



第三章 晶体缺陷

原子排列偏离完整性的区域 —— 晶体缺陷

点缺陷——在三个方向上尺寸都很小

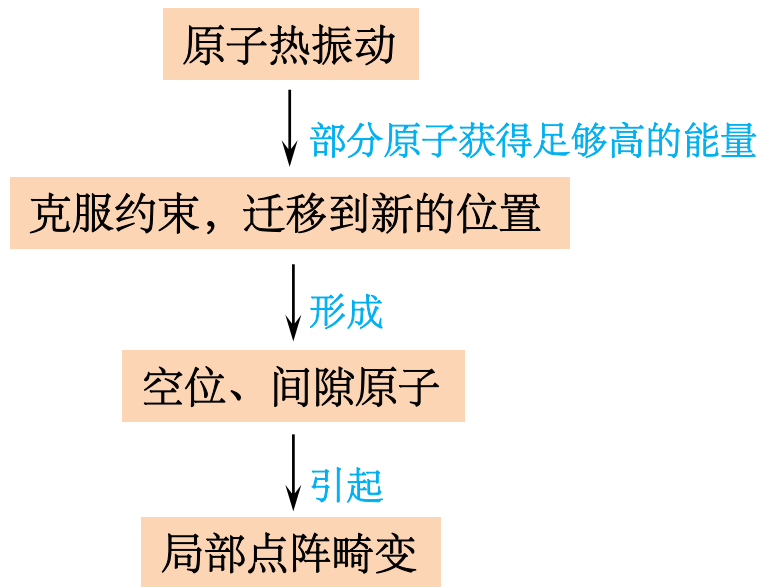
线缺陷——在二个方向上尺寸很小

面缺陷——在一个方向上尺寸很小



第一讲 点缺陷

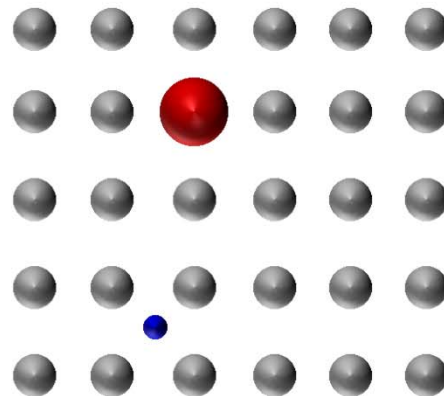
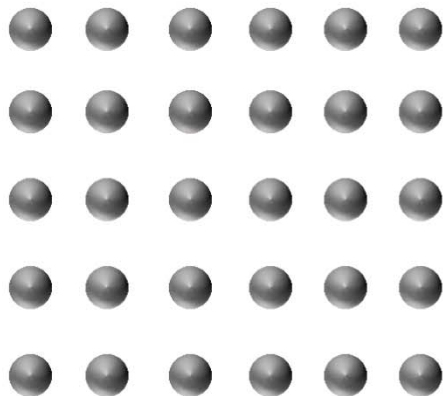
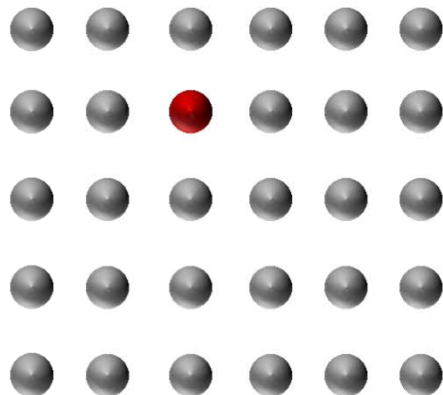
一、点缺陷的形成





二、分类

- 肖脱基缺陷——原子迁移到表面——仅形成空位
- 弗兰克缺陷——原子迁移到间隙中——形成空位-间隙对
- 杂质或溶质原子——间隙式（小原子）或置换式（大原子）





三、点缺陷的平衡浓度

$$c = \frac{n_e}{N} = A e^{-\frac{\Delta E_v}{kT}}$$

n_e — 平衡空位数

N — 原子总数

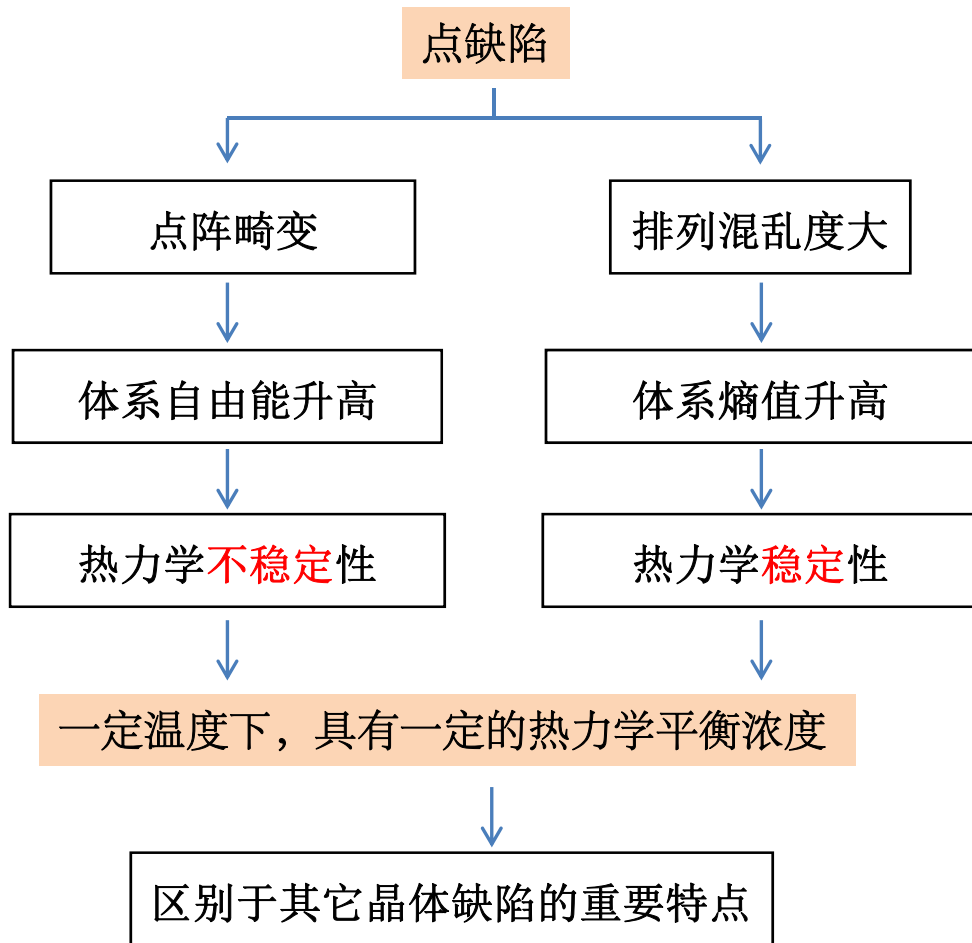
ΔE_v — 每增加一个空位的能量变化

k — 玻尔兹曼常数

T — 绝对温度

其中： A 由振动熵决定的系数，取1~10，通常取1

$$T \uparrow \text{-----} C \uparrow$$





常见金属的空位形成能

金属	ΔE_v (eV)
W	2.20
Fe	1.50
Ni	1.40
Cu	1.15
Ag	1.10
Mg	0.89
Al	0.76
Pb	0.60
Sn	0.50

Cu的空位平衡浓度

温度 (K)	c
100	10^{-57}
300	10^{-19}
500	10^{-11}
700	$10^{-8.1}$
900	$10^{-6.3}$
1000	$10^{-5.7}$



金属中空位浓度的测量

示差膨胀法 D.D

测量宏观热膨胀 $\Delta L/L$ 和微观热膨胀 $\Delta a/a$ 空位浓度 x_v 为:
$$x_v = 3 \left(\frac{\Delta L}{L} - \frac{\Delta a}{a} \right)$$

正电子湮没谱测定法 PAS

- ① 晶体中的空位处的局域电子密度低，可俘获入射的高能正电子。
- ② 被俘获的正电子寿命比完整晶体中的自由电子寿命高，
- ③ 因此，可以用正电子寿命作为空位浓度的度量。



四、离子晶体中的点缺陷

—— 缺陷取决于多原子性、缺陷带电和晶体保持电中性要求

对于 A^+B^- 型离子晶体

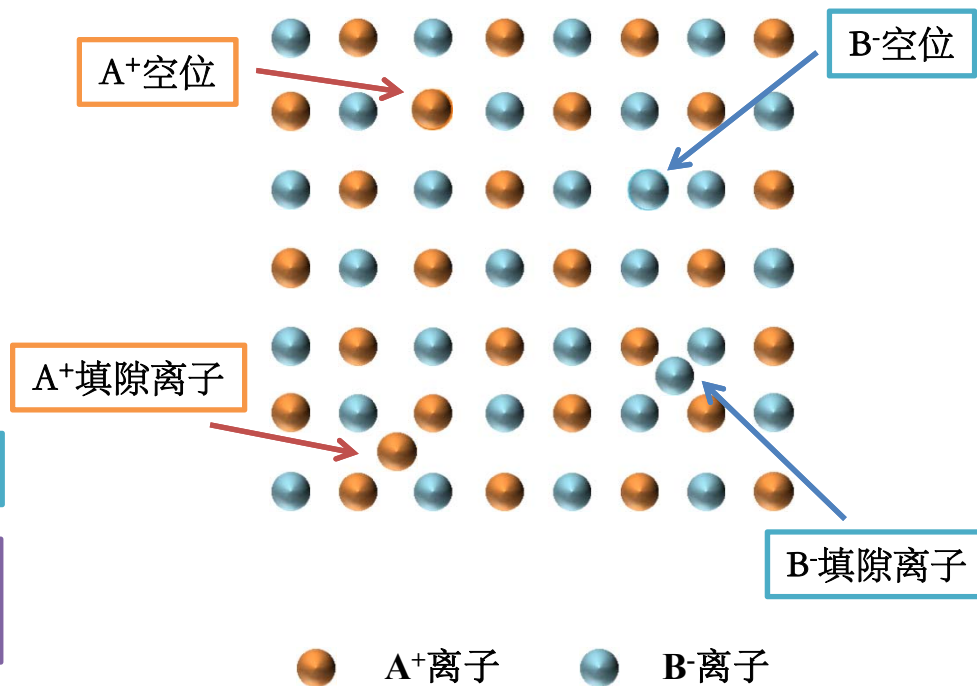
A^+ 空位 A^+ 填隙离子

B^- 空位 B^- 填隙离子

晶体保持电中性：

肖脱基缺陷：正、负空位数量相等

弗兰克缺陷：正、负填隙离子数量相等
正、负空位数量相等





五、有序合金中的点缺陷

有序合金的一种本征点缺陷 ——反位缺陷

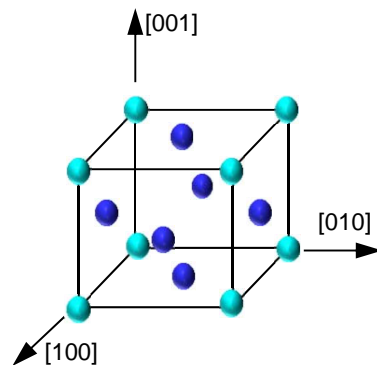
A_3B 型有序相 A原子形成 α 亚晶格
 B原子形成 β 亚晶格

A 原子占据 β 亚晶格格点, 形成 β 位反位缺陷, 记为 A_B
B 原子占据 α 亚晶格格点, 形成 α 位反位缺陷, 记为 B_A

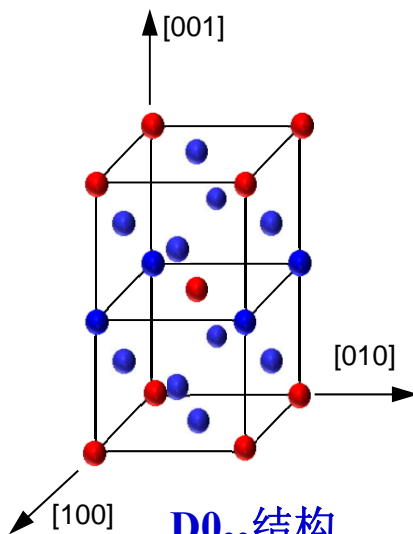
空位形成能 > 反位缺陷形成能

—— 反位缺陷浓度远高于空位浓度

反位缺陷对塑性、强度、抗蠕变性、光学性能、介电性能等有较大影响



$L1_2$ 结构

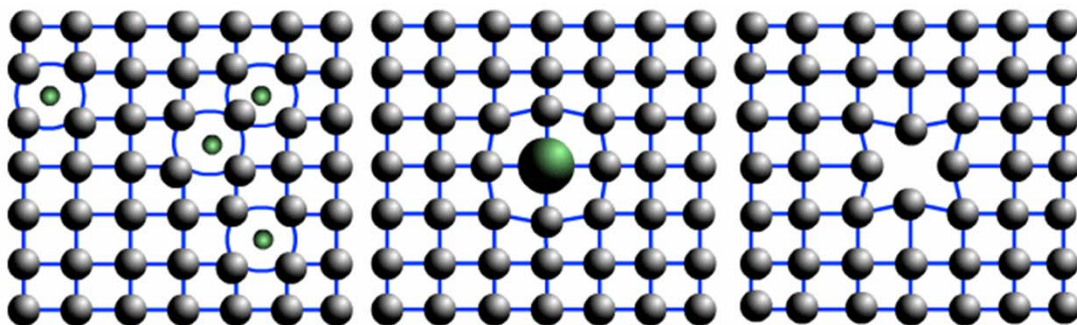


$D0_{22}$ 结构



六、点缺陷对晶体性能的影响

- 电子层面
 - 附加电子散射——电阻 \uparrow
 - 改变电子态——影响物理性能
- 点阵畸变
 - 间隙原子——体积膨胀1~2个原子体积
 - 空位——体积膨胀0.5个原子体积



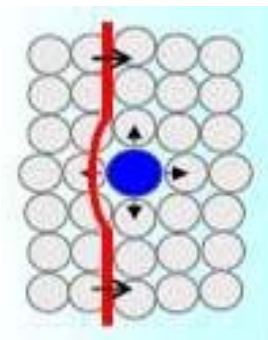
间隙原子

置换原子

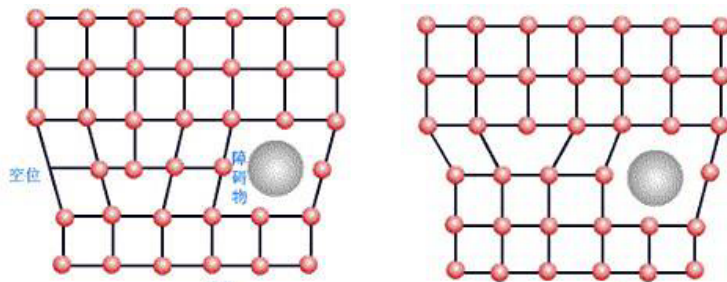
晶格空位



- 屈服强度 \uparrow



点缺陷阻碍塑性变形，提高变形抗力



- 对扩散、内耗、高温形变和热处理等过程有重要影响。

