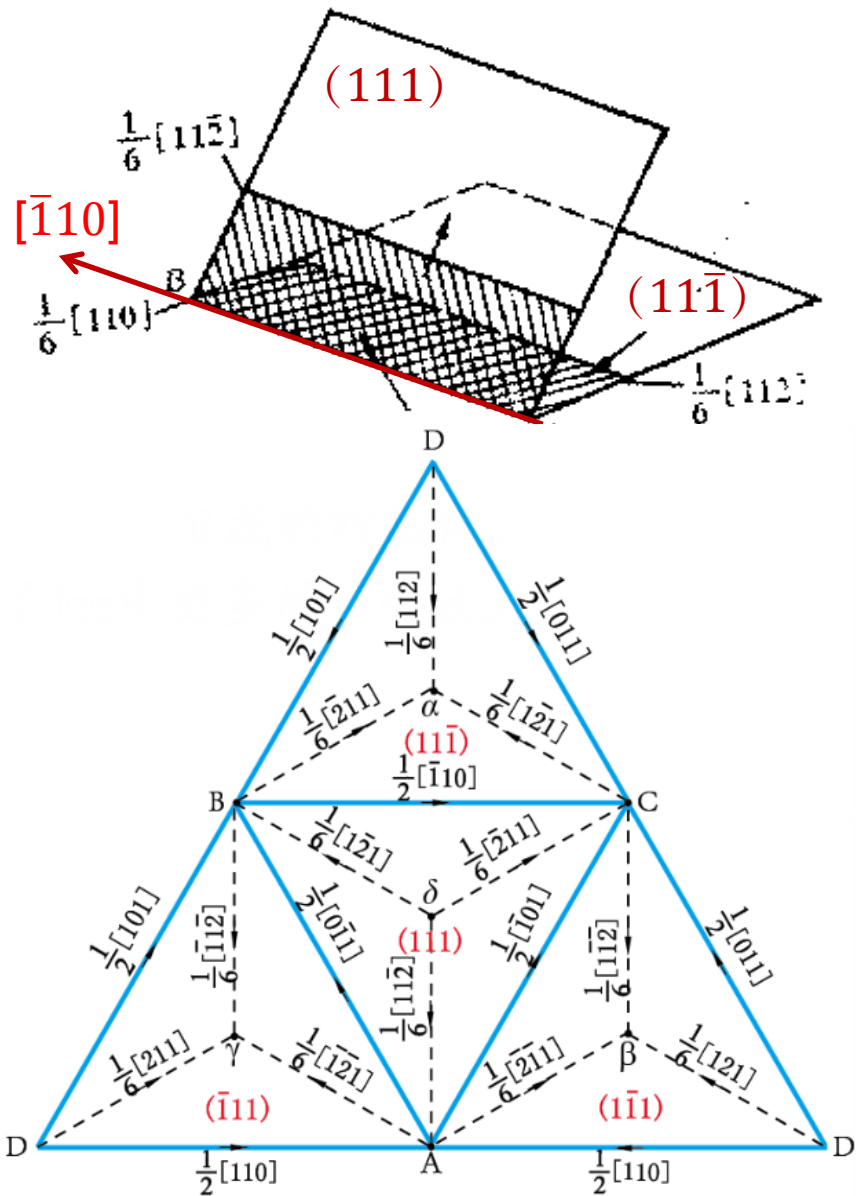
(11 $\bar{1}$) 面上

$$\frac{a}{6}[\bar{1}21] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[110], \quad \text{即 } \alpha C + C\delta = \alpha\delta$$

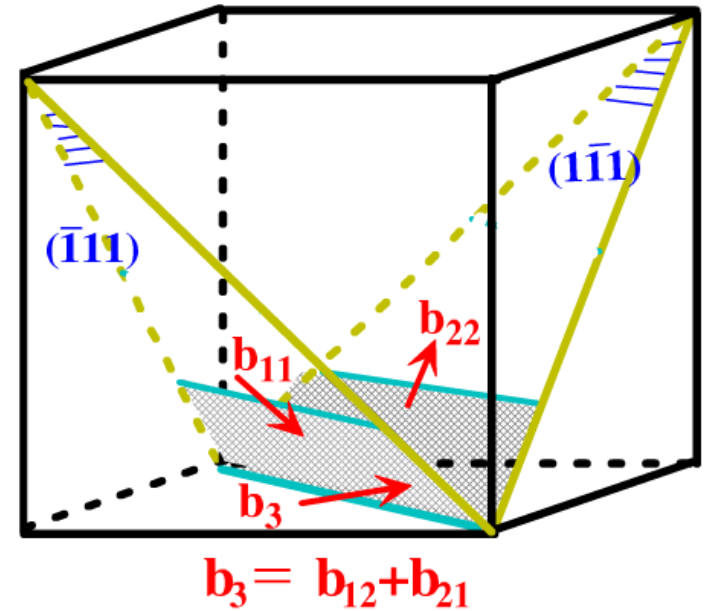
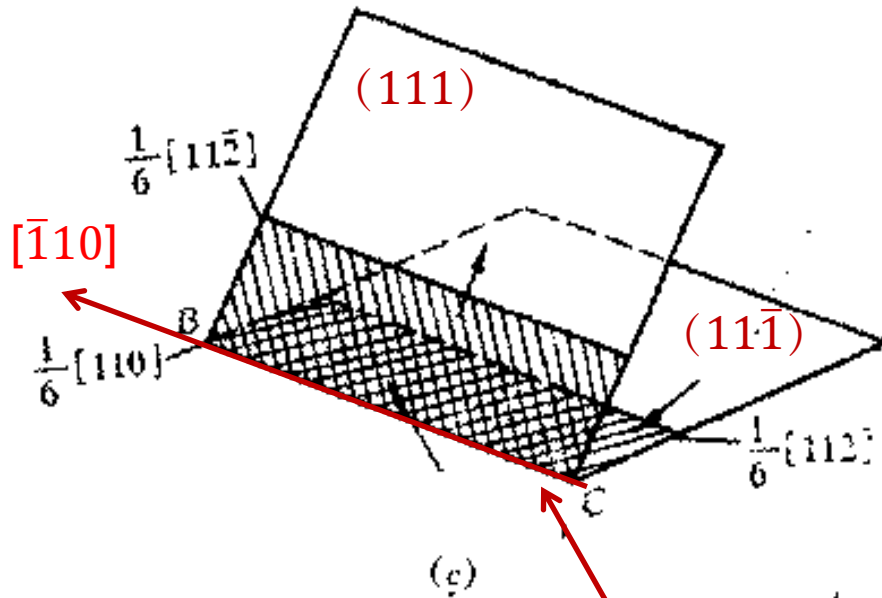
$[\bar{1}10]$
 $[110]$ } 滑移面: (001)

$$\begin{bmatrix} u1 & v1 & w1 \\ u2 & v2 & w2 \end{bmatrix}$$

$$h:k:l = \begin{bmatrix} v1 & w1 \\ v2 & w2 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} w1 & u1 \\ w2 & u2 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} u1 & v1 \\ u2 & v2 \end{bmatrix}$$



面角位错 (Lomer-Cottrell 位错)



压杆位错
(Stair rod)



面角位错

- 两个不全位错
- (111)面和(11 $\bar{1}$)面上的层错
- 压杆位错

割价位错 (jogged dislocation)

