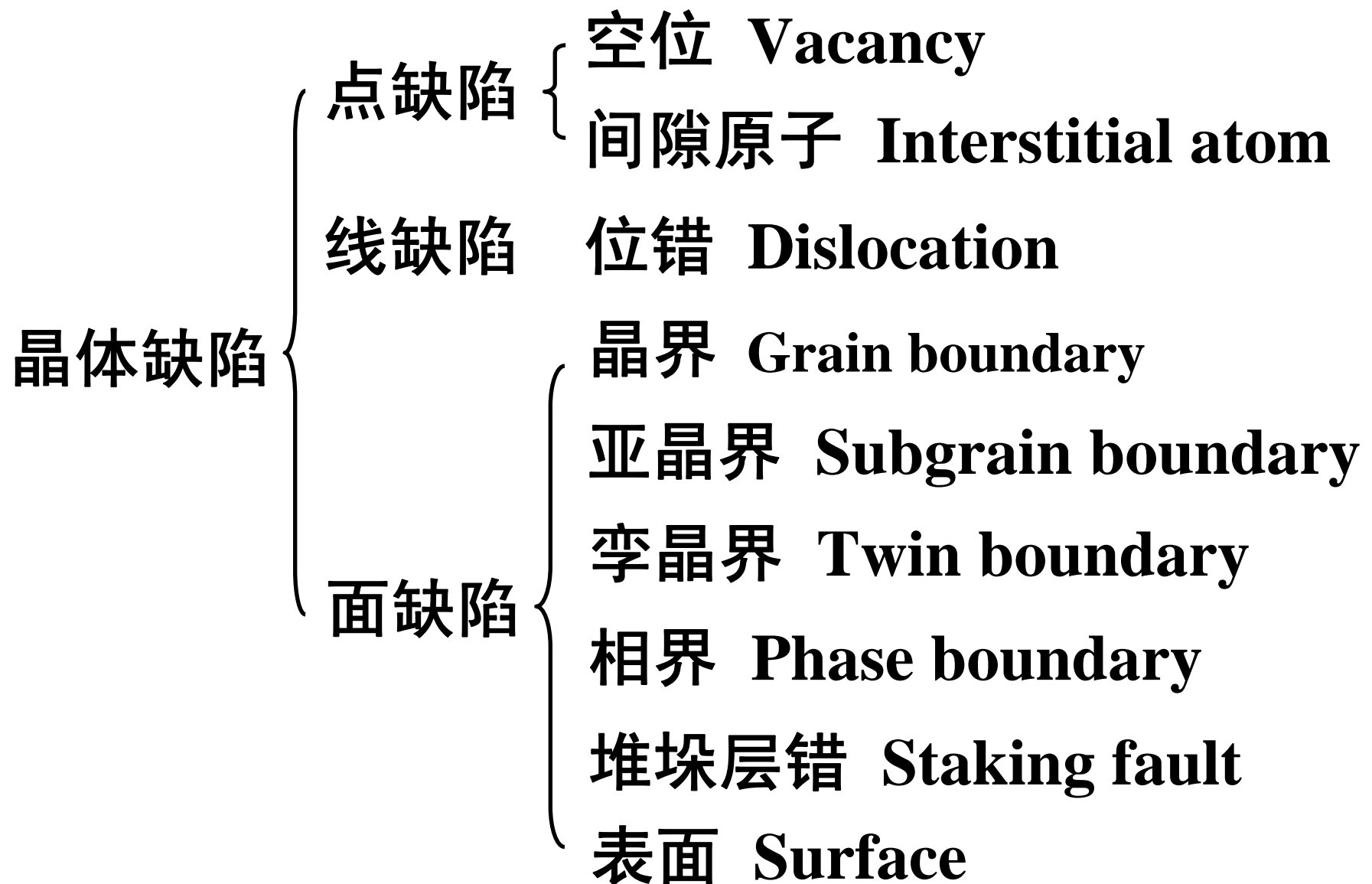


第三章 晶体缺陷

CRYSTAL DEFECTS

晶体缺陷 — 实际晶体中偏离理想结构的不完整区域。

根据晶体中结构不完整区域的形状及大小，晶体缺陷常分为如下三类：



点缺陷

位错的基本概念

位错的弹性性质

作用在位错线上的力

实际晶体结构中的位错

晶体中的界面

第一节 点缺陷

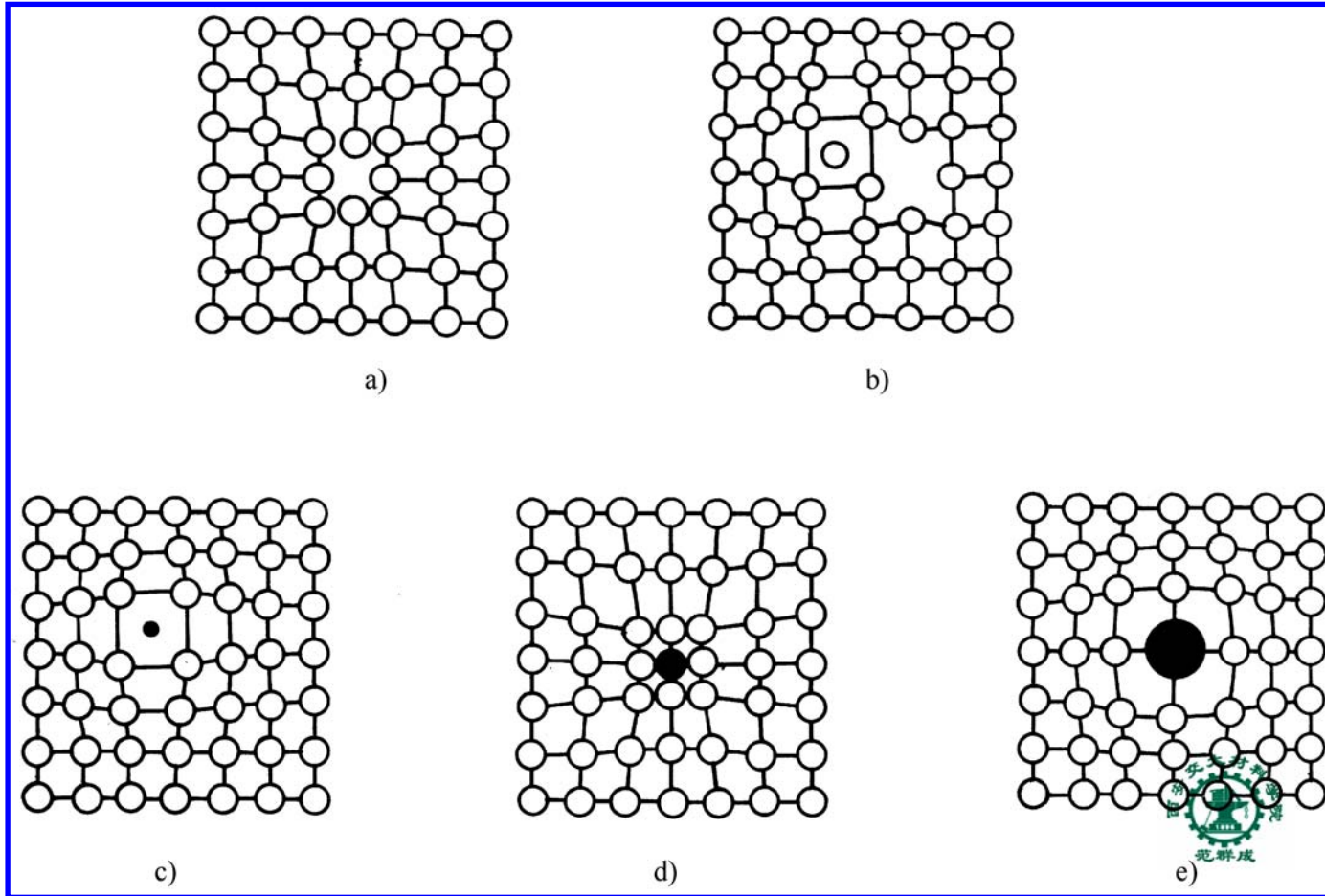
POINT DEFECTS

点缺陷的类型

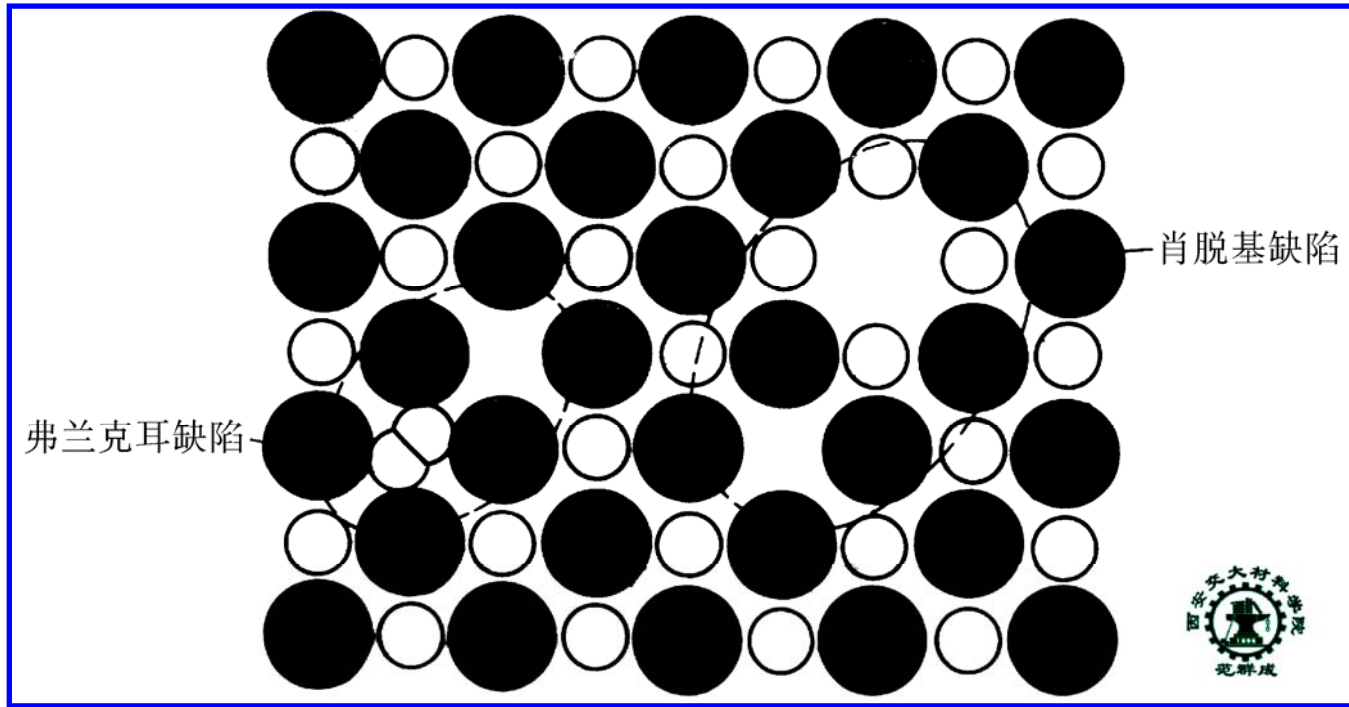
点缺陷的浓度

点缺陷与材料行为

一、点缺陷的类型



点缺陷的类型：(a) Schottky 空位；(b) Frenkel 缺陷；
(c) 异类间隙原子；(d) 小置换原子；(e) 大置换原子



离子晶体中两种常见的点缺陷

纯元素中： 间隙原子， 空位

固溶体中： 异类间隙原子， 置换原子

离子晶体中 { 正、负离子空位对—肖脱基缺陷
 间隙离子、空位对—弗兰克耳缺陷

二、点缺陷的浓度

1. 平衡点缺陷的浓度

虽然点缺陷的存在使晶体的内能增高，但同时也使熵增加，从而使晶体的能量下降。因此，点缺陷是晶体中热力学平衡的缺陷。

等温等容条件下，点缺陷使晶体的亥姆霍兹自由能变化为：

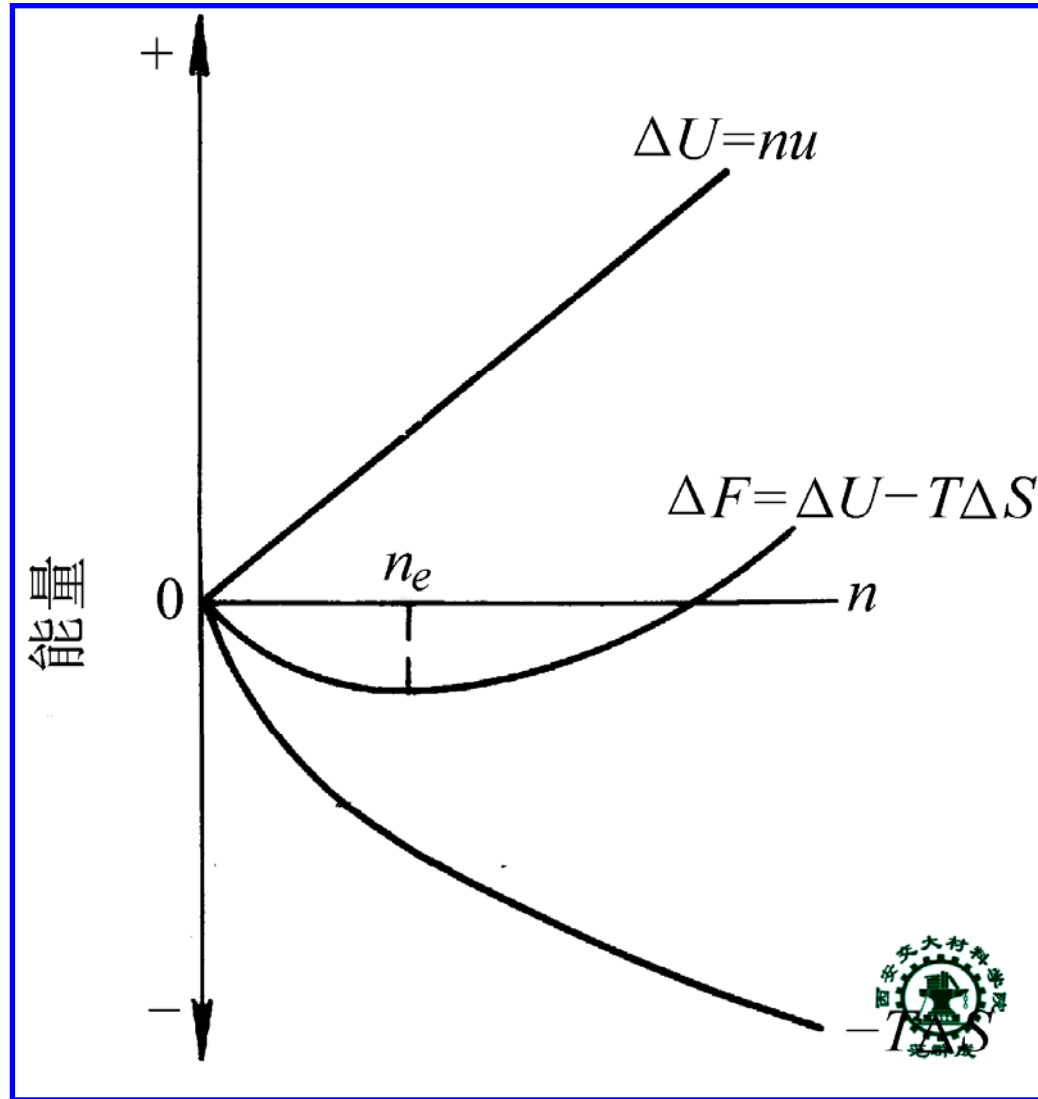
$$\Delta A = \Delta U - T\Delta S$$

$$\Delta U = nu$$

式中， n — 点缺陷个数

u — 一个点缺陷引起的内能增量，即点缺陷的形成能

THE END



自由能随点缺陷数量的变化

平衡点缺陷的浓度：

$$C_e = \frac{n_e}{N} = A \exp \frac{-u}{kT}$$

式中， n_e — 平衡点缺陷数目
 N — 晶体中的原子总数
 A — 材料常数，通常取值为 1
 u — 点缺陷形成能
 k — 玻尔兹曼常数， $8.62 \times 10^{-5} \text{ eV} / K$
或 $1.38 \times 10^{-23} \text{ J} / K$

讨论

- i) 平衡浓度点缺陷的存在使晶体自由能最低
- ii) 点缺陷产生于原子的热振动，故其平衡浓度随温度升高呈指数增加
- iii) 点缺陷平衡浓度随其形成能减小呈指数增加，故晶体中的间隙原子平衡浓度大大小于空位平衡浓度

2. 过饱和点缺陷的产生

淬火 quenching

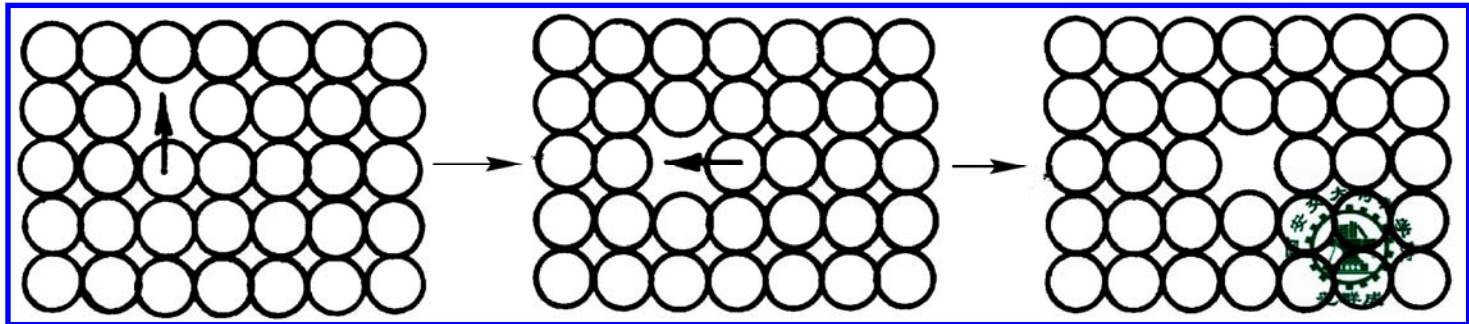
辐照 irradiating

冷塑性变形 cold plastic deforming

三、点缺陷与材料行为

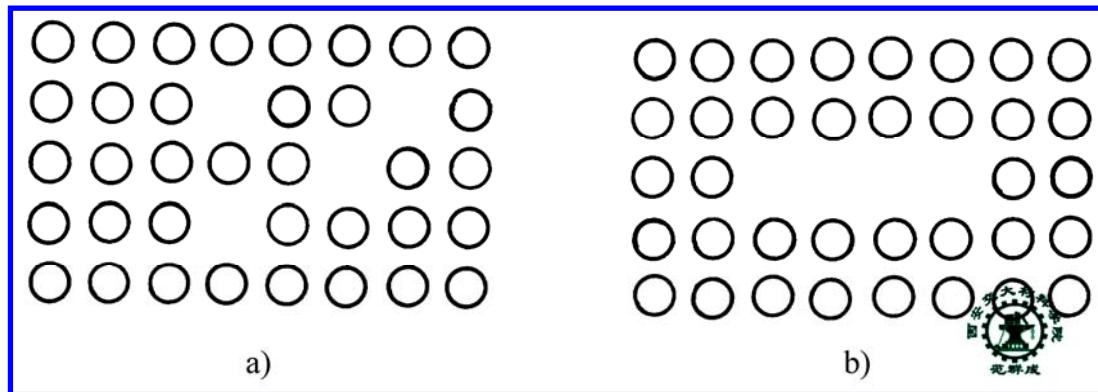
1. 点缺陷的运动

1) 空位的运动



2) 间隙原子的运动

3) 空位片的形成



2. 点缺陷对材料性能的影响

- 1) 点缺陷的运动是晶体中原子扩散的内在原因.
- 2) 引起晶体物理性能变化, 如电阻率升高、密度变化.
- 3) 引起晶体力学性能变化, 如强度升高、韧性下降.

第二节 位错的基本概念

PRIMARY CONCEPT OF DISLOCATION

位错学说的产生

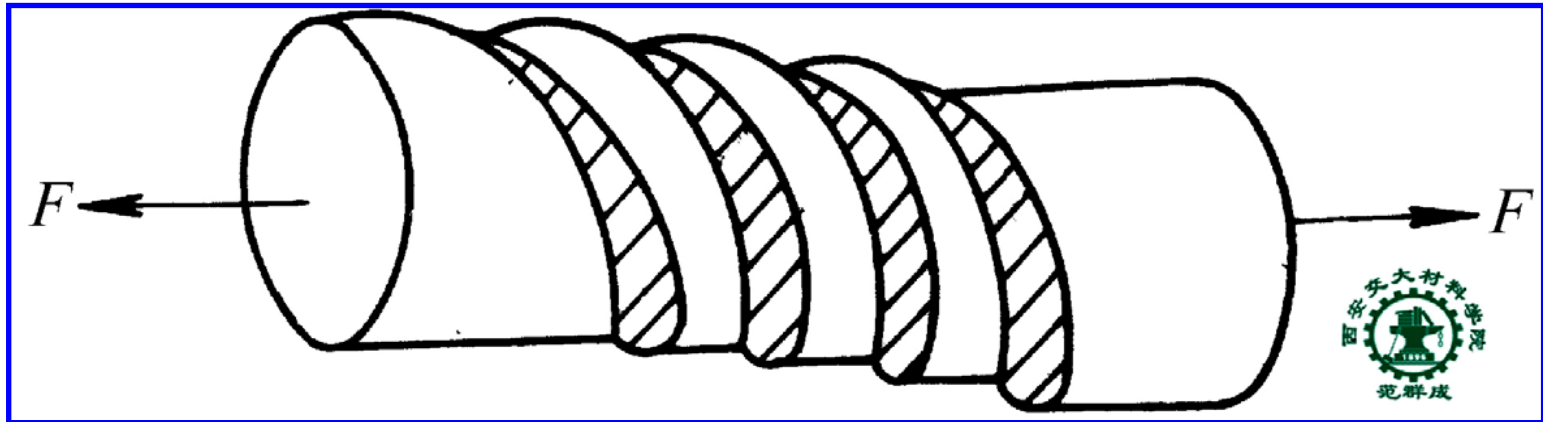
位错的几何形态

位错的运动

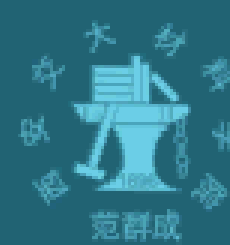
一、位错学说的产生

1. 理想晶体的理论剪切强度的估算

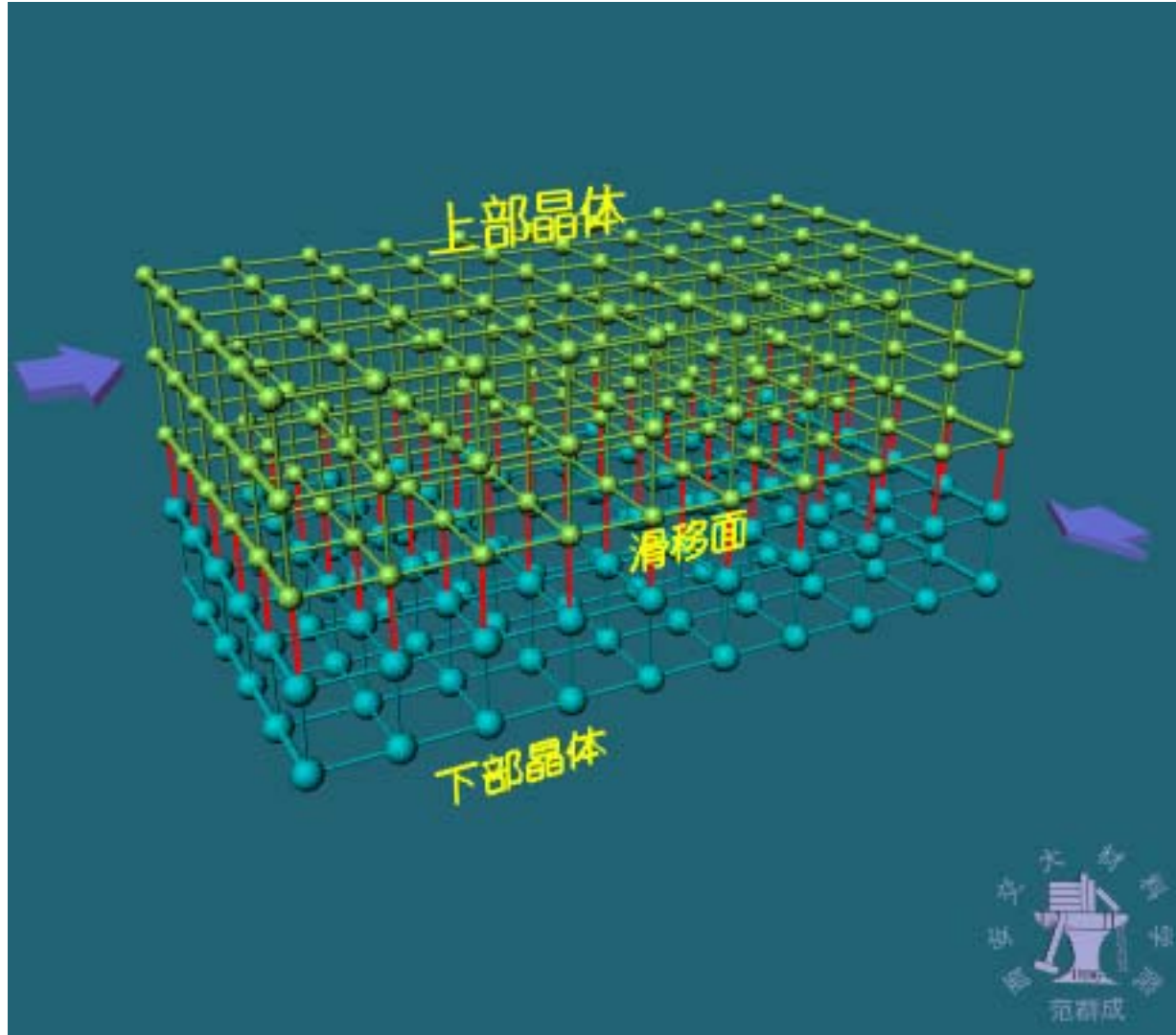
晶体的塑性变形主要通过剪切应力作用下晶体的滑移进行



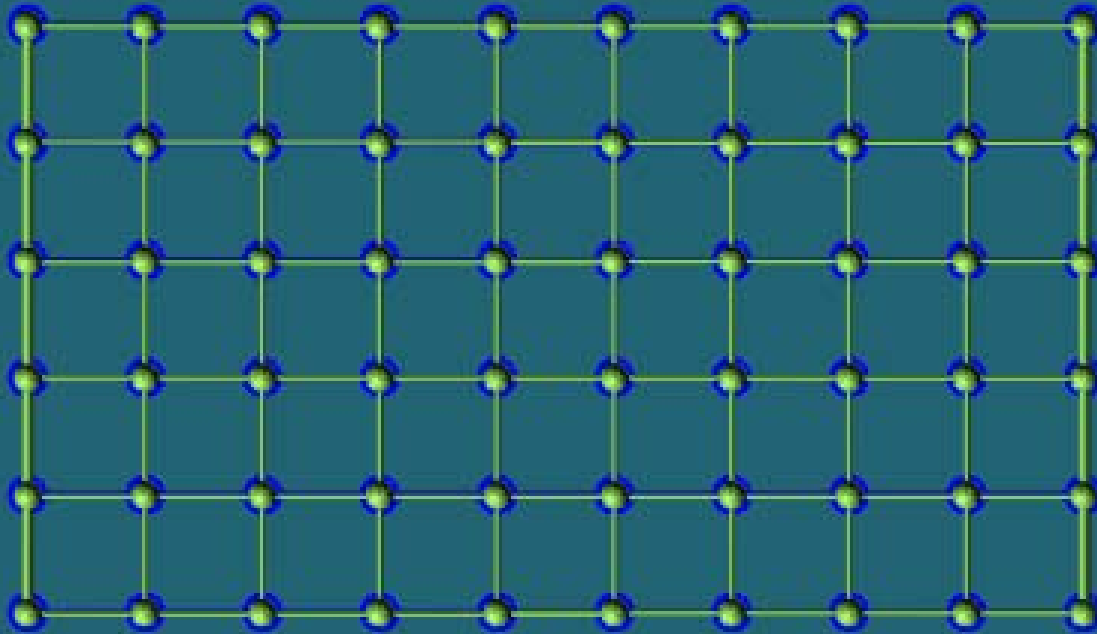
单晶体塑性变形时外形的变化



理想晶体按照“刚性滑移”模型进行塑性变形



蓝色—下部晶体
绿色—上部晶体



按照“刚性滑移”模型，估算出理想晶体的理论剪切屈服强度为：

$$\tau_m \approx \frac{G}{30}$$

式中， G — 晶体的切变模量

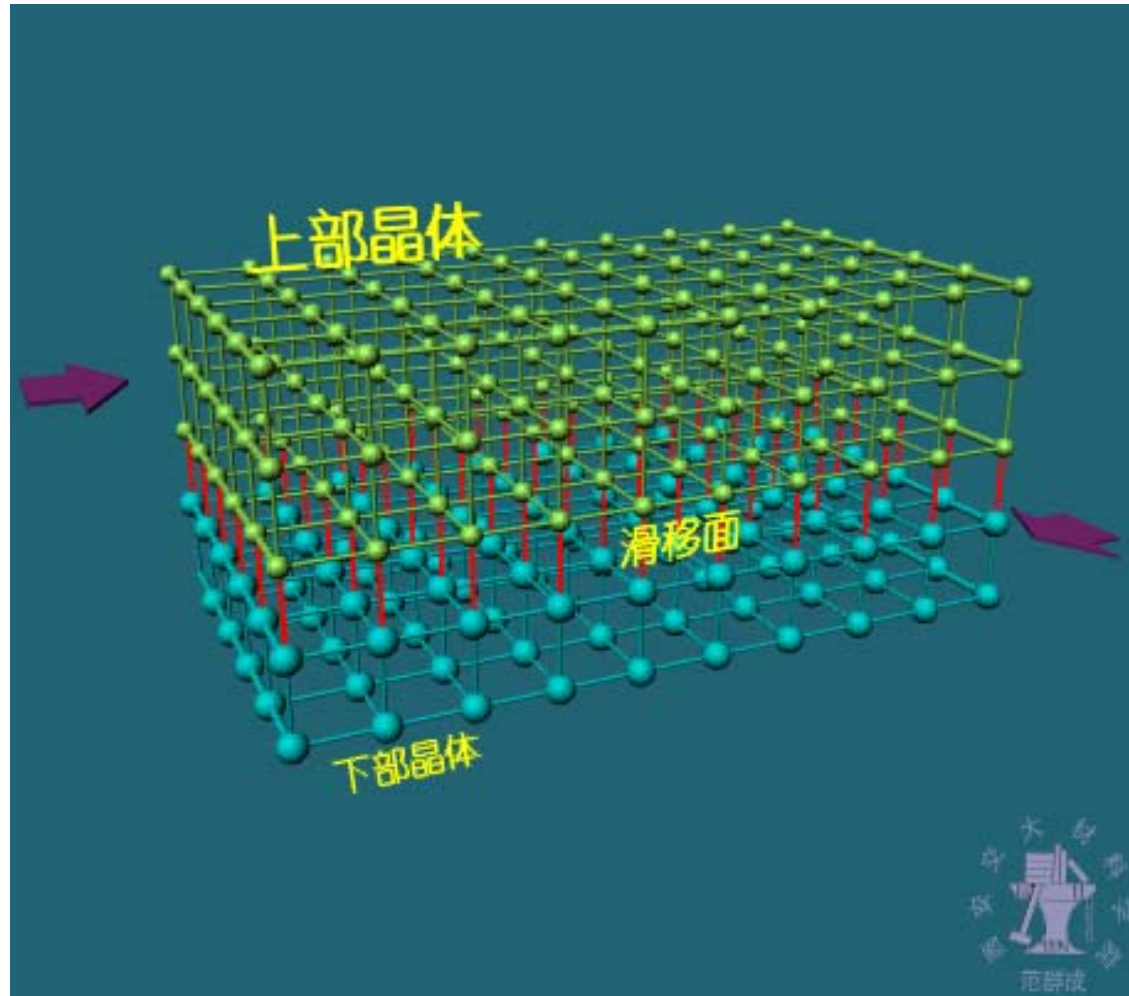
2. 实际晶体的剪切强度

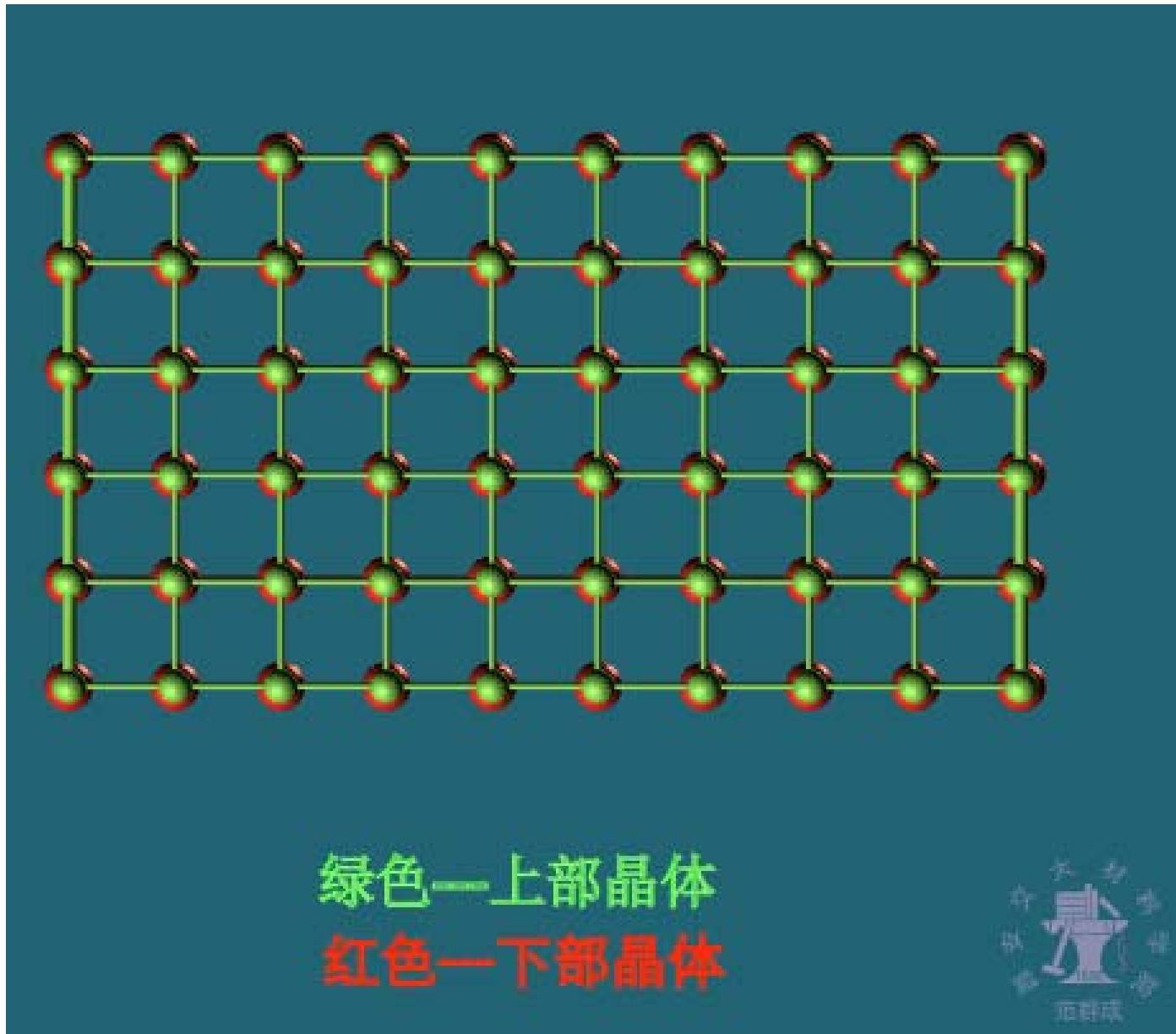
与理想晶体的剪切强度相差2~4个数量级

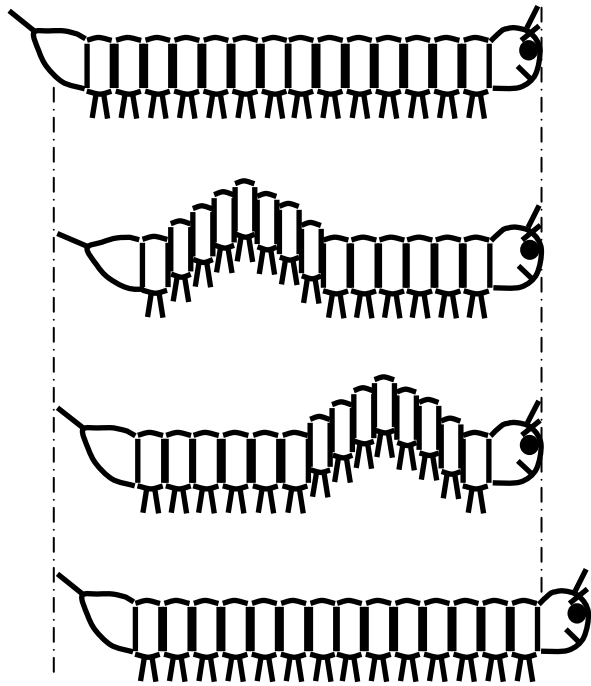
金 属	切弹模量 $G / \text{MN} \cdot \text{m}^{-2}$	理论剪切强度 $\tau_m / \text{MN} \cdot \text{m}^{-2}$	实际剪切强度 $\text{MN} \cdot \text{m}^{-2}$
Al	24400	3830	0.786
Ag	25000	3980	0.372
Cu	6480	6480	0.490
α -Fe	~ 68950	~ 10960	2.75
Mg	16400	2630	0.393

3. 位错概念的提出

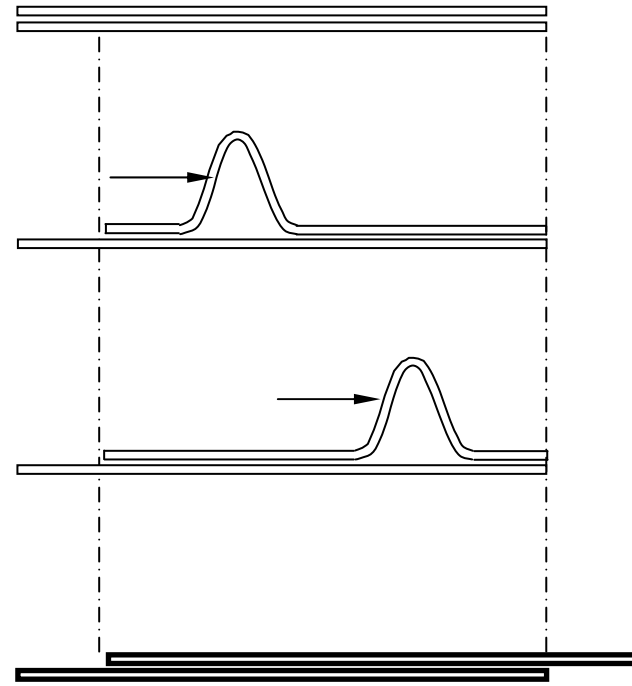
实际晶体中存在位错，且其具有易动性







毛毛虫爬行过程示意图



挪动地毯过程示意图

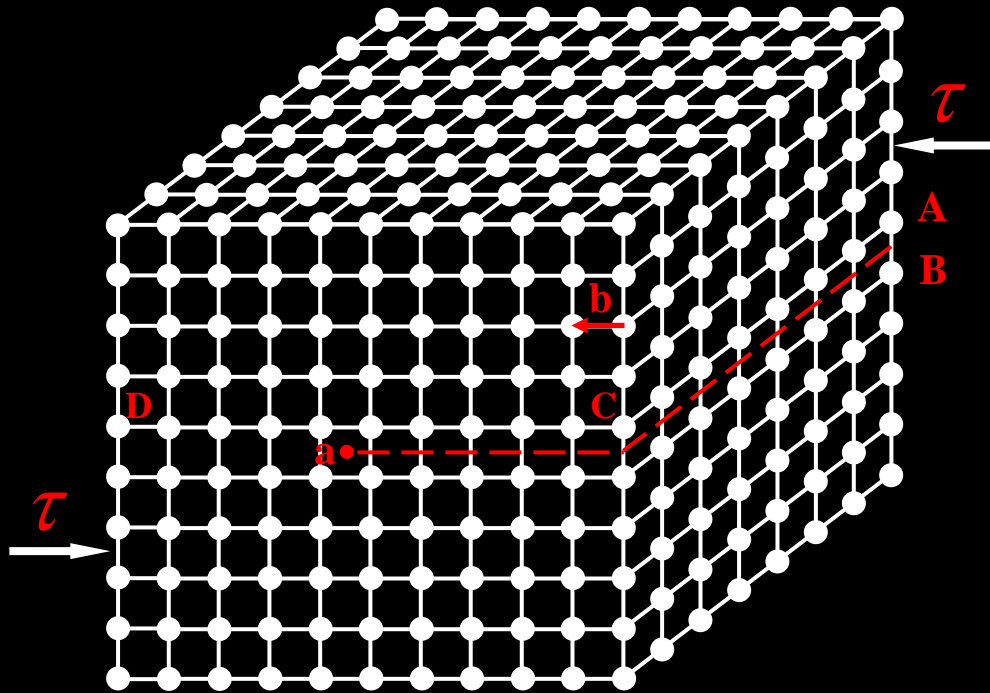
二、位错的几何形态

位错 — 晶体中两个尺度较小、一个尺度较大的原子位置错排区

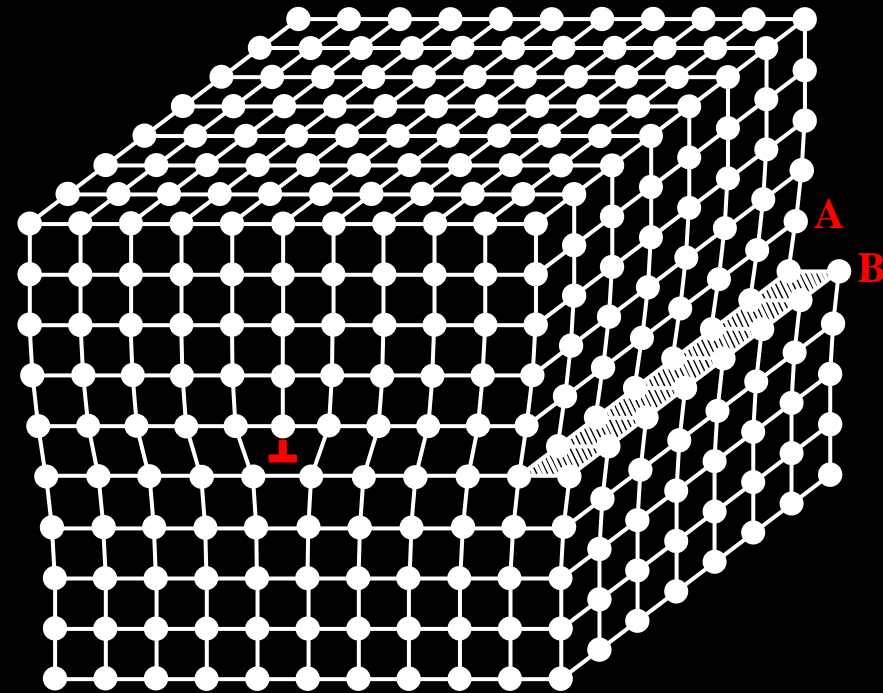
1. 位错的基本类型

位错	{	刃型位错	Edge dislocation
		螺型位错	Screw dislocation
		混合位错	Mixed dislocation

1) 刃型位错



a)



b)

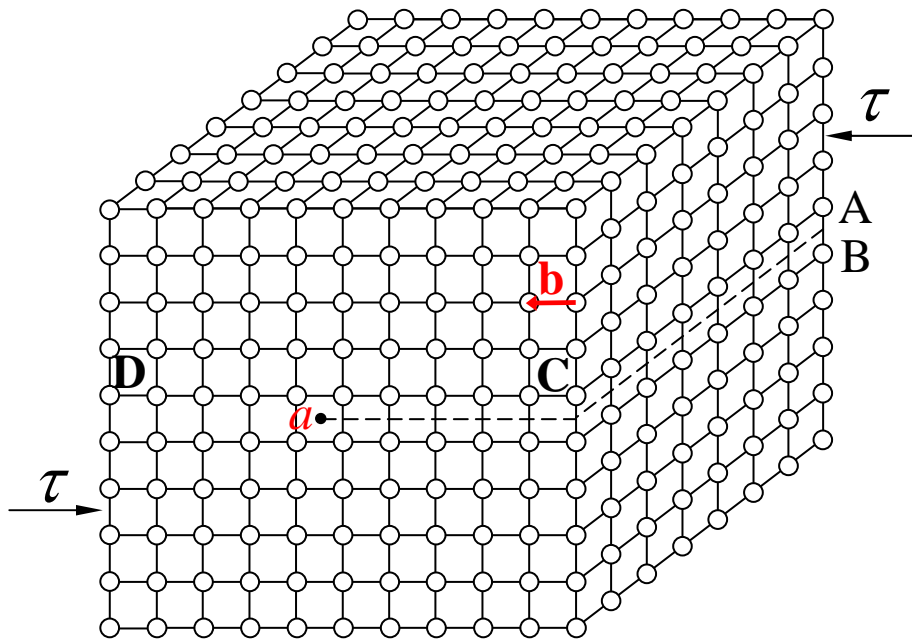
简单立方晶体中的刃型位错模型

a) 理想晶体 b) 刃型位错

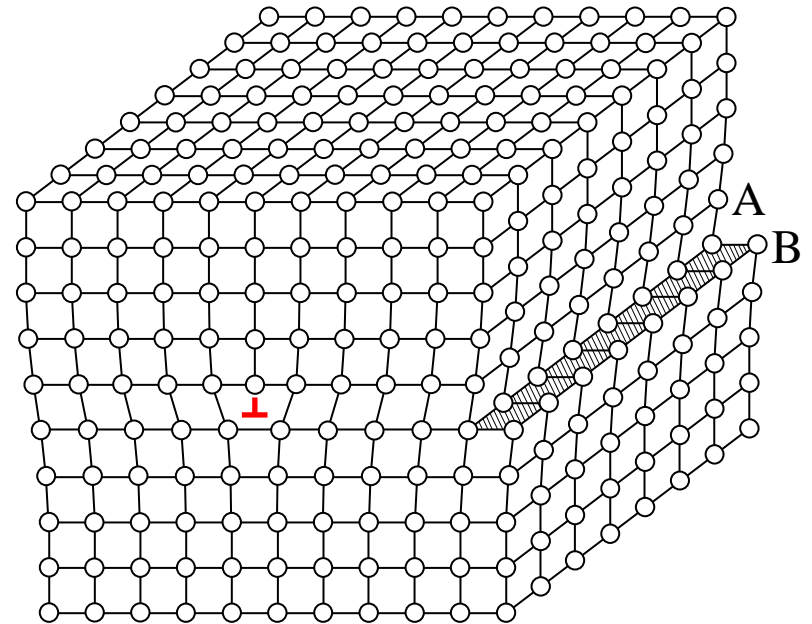
刃型位错 — 晶体中半原子面边缘周围的原子位置错排区

1) 刃型位错

刃型位错 — 晶体中半原子面边缘周围的原子位置错排区

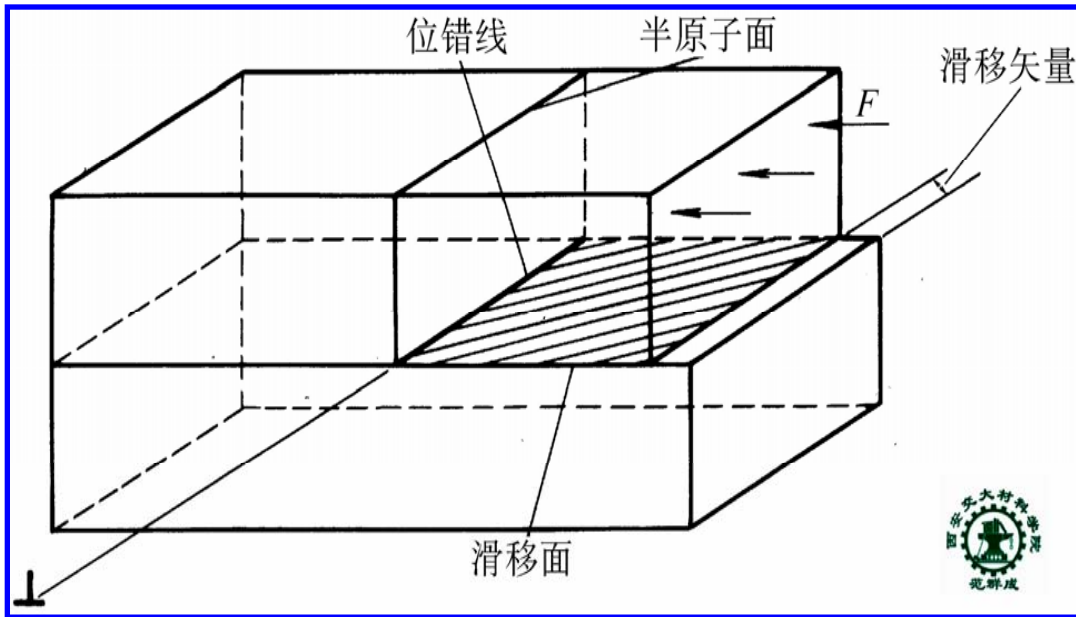


a) 完整晶体

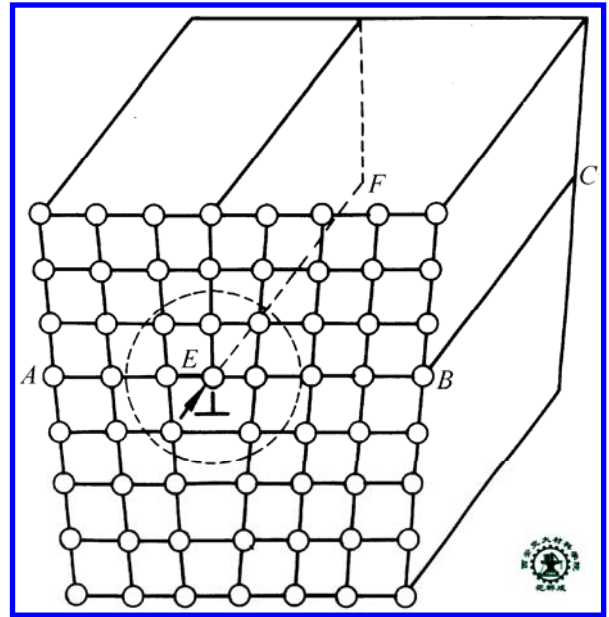


b) 刃型位错

简单立方晶体中的刃型位错模型



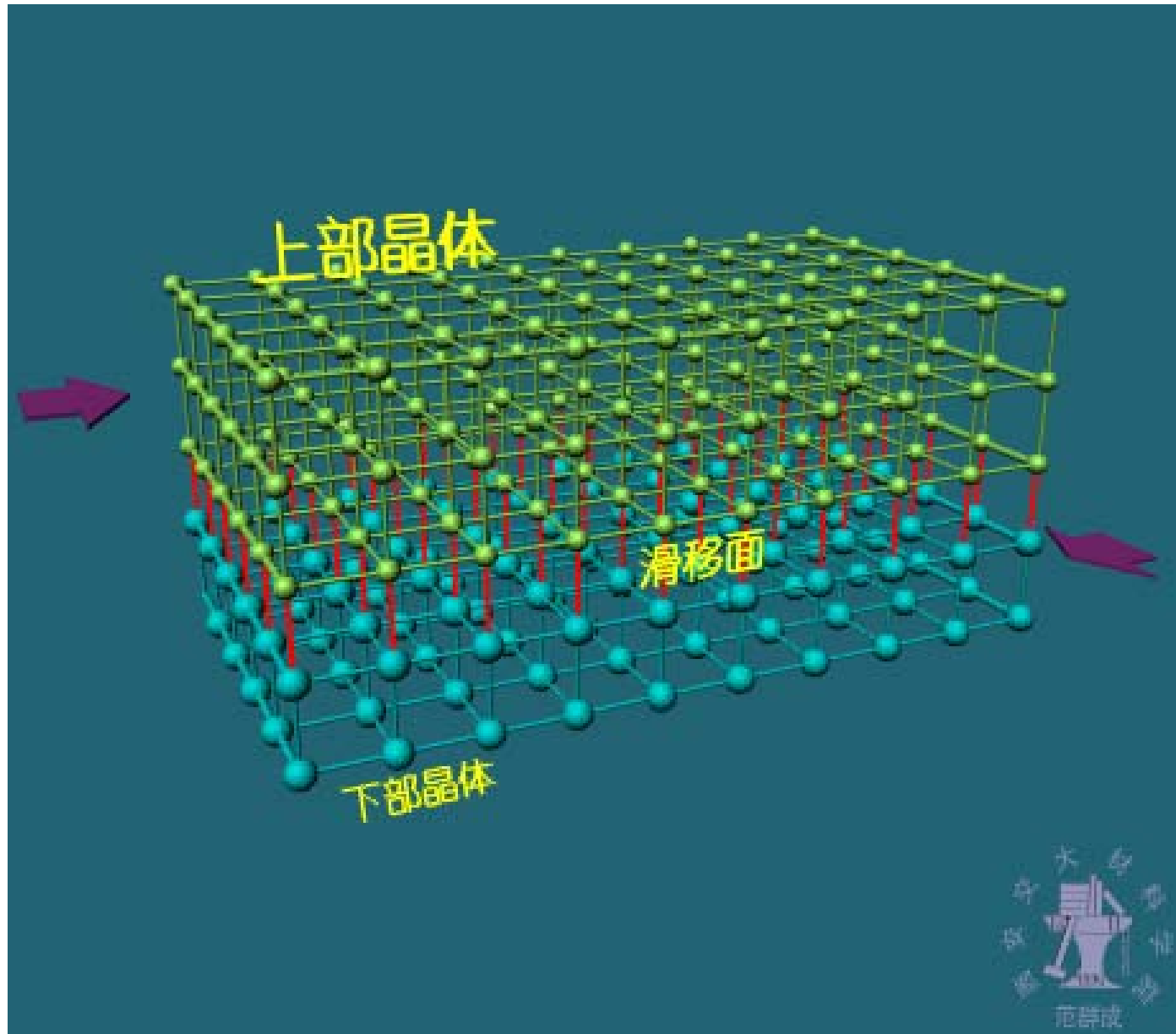
刃型位错的形成



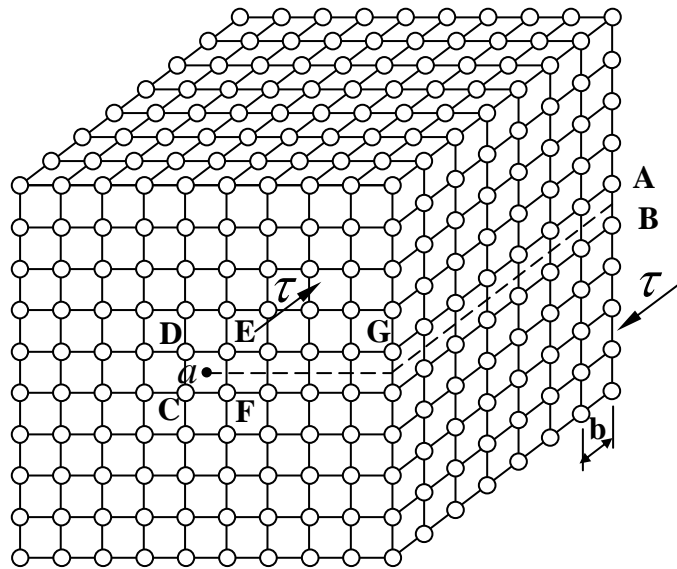
刃型位错原子模型

刃位错的半原子面垂直于晶体的滑移面, 半原子面与滑移面的交线定义为刃型位错线.

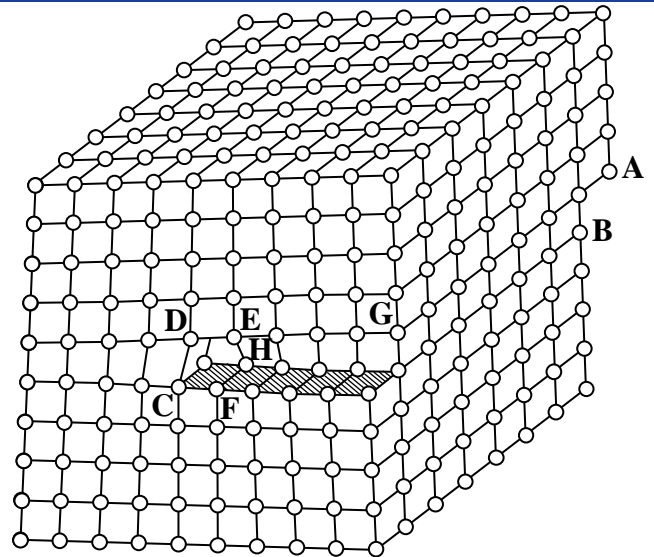
半原子面位于滑移面上方的定义为正刃型位错, 用符号 “**⊥**” 表示; 半原子位于滑移面下方的定义为负刃型位错, 用符号 “**⊥**” 表示



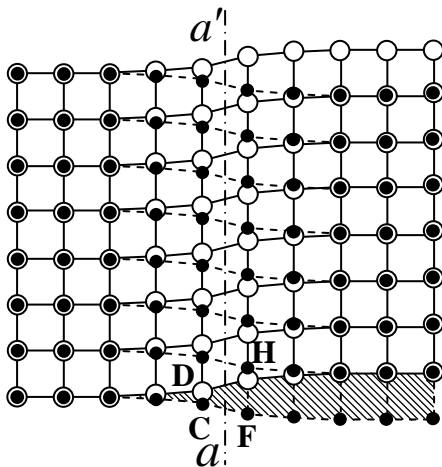
2) 螺型位错



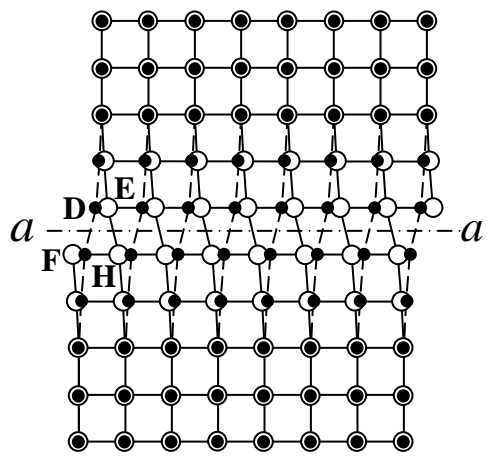
a) 完整晶体



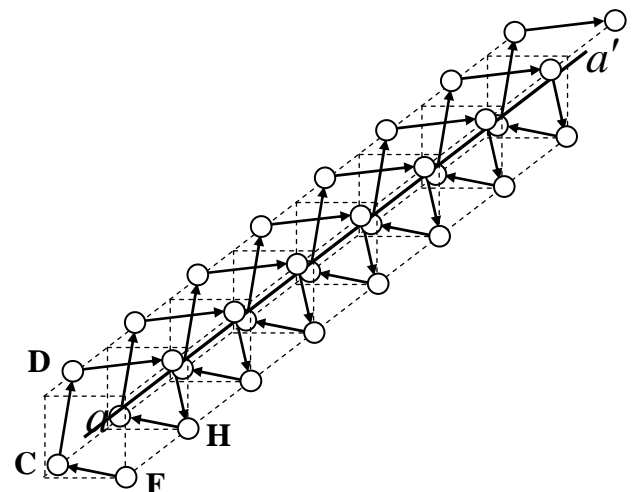
b) 螺型位错



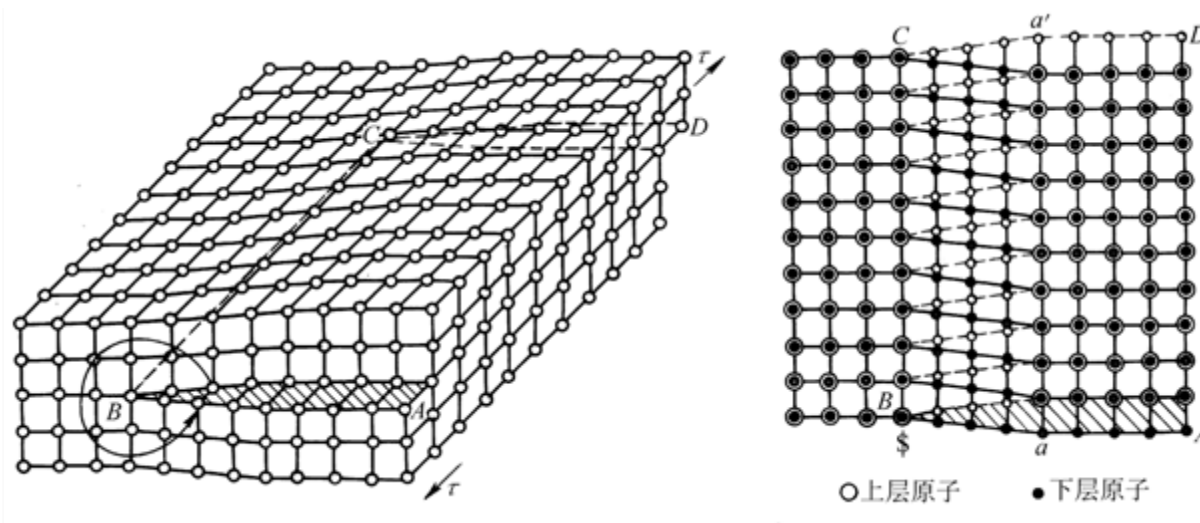
○ 上层原子 • 下层原子
c) 图b中A、B两层原子面的顶视图



○ 上层原子 • 下层原子
d) 图b中CD原子面和FHE原子面的右视图



e) 环绕位错线 aa' 的原子螺旋线



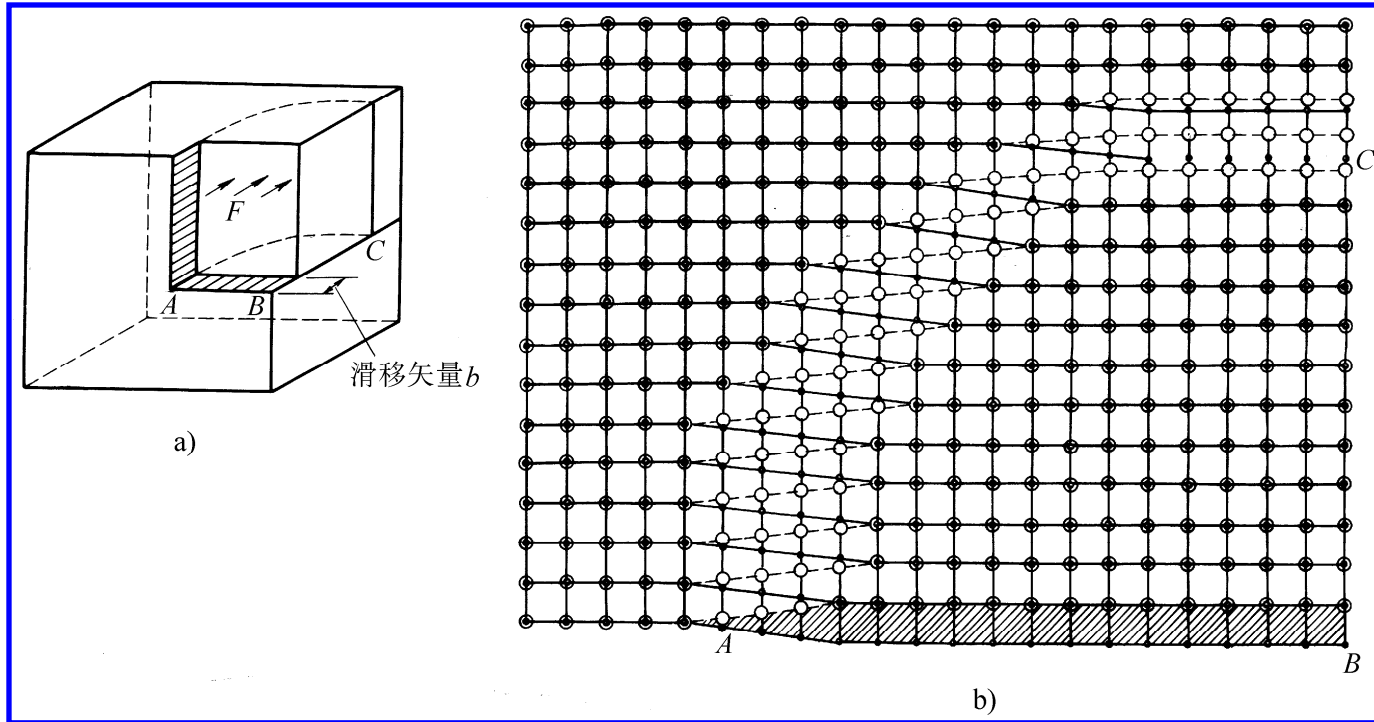
螺型位错 — 晶体中螺旋原子面螺旋轴线周围的原子位置错排区。

螺旋原子面的螺旋轴线定义为螺型位错线。

螺旋原子面绕位错线的旋转方向与其前进方向符合右手法则的定义为右螺型位错，而符合左手法则的定义为左螺型位错。

○ 上层原子 ● 下层原子

c)



混合位错 — 原子位置错排区中既有半原子面也有螺旋原子面的位错.

混合位错中半原子面的边缘线与螺旋原子面的螺旋轴线相重合, 该线定义为混合位错线.

4) 讨论

- (1) 可将位错线看成是晶体中已滑移区与未滑移区的交界线。刃位错线垂直于晶体的滑移矢量，螺位错线平行于晶体的滑移矢量，混合位错线既不垂直也不平行于晶体的滑移矢量
- (2) 刃位错的正、负是相对的，而螺位错的左、右是绝对的
- (3) 混合位错具有刃型分量和螺型分量
- (4) 螺位错线一定是直线，刃位错线不一定是直线
- (5) 位错线不能终止在晶体内部，只能露头于晶体表面或界面处，或在晶体内部形成位错环或与其他位错线相接

2. 位错的柏氏矢量

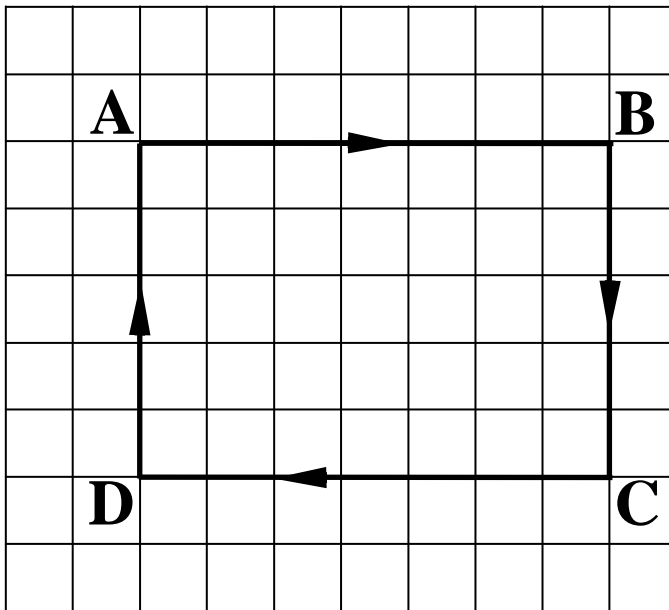
1) 用柏氏回路确定位错的柏氏矢量

在理想晶体中作一闭合回路。

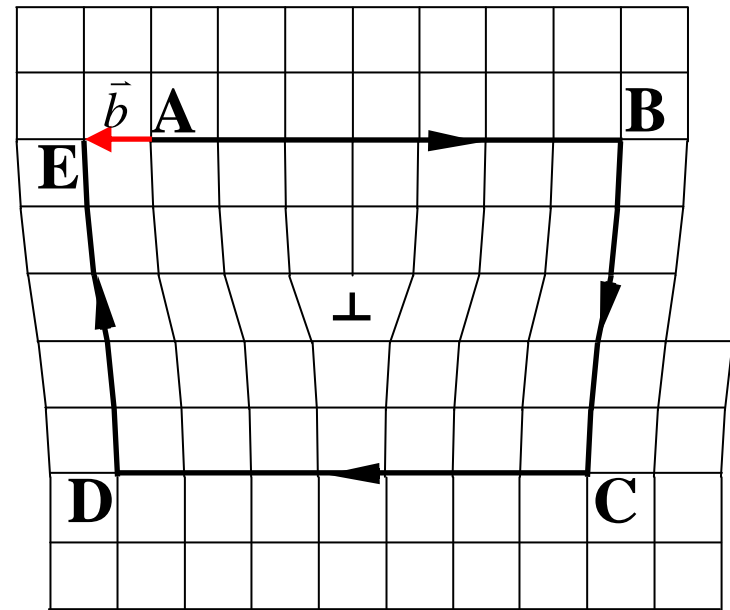
再在有位错的晶体中作一相同回路包围位错线，回路应远离位错中心晶格严重畸变区，位错线的正方向与回路的绕向应符合右手法则（四指代表回路绕向，大拇指代表位错线正方向）。但该回路的终点与起点并不重合。从起点向终点作一矢量使两点相连，该矢量定义为该位错的柏氏矢量。

用柏氏回路确定刃位错的柏氏矢量

刃位错的柏氏矢量垂直于位错线



a)



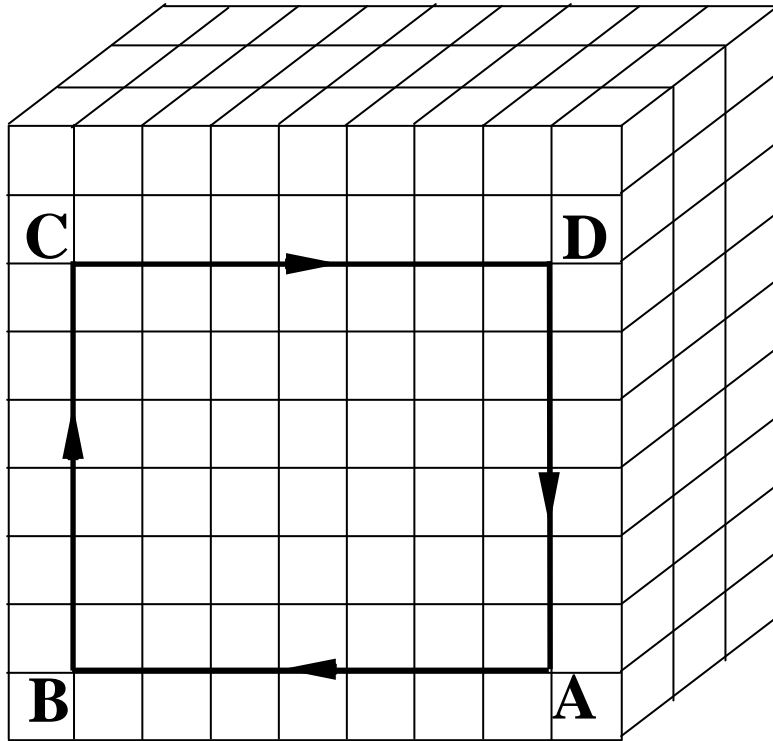
b)

简单立方晶体中刃位错的柏氏回路

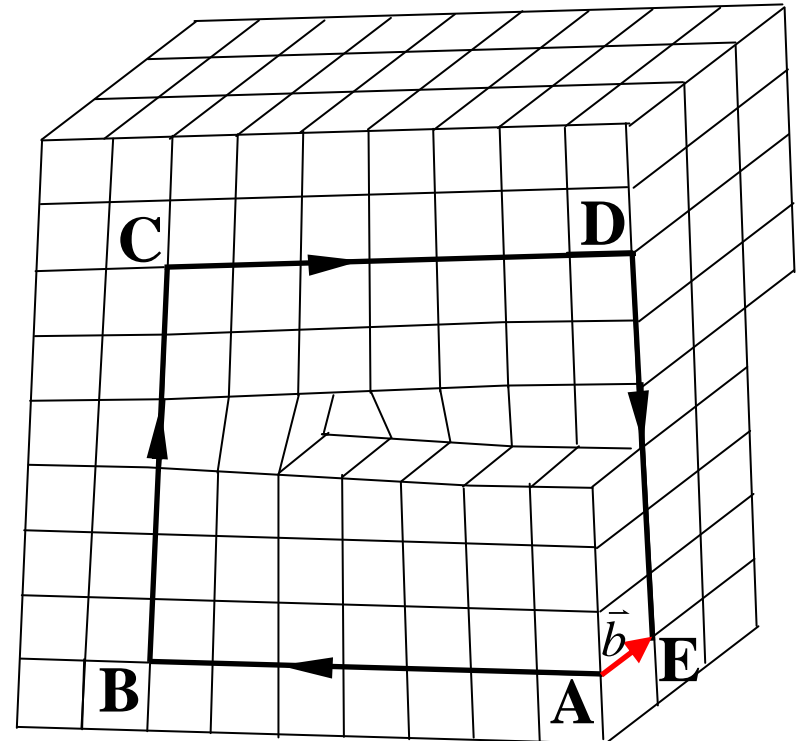
a) 理想晶体中的柏氏回路； b) 环绕位错的柏氏回路

用柏氏回路确定螺位错的柏氏矢量

螺位错的柏氏矢量平行于位错线



a)



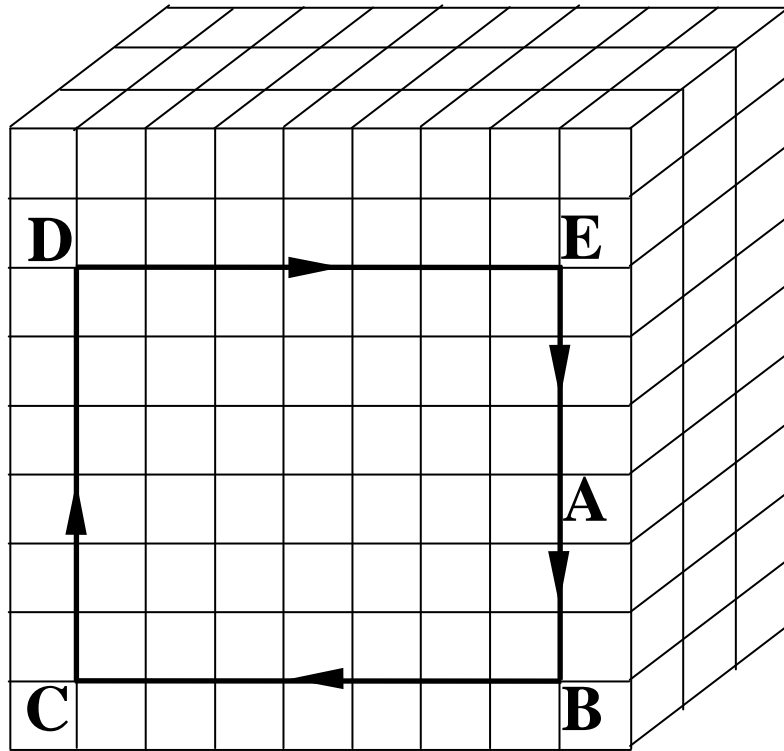
b)

简单立方晶体中螺位错的柏氏回路

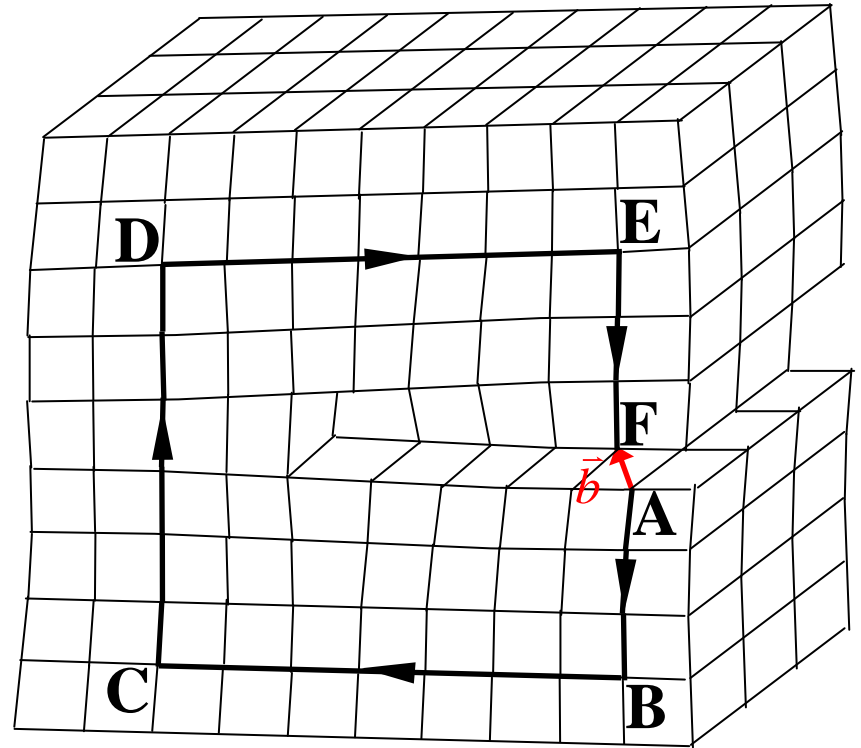
a) 理想晶体中的柏氏回路; b) 环绕位错的柏氏回路

用柏氏回路确定混合位错的柏氏矢量

混合位错的柏氏矢量既不垂直也不平行于位错线



a)

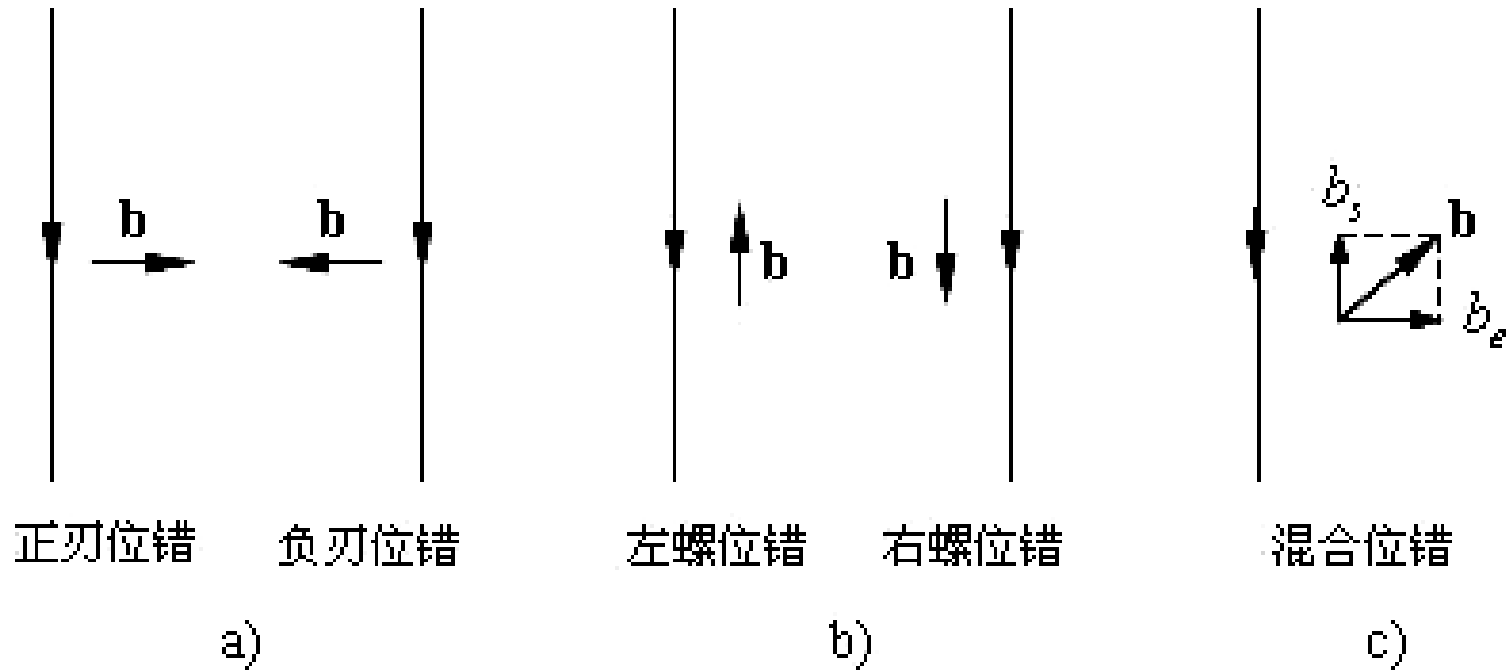


b)

简单立方晶体中混合位错的柏氏回路

a) 理想晶体中的柏氏回路; b) 环绕位错的柏氏回路

2) 柏氏矢量与位错线的关系

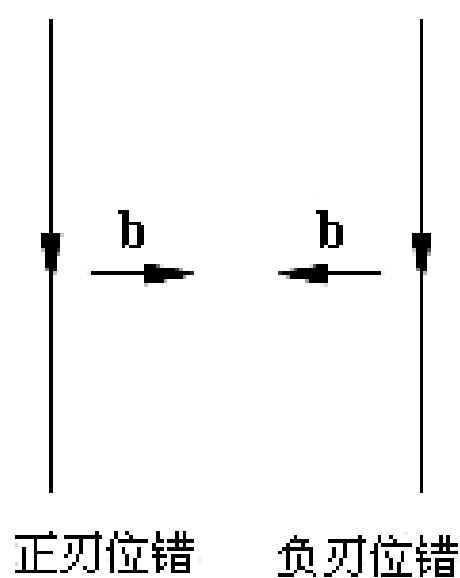


柏氏矢量与位错线的关系

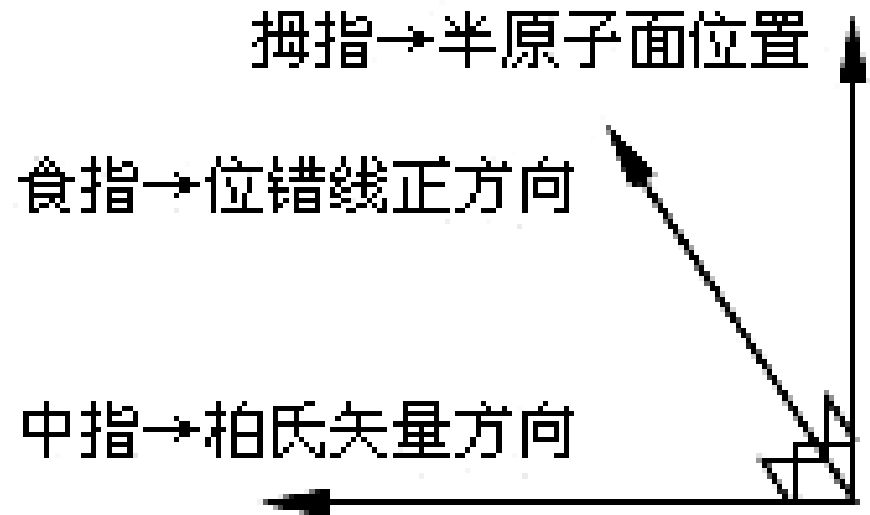
a) 刃型位错 b) 螺型位错 c) 混合型位错

(1) 对于刃位错线

柏氏矢量垂直于位错线，且柏氏矢量的正方向、位错线的正方向、半原子面的位置三者之间符合右手定则



a)



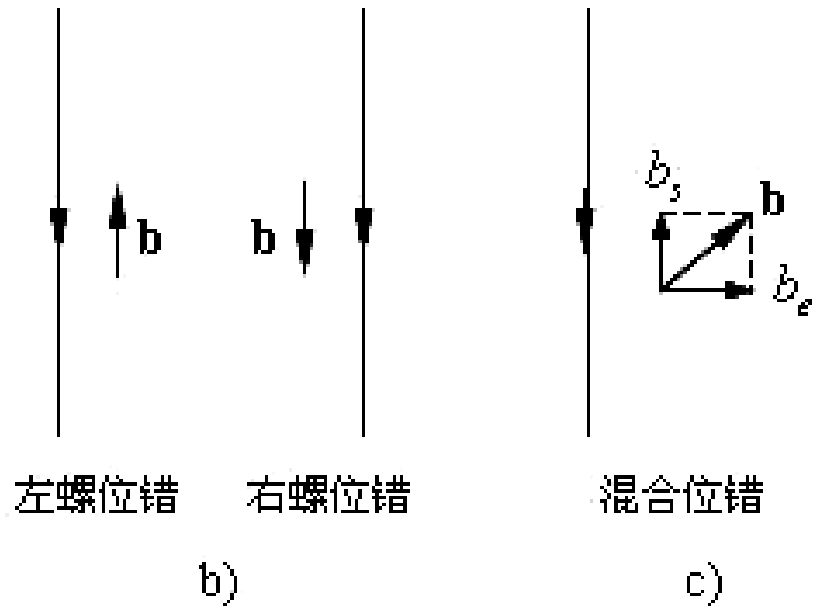
判断刃位错柏氏矢量方向的右手定则

(2) 对于螺位错线

柏氏矢量平行于位错线，且左相反、右相同

(3) 对于混合位错线

柏氏矢量既不垂直也不平行于位错线，但可分解成平行于位错线的螺分量，和垂直于位错线的刃分量

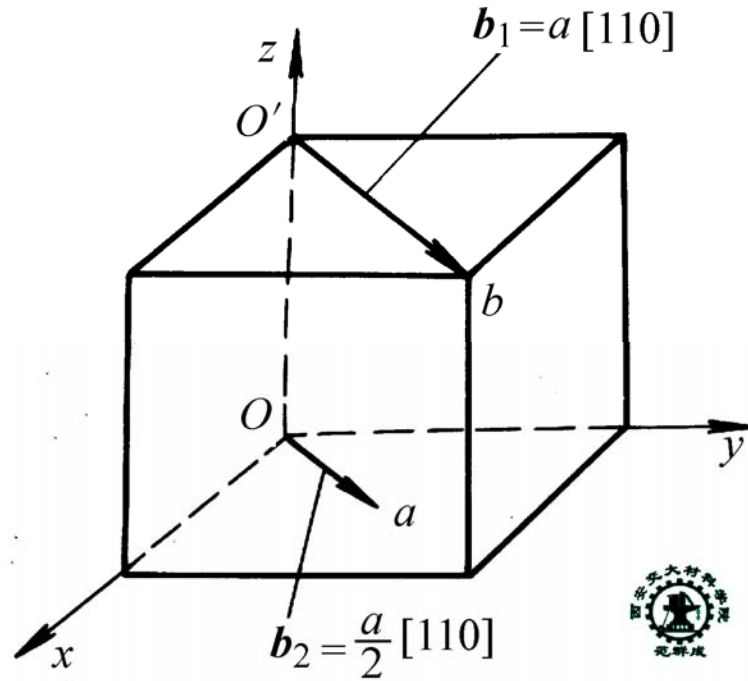


3) 柏氏矢量的定义

位错的柏氏矢量 — 表征位错所引起的错排原子间相对位移的方向及环绕位错线一周的位移总量大小的特征参量。

4) 柏氏矢量的表示方法

柏氏矢量的表示方法与晶向指数相似，但晶向指数只需表示出其方向，而柏氏矢量既要表示其方向还要表示其大小。



例如，图中所示立方晶系中的 Oa 和 $O'b$ 作为晶向： Oa 和 $O'b$ 的指数都是 $[110]$

作为柏氏矢量： $\vec{b}_1 = \vec{O'b} = a[110] \quad |\vec{b}_1| = \sqrt{2}a$
 $\vec{b}_2 = \vec{Oa} = \frac{a}{2}[110] \quad |\vec{b}_2| = \frac{\sqrt{2}a}{2}$

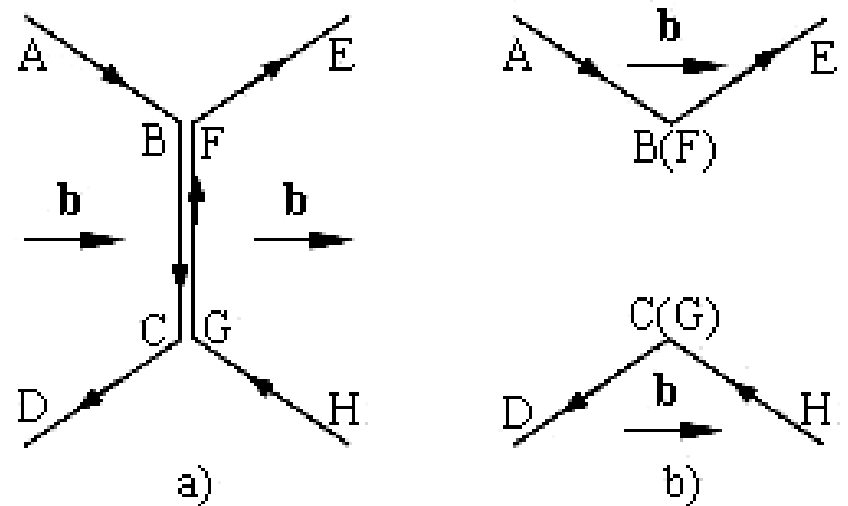
5) 柏氏矢量的特性

(1) 柏氏矢量的唯一性

一根位错线只能有一个惟一不变的柏氏矢量。

(2) 柏氏矢量的加和性

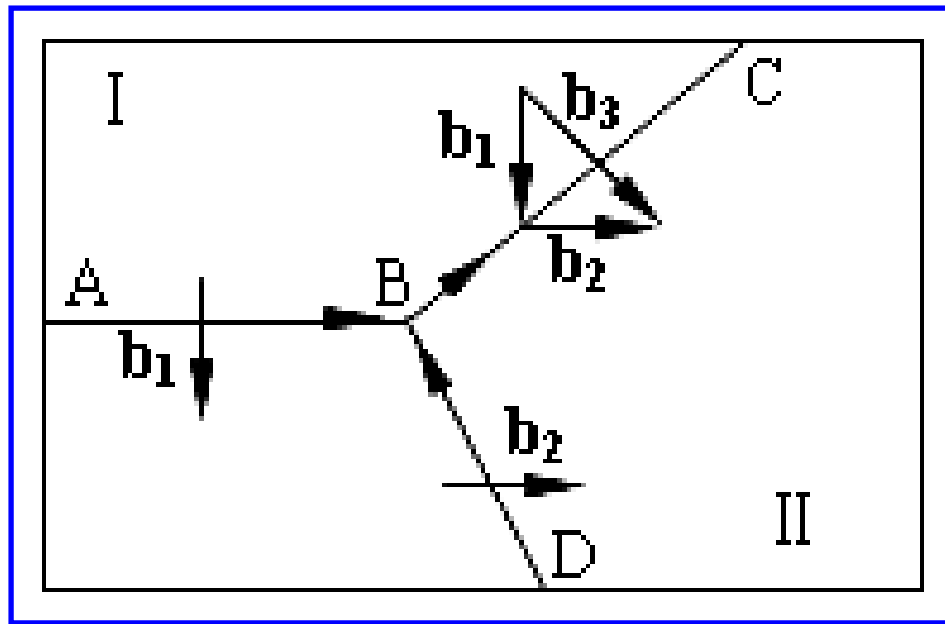
由几根位错线合并成一根位错线的柏氏矢量是这几个位错线的柏氏矢量之和



位错柏氏矢量的加和
a) 加和前; b) 加和后

(3) 柏氏矢量的守恒性

汇聚于一点的几根位错线，流入节点的位错的柏氏矢量之和等于流出节点的位错的柏氏矢量之和。



位错柏氏矢量的守恒性

6) 讨论

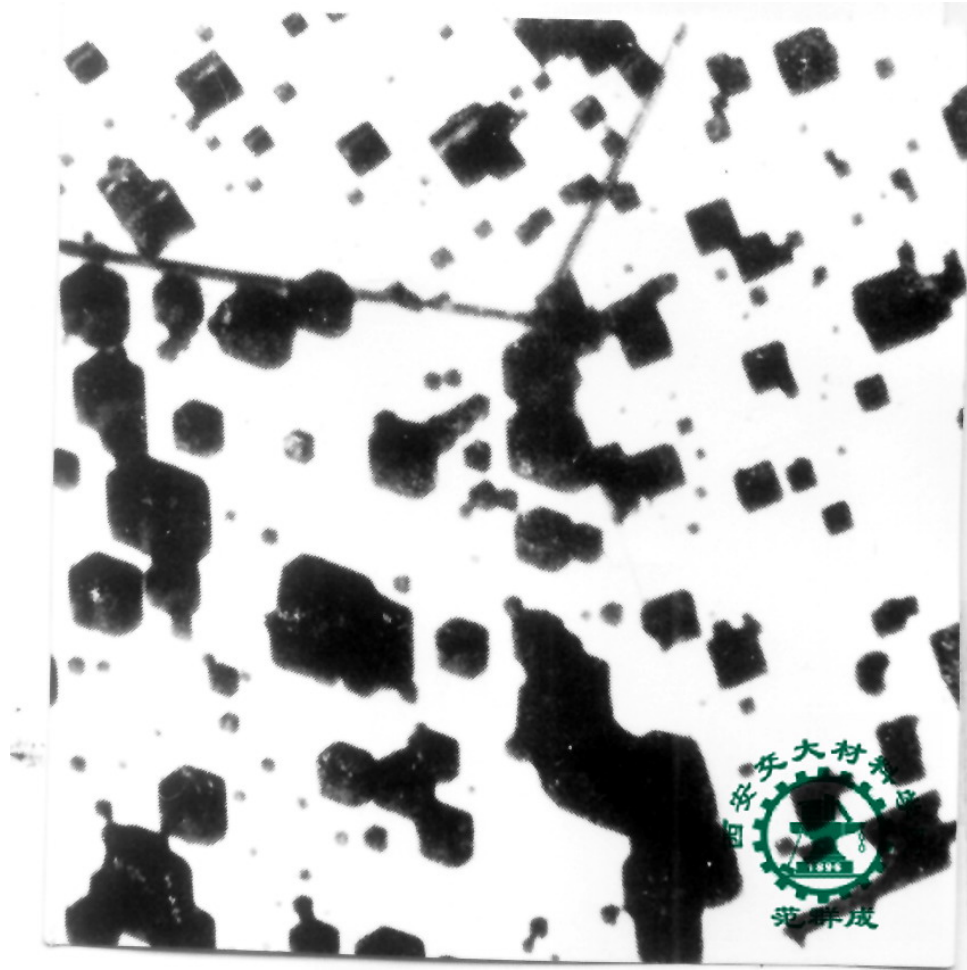
(1) 柏氏矢量的正方向依赖于位错线的正方向

(2) 柏氏矢量是晶体的滑移矢量。

一方面，晶体局部滑移的滑移矢量就是所产生的位错的柏氏矢量；另一方面，位错的运动会使位错线扫过区域两侧的晶体产生相对滑动，相对滑动的方向及大小与位错的柏氏矢量相同。

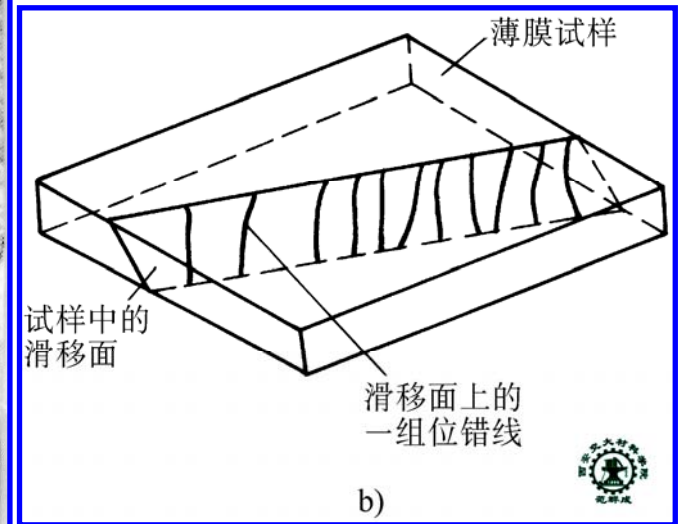
3. 位错的实验观察

1) 蚀坑法



位错的腐蚀坑 (1000 \times)

2) 透射电镜法



用电子显微镜观察位错 a) 电镜下观察的位错组态图
(30000 \times) b) 该组位错在三维试样中的分布

4. 位错的密度

- 1) 位错的面密度 — 穿过晶体单位截面的位错线的总根数

$$\rho_A = \frac{n}{A}$$

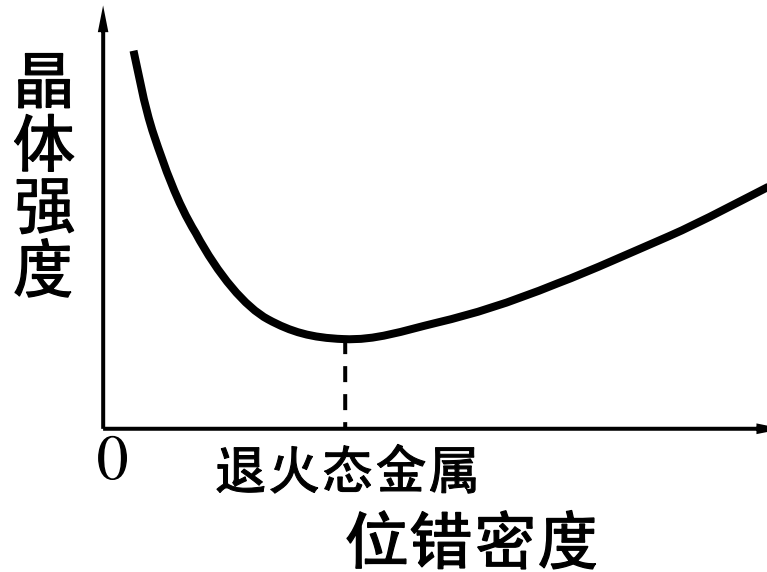
式中, A 为截面积; n 为穿过面积 A 的位错线根数

- 2) 位错的体密度 — 单位体积晶体中所含位错线的总长度

$$\rho_V = \frac{L}{V}$$

式中, V 为晶体体积; L 为 V 中所含位错线总长度

3) 位错密度与晶体强度



晶体强度与位错密度关系示意图

对于退火态金属, $\rho_A \approx 10^7 / cm^2$

理想晶体具有理论强度

晶须具有极高强度

工程中通常用增加位错密度提高金属强度

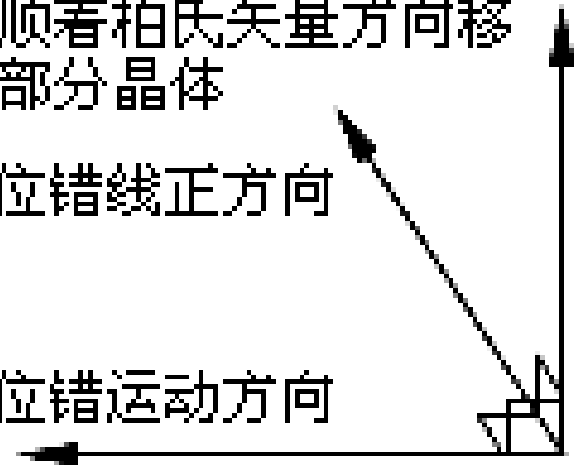
三、位错的运动

位错运动 { 滑移运动
攀移运动

拇指→顺着柏氏矢量方向移动的那部分晶体

食指→位错线正方向

中指→位错运动方向



判断位错线运动方向的右手法则

1. 位错运动的方向

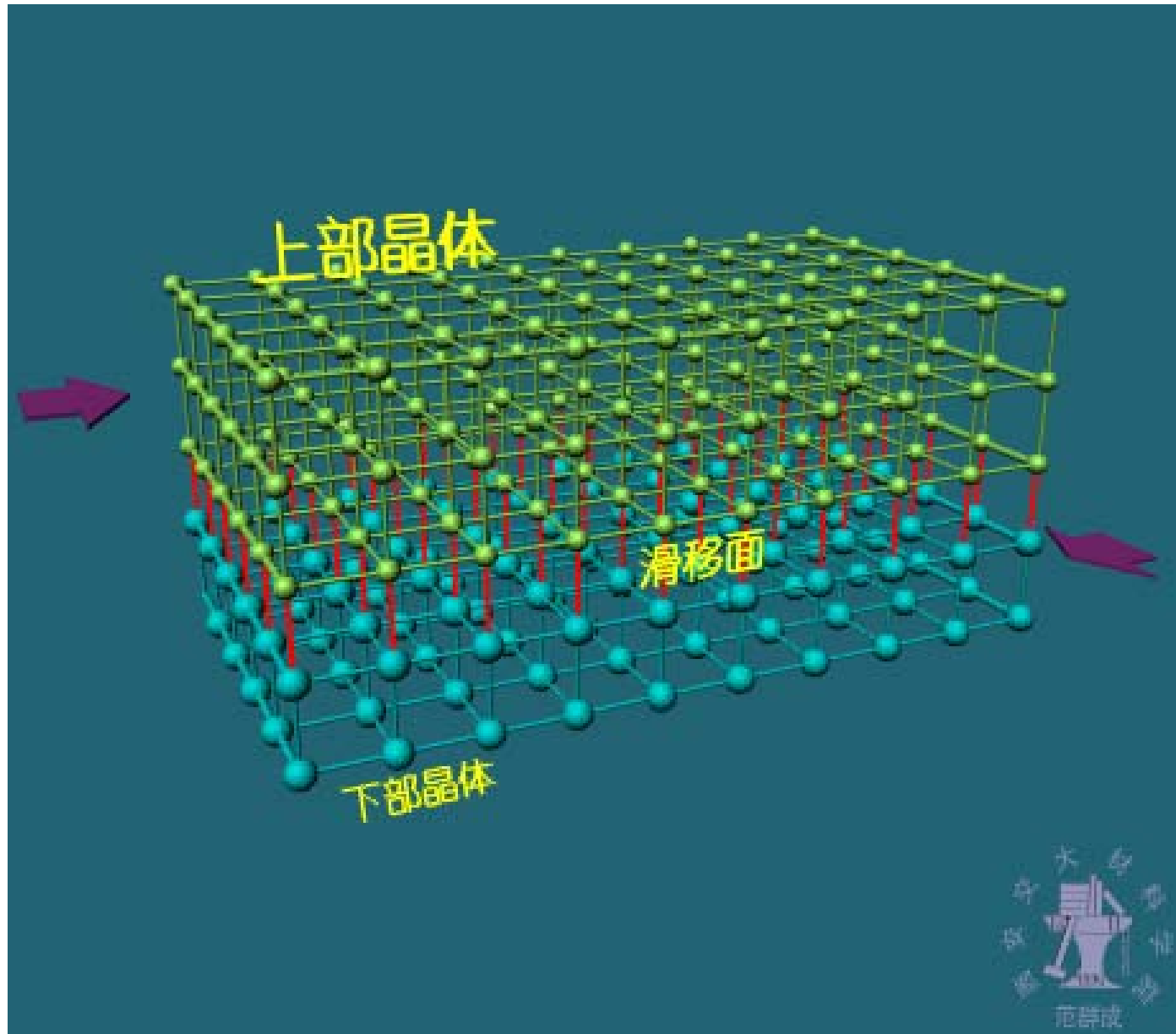
无论位错做何种运动，其运动方向都垂直于位错线。在一定应力作用下，顺着位错柏氏矢量移动的那部分晶体（用拇指代表）、位错线的正方向（用食指代表）、位错线的运动方向（用中指代表）三者之间符合右手法则。

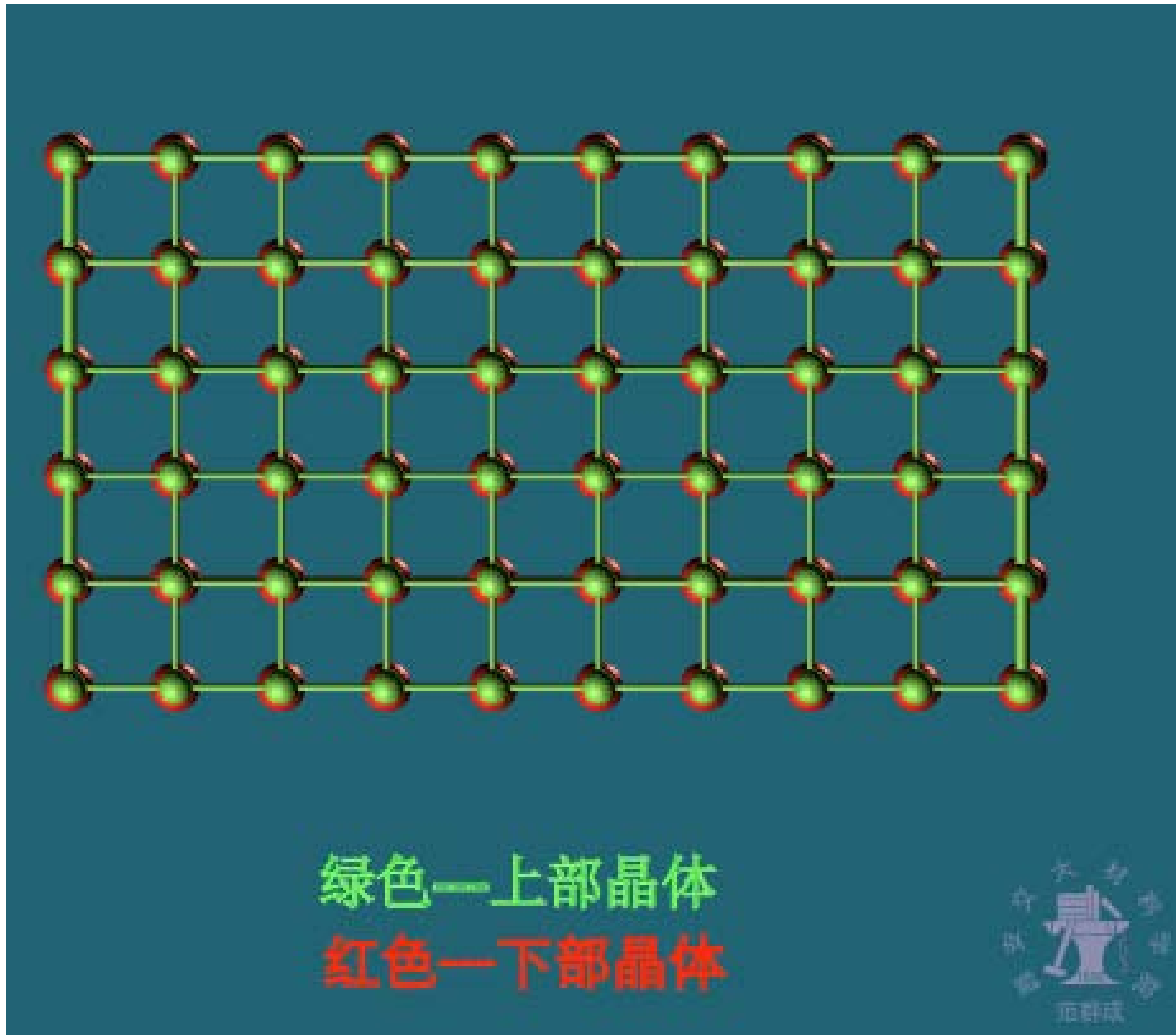
2. 位错的滑移运动

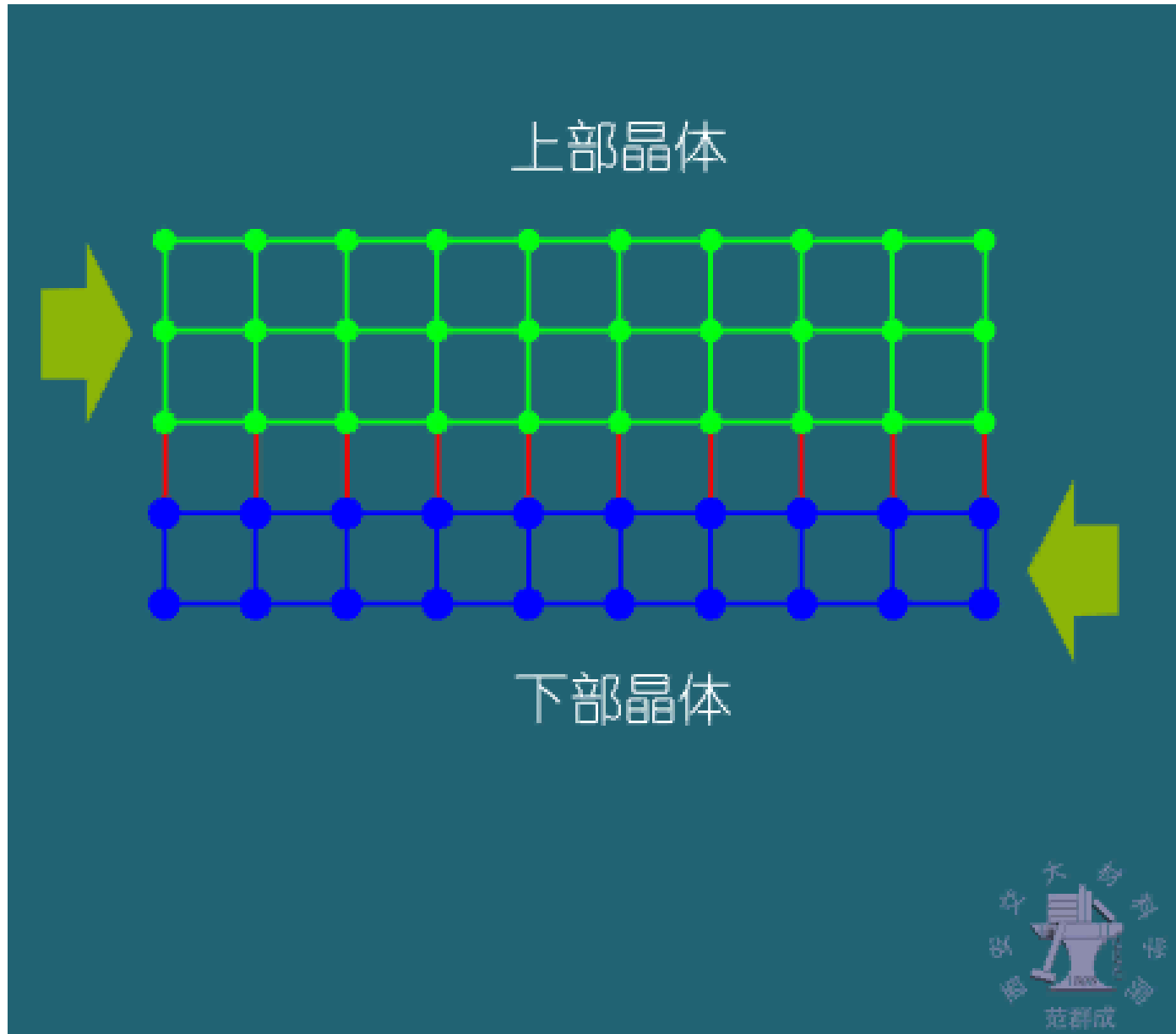
位错的滑移 — 位错线在其滑移面内的运动

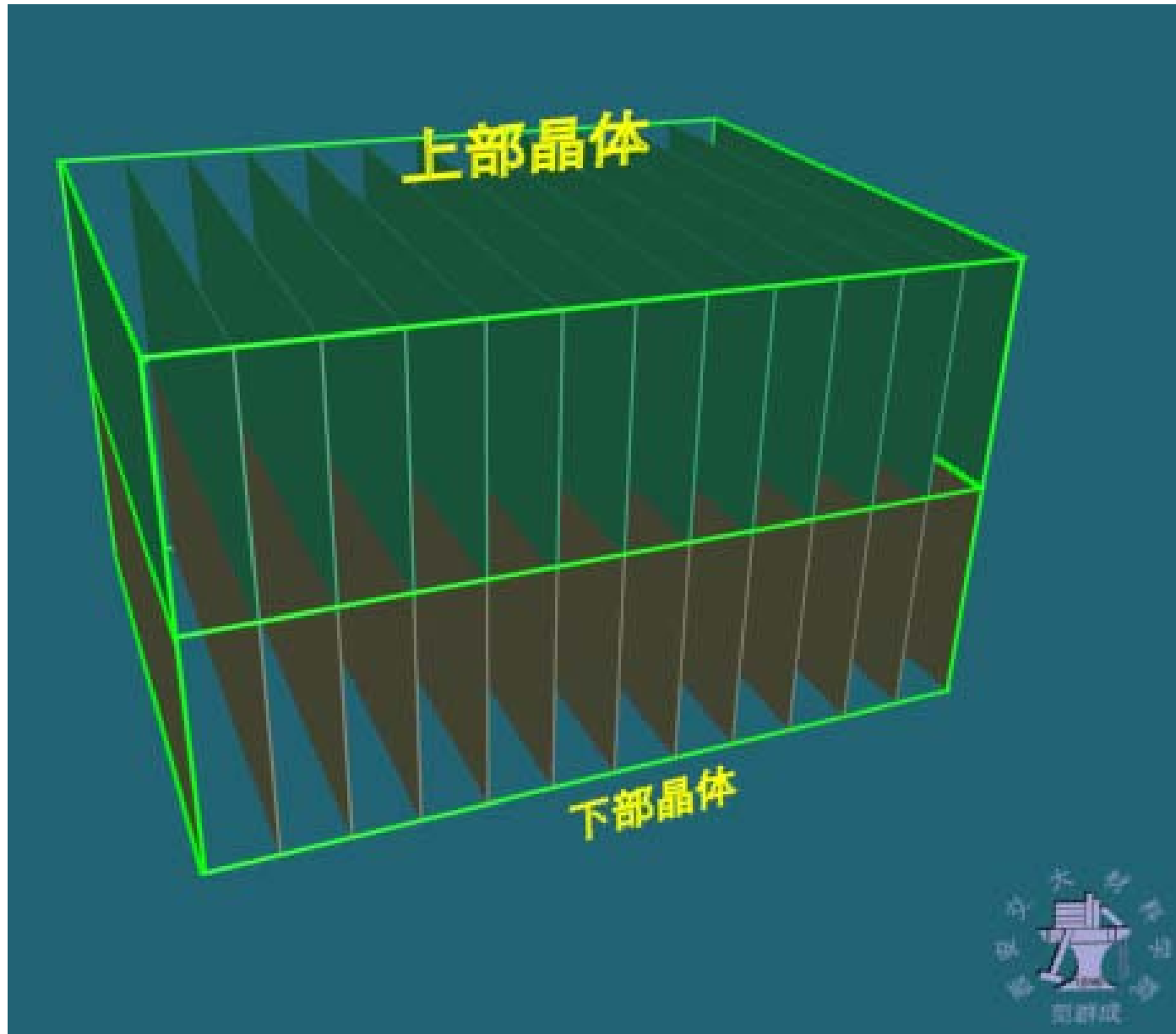
位错的滑移面 — 由位错线及其柏氏矢量所确定的平面或曲面

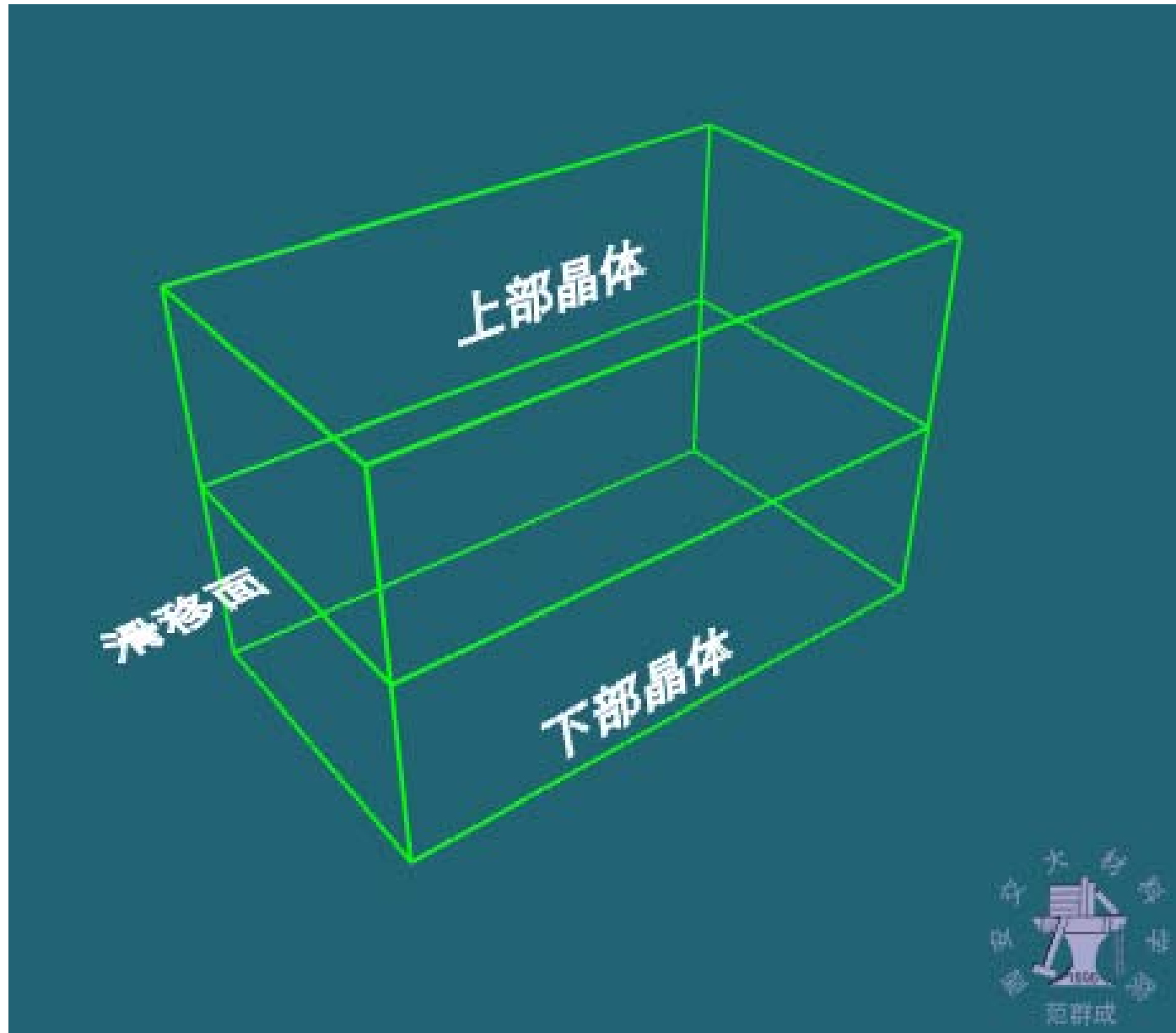
1) 刃位错的滑移



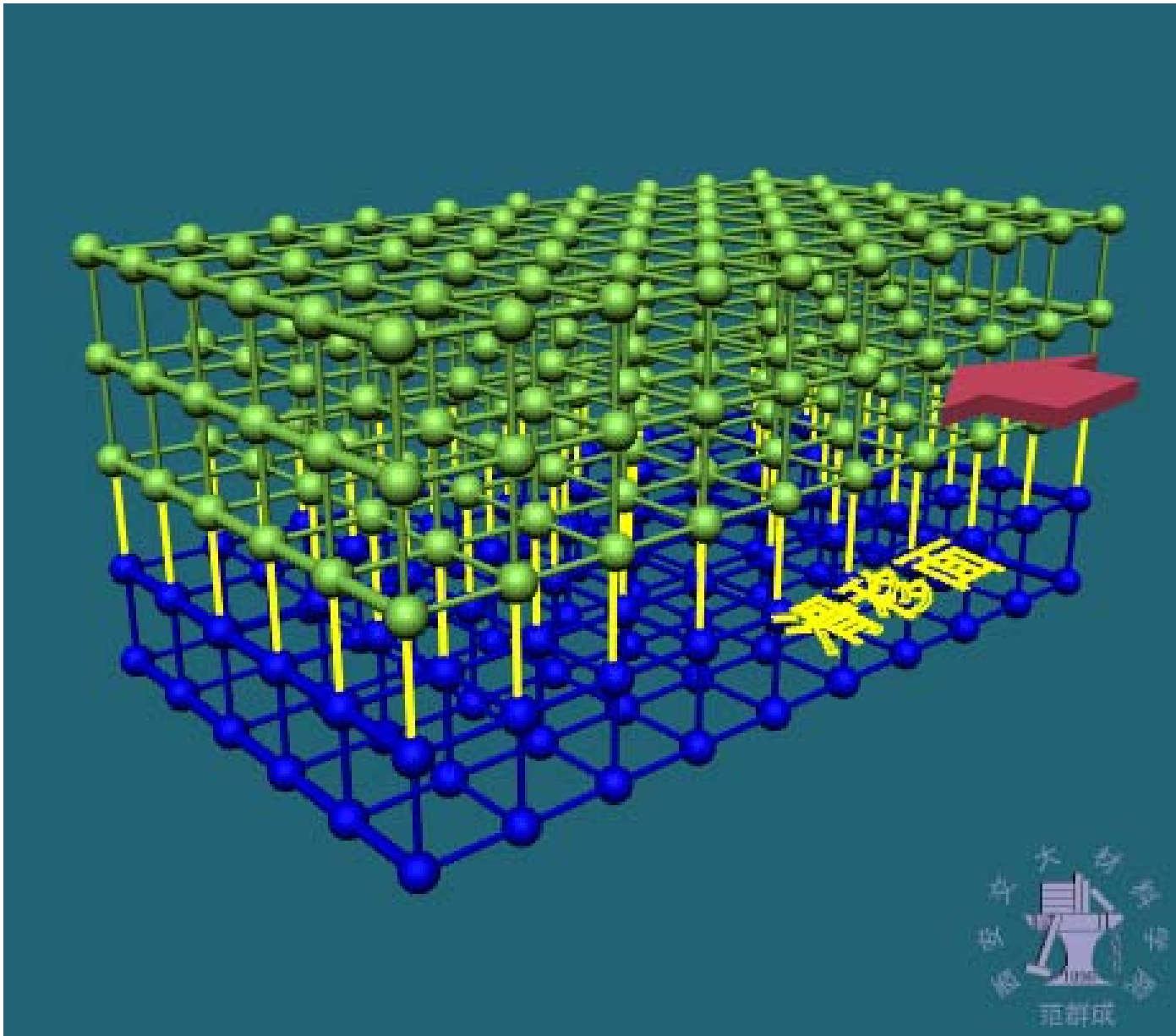




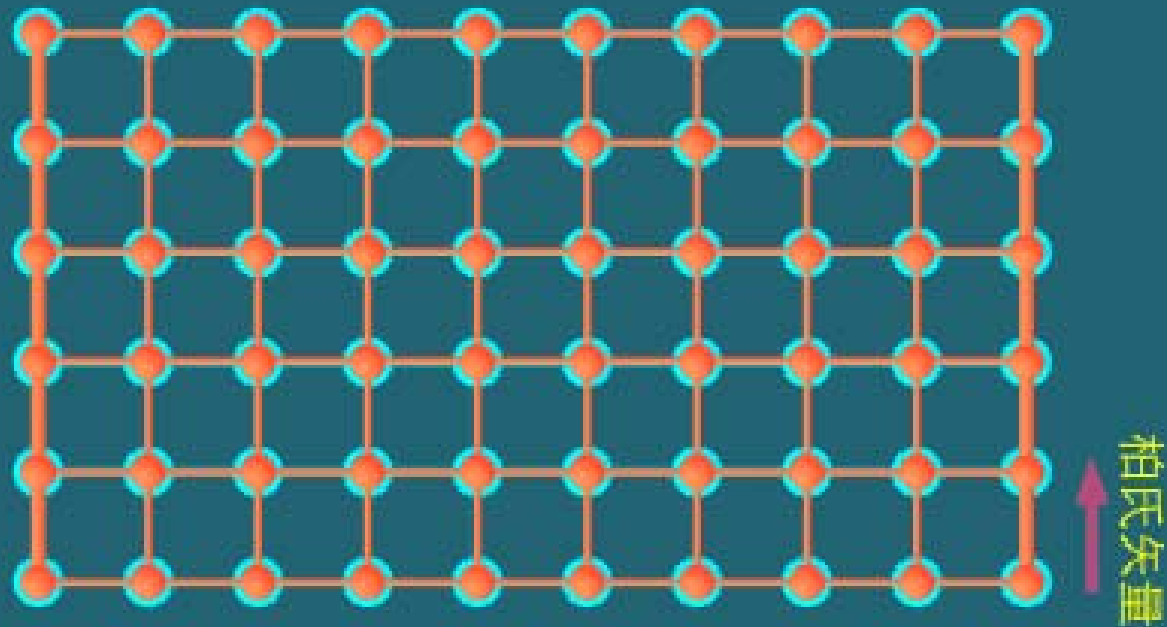


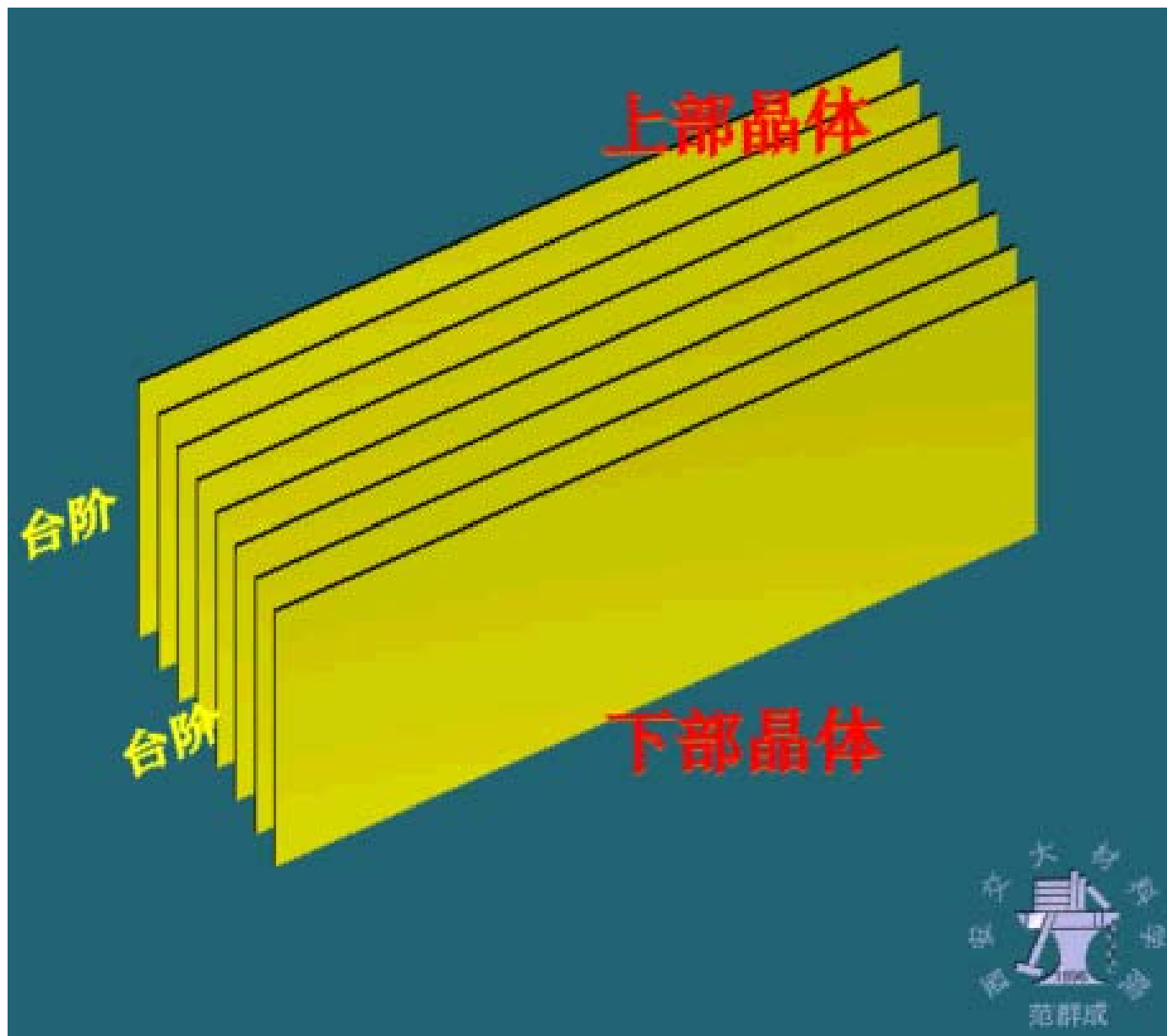


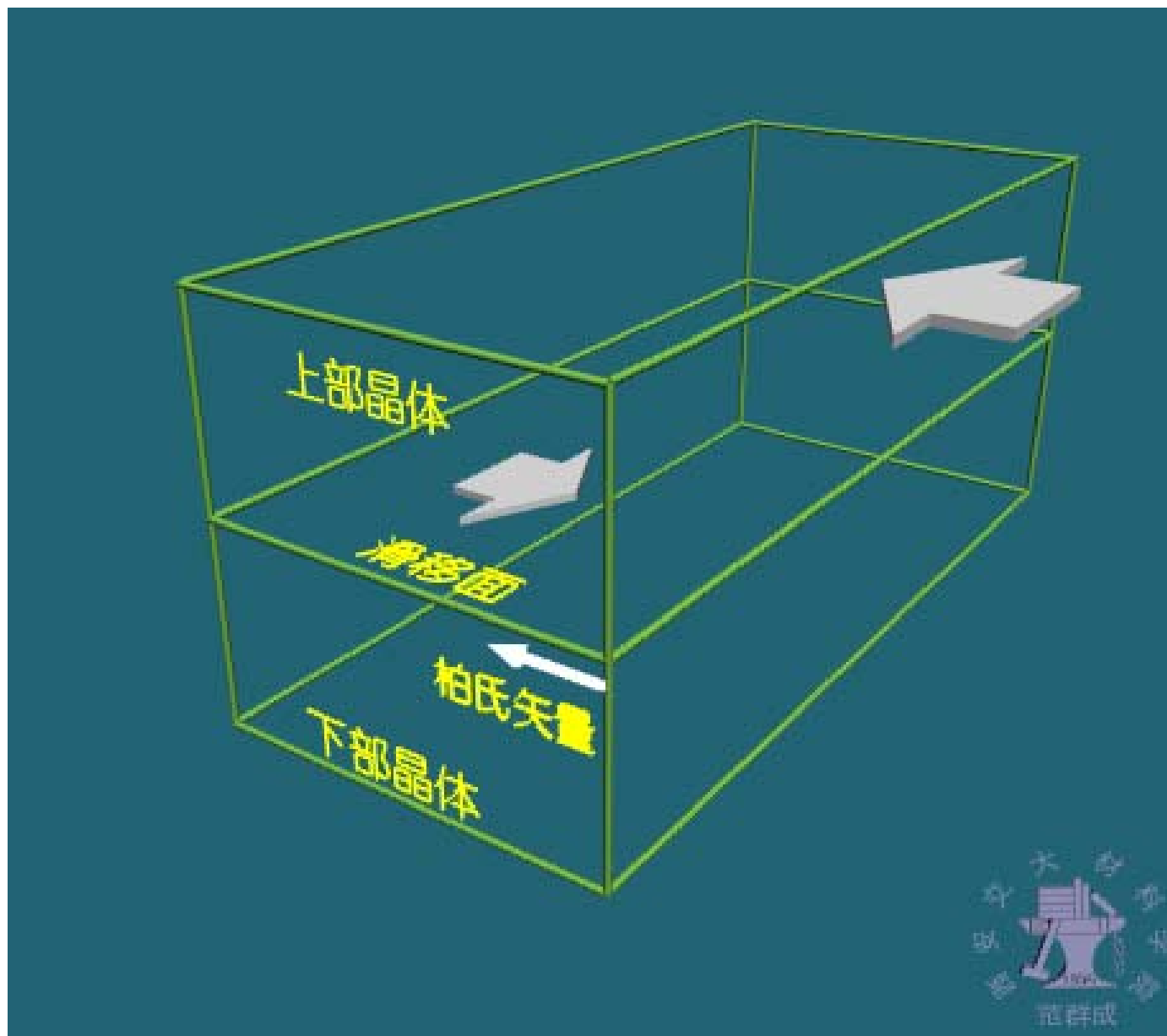
2) 螺位错的滑移



红色--上层原子
蓝色--下层原子

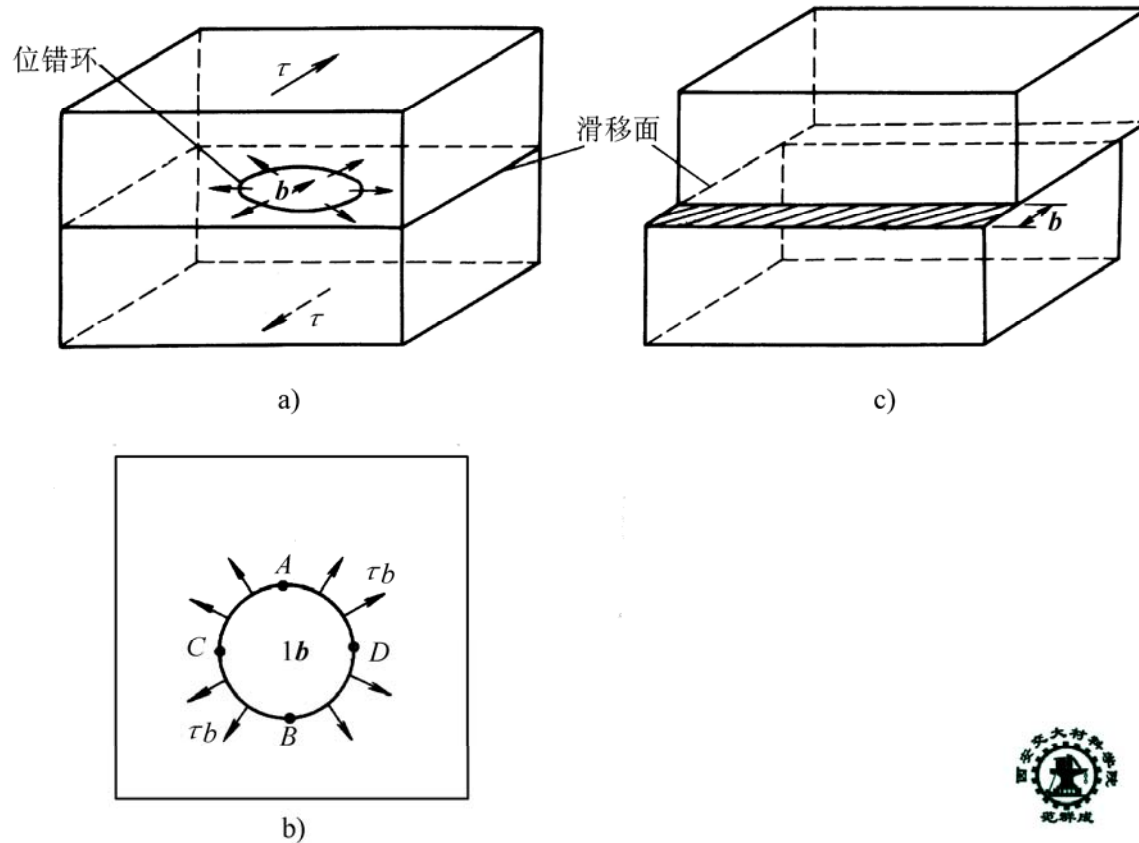






3) 位错环的滑移

当切应力的作用面与位错环的滑移面平行且切应力方向与位错柏氏矢量平行时，位错环在其滑移面内扩大或缩小。

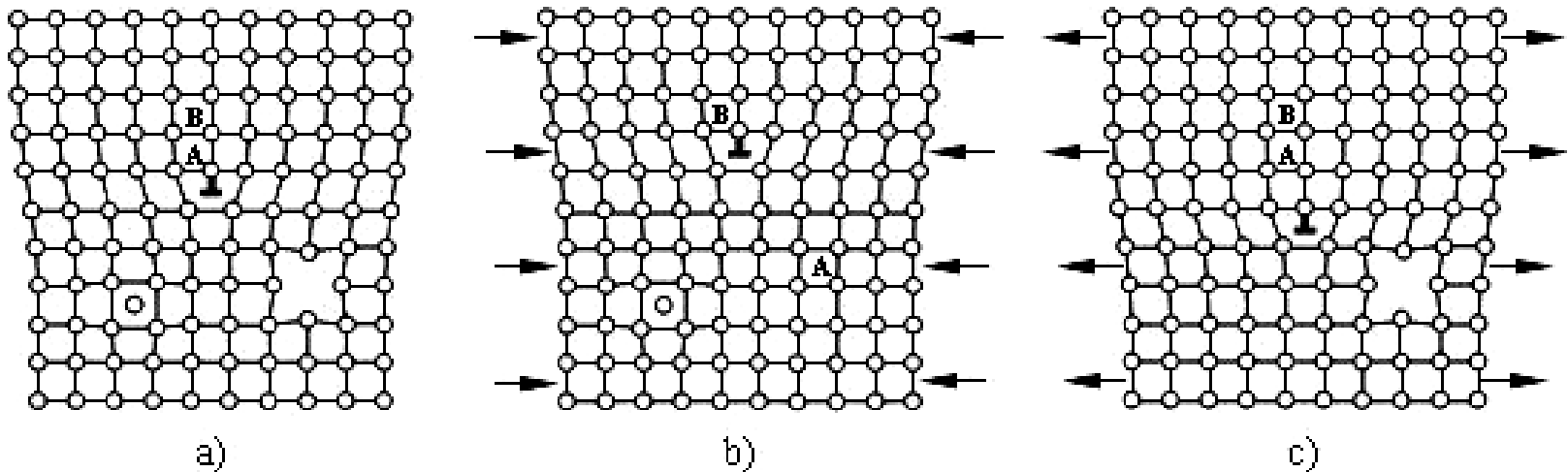


4) 讨论

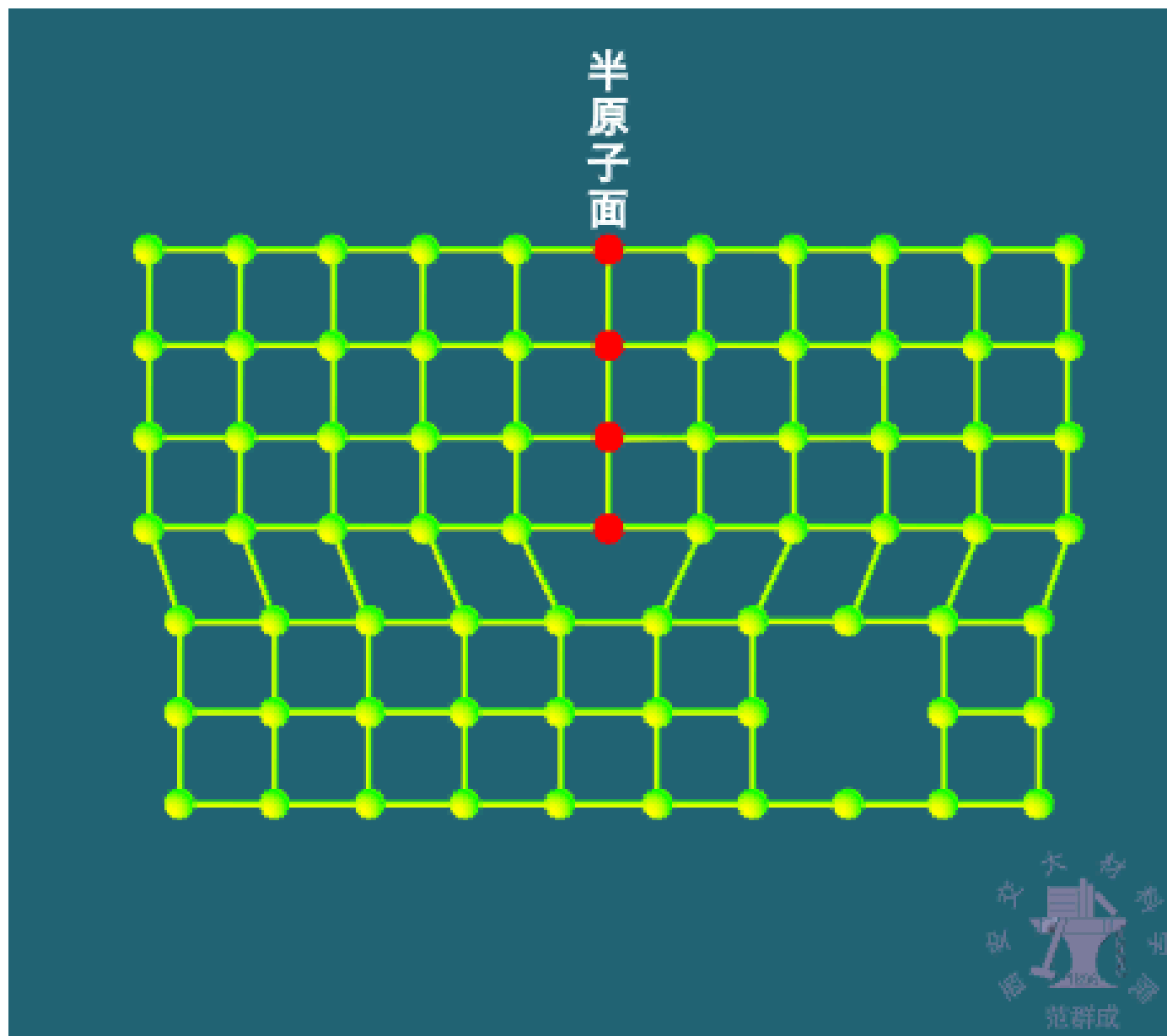
- (1) 位错滑移是在切应力作用下进行的，起作用的是既平行于滑移面又平行于位错柏氏矢量的切应力分量
- (2) 刃位错只有一个滑移面，螺位错有多个滑移面
- (3) 位错线滑移过的区域，其两侧的晶体发生与位错柏氏矢量相同的相对位移
- (4) 位错线滑移出晶体，晶体表面产生一个与位错柏氏矢量相同的台阶
- (5) 位错滑移是保守运动：只改变晶体形状，不改变晶体体积

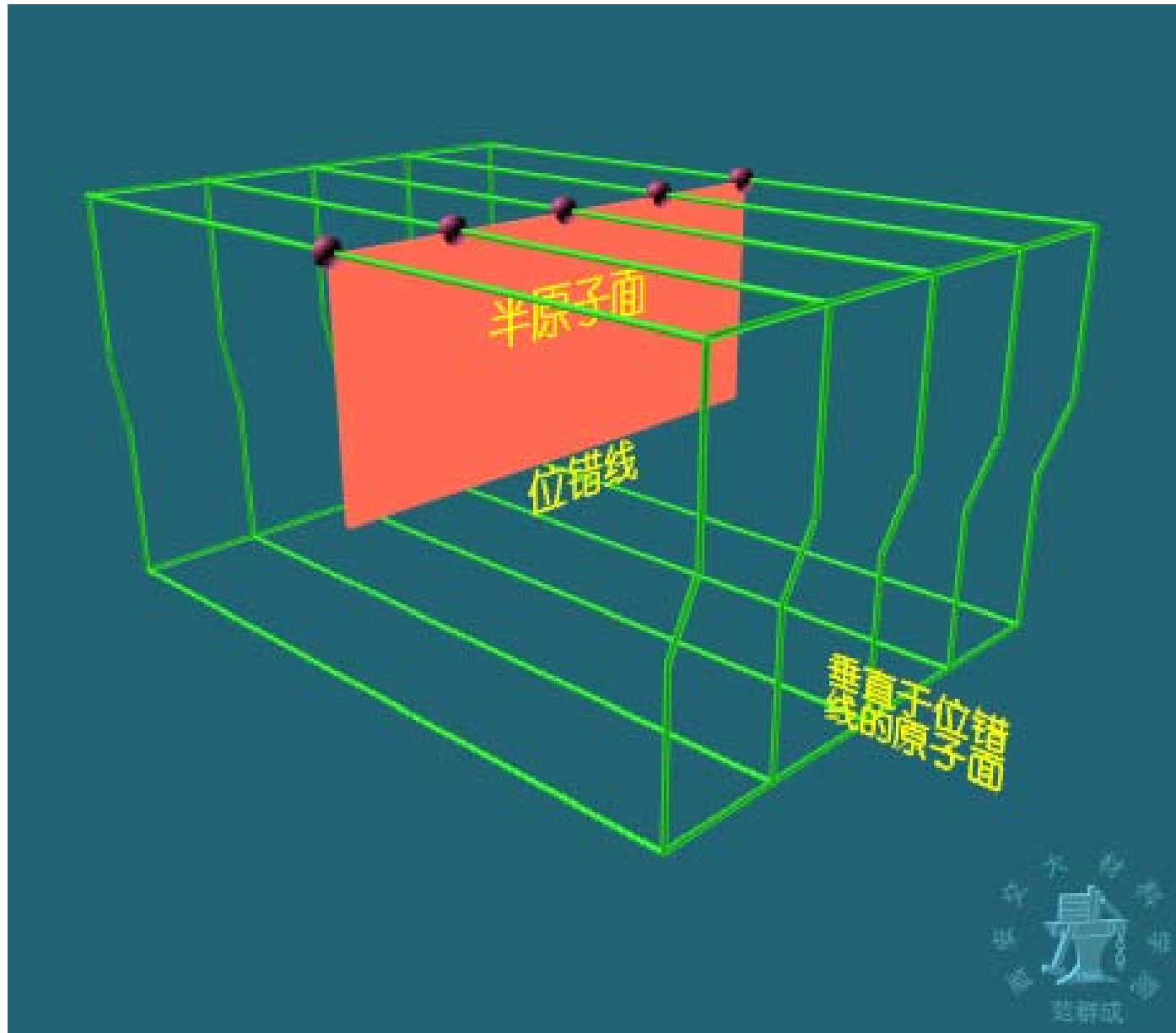
3. 刃位错的攀移

刃位错的攀移 — 刃位错线在垂直于其滑移面内的运动，实际上是半原子面的扩大或缩小。使半原子面缩小的攀移称为**正攀移**；使半原子面扩大的攀移称为**负攀移**。



刃位错的攀移 a) 攀移前； b) 正攀移； c) 负攀移





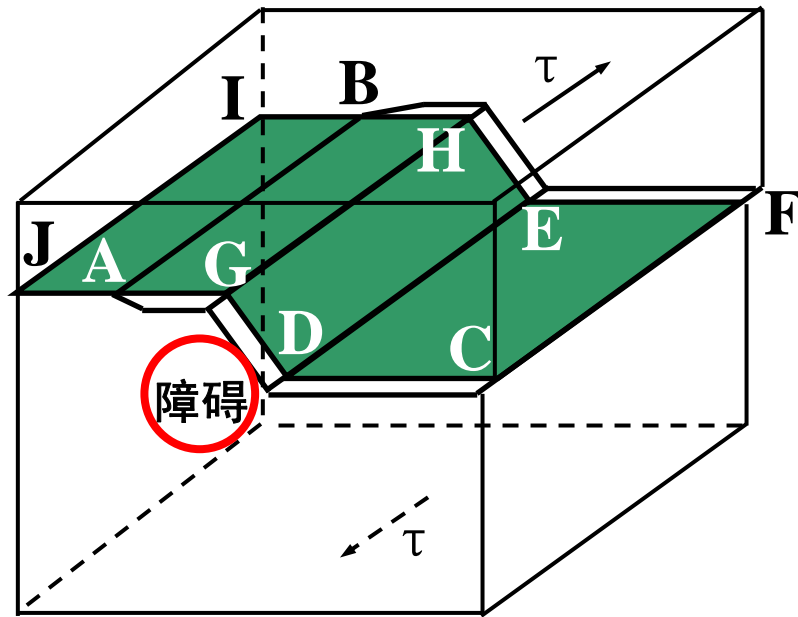
讨论

- 1) 位错攀移是在正应力作用下进行的，起作用的是垂直于半原子面的正应力分量。压应力使其正攀移，拉应力使其负攀移
- 2) 位错攀移需要原子的长程迁移，因而比位错滑移困难，需要热激活
- 3) 位错线攀移过的区域，其两侧晶体发生与位错柏氏矢量相同的相对位移
- 4) 刃位错攀移是非保守运动：既改变晶体的形状，也改变晶体的体积，正攀移使晶体中空位减少而体积收缩，负攀移使晶体中空位增多而体积膨胀

4. 螺位错的交滑移

螺位错的交滑移—当螺位错滑移受阻时，会在与初始滑移面相交的另一个滑移面内继续滑移的运动。当滑移受阻的螺位错通过交滑移越过障碍后，又交滑移到与初始滑移面平行的滑移面内的滑移运动称为双交滑移。

螺位错双交滑移运动示意图



例题1 如图所示，立方形晶体内有一正方形位错环ABCD，其滑移面EFGH平行于晶体的上下底面， $AB \parallel EF$ ，柏氏矢量 $\mathbf{b} \perp AB$ 。在晶体的上下底面施加切应力 $\tau \parallel \mathbf{b}$ 。试判断各段位错线运动的类型及方向

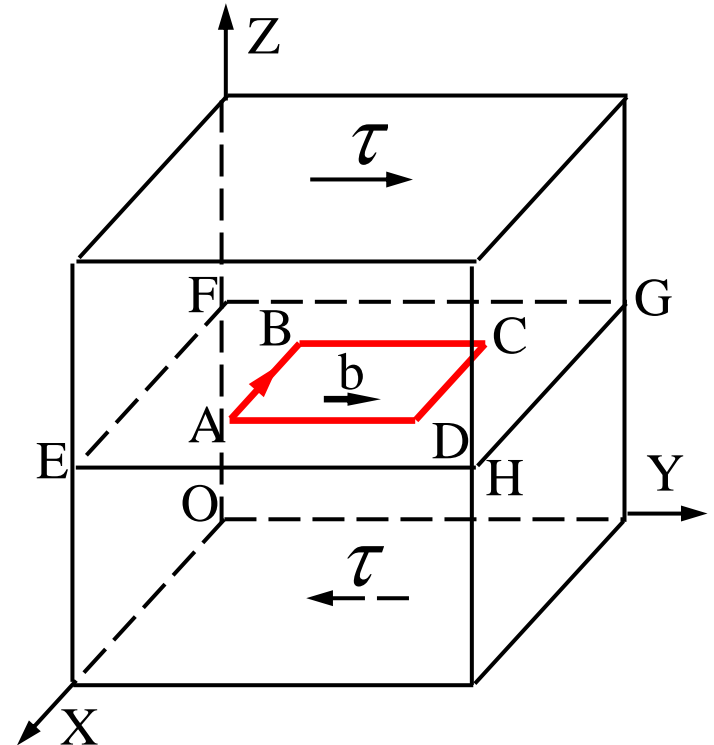
解：

AB段：滑移，指向 - Y

BC段：滑移，指向 - X

CD段：滑移，指向 Y

DA段：滑移，指向 X



例题2 如图所示，立方形晶体内有一正方形位错环ABCD，其滑移面EFGH平行于晶体的上下底面， $AB \parallel EF$ ，柏氏矢量 $b \perp AB$ 。在晶体的左右表面施加压应力 $\sigma \parallel b$ 。试判断各段位错线运动的类型及方向。

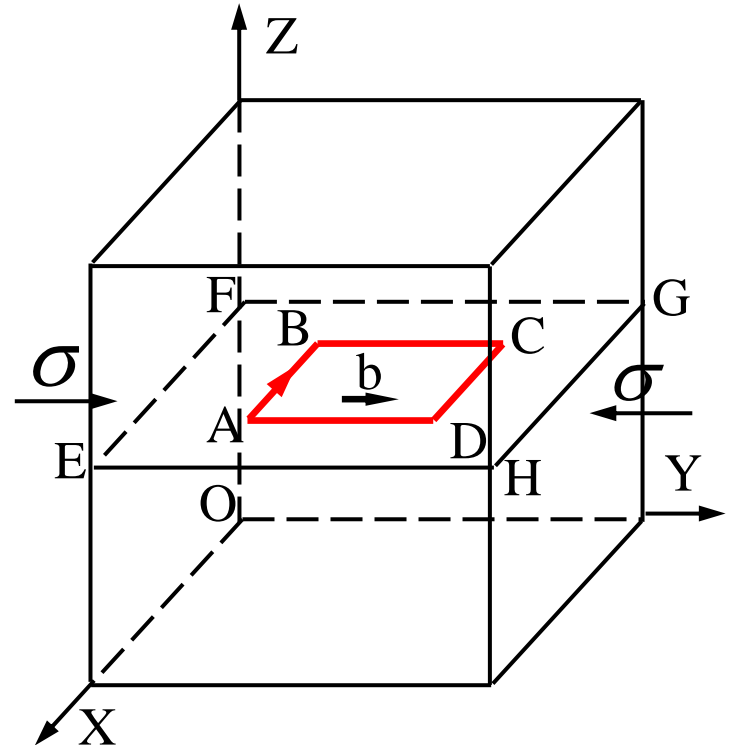
解：

AB段：攀移，指向 $-Z$

BC段：不动

CD段：攀移，指向 Z

DA段：不动



第三节 位错的弹性性质

ELESTIC NATURE OF DISLOCATION

应力和应变分析

位错的应力场

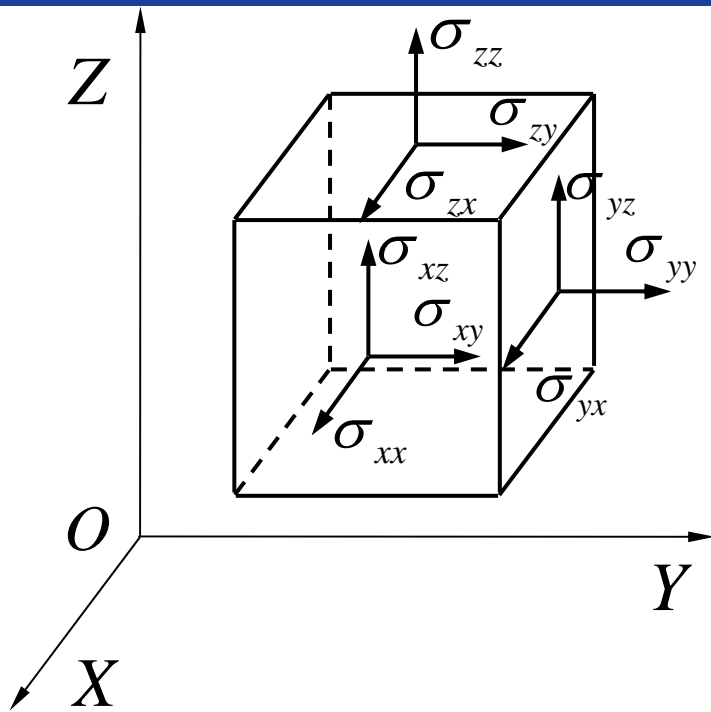
位错的应变能

一、应力和应变分析

1. 应力

应力 σ 是一个张量，包含应力的作用面、方向及大小。固体中任一点的应力状态都可用单元体上的正应力和切应力分量来表示。

1) 直角坐标系中的应力分量



$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

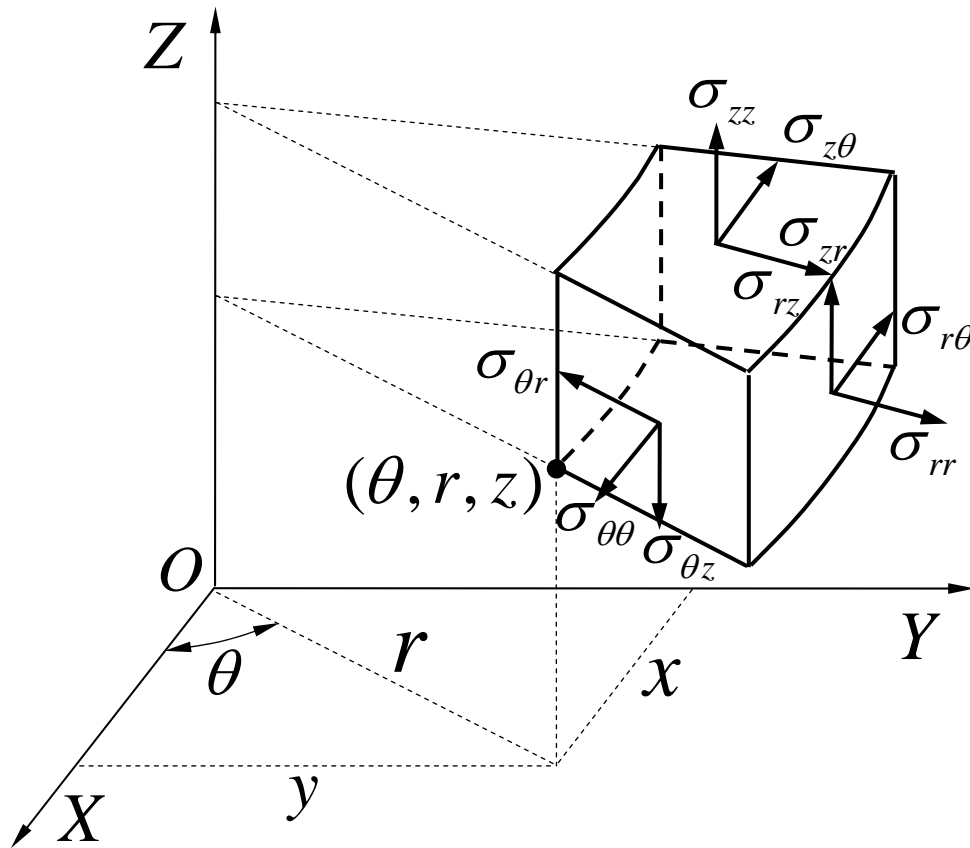
$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$$

应力分量符号有两个下标：第一个下标表示应力的作用面，第二个下标表示应力的作用方向。如果应力符号的两个下标字母相同，此即正应力（应力的方向垂直于作用面）；如果两个下标字母不同，此即切应力（应力的方向平行于作用面）。

2) 圆柱坐标系中的应力分量



$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{\theta\theta} & \sigma_{\theta r} & \sigma_{\theta z} \\ \sigma_{r\theta} & \sigma_{rr} & \sigma_{rz} \\ \sigma_{z\theta} & \sigma_{zr} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_{\theta r} = \sigma_{r\theta}$$

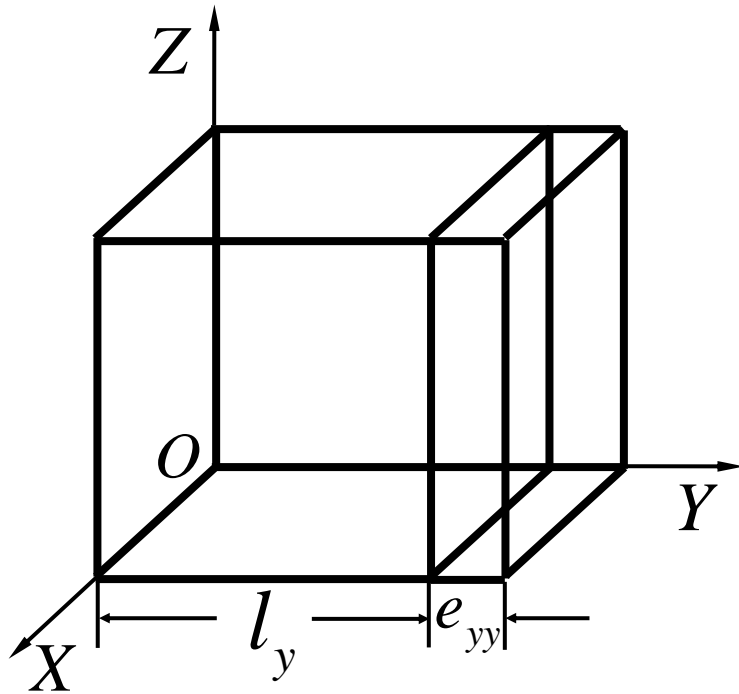
$$\sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta}$$

$$\sigma_{rz} = \sigma_{zr}$$

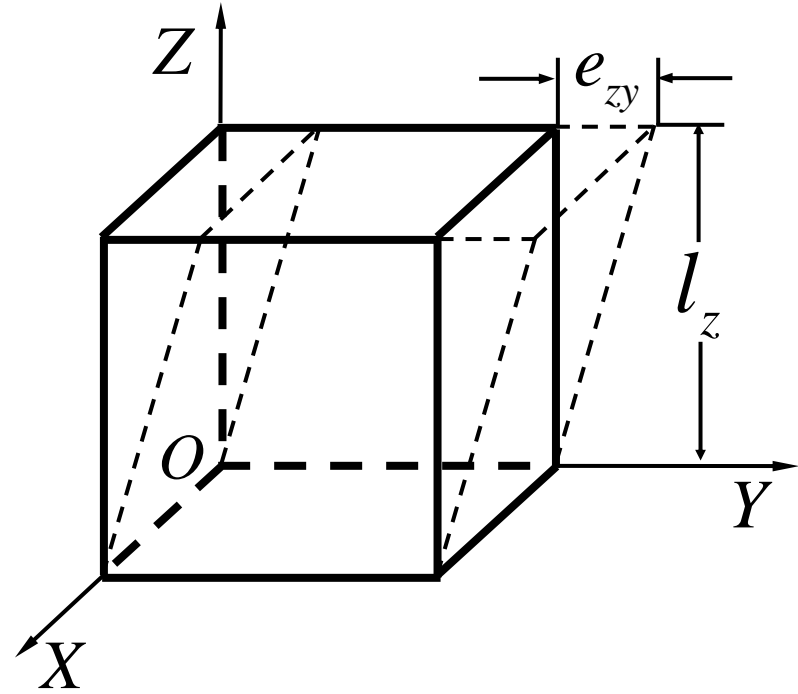
2) 应变

应变 ε 也是一个张量，固体中任一点的应变状态都可用九个应变分量来表示，其中三个正应变分量和六个切应变分量。

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{yx} \\ \varepsilon_{xz} &= \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{yz} &= \varepsilon_{zy} \end{aligned}$$



$$\text{a) } \varepsilon_{yy} = \frac{e_{yy}}{l_y}$$



$$\text{b) } \varepsilon_{zy} = \frac{e_{zy}}{l_z}$$

直角坐标中应变分量的定义

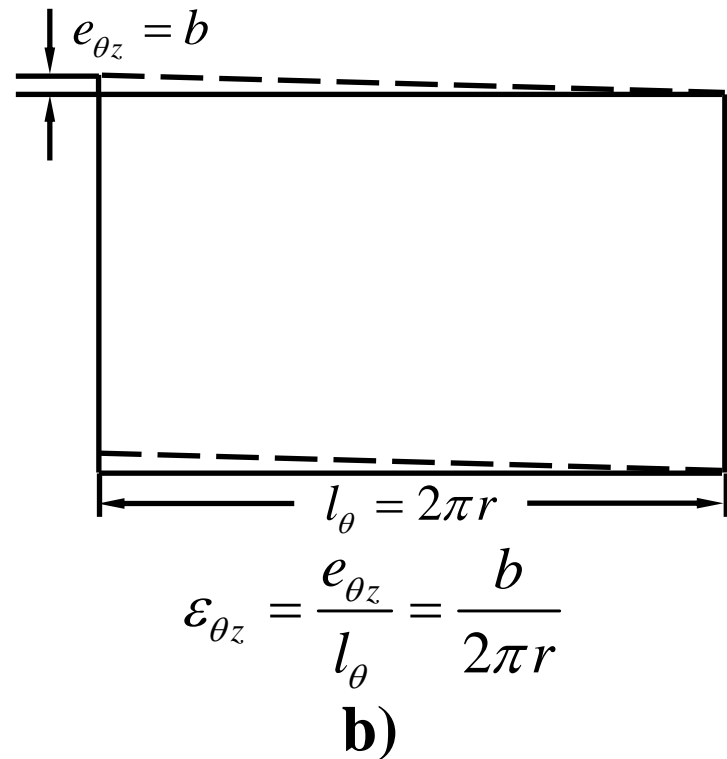
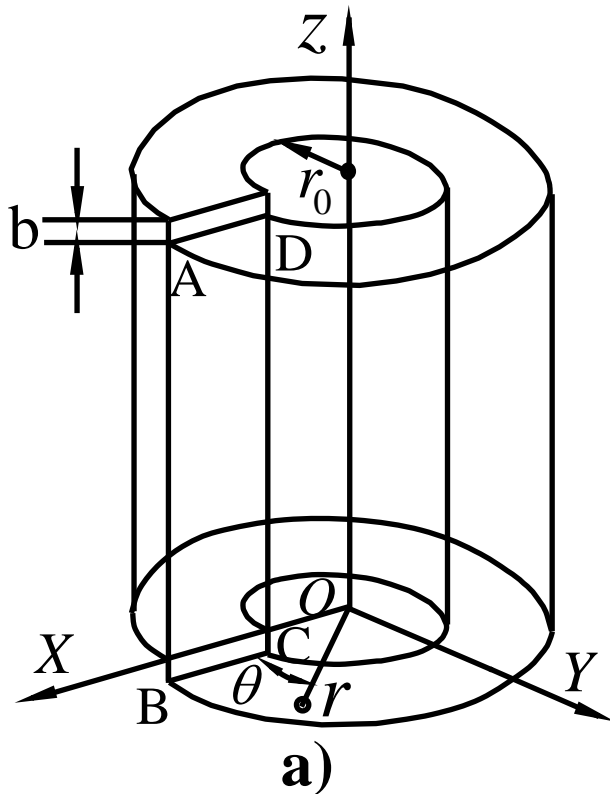
a) 正应变

b) 切应变

二、位错的应力场

1. 螺位错的应力场

1) 圆柱坐标系中的螺位错应力场公式



螺位错应力场公式推导过程图解

a) 螺位错的连续介质模型 b) 螺位错中任一 r 处的切应变

$$\varepsilon_{\theta z} = \varepsilon_{z\theta} = \frac{b}{2\pi r}$$

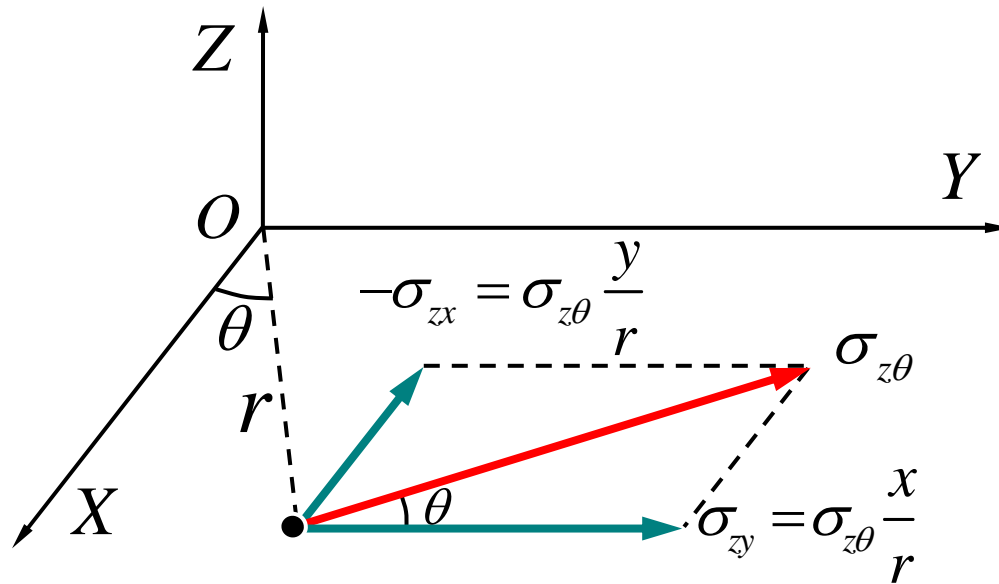
$$\varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\theta r} = \varepsilon_{r\theta} = \varepsilon_{rr} = \varepsilon_{rz} = \varepsilon_{zr} = \varepsilon_{zz} = 0$$

$$\sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta} = G\varepsilon_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r}$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\theta r} = \sigma_{r\theta} = \sigma_{rr} = \sigma_{rz} = \sigma_{zr} = \sigma_{zz} = 0$$

$$\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{Gb}{2\pi r} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{Gb}{2\pi r} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

2) 直角坐标系中的螺位错应力场公式



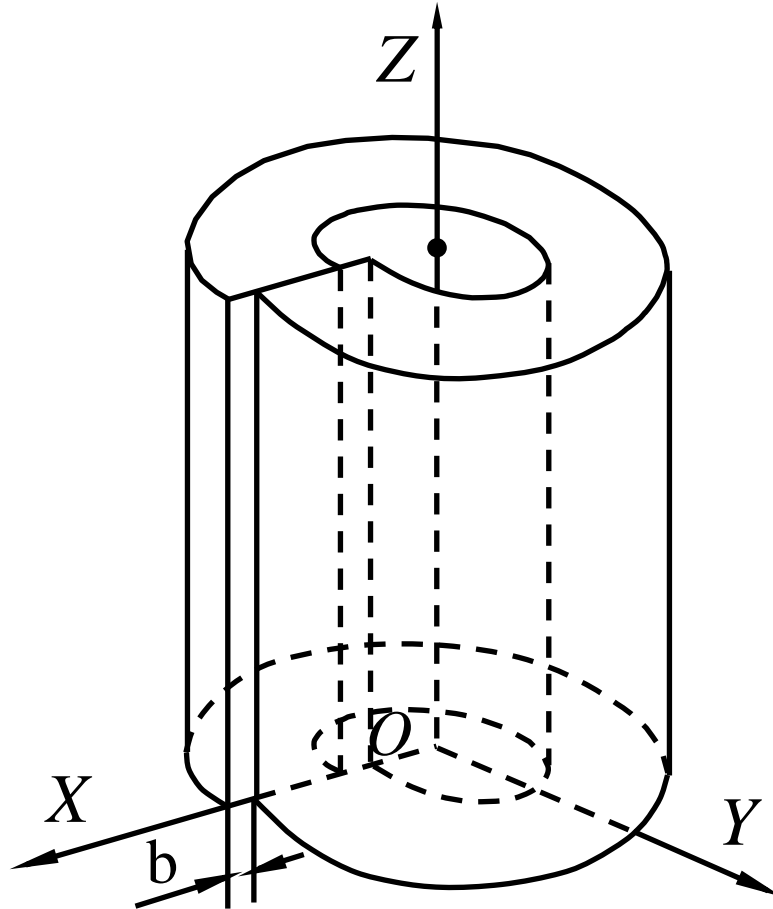
$$\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{-Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} \\ 0 & 0 & \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \\ \frac{-Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} & \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} & 0 \end{bmatrix}$$

3) 螺位错应力场的特点

- (i) 只有切应力分量，无正应力分量
- (ii) 切应力分量在 θ 面内，平行于位错线方向
- (iii) 切应力分量的大小，
$$\tau = \frac{Gb}{2\pi r}$$
- (iv) 与 Z 方向（位错线所在方向）无关，且径向对称，即在以位错线为轴线的圆柱面内切应力相同，大小与只圆柱半径成反比。

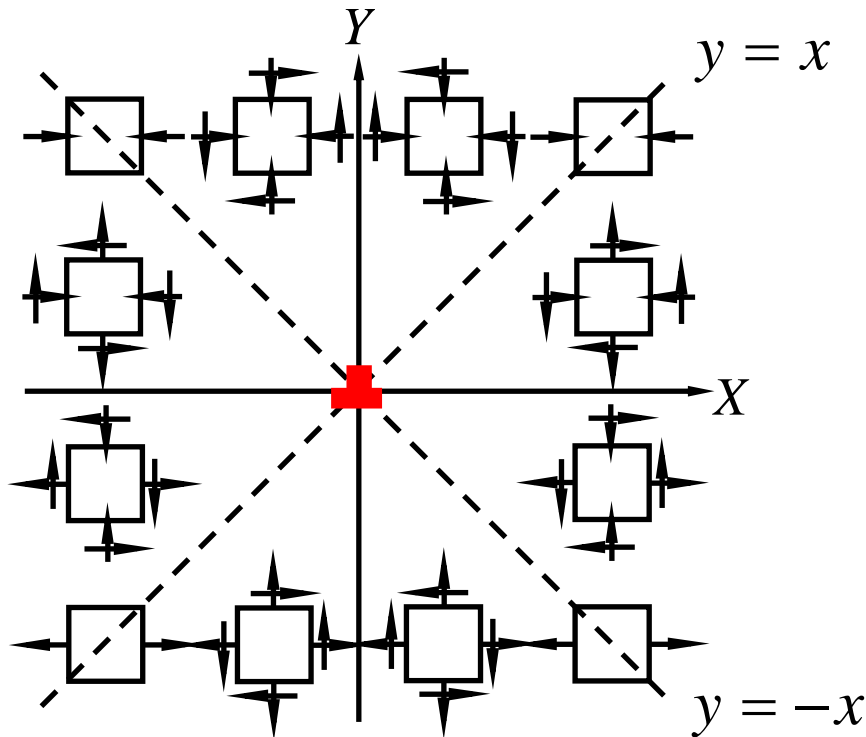
2. 刃位错的应力场

1) 直角坐标系中的刃位错应力场公式



刃位错的连续介质模型

$$\sigma = \begin{pmatrix} \frac{-Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & 0 \\ \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \end{pmatrix}$$



直角坐标系中的
刃位错应力
场(未包含 σ_{zz})

2) 圆柱坐标系中的刃位错应力场公式

$$\sigma = \begin{pmatrix} \frac{-Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r} & \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \theta}{r} & 0 \\ \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \theta}{r} & \frac{-Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r} & 0 \\ 0 & 0 & \nu(\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{rr}) \end{pmatrix}$$

3) 刃位错应力场的特点

- (i) 既有切应力分量，也有正应力分量
- (ii) 正应力分量有 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 σ_{zz} ，其中 σ_{xx} ：
在滑移面上方为压；在滑移面下方为拉；
在滑移面内为零
- (iii) 切应力分量 $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ：
在滑移面内，有最大值 $\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)x}$
在 $x = 0$ 处及 $|x| = |y|$ 处， $\tau = 0$

3. 混合位错的应力场

由于混合位错是由一个刃位错和一个螺位错混合而成，那么，它的应力场就是这两个位错应力场的迭加。在直角坐标系中，刃位错和螺位错的应力场表达式正好互补。这样，只需将混合位错的柏氏矢量 b 分解为刃分量 b_e 和螺分量 b_s ，就可以方便地写出任何一个混合位错在直角坐标系中的应力场表达式。

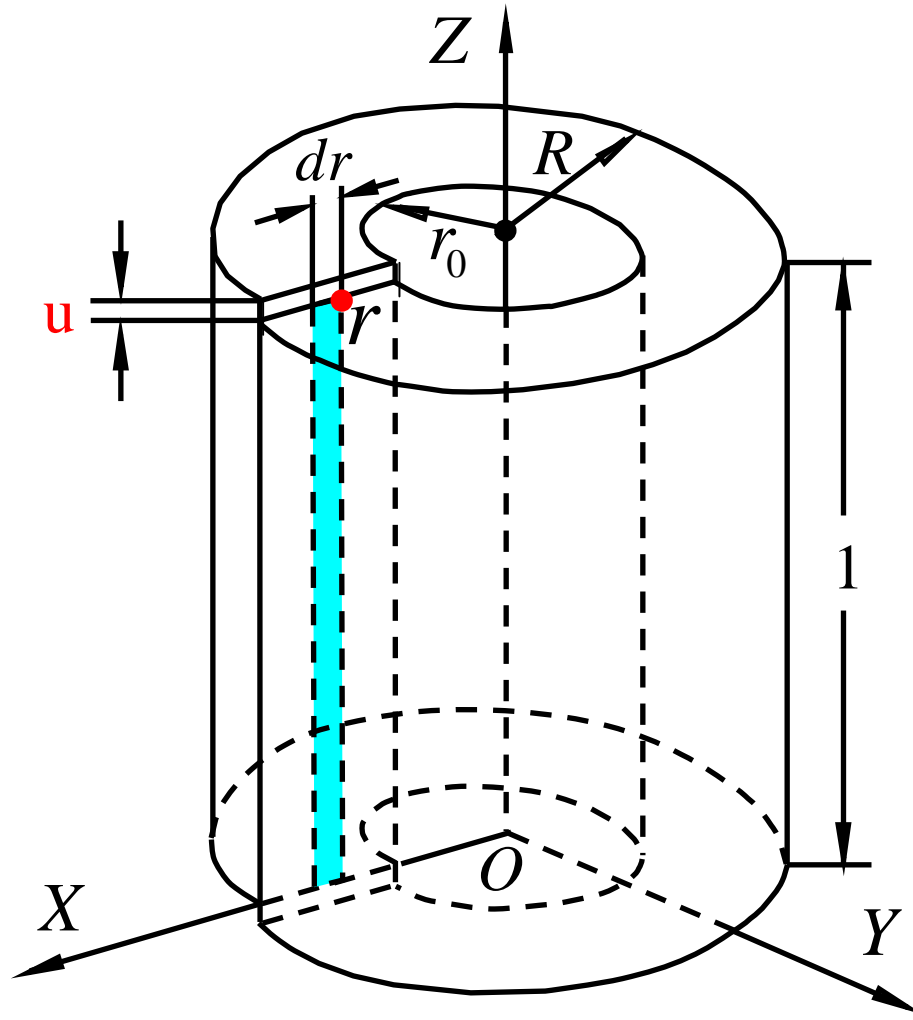
4. 讨论

- (i) 关于螺位错的应力场公式：①位错线过坐标原点且平行于 Z 轴，否则应进行坐标变换；②适用于右螺位错，对于左螺位，每个应力分量前应加“—”
- (ii) 关于刃位错的应力场公式：①位错线过坐标原点且平行于 Z 轴，半原子面垂直于 $x-z$ 面，否则应进行坐标变换；②适用于正刃位，对于负刃位错，每个应力分量前应加“—”
- (iii) 关于混合位错的应力场公式：①位错线过坐标原点且平行于 Z 轴，否则，应进行坐标变换；②螺分量应符合螺位错应力场公式的条件，刃分量应符合刃位错应力场公式的条件

二、位错的应变能

位错线周围原子间的相对位移使晶体的能量明显升高，这部分能量称为位错的应变能。位错的应变能包括两部分：位错中心区的非弹性应变能，占应变能的很小一部分，可以忽略；位错中心区以外区域的弹性应变能，是应变能的主要部分，常用以代表位错的应变能。

1. 单位长度螺位错的应变能 E_s



螺位错应变能公式推导图解

“制造”单位长度螺位错过程中外力所做的功
对于位于 r 处的面积微元 $dr \times 1$

位移为 u 时作用于微元上的应力: $\sigma_{\theta z} = \frac{Gu}{2\pi r}$

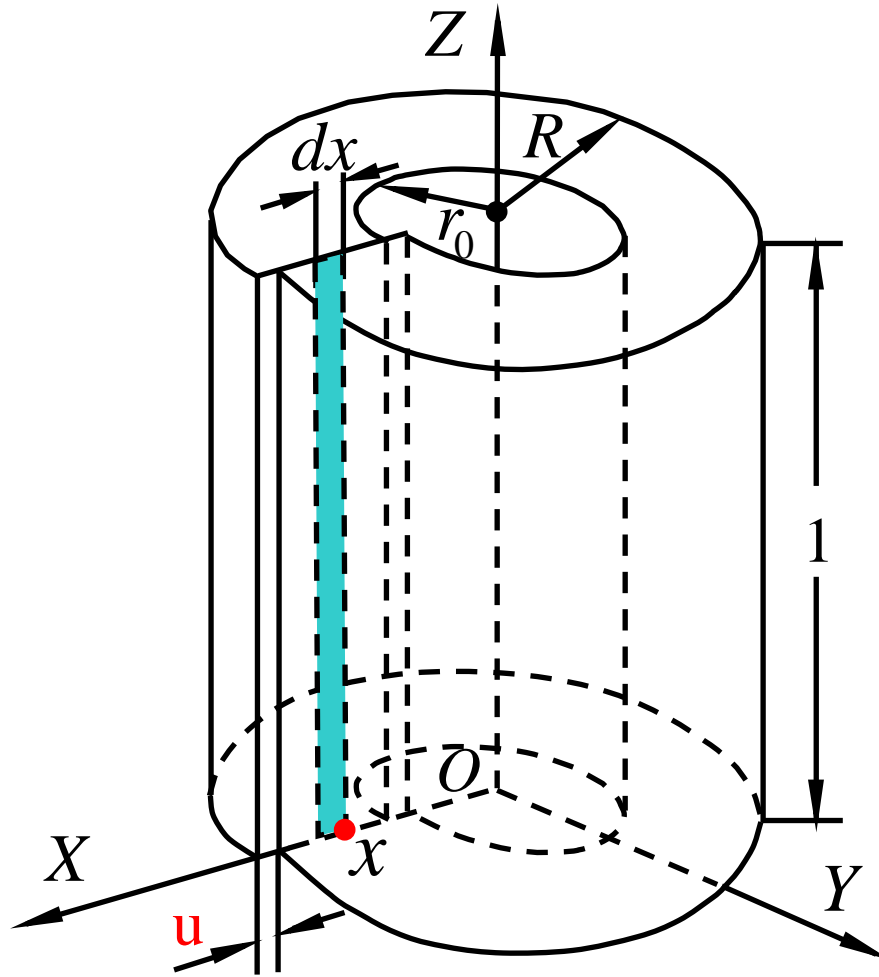
作用于微元上的力: $\sigma_{\theta z} \times dr \times 1 = \frac{Gu}{2\pi r} dr$

对微元所做的功: $\frac{Gu}{2\pi r} dr du$

应变能: $E_s = \int_0^b \int_{r_0}^R \frac{Gu}{2\pi r} dr du = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}$

式中, r_0 — 位错中心区半径, 可取2个原子间距
 R — 位错应力场作用半径, $\approx 1000 - 10000 r_0$
 G — 晶体的切弹模量
 b — 位错的柏氏矢量

2. 单位长度刃位错的应变能 E_e



刃位错应变能公式推导图解

“制造”单位长度刃位错过程中外力所做的功

对于位于x处的面积微元 $dx \times 1$

位移为u时作用于微元上的应力: $\sigma_{yx} = \frac{Gu}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{x}$

作用于微元上的力: $\sigma_{yx} \times dx \times 1 = \frac{Gu}{2\pi(1-\nu)x} dx$

对微元所作的功: $\frac{Gu}{2\pi(1-\nu)x} dx du$

应变能: $E_e = \int_0^b \int_{r_0}^R \frac{Gu}{2\pi(1-\nu)x} dx du = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}$

式中, r_0 — 位错中心区半径, 可取2个原子间距

R — 位错应力场作用半径, $\approx 1000 - 10000 r_0$

ν — 泊松比, $\nu \approx 0.33$

G — 晶体的切弹模量

b — 位错的柏氏矢量

3. 讨论

- (1) 混合位错的应变能为其刃分量和螺分量应变能之和
- (2) 由于位错总是使晶体的能量升高，所以位错是晶体中热力学不稳定的缺陷
- (3) 同一晶体中，柏氏矢量大小相同的刃位错的应变能高于螺位错的应变能， $E_e \approx 1.5E_s$
- (4) 位错的应变能与其柏氏矢量平方成正比，即 $E = \alpha Gb^2$ ， $\alpha \approx 0.5 - 1.0$ ，螺位错取下限，刃位错取上限

第四节 作用在位错线上的力

THE FORCE ACTING ON THE DISLOCATION

Petch-Koehler公式

外加应力对位错的作用力

位错间的互作用力

位错与溶质原子的互作用力

位错的线张力

位错运动的点阵阻力

映像力

一、Petch-Koehler公式

1. Petch-Koehler公式的功能

用于计算一个应力场对单位长度位错线的作用力

2. Petch-Koehler公式的表达式

$$\vec{f} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{l}_0$$

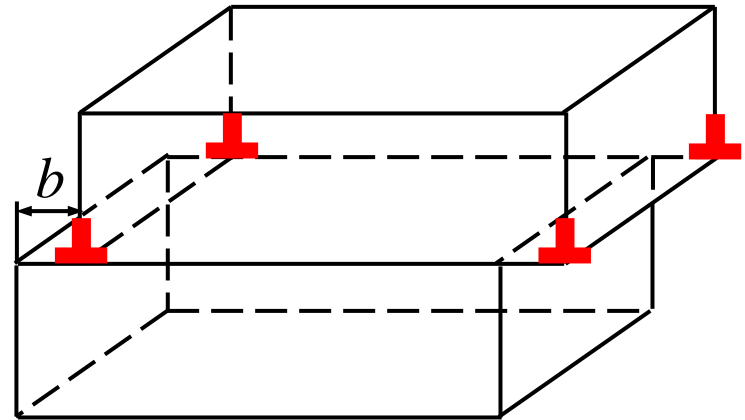
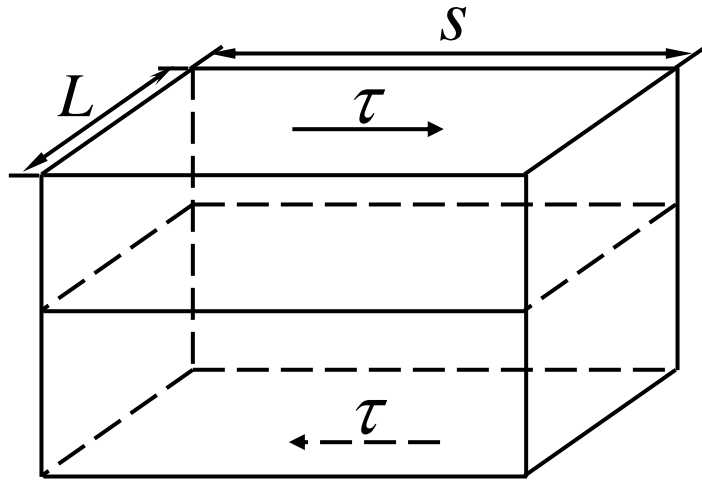
式中, $\vec{\sigma}$ 为作用于位错的应力场; \vec{b} 为位错的柏氏矢量; $\vec{l}_0 = \frac{d\vec{l}}{|d\vec{l}|}$ 为位错线的单位向量

3. Petch-Koehler公式的展开

$$\begin{aligned}
 \vec{f} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{l}_0 &= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{bmatrix} \\ \times \begin{bmatrix} l_x \\ l_y \\ l_z \end{bmatrix} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \sigma_{xx}b_x + \sigma_{xy}b_y + \sigma_{xz}b_z \\ \sigma_{yx}b_x + \sigma_{yy}b_y + \sigma_{yz}b_z \\ \sigma_{zx}b_x + \sigma_{zy}b_y + \sigma_{zz}b_z \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_x \\ l_y \\ l_z \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} (\sigma_{yx}b_x + \sigma_{yy}b_y + \sigma_{yz}b_z)l_z - (\sigma_{zx}b_x + \sigma_{zy}b_y + \sigma_{zz}b_z)l_y \\ (\sigma_{zx}b_x + \sigma_{zy}b_y + \sigma_{zz}b_z)l_x - (\sigma_{xx}b_x + \sigma_{xy}b_y + \sigma_{xz}b_z)l_z \\ (\sigma_{xx}b_x + \sigma_{xy}b_y + \sigma_{xz}b_z)l_y - (\sigma_{yx}b_x + \sigma_{yy}b_y + \sigma_{yz}b_z)l_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{i} \\ \vec{j} \\ \vec{k} \end{bmatrix} \\
 &= f_x + f_y + f_z
 \end{aligned}$$

一、外加应力对位错的作用力

1. 用虚功原理计算



设使晶体变形所做的功为 W' ，作用在位错线上的力使位错线运动所做的功为 W

则，
$$W = \tau(L \cdot s)b \quad W' = f \cdot L \cdot S$$

根据虚功原理， $W = W'$

解得，
$$f = \tau b$$

讨论

- (1) 对于刃位错，公式中的 τ 代表作用面与位错
滑移面平行、作用方向与位错柏氏矢量方向
平行的切应力，或作用面与半原子面平行、
作用方向与位错柏氏矢量方向平行的正应力
- (2) 对于螺位错，公式中的 τ 代表作用面与位错
滑移面平行、作用方向与位错柏氏矢量方向
平行的切应力
- (3) 对于混合位错，将其分解为刃分量和螺分量，
求出各自的作用力后再进行矢量合成
- (4) 作用在位错线上的力垂直于位错线，与使位
错线运动的方向相同

例题3 如图所示, 立方形晶体内有一正方形位错环ABCD, 其滑移面 EFGH 平行于晶体的上下底面, $AB \parallel EF$, 柏氏矢量 $b \perp AB$. 在晶体的前后侧面施加切应力 $\tau \parallel b$. 试求单位长度位错线受到的作用力.

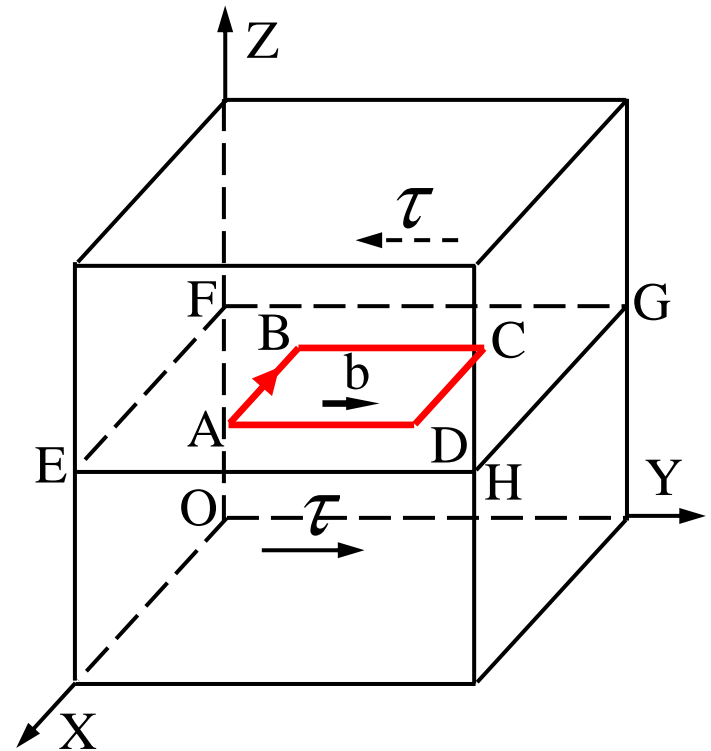
解:

AB段: 不受力

BC段: τb , 指向 Z

CD段: 不受力

DA段: τb , 指向 $-Z$



2. 用Petch-Koehler公式计算

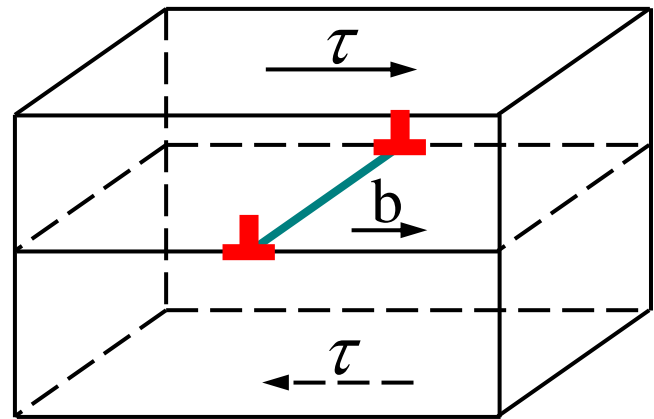
例题4 如图所示四方形晶体中有一正刃位错，其柏氏矢量为 b ，其滑移面平行于晶体上下底面。在晶体上下底面内施加切应力 $\tau \parallel b$ ，计算单位长度位错线上的作用力 f

解：

设 $\vec{l}_0 = [100]$ $\vec{b} = [0b0]$

则 $\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau & 0 \end{bmatrix}$

故 $\vec{f} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{l}_0 = \tau b \mathbf{j}$



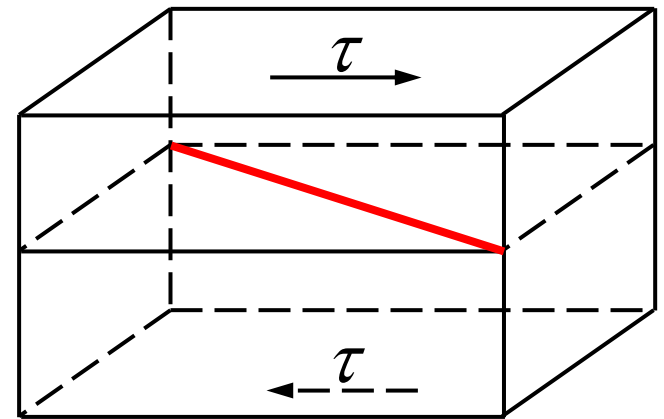
例题5 如图所示长方形晶体中有一右螺位错, 平行于长方体上下底面, 柏氏矢量为 b . 在上下底面内施加切应力 τ , 其与位错线夹角为 45° . 计算单位长度位错线上的作用力 f

解:

设
$$\bar{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau & 0 \end{bmatrix}$$

则
$$\bar{l}_0 = \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\sqrt{2}}{2} 0 \right] \quad \bar{b} = \left[\frac{\sqrt{2}b}{2} \frac{\sqrt{2}b}{2} 0 \right]$$

故
$$\bar{f} = (\bar{\sigma} \cdot \bar{b}) \times \bar{l}_0 = -\frac{\tau b}{2} i + \frac{\tau b}{2} j$$



三、位错间的互作用力

用Petch-Koehler公式计算

$$\vec{f} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{l}_0$$

式中， $\vec{\sigma}$ — 位错线 1 (位于坐标原点) 的应力场
在位错线 2 处的应力

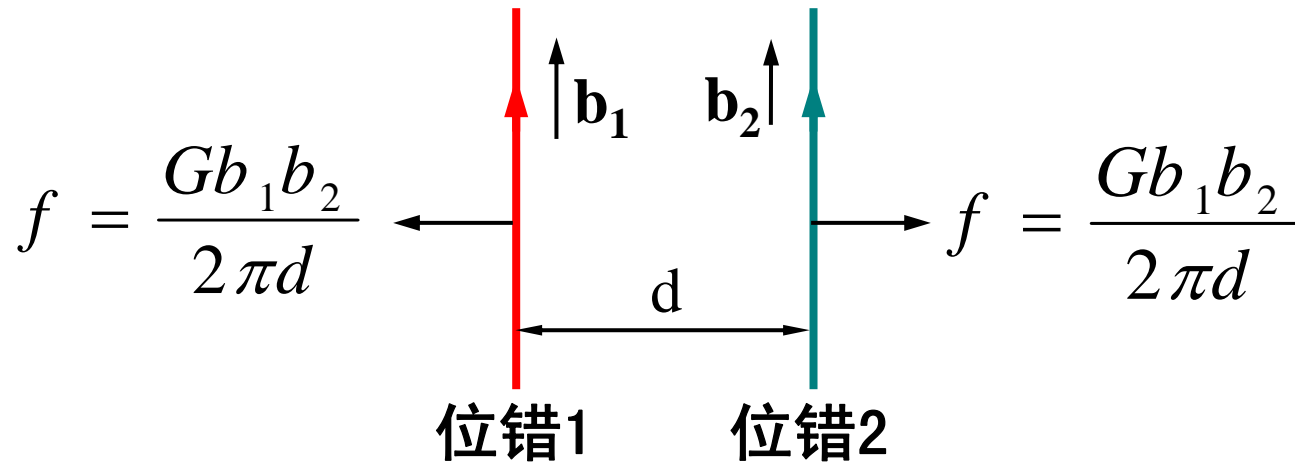
\vec{b} — 位错线 2 的柏氏矢量

\vec{l}_0 — 位错线 2 的正方向单位矢量

1. 两平行螺位错间的互作用力

$$\bar{\sigma}_1(d, 0, 0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{Gb_1}{2\pi d} \\ 0 & \frac{Gb_1}{2\pi d} & 0 \end{bmatrix} \quad \bar{b}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -b_2 \end{bmatrix} \quad \bar{l}_{02} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\vec{f}_{12} = (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2) \times \bar{l}_{02} = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi d}$$



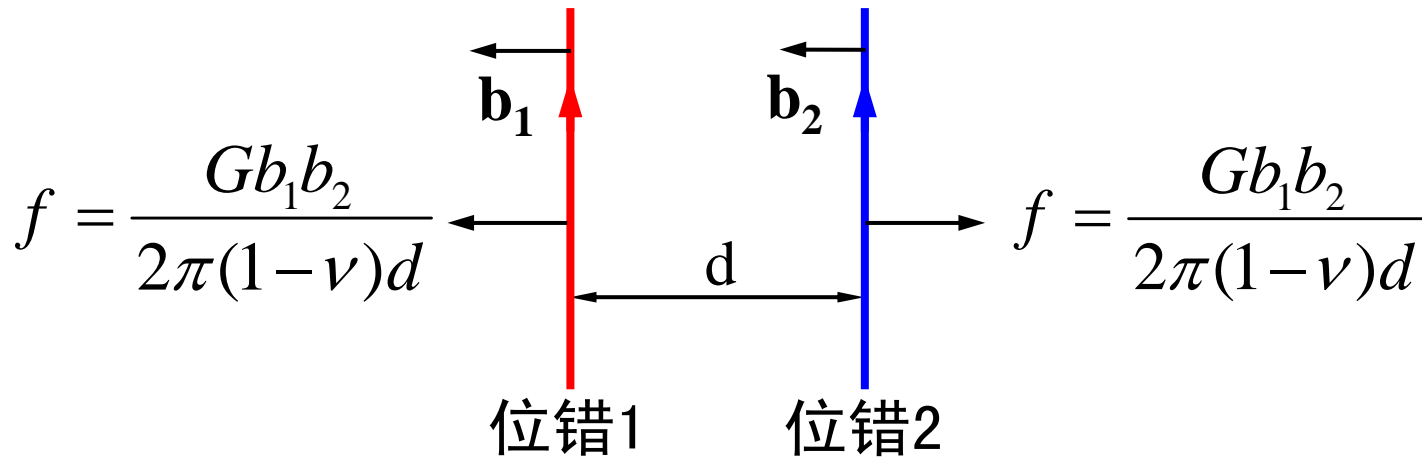
两个平行右螺位错间的互作用力

两个相距为 d 、柏氏矢量分别为 b_1 和 b_2 的平行螺位错，单位长度位错线的相互作用力在两位错线的连线方向，大小为 $f = \frac{Gb_1b_2}{2\pi d}$ ，且同号相斥、异号相吸。

2. 同一滑移面内两平行刃位错间的互作用力

$$\bar{\sigma}_1(d,0,0) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)d} & 0 \\ \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \bar{b}_2 = \begin{bmatrix} -b_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \bar{l}_{02} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\vec{f}_{12} = (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{b}_2) \times \bar{l}_{02} = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi d} i$$



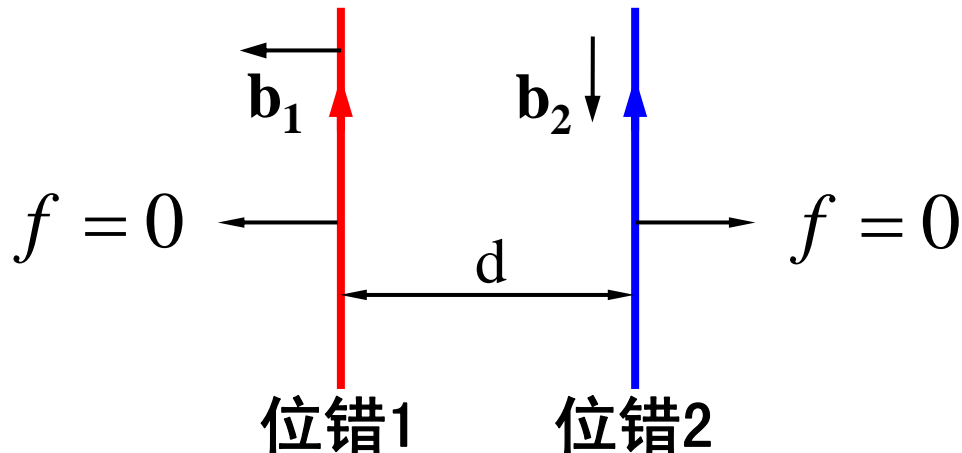
同一滑移面内两个平行正刃位错间的互作用力

同一滑移面内，两个相距为 d 、柏氏矢量分别为 b_1 和 b_2 的平行刃位错，单位长度位错线的相互作用力在两位错线的连线方向， 大小为 $f = \frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-\nu)d}$ ， 且同号相斥、异号相吸。

3. 平行刃位错与螺位错间无相互作用力

$$\bar{\sigma}_1(d,0,0) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)d} & 0 \\ \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \bar{b}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad \bar{l}_{02} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\vec{f}_{12} = (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{b}_2) \times \bar{l}_{02} = 0$$



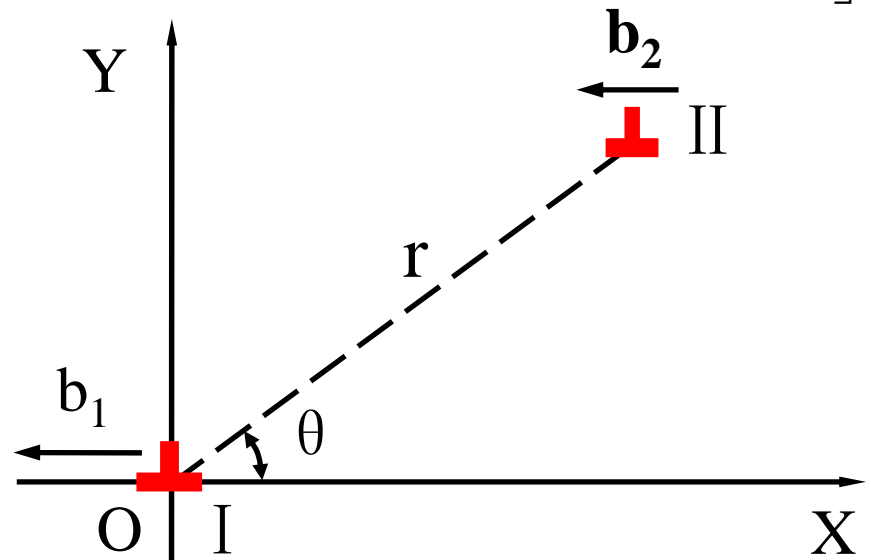
平行刃位错和螺位错间无相互作用力

4. 平行滑移面内两平行刃位错间的互作用力

$$\bar{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-Gb_1}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & 0 \\ \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \end{bmatrix}$$

$$\bar{b}_2 = \begin{bmatrix} -b_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \bar{l}_{02} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

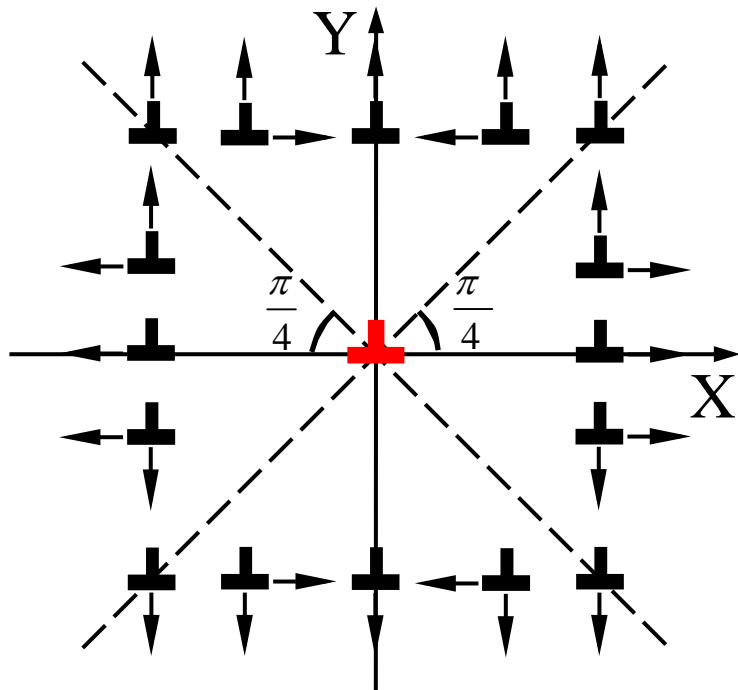
$$\begin{aligned} \vec{f}_{12} &= (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{b}_2) \times \bar{l}_{02} \\ &= \sigma_{yx} b_2 \mathbf{i} - \sigma_{xx} b_2 \mathbf{j} \\ &= f_x + f_y \end{aligned}$$



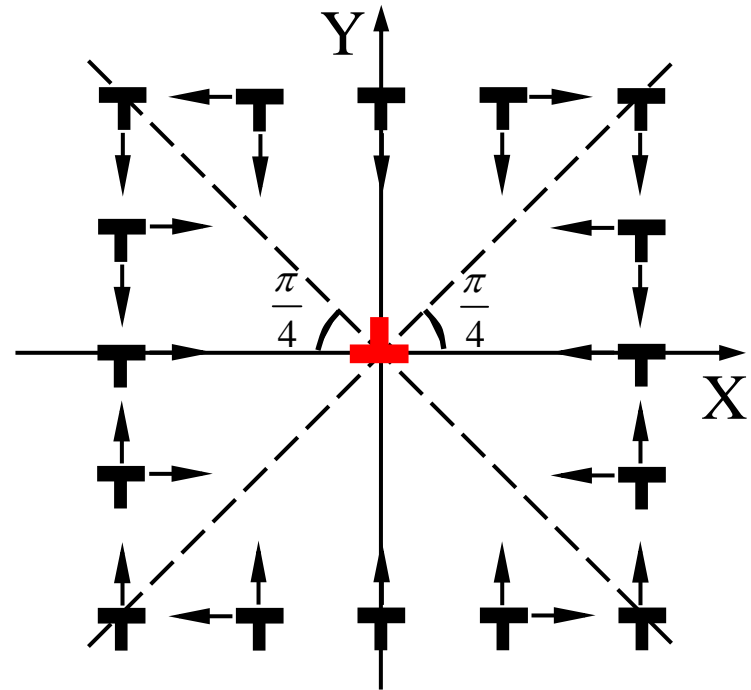
平行滑移面内两个平行
正刃位错间的互作用力

$$f_x = \sigma_{yx} \cdot b_2 = \frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \theta \cos 2\theta}{r}$$

$$f_y = -\sigma_{xx} \cdot b_2 = \frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta(2 + \cos 2\theta)}{r}$$



a) 同号位错



b) 异号位错

平行滑移面内两平行刃位错间的互作用力

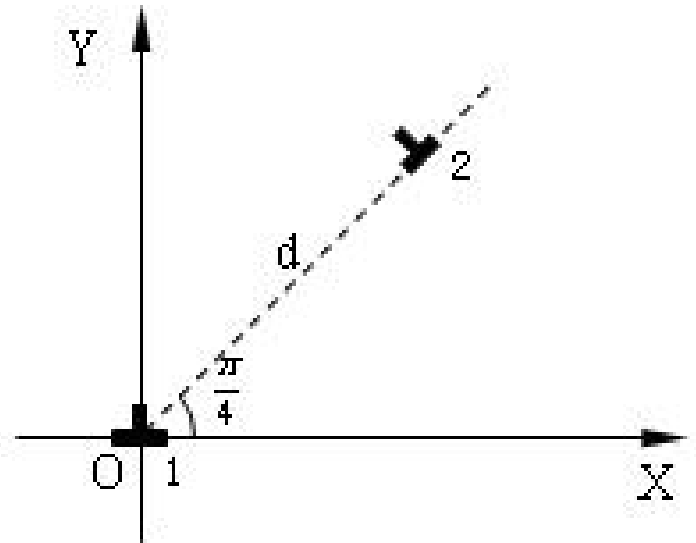
例题6 如图所示，两个相距为 d 的平行刃位错 1 和刃位错 2，其柏氏矢量分别为 \vec{b}_1 和 \vec{b}_2 ，其滑移面夹角为 $\pi/4$ 。试求位错 1 对单位长度位错 2 的作用力 \vec{f}_{12}

解：

$$\vec{l}_{02} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \vec{b}_2 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}b_2/2 \\ \sqrt{2}b_2/2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

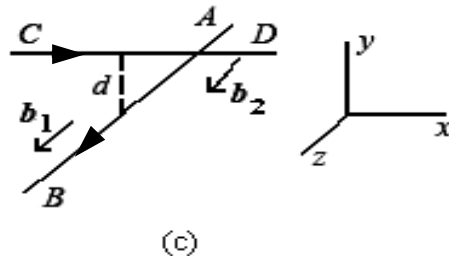
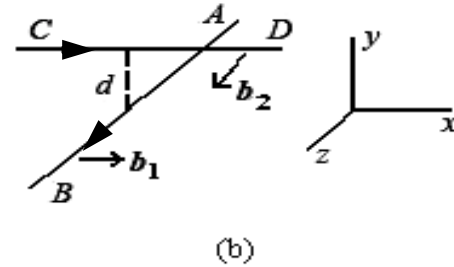
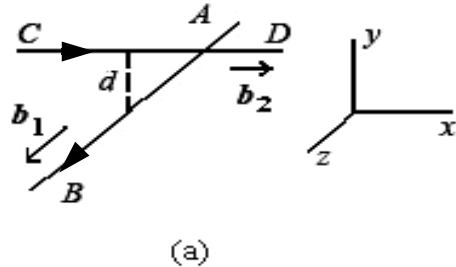
$$\vec{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} \frac{-\sqrt{2}Gb_1}{2\pi(1-\nu)d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-\sqrt{2}\nu Gb_1}{2\pi(1-\nu)d} \end{bmatrix}$$

$$\vec{f}_{12} = \frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-\nu)d} \vec{j}$$



例题7 如图所示, 两条相距为 d 、正交但不共面的位错线 AB 和 CD , 其柏氏矢量分别为 b_1 和 b_2 , 且 $|b_1| = |b_2| = b$ 。试求下述情况下两位错间的互作用力 (单位长度位错线所受的力 f , 总力 F , 及总力矩 M)

- (1) 两个位错都是螺型;
- (2) 两个位错都是刃型;
- (3) 一个是螺型, 一个是刃型。

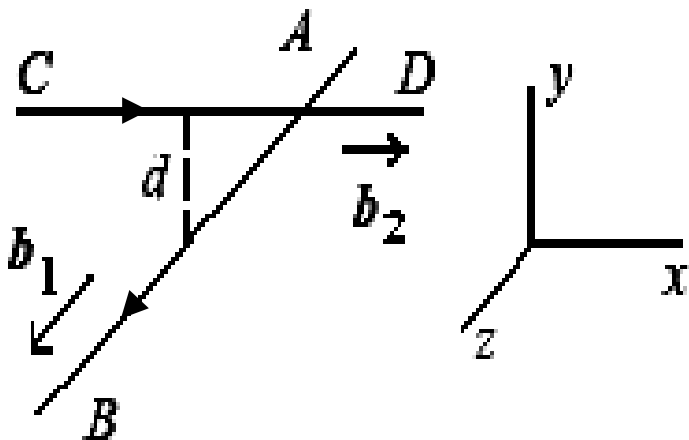


解: (1)

$$f = (\sigma \cdot b_2) \times l_{02} = \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xz} \\ 0 & 0 & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{f}_{12} = \sigma_{zx} b_2 j \quad F_y = \int_{-\infty}^{\infty} f_{12} dx = \frac{-Gb_1 b_2}{2} = \frac{-Gb_1 b_2 d}{2\pi(x^2 + d^2)} j$$

$$M = \int_{-\infty}^{\infty} f_{12} x dx = 0$$



$$\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{-Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} \\ 0 & 0 & \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \\ \frac{-Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} & \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} & 0 \end{bmatrix}$$

解: (2)

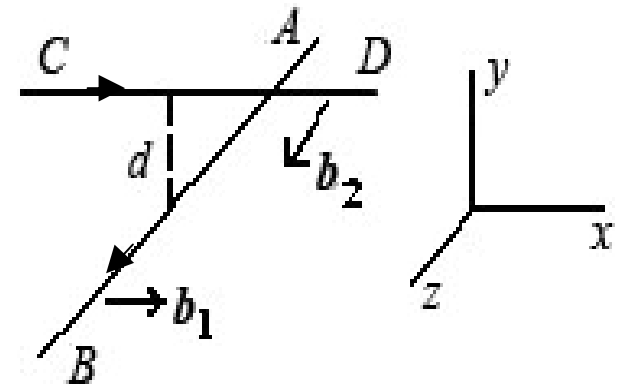
$$\mathbf{f} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_2) \times \mathbf{l}_{02} = \left[\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix} \right] \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$f_{12} = \sigma_{zz} b_2 j = \frac{-Gb_1 b_2 d \nu}{\pi(1-\nu)(x^2 + d^2)} j$$

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} f_{12} dx = -Gb_1 b_2 \nu / (1-\nu)$$

$$M = \int_{-\infty}^{\infty} f_{12} x dx = 0$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{-Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & 0 \\ \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \end{pmatrix}$$



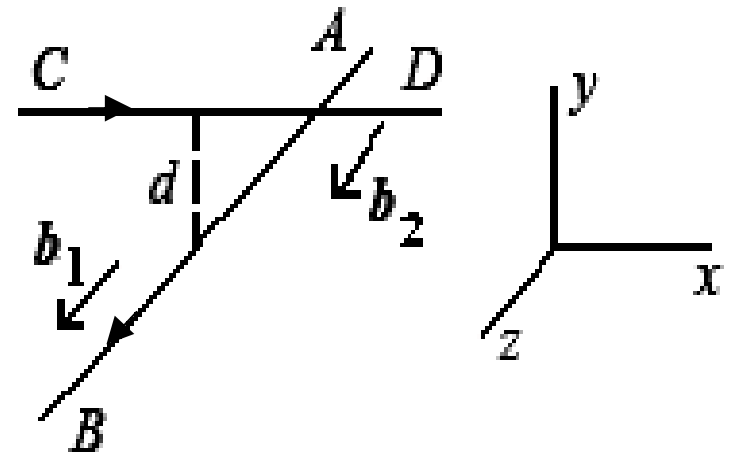
解: (3)

$$\mathbf{f} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_2) \times \mathbf{l}_{02} = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$f_{12} = -\sigma_{yz} b_2 k = \frac{-Gb_1 b_2 x}{2\pi(x^2 + d^2)} k \quad F = \int_{-\infty}^{\infty} f_{12} dx = 0$$

$$M = \int_{-\infty}^{\infty} f_{12} x dx = \frac{Gb_1 b_2 d}{2\pi}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{-Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} \\ 0 & 0 & \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \\ \frac{-Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} & \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} & 0 \end{bmatrix}$$



四、位错与溶质原子的互作用力

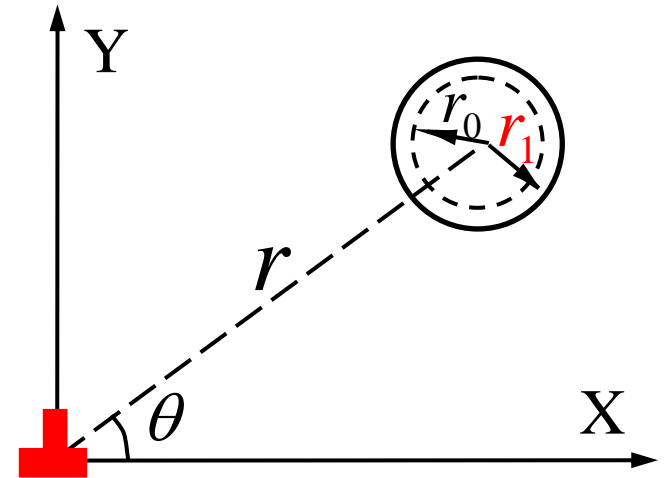
1. 位错与溶质原子的弹性交互作用

1) 柯垂尔 (Cottrell) 气团

如图所示, 在弹性体中刃位错附近挖一半径为 r_0 的小洞, 向洞中填入一半径为 r_1 的刚性球. 设在此过程中, 刃位错应力场中的正应力分量抗拒 (或协助) 刚性球填入所做的功为 W

$$\begin{aligned} \text{则, } W &= \sigma_m \cdot 4\pi r_0^2 \cdot (r_1 - r_0) \\ &= \sigma_m \cdot 4\pi r_0^3 \varepsilon \end{aligned}$$

式中, $\varepsilon = \frac{r_1 - r_0}{r_0} \neq 0$ 为错配度



式中, $\sigma_m = \frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) = \frac{-Gb(1+\nu)}{3\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r}$

为刃位错应力场中的正应力分量在刚性球处的平均值.

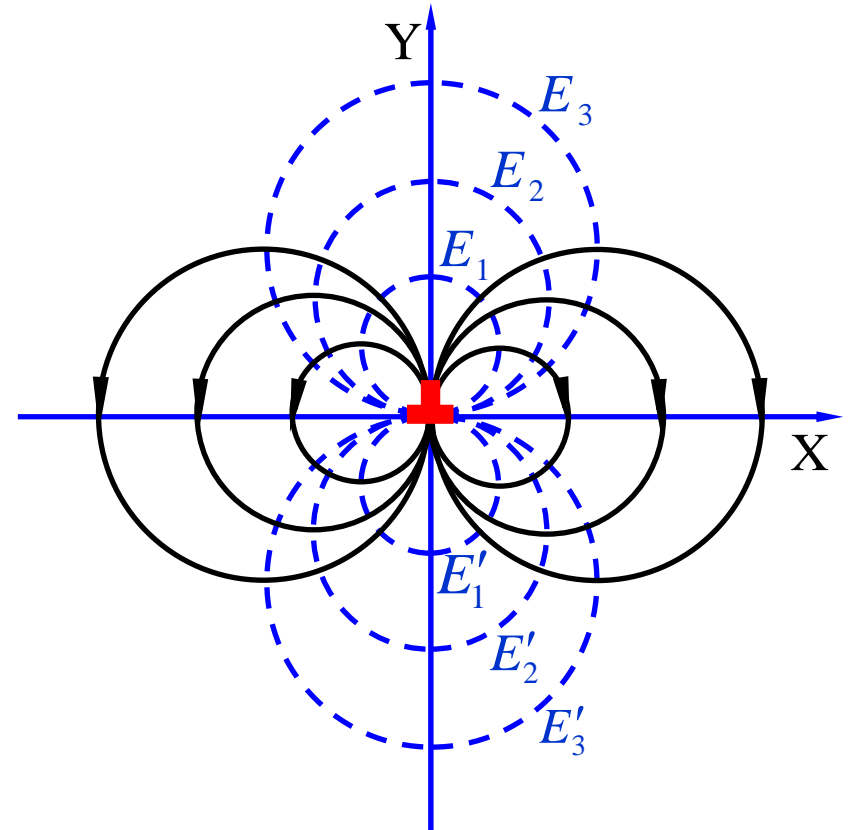
则,
$$W(r, \theta) = -\frac{4(1+\nu)}{3(1-\nu)} \cdot Gbr_0^3 \varepsilon \frac{\sin \theta}{r}$$

对于固溶体合金, 一个溶质原子就相当于这个刚性球. 设溶质原子与刃位错的相互作用能为E, 则,

$$E(r, \theta) = -W(r, \theta) = \frac{4(1+\nu)}{3(1-\nu)} \cdot Gbr_0^3 \varepsilon \frac{\sin \theta}{r} = \beta \frac{\sin \theta}{r}$$

$$\beta = \frac{4(1+\nu)}{3(1-\nu)} \cdot Gbr_0^3 \varepsilon$$

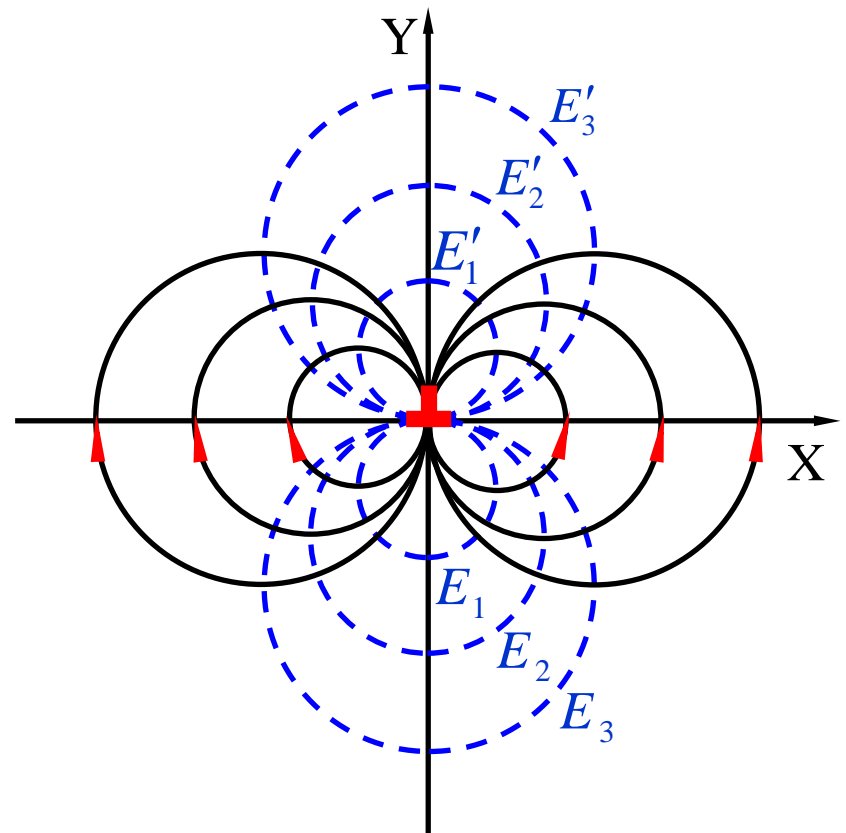
对于间隙原子及置换原子, $E = \beta \frac{\sin \theta}{r}$ 中的 $\beta > 0$, 位错与周围间隙原子及大置换原子的相互作用等能量线及力线如图所示. 这表明: 为降低相互作用能, 间隙原子及大置换原子倾向于向刃位错半原子面下方偏聚



$$E_1 > E_2 > E_3 > 0 > E'_3 > E'_2 > E'_1$$

刃位错与其周围间隙原子及大置换原子的相互作用等能量线 (虚线) 及力线 (实线)

对于小置换原子，公式 $E = \beta \frac{\sin \theta}{r}$ 中的 $\beta < 0$ ，则位错与其周围小置换原子的相互作用等能量线及力线如图所示。这表明：为降低相互作用能，小置换原子倾向于向刃位错半原子面上方偏聚



$$E_1 > E_2 > E_3 > 0 > E'_3 > E'_2 > E'_1$$

刃位错与其周围小置换原子的相互作用等能量线（虚线）及力线（实线）

偏聚在刃位错周围的溶质原子称为柯垂尔 (Cottrell) 气团刃位错线周围溶质原子的浓度分布遵从 Boltzmann 分布

$$C(r, \theta) = C_0 \exp\left[-\frac{E(r, \theta)}{kT}\right] = C_0 \exp\left(-\frac{\beta \sin \theta}{rkT}\right)$$

式中, C_0 — 固溶体中溶质原子平均浓度

T — 热力学温度

k — 玻尔兹曼常数

柯垂尔气团会钉扎位错, 从而阻碍位错运动.

2) 斯诺克 (Snoek) 气团

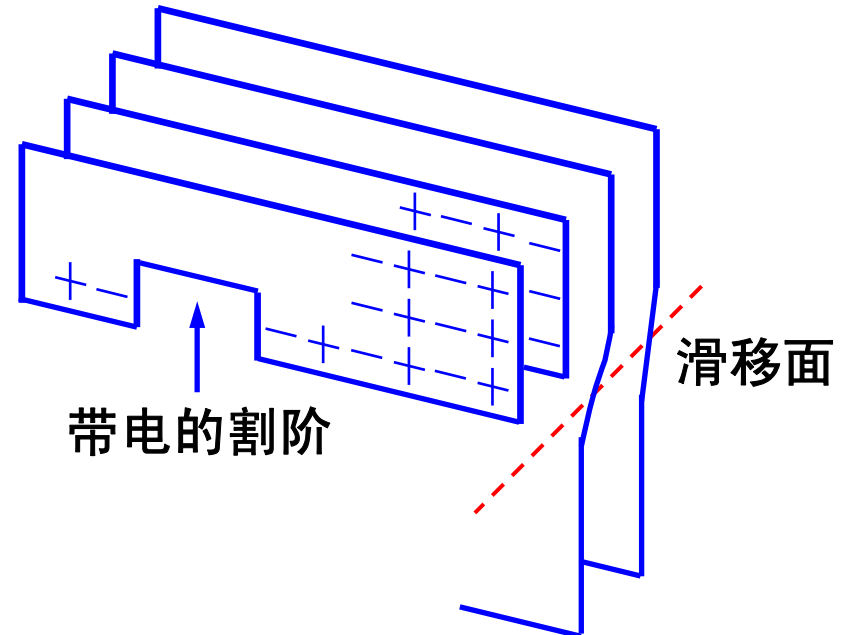
因引起晶格非球形对称畸变而有序分布在螺位错周围的溶质原子称为斯诺克 (Snoek) 气团。斯诺克气团会阻碍螺位错的滑移运动。

例如，位于体心立方结构扁八面体间隙中的溶质原子

2. 位错与溶质原子的静电交互作用

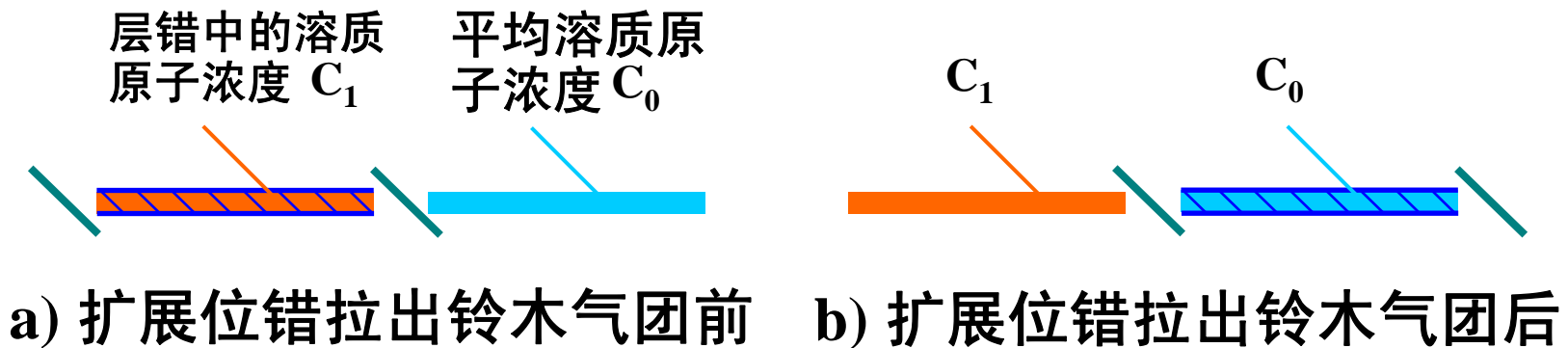
金属晶体中，刃位错周围的自由电子从压应力区移向拉应力区形成静电偶极子，从而改变与基体电价不同的溶质原子在刃位错滑移面两侧的浓度分布。

离子晶体中，刃位错线上的带电割阶会与带电的溶质离子发生静电交互作用，从而改变溶质离子的分布。



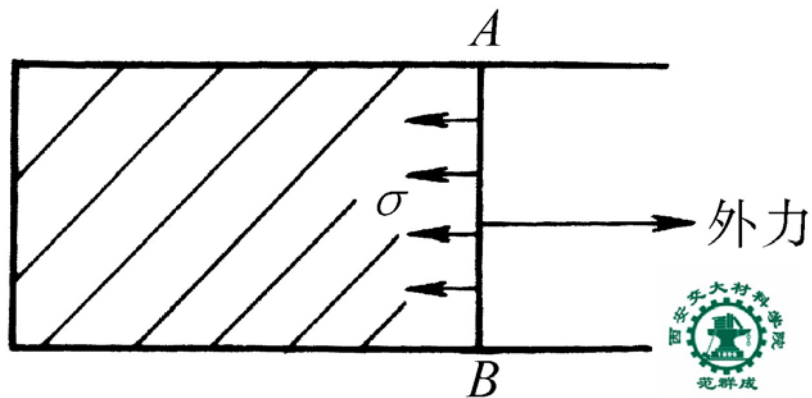
3. 位错与溶质原子的化学交互作用

溶质原子与扩展位错的层错区发生化学交互作用，形成与基体中溶质原子浓度不同的浓度，从而阻碍扩展位错的运动。这种分布在扩展位错的层错区中的溶质原子称为铃木(Suzuki)气团。



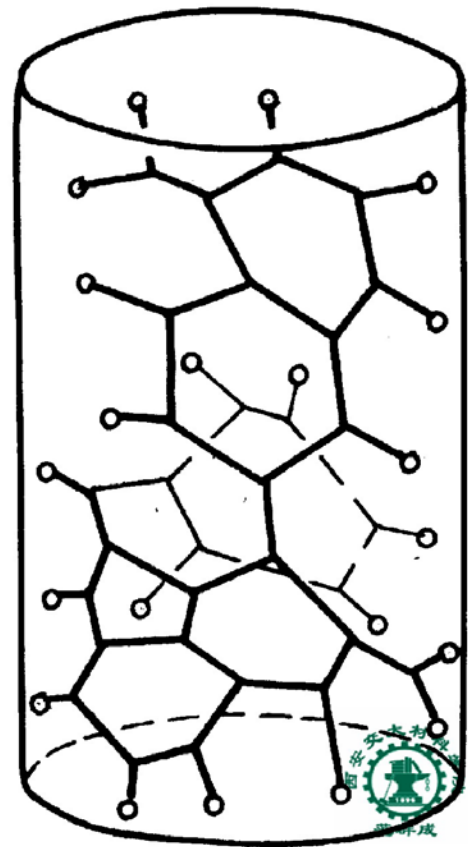
五、位错的线张力

—— 位错线抵抗自身伸长或弯曲的力, 数值上等于单位长度位错的应变能



表面张力示意图

位错线张力应用举例：两端固定的位错线段的曲率半径 R 与所加切应力 τ 的关系



晶体中位错网络示意图

位错线张力应用举例：两端固定的位错线段的曲率半径 R 与所加切应力 τ 的关系

切应力 τ 对 ds 段位错的作用力

$$F = \tau b ds = \tau b R d\theta$$

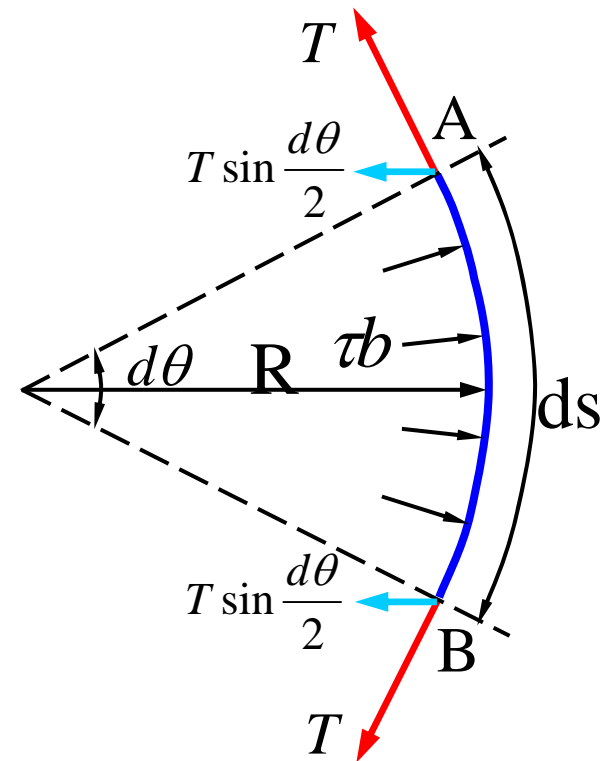
线张力 T 对 ds 段位错的阻力

$$F' = 2T \sin \frac{d\theta}{2} \approx T d\theta$$

由 $F = F'$ ，并令 $T = \frac{Gb^2}{2}$

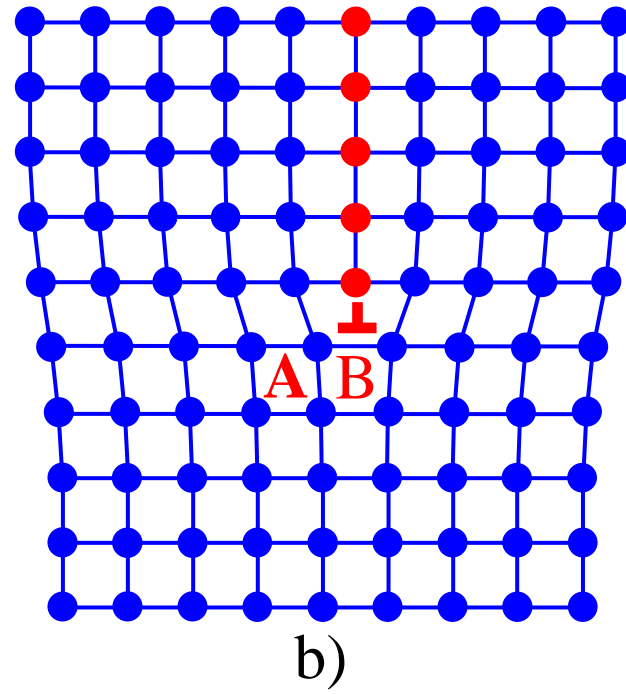
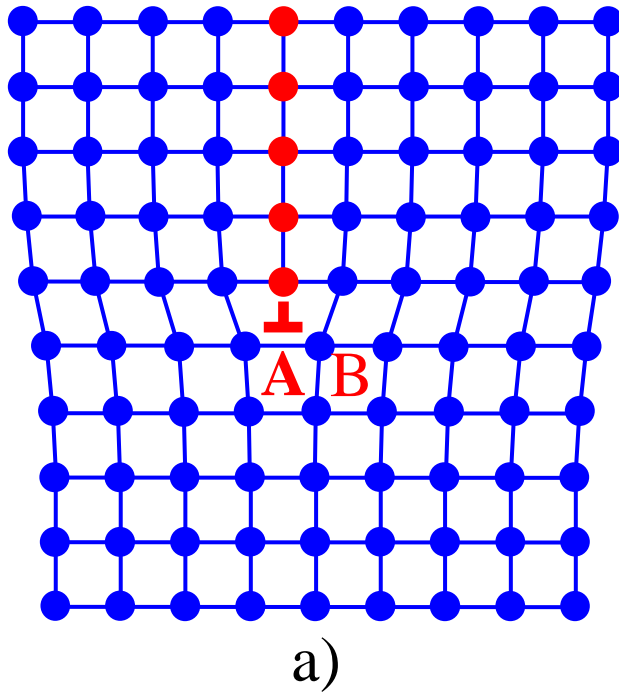
得： $\tau = \frac{Gb}{2R}$

上式表明：两端固定的位错线段的曲率半径 R 与所加切应力 τ 成反比



六、位错运动的点阵阻力—P-N力

在无其他任何阻力的情况下，位错从一个点阵对称位置运动到相邻对称位置所需克服的阻力称为点阵阻力，也叫派-纳 (P-N) 力. 用 τ_{P-N} 表示



刃位错从一个点阵对称位置 A (a) 运动到相邻对称位置 B (b)

根据复杂且尚不精确的推导可得：

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

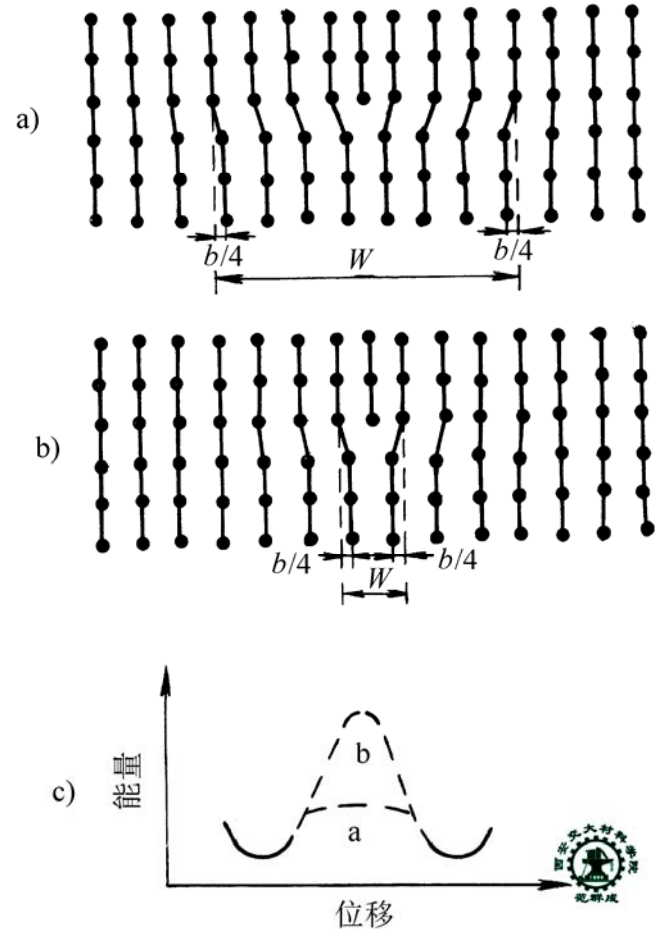
$$= \frac{2G}{1-\nu} \exp\left[-\frac{2\pi a}{b(1-\nu)}\right]$$

式中, a — 滑移面的面间距

b — 滑移方向上的原子间距

ν — 泊松比

w — 位错宽度 $w = \frac{a}{1-\nu}$



位错宽度 w 的大(a)小(b)及其对位错易动性的影响(c)

讨论:

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

- (i) 位错滑移发生在面间距最大的面内及原子间距最小的方向上
- (ii) w 越大, 则 τ_{P-N} 越小, 位错越易动
- (iii) w 的大小取决于晶体结构及结合键
共价和离子晶体: w 小, 位错不易动
金属晶体: w 大, 位错易动. 其中,
bcc 比fcc 和 cph 的 τ_{P-N} 大

七、晶体表面对位错的作用力—映像力

晶体表面对其内侧附近的位错具有作用力，可以看成是其表面外侧的“映像位错”对他的作用力，故称其为映像力。

1. 自由表面对位错的吸引力

位错具有弹性应变能 E ，其大小与位错应力场作用半径 R 有关。当位错与晶体自由表面的距离 λ 小于 R 时， E 随 λ 减小而减小
根据作用力与能量的关系：

$$\vec{F} = -\nabla E$$

式中“ $-$ ”表示作用力指向能量下降的方向。
故自由表面对位错产生吸引力。

2. 映像位错及其吸引力

由于晶体自由表面处无应力，故设置在表面外侧的映像位错与真实位错的应力场的叠加在自由表面必须处处为零。映像位错对真实位错的吸引力就是自由表面对真实位错的吸引力

以螺位错为例：

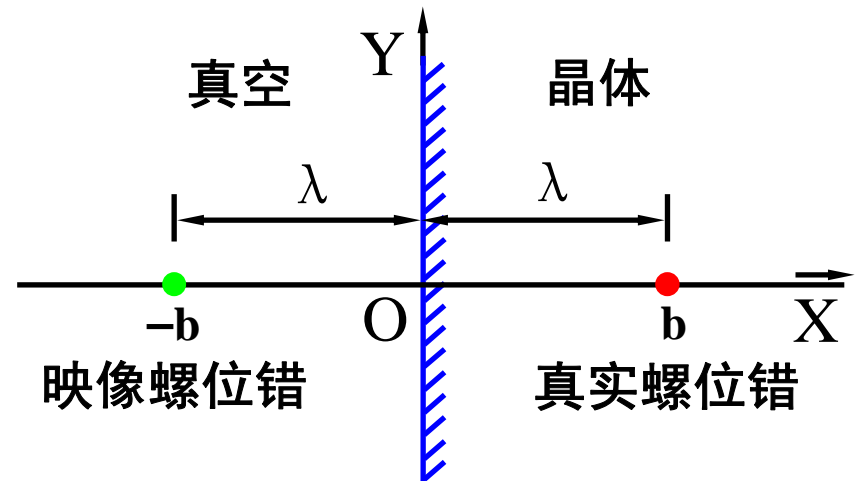
真实螺位错的应变能

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{\lambda}{r_0}$$

映像力 $\vec{F} = -\nabla E = \frac{Gb^2}{4\pi\lambda}$

映像位错对真实位错

的吸引力 $f = \frac{Gb^2}{2\pi(2\lambda)} = \frac{Gb^2}{4\pi\lambda}$



平直自由表面

平直自由表面附近的
螺位错及其映像位错

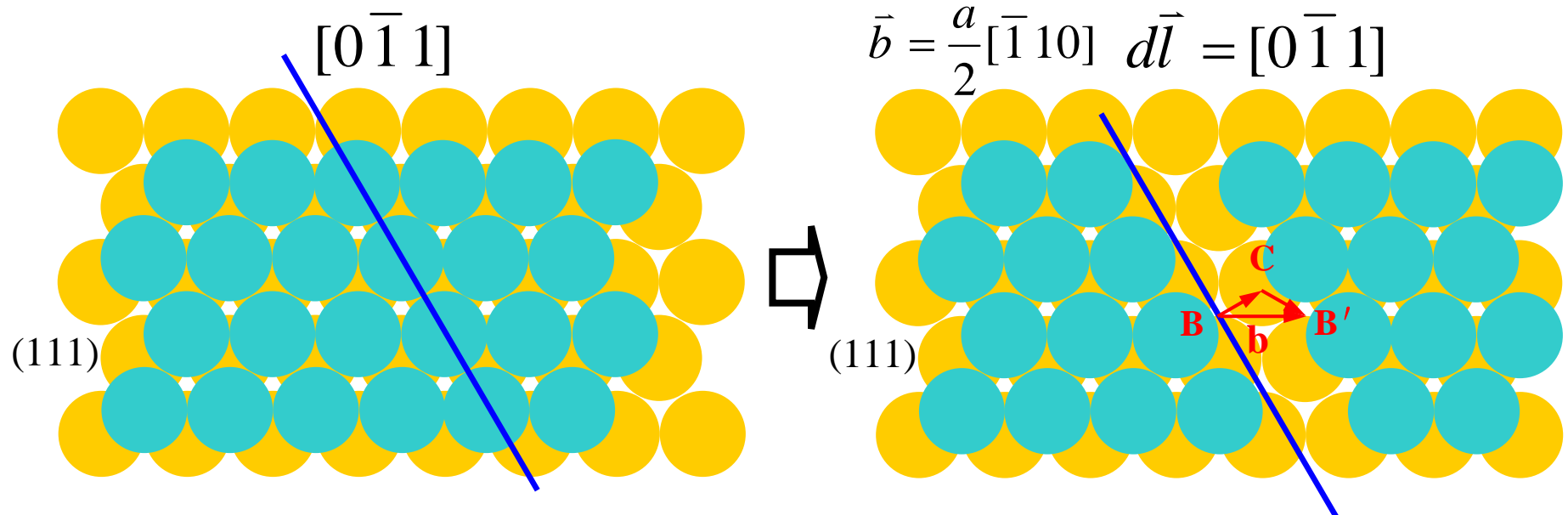
第五节 实际晶体 结构中的位错

THE DISLOCATION IN ACTUAL CRYSTAL STRUCTURE

全位错
堆垛层错
不全位错
位错反应

一、全位错

1. 定义 — 柏氏矢量等于晶体点阵矢量的位错称为全位错，柏氏矢量最短的称单位位错



2. 金属晶体结构中常见单位位错的柏氏矢量

fcc	bcc	cph
$\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$	$\frac{a}{2} \langle 111 \rangle$	$\frac{a}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$

二、堆垛层错

1. 定义 ——晶体中正常堆垛次序发生错误的一种原子组态，属于面缺陷。

2. 层错能

形成层错时几乎不产生晶格畸变，但它破坏了晶体的正常周期性，使电子发生反常的衍射效应，故使能量有所升高。堆垛层错使晶体能量升高的部分称为堆垛层错能，简称层错能。单位面积的层错能称为比层错能

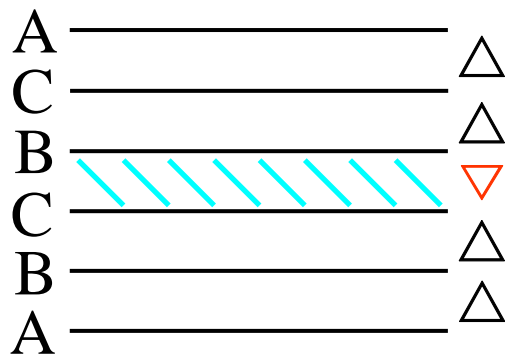
一些金属的比层错能

金	属	银	金	铜	铝	镍	钴
比层错能 (J/m^2)		0.02	0.06	0.04	0.20	0.25	0.02

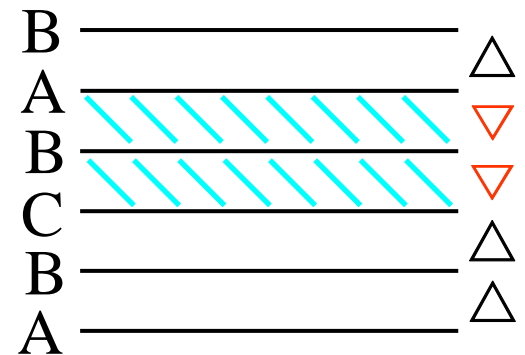
3. 面心立方晶体中的几种堆垛层错



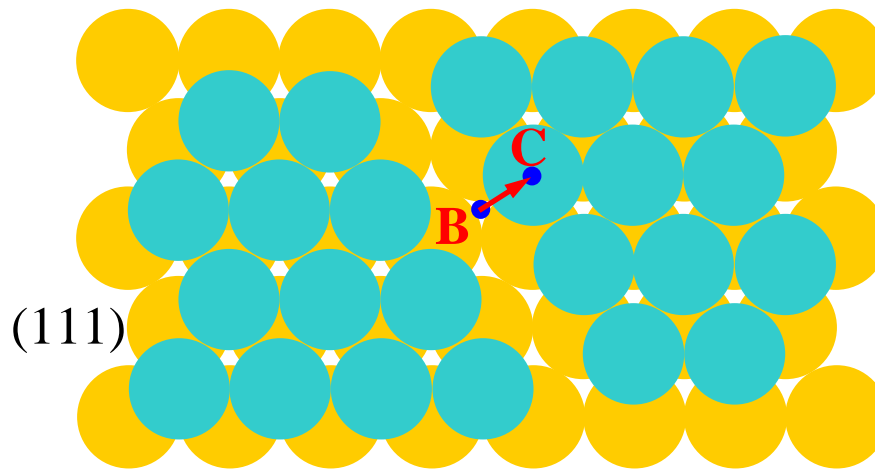
(a) 正常堆垛次序



(b) 抽出一层(A)型



(c) 插入一层(B)型



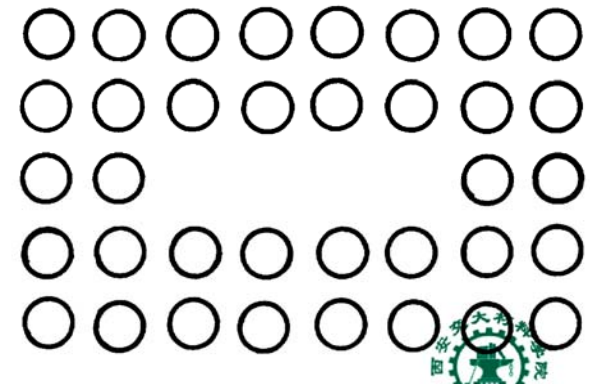
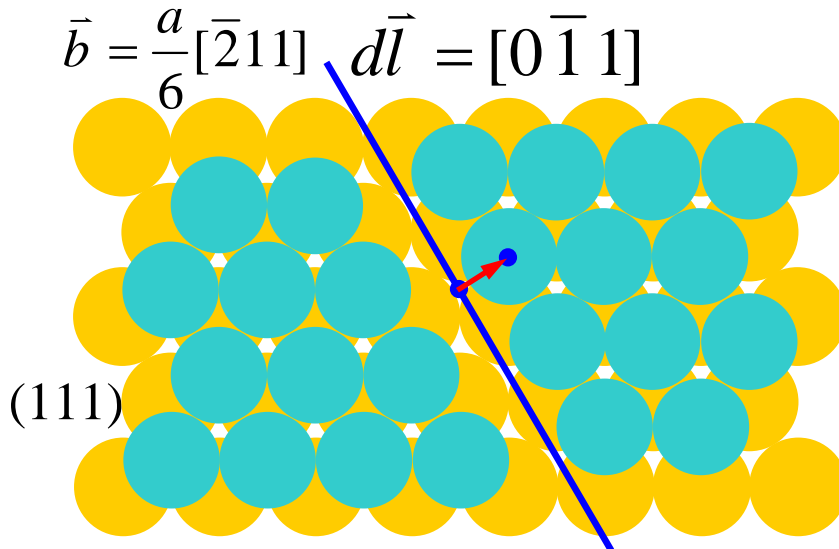
(d) 滑移($a\langle 112 \rangle/6$)型

三、不全位错

1. 定义 — 柏氏矢量不等于晶体点阵矢量整数倍的位错称为不全位错，或分位错

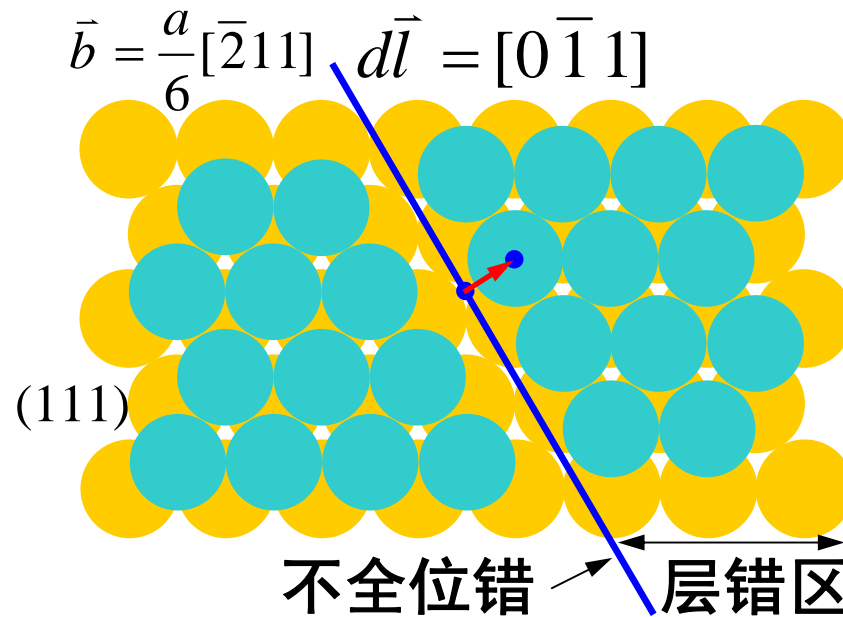
2. 面心立方晶体中常见的不全位错

名 称	柏氏矢量	位错类型	运动方式
肖克莱不全位错	$a \langle 112 \rangle / 6$	刃型 螺型 混合型	只能滑移
弗兰克不全位错	$a \langle 111 \rangle / 3$	刃型	只能攀移



3. 不全位错与层错的联系

晶体中的不全位错总是与层错区紧密相连



但晶体中的层错区并不总是与不全位错相连

四、位错反应

1. 位错反应的条件

① 几何条件: $\sum_{i=1}^n \vec{b}_i = \sum_{j=1}^m \vec{b}'_j$ ② 能量条件: $\sum_{i=1}^n |\vec{b}_i|^2 > \sum_{j=1}^m |\vec{b}'_j|^2$

式中, \vec{b}_i 为反应前各位错的柏氏矢量
 \vec{b}'_j 为反应后各位错的柏氏矢量

课堂练习: 下述位错反应能否自发进行?

(1) fcc中 $\frac{a}{2}[110] + \frac{a}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow a[100]$

(2) fcc中 $\frac{a}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{2}11] + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$

解: (1) 满足几何条件, 但 $\left(\frac{\sqrt{2}a}{2}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{2}a}{2}\right)^2 = a^2$, 不能

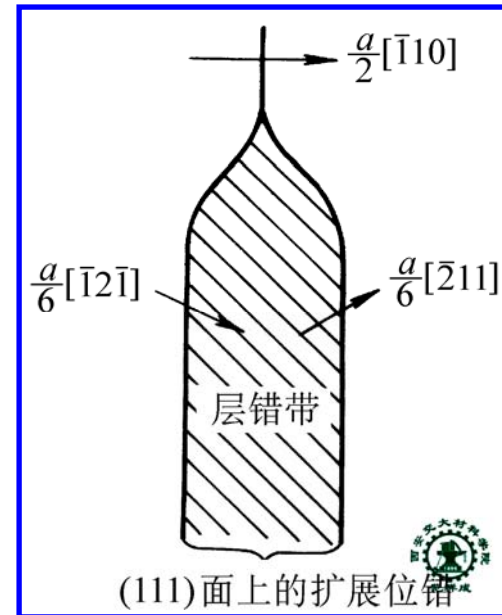
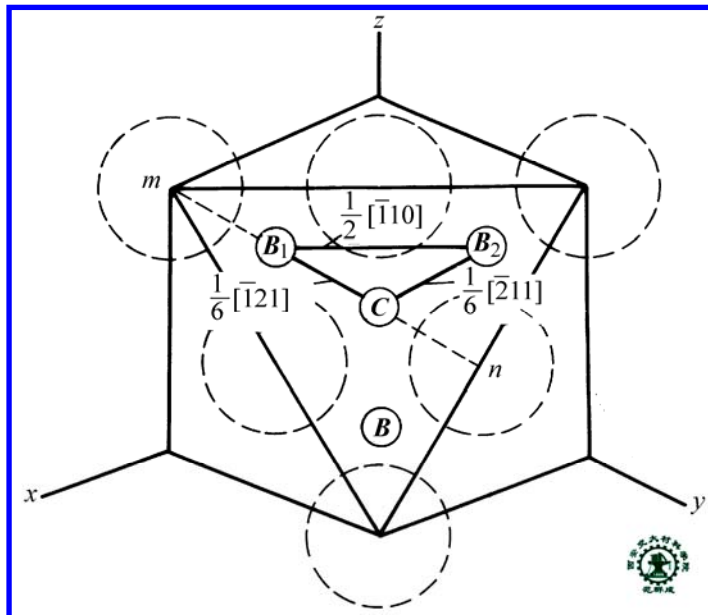
(2) 满足几何条件, 且 $\left(\frac{\sqrt{2}a}{2}\right)^2 > \left(\frac{\sqrt{6}a}{6}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{6}a}{6}\right)^2$, 能

2. 位错反应举例

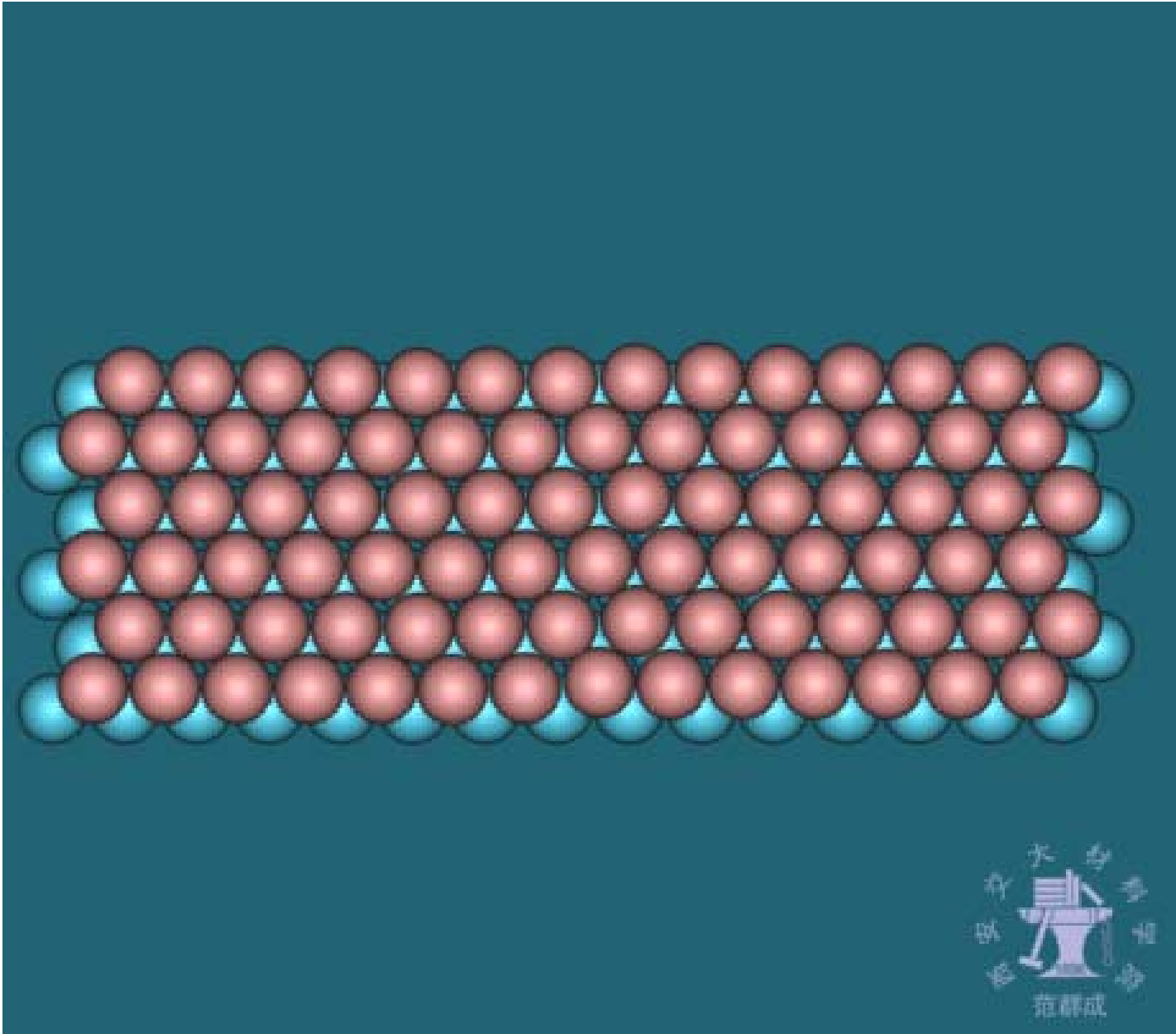
1) 面心立方晶体中的扩展位错

面心立方晶体中位于 $\{111\}$ 面内的单位位错可分解为两个肖克莱不全位错及它们之间的层错区，称其为扩展位错

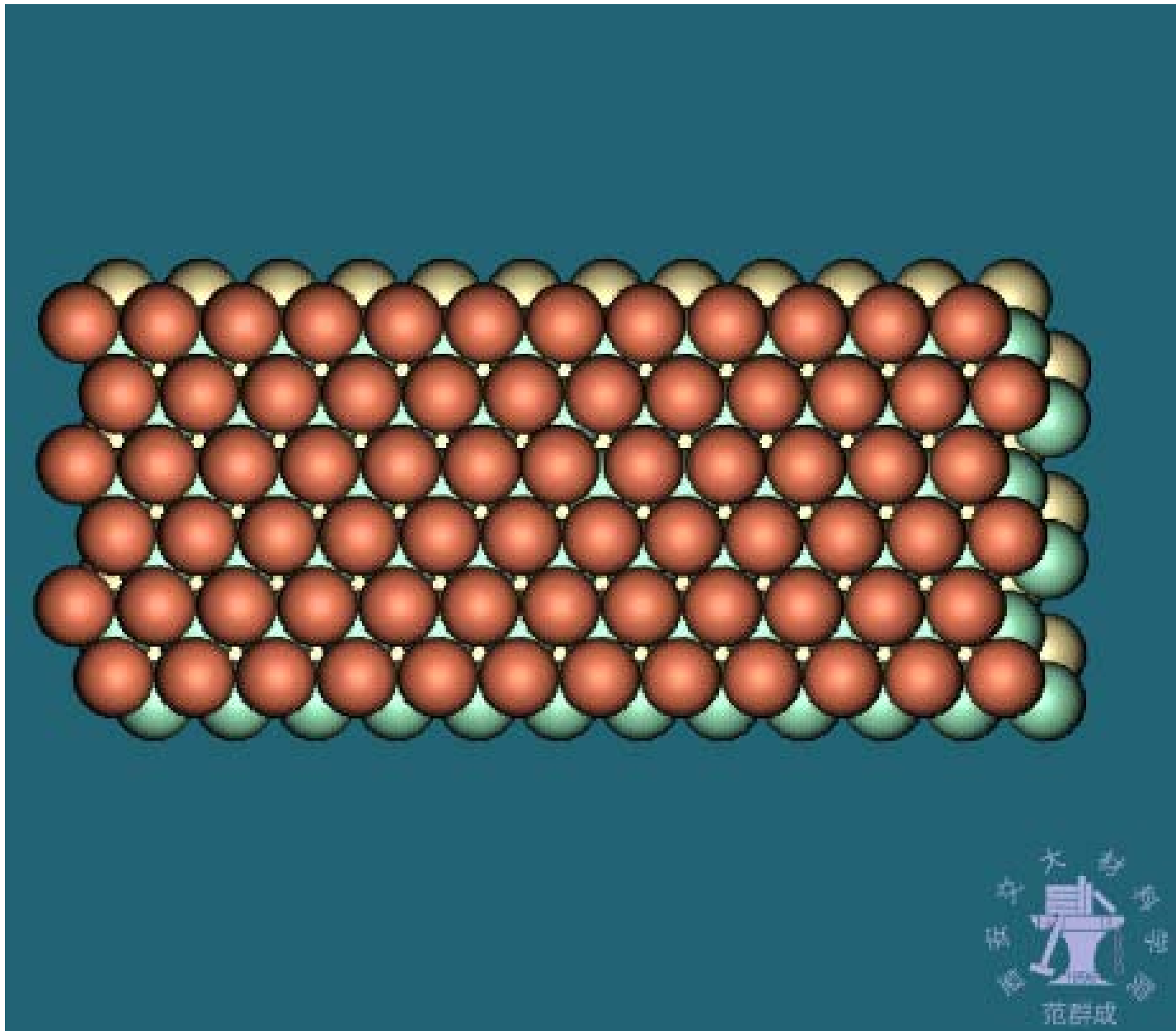
例如：
$$\frac{a}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{2}11] + \text{层错} + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$$

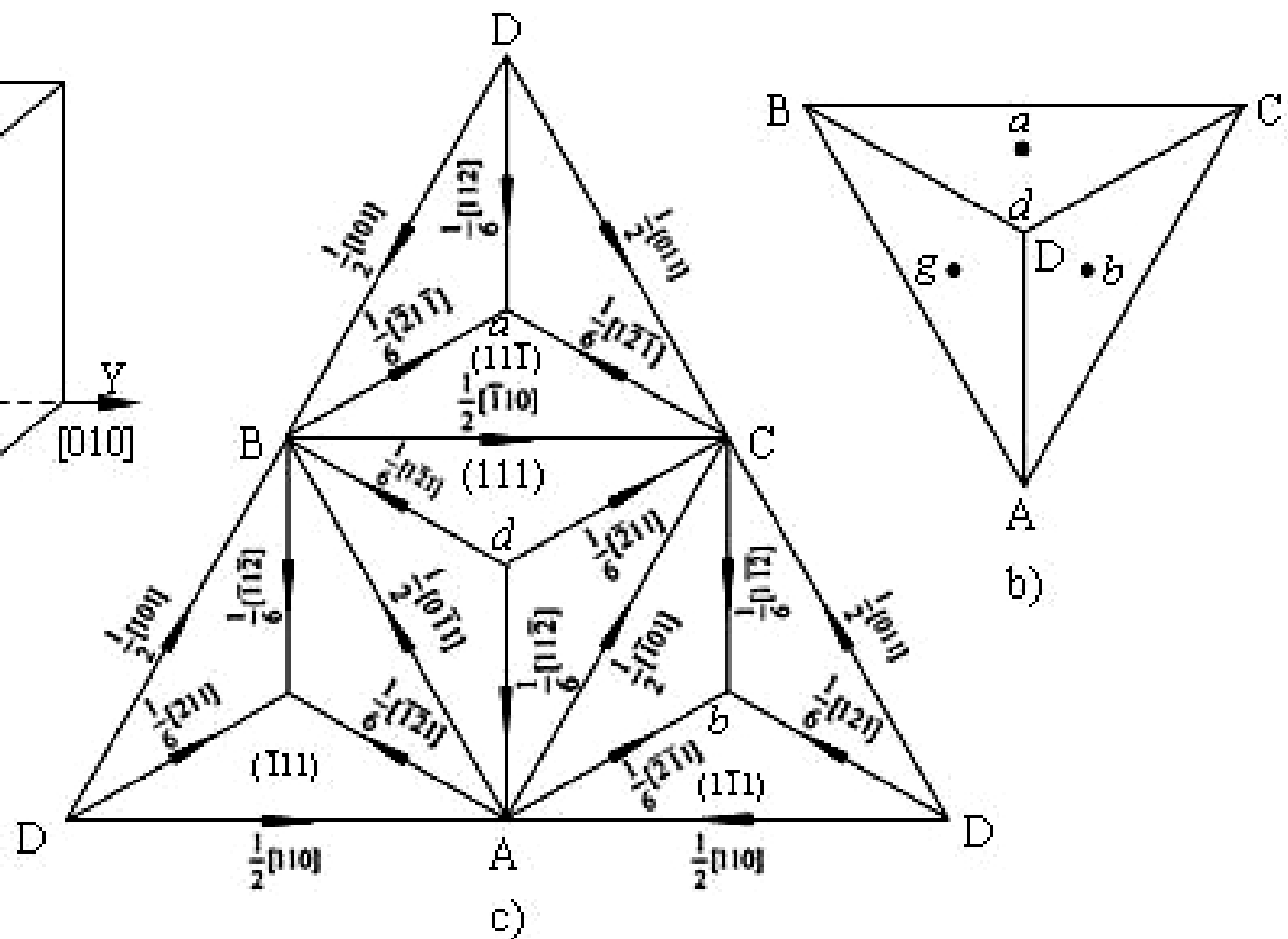


单位刃位错分解为扩展位错



单位混合位错分解为扩展位错





汤普森四面体及汤普森记号

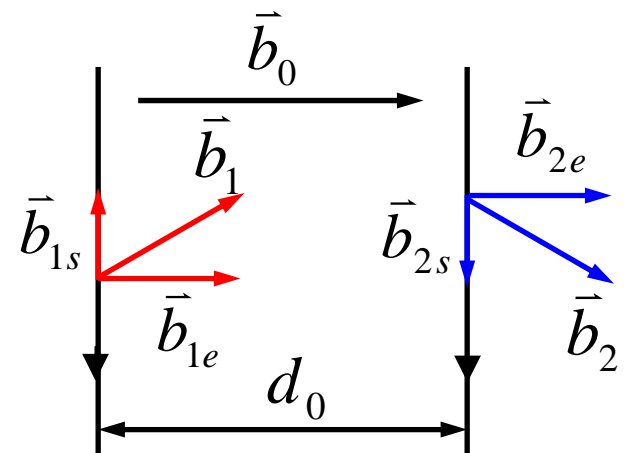
a) 面心立晶胞中的 $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ 四面体； b) 汤普森四面体； c) 汤普森四面体的展开

2) 扩展位错平衡宽度

扩展位错中两个分位错间的平衡距离称为扩展位错平衡宽度 d_0 。两分位错间的相互作用合力为斥力，使两分位错相互远离；两分位错间的层错对两个分位错施加吸引力，阻止两分位错相互远离。当作用在两分位错上的斥力与引力相平衡时，扩展位错达到平衡宽度。

$$\text{故, } d_0 = \frac{G\vec{b}_{1e} \cdot \vec{b}_{2e}}{2\pi(1-\nu)\gamma} + \frac{G\vec{b}_{1s} \cdot \vec{b}_{2s}}{2\pi\gamma} \approx \frac{G\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2}{2\pi\gamma}$$

式中, $\vec{b}_{1e}, \vec{b}_{1s}, \vec{b}_{2e}, \vec{b}_{2s}$ 分别为
两个分位错柏氏矢量的刃、螺分量
G — 晶体的切弹模量
 γ — 晶体的比层错能



例题8 设某fcc晶体的切弹模 $G=4.8 \times 10^{10} \text{Pa}$ ，晶格常数 $a=0.36 \text{nm}$ ，比层错能 $\gamma = 0.04 \text{J/m}^2$ 。试精确计算 (111) 面内 $\vec{b} = a[\bar{1}10]/2$ 的刃型单位位错所分解成的扩展位错的平衡宽度

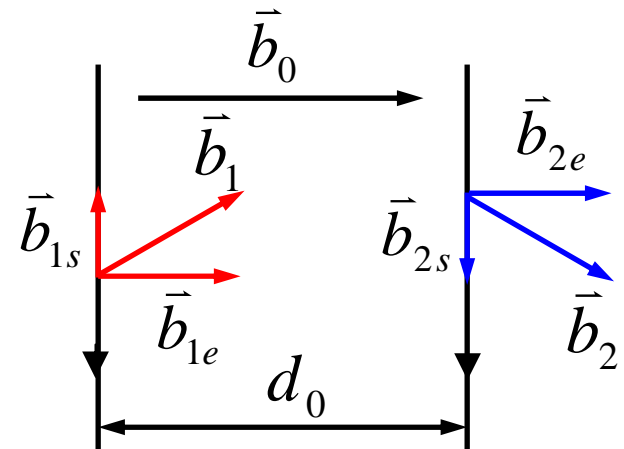
解： $\frac{a}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{2}11] + \text{层错} + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$

$$\vec{b}_{1e} = \vec{b}_{2e} = \frac{\sqrt{2}a}{4} \quad \vec{b}_{1s} = -\vec{b}_{2s} = \frac{\sqrt{6}a}{12}$$

$$d_0 = \frac{Gb_{1e}b_{2e}}{2\pi(1-\nu)\gamma} - \frac{Gb_{1s}b_{2s}}{2\pi\gamma} = \frac{Ga^2}{48\pi\gamma} \frac{2+\nu}{1-\nu}$$

代入 $G, a, \gamma, \nu = 1/3$

得： $d_0 \approx 3.6 \text{nm}$



3) 层错能对扩展位错平衡宽度的影响

层错能越低，层错对扩展位错中两个分位错的吸引力越弱，则扩展位错的平衡宽度越大。

一些金属的比层错能和扩展位错平衡宽度

金	属	银	金	铜	铝	镍	钴
比层错能 (J/m ²)		0.02	0.06	0.04	0.20	0.25	0.02
扩展位错平衡宽度 (原子间距)		12.0	5.7	10.0	1.5	2.0	35.0

第六节 晶体中的界面

INTERFACE IN CRYSTAL

晶界的结构与晶界能

表面及表面能

表面吸附与晶界内吸附

润湿行为

界面能与显微组织的变化

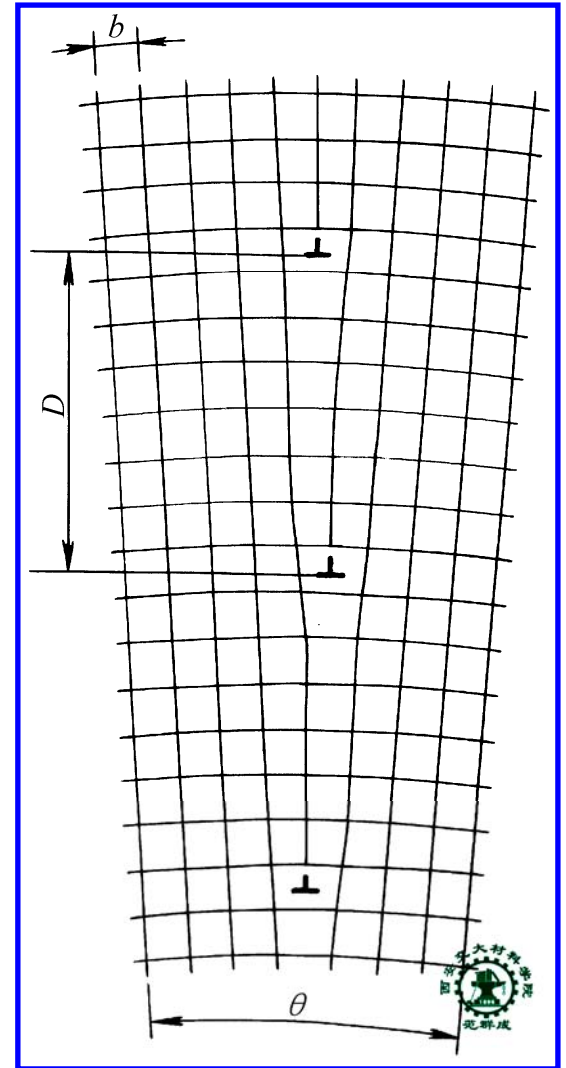
一、晶界的结构与晶界能

1. 小角度晶界的结构

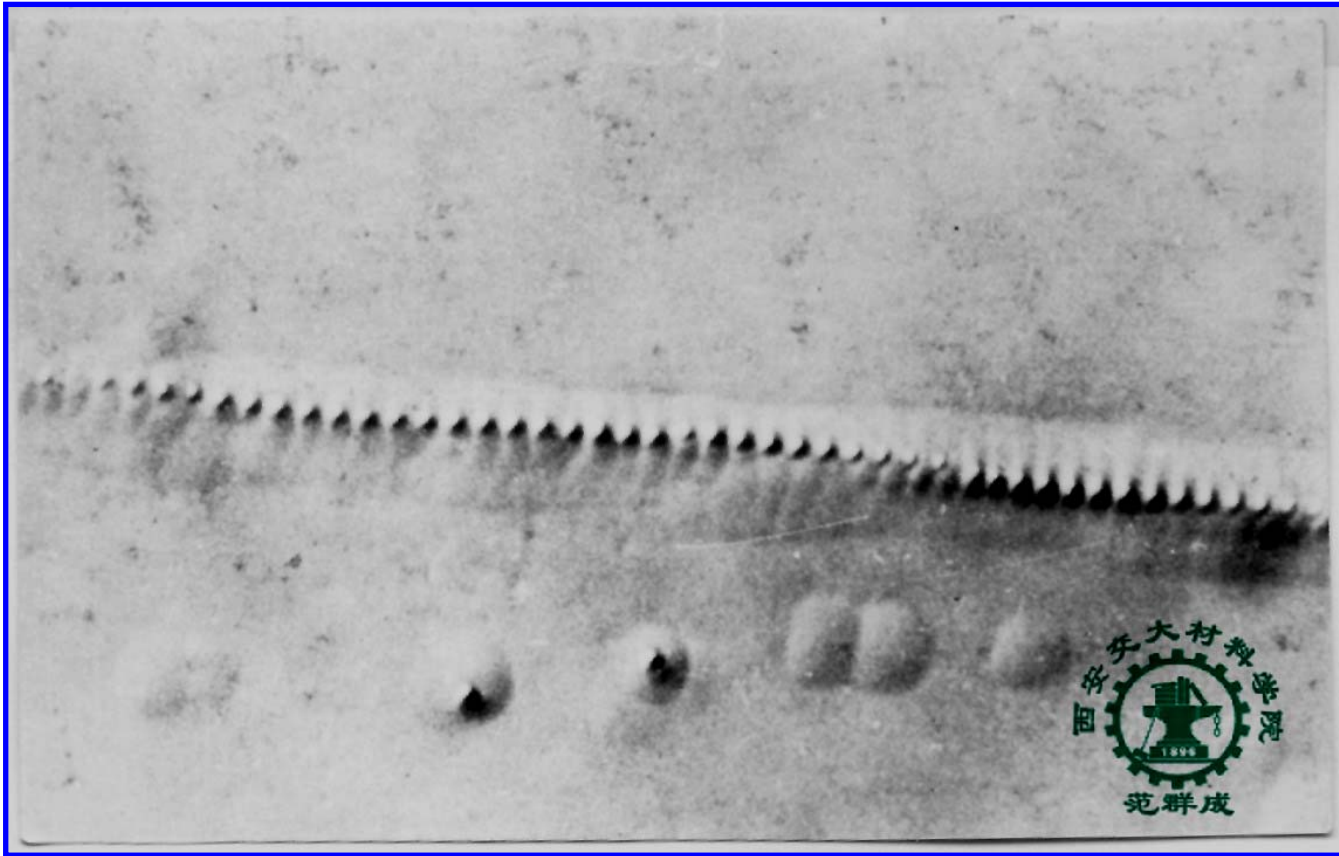
小角度晶界是指相邻晶粒间界面两侧晶粒的位向差小于 10° ($\theta < 10^\circ$)的界面, 也称为亚晶界。

典型的结构是对称倾斜结构, 由多个柏氏矢量 b 相同的刃位错排列成的位错墙。位错间距 D 为:

$$D = \frac{b}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \approx \frac{b}{\theta}$$



对称倾斜小角度晶界的结构

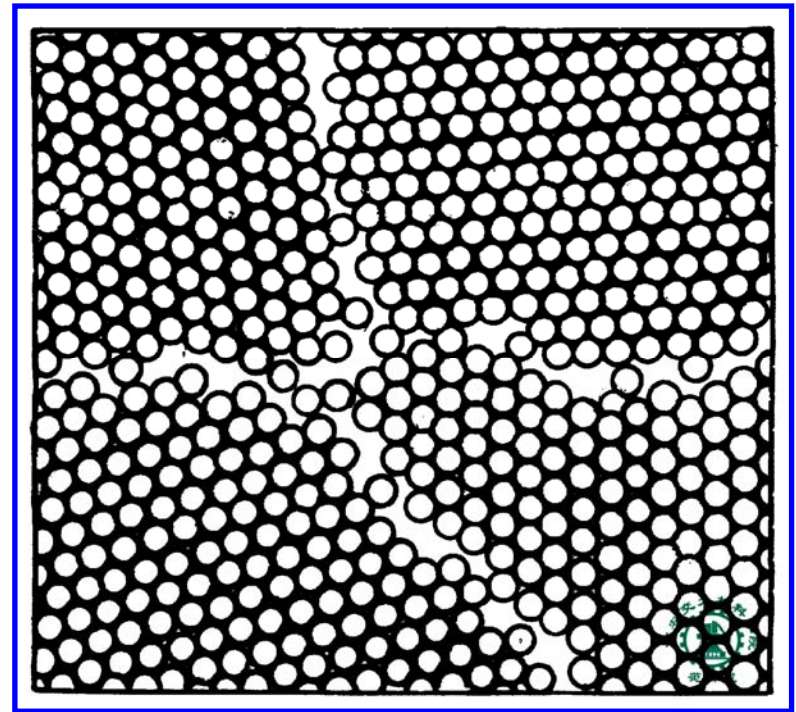


晶体中的小角度晶界与位错蚀坑 (1500 \times)

2. 大角度晶界

大角度晶界是指相邻晶粒间界面两侧晶粒的位向差大于 10° ($\theta > 10^\circ$)的界面。

大角度晶界构造极其复杂，有各种不同的结构模型。



大角度晶界结构示意图

3. 晶界能

——单位面积晶界使晶体能量增高的部分。

1) 小角度晶界的晶界能 γ_G

$$\gamma_G = \gamma_0 \theta (B - \ln \theta)$$

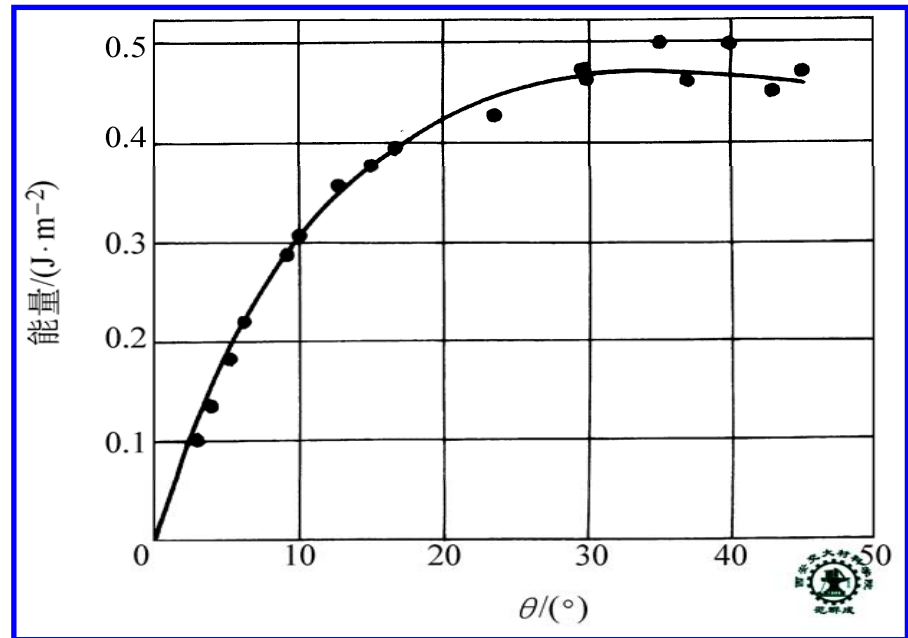
式中, $\gamma_0 = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)}$ 为材料常数, 其中 G 为切

弹性模量, b 为柏氏矢量, ν 为泊松比
B —— 与位错中心区半径有关的积分常数
 θ —— 位向差

2) 大角度晶界的晶界能

大角度晶界的晶界能高于小角度晶界，但与位向差无明显关系，可近似看成材料常数。

大角度晶界能与材料弹性模量有很好的对应关系。



Cu晶体的晶界能与位向差的关系

一些材料的大角度晶界能和弹性模量的比较

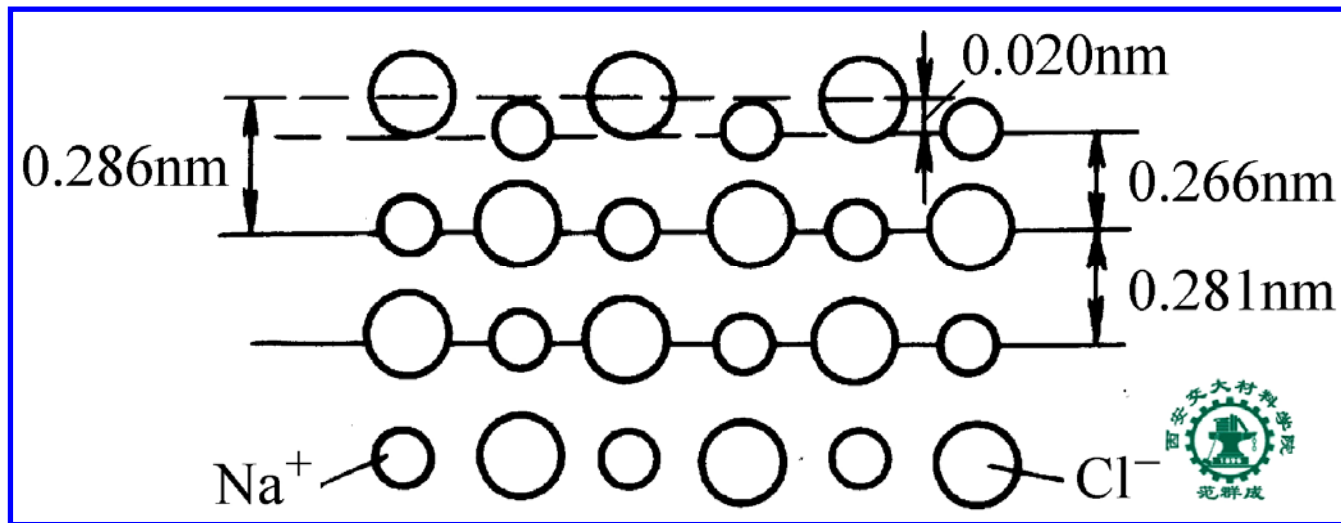
材 料	Au	Cu	Fe	Ni	Sn
大角度晶界能 (J/m ²)	0.36	0.60	0.78	0.69	0.16
弹性模量 (GPa)	77	115	196	193	40

二、表面及表面能

1. 晶体表面原子结合的特点

与内部原子相比, 表面原子的结合有如下特点

- i) 存在不饱和键力
- ii) 存在范德瓦耳斯力



NaCl表面原子的切面图

2. 表面能 γ_s

——单位面积表面使晶体能量增高的部分

$$\gamma_s \approx 3\gamma_G \approx 0.05Eb$$

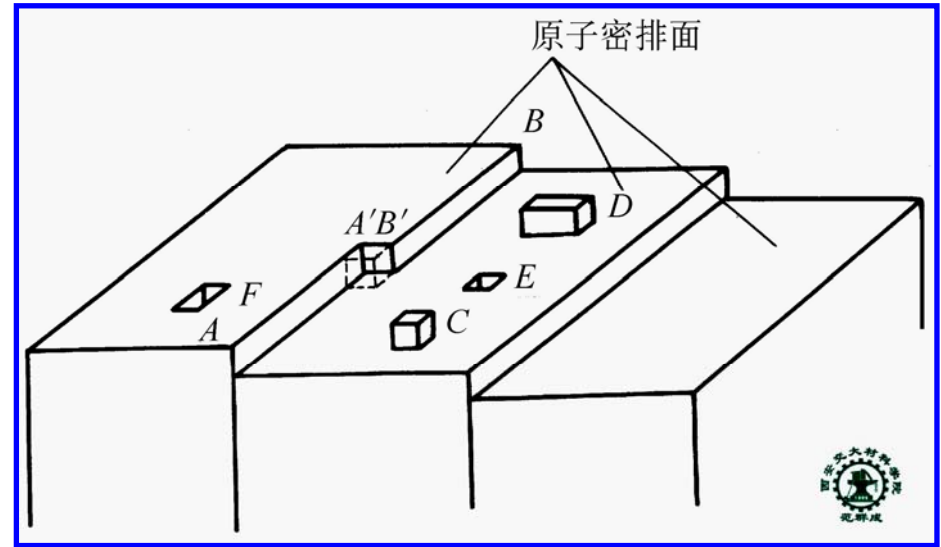
式中， γ_G — 晶界能

E — 弹性模量

b — 表面的原子间距

3. 晶体的表面形貌

通常是原子
最密排面或次密
排面



晶体表面的台阶及凹凸不平

4. 表面能对材料性能的影响

- i) 使纳米粉末发生性能突变
- ii) 是粉末烧结的驱动力

三、表面吸附与晶界内吸附

1. 吸附现象

— 外来原子或气体分子在界面上富集的现象

吸附现象的特点：

- i) 使体系能量降低，是自发过程.
- ii) 是放热过程. 温度降低有利于吸附；温度升高有利于解吸.

2. 表面吸附

{ 物理吸附
化学吸附

- 1) 物理吸附：由表面的范德瓦耳斯力所致，无选择性，吸附热较小
- 2) 化学吸附：由表面的不饱和键力所致，有选择性（必须形成化合物），吸附热较大
- 3) 吸附现象应用举例
 - i) 净化和分离技术
 - ii) 催化技术
- 4) 吸附的有害作用

3. 晶界内吸附

晶体内杂质或合金元素在晶界处富集的现象

1) 原因：异类原子与晶界交互作用

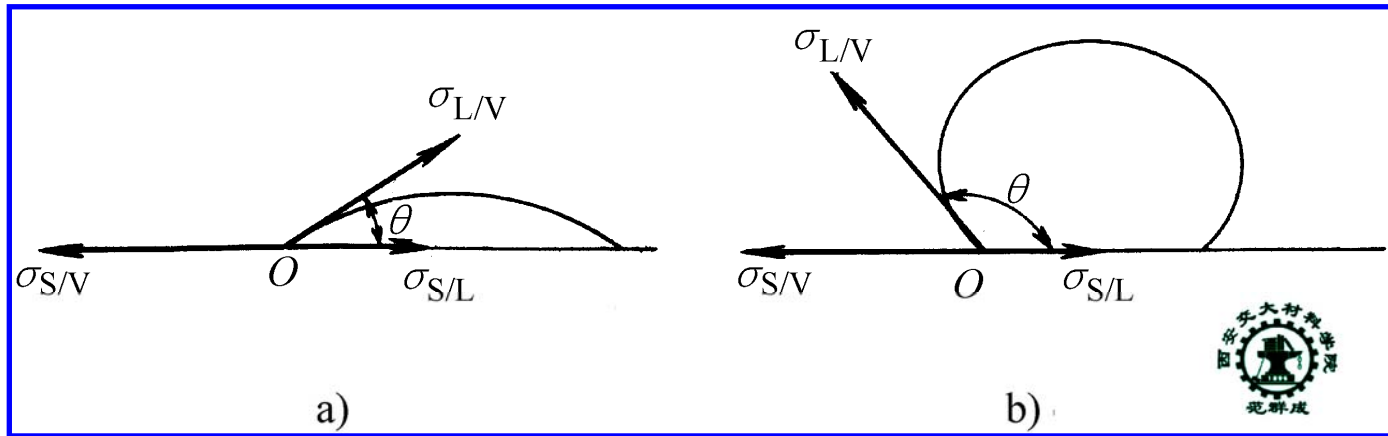
2) 晶界内吸附的作用

i) 有害作用：(P、Sb、Sn)使晶界脆化，
奥氏体不锈钢的晶间腐蚀...

ii) 有益作用：硼提高钢的淬透性，
钛防奥氏体不锈钢的晶间腐蚀

四、润湿行为 —— 液体在固体表面铺展

1. 润湿性与界面张力



液滴在固体表面润湿(a) 与不润湿(b) 的情况

$$\sigma_{S/V} = \sigma_{S/L} + \sigma_{L/V} \cos \theta$$

$\theta \rightarrow 0$ 完全润湿

$\theta < 90^\circ$ 润湿

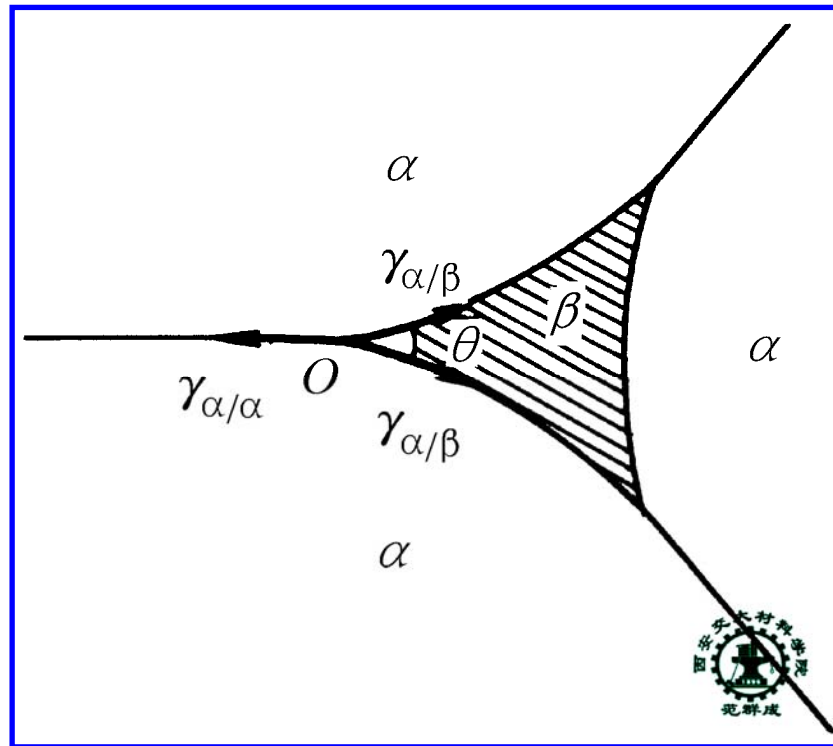
$\theta > 90^\circ$ 不润湿

$\theta \rightarrow 180^\circ$ 完全不润湿

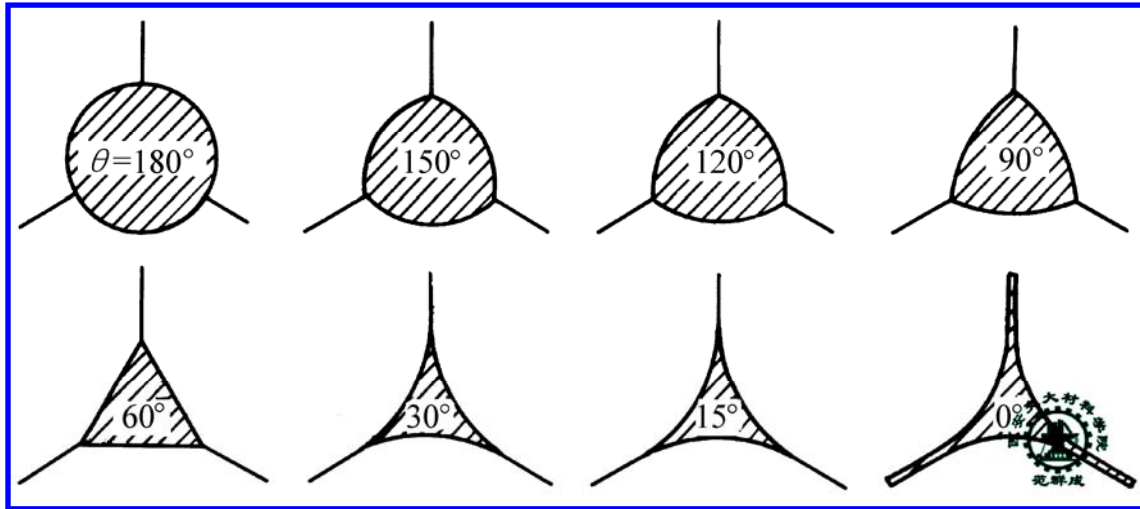
润湿性取决于面张力($\sigma_{S/L}$, $\sigma_{L/V}$, $\sigma_{S/V}$)的相对大小

2. 润湿性对材料显微组织的影响

$$\gamma_{\alpha/\alpha} = 2\gamma_{\alpha/\beta} \cos(\theta/2)$$



第二相 β 处于三个 α 晶粒交点时晶界能与相界能的平衡



不同接触角下第二相在晶界上的形状

当 $\theta = 0$ ，第二相呈连续薄膜 { 低熔点的，引起材料的热脆性
脆性的，引起材料的室温脆性

当 $\theta \neq 0$ ，第二相呈颗粒形状 { θ 小时，尖角状，硬质颗粒引起大的应力集中
 θ 大时，球状，硬质颗粒起强化作用

3. 润湿行为在其它方面的应用举例

i) 炼钢

钢液 / 炉衬：润湿不好，炉衬易受蚀

钢液 / 炉渣：润湿不好，不易排渣

钢液 / 铸模：润湿适中

ii) 钎焊

焊料与母材必须润湿

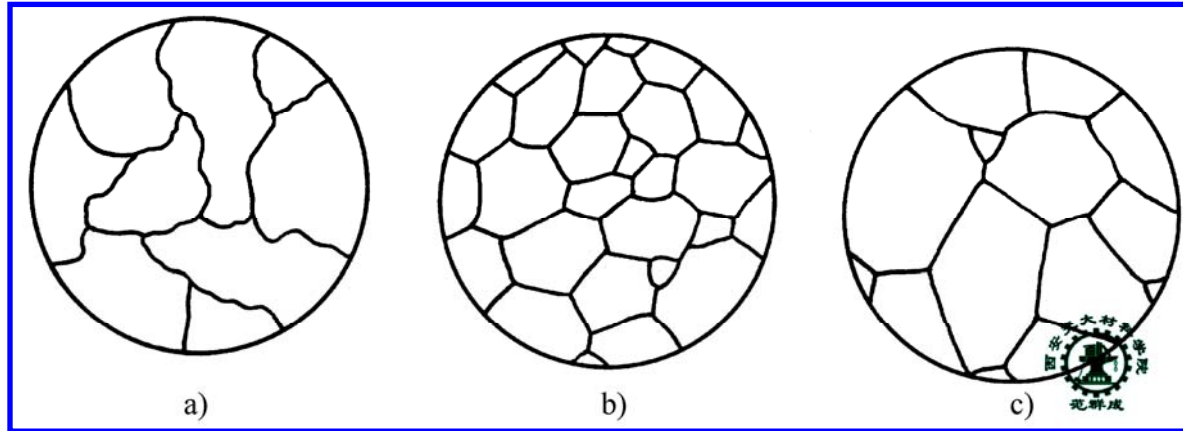
iii) 粉末液相烧结

液相与粉末必须润湿

iv) 铸造孕育处理

形核剂与金属液必须润湿

四、界面能与显微组织的变化



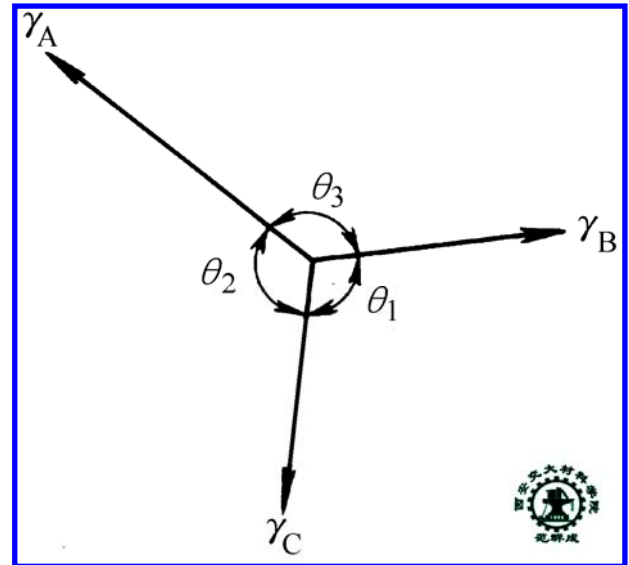
铸态金属晶粒 (a) 与退火态晶粒形状 (b、c)

1. 三岔晶界的平衡

$$\frac{\gamma_A}{\sin \theta_1} = \frac{\gamma_B}{\sin \theta_2} = \frac{\gamma_C}{\sin \theta_3}$$

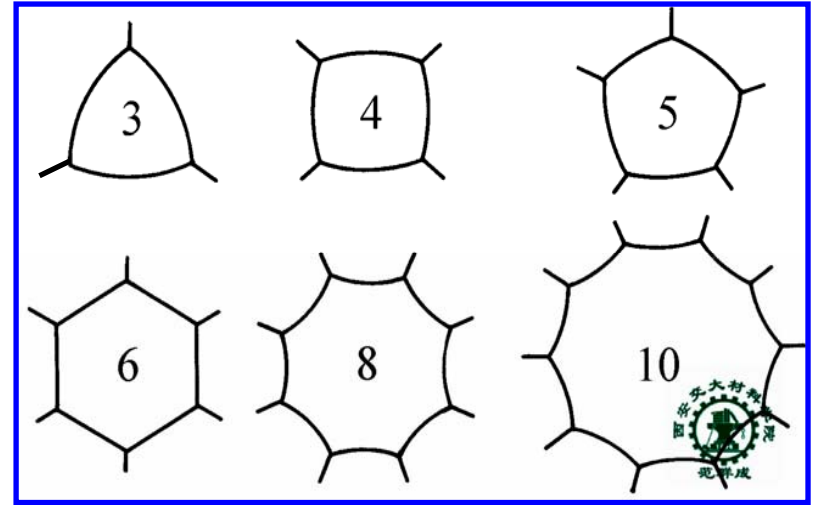
$$\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 120^\circ$$

三晶粒交会点上界面能的平衡关系



2. 晶粒的稳定形状

——六边形
晶界弯曲的多边形
↓
晶界平直的六边形



晶界边数与晶粒形状（二维）

3. 相界能与第二相形状及大小的自发变化

条状 细粒状
↓ ↓
粒状 粗粒状
以减小总界面能

表面能驱动下
的组织变化

