



北京航空航天大学《材料综合911》考研辅导系列

《金属学原理》考点与考题精讲

第3讲 晶体缺陷

主讲人：何 蓓

网学天地
www.e-studysky.com

一、晶体缺陷的分类

(一) 点缺陷

点缺陷是最简单的晶体缺陷，它是在结点上或邻近的微观区域内偏离晶体结构的正常排列的一种缺陷。晶体点缺陷包括空位、间隙原子、杂质或溶质原子，以及由它们组成的复杂点缺陷，如空位对、空位团和空位-溶质原子对等。

1. 点缺陷的类型

金属晶体中常见的点缺陷有空位、间隙原子、置换原子等。

(1) 空位。空位是一种热平衡缺陷，即在一定温度下，空位有一定的平衡浓度。空位在晶体中的位置不是固定不变的，而是不断运动变化的。

(2) 间隙原子。处于晶格间隙中的原子即为间隙原子。

(3) 置换原子。占据在原来基体原子平衡位置上的异类原子称为置换原子。

2. 获得非平衡空位的方法

(1) 高温淬火：冷冻高温下的平衡空位；

(2) 固溶处理：过饱和固溶体、过饱和空位；

(3) 强烈塑性变形；

(4) 高能粒子辐照；

(5) 中子辐照等。

(二) 线缺陷 (位错)

晶体的线缺陷表现为各种类型的位错，其在三维空间两个方向上尺寸很小，另外一个方向上延伸较长。位错对晶体的强度与断裂等力学性能起着决定性的作用。同时，位错对晶体的扩散与相变等过程也有一定的影响。

1. 位错的基本类型和特征。

(1) 刃型位错。

刃型位错的位错线垂直于滑移方向，其相当于在正常排列的晶体当中插入了半个原子面。

(2) 螺型位错。

晶体中已滑移区与未滑移区的边界线（即位错线）若平行于滑移方向，则在该处附近原子平面已扭曲为螺旋面，即位错线附近的原子是按螺旋形式排列的，这种晶体缺陷称为螺型位错。

(3) 混合型位错。

晶体中已滑移区与未滑移区的边界线（即位错线）既不平行也不垂直于滑移方向，即滑移矢量与位错线成任意角度，这种晶体缺陷称为混合型位错。

2. 位错的基本性质 (考点)

- (1) 宏观上属于线缺陷;
- (2) 对同一根位错线引起的滑移量是一定的, 即柏氏矢量是一定的;
- (3) 在近体内部呈自封闭曲线或终止于晶体表面或晶界。

3. 刃位错、螺位错的运动特点

晶体宏观的塑性变形是通过位错运动来实现, 并且晶体的力学性能如强度、塑韧性和断裂等均与位错的运动有关。位错运动的基本形式有两种: 滑移和攀移。

(1) 位错的滑移。

位错的滑移是在外加切应力作用下, 通过位错中心附近的原子沿柏氏矢量方向在滑移面上不断地作少量位移 (小于一个原子间距) 而逐步实现的。

对于螺型位错, 还存在交滑移和双交滑移。

(2) 位错的攀移。

刃型位错除了可以在滑移面上滑移外，还可以在垂直于滑移面的方向上运动，即发生攀移。通常把多余半原子面向上运动称为正攀移，向下运动称为负攀移。

攀移运动又称为“非守恒运动”；而相对应的位错滑移为“守恒运动”。

位错攀移需要热激活，较之滑移所需的能量更大。对大多数材料，在室温下很难进行位错的攀移，而在较高温度下，攀移较易实现。

(3) 运动位错的交割。

当一位错在某一滑移面上运动时，会与穿过滑移面的其他位错交割。位错交割时会发生相互作用，这对材料的强化、点缺陷的产生有重要意义。

4. 位错反应

实际晶体中，组态不稳定的位错可以转化为组态稳定的位错；具有不同伯氏矢量的位错线可以合并为一条位错线；反之，一条位错线也可以分解为两条或更多条具有不同柏氏矢量的位错线。通常，将位错之间的相互转化（分解或合并）称为位错反应。

位错反应能否进行，决定于是否满足如下两个条件：

(1) 几何条件。按照柏氏矢量守恒性的要求，反应后诸位错的柏氏矢量之和应该等于反应前诸位错的柏氏矢量之和。

(2) 能量条件。从能量角度，位错反应必须是一个伴随着能量降低的过程。为此，反应后各位错的总能量应小于反应前各位错的总能量。由于位错能量正比于其 b^2 ，故可近似地把一组位错的总能量看作是 $\sum |b_b|^2$ ，于是便可引入位错反应的能量判据，即 $\sum |b_b|^2 > \sum |b_a|^2$ 。

5. 观察位错的方法

- (1) 间接测量晶体的物理性质变化;
- (2) 晶体生长表面形貌的观察;
- (3) 表面腐蚀 (蚀抗法);
- (4) 缀饰法;
- (5) 利用电镀透射电镜观察;
- (6) 利用SEM观察。

(三) 面缺陷 (表面与界面)

1. 晶界和亚晶界

属于同一固相但位向不同的晶粒之间的界面称为晶界；而每个晶粒有时又由若干个位向稍有差异的亚晶粒所组成，相邻亚晶粒间的界面称为亚晶界。

(1) 小角度晶界的结构。

- ① 对称倾斜晶界。
- ② 不对称倾斜晶界。
- ③ 扭转晶界。

(2) 大角度晶界的结构。晶粒之间的晶界通常为大角度晶界。

(3) 晶界的特性。

- ①晶界处点阵畸变大，存在晶界能。
- ②晶界处原子排列不规则，在常温下晶界的存在会对位错的运动起阻碍作用，致使塑性变形抗力提高，宏观表现为晶界较晶内具有较高的强度和硬度。
- ③晶界处原子偏离平衡位置，具有较高的动能，并且晶界处存在较多的缺陷如空穴、杂质原子和位错等，故晶界处原子的扩散速度比在晶内快得多。
- ④在固态相变过程中，由于晶界能量较高且原子活动能力较大，所以新相易于在晶界处优先形核。原始晶粒越细，晶界越多，则新相形核率也相应越高。
- ⑤由于成分偏析和内吸附现象，特别是晶界富集杂质原子的情况下，往往晶界熔点较低，故在加热过程中，因温度过高将引起晶界熔化和氧化，导致“过热”现象产生。
- ⑥由于晶界能量较高、原子处于不稳定状态，以及晶界富集杂质原子的缘故，与晶内相比晶界的腐蚀速度一般较快。这就是用腐蚀剂显示金相样品组织的依据，也是某些金属材料在使用中发生晶间腐蚀破坏的原因。

2. 孪晶界

孪晶是指两个晶体（或一个晶体的两部分）沿一个公共晶面构成镜面对称的位向关系，这两个晶体就称为“孪晶（twin）”，此公共晶面就称孪晶面。

孪晶界可分为两类，共格孪晶界和非共格孪晶界。

（1）共格孪晶界就是孪晶面在孪晶面上的原子同时位于两个晶体点阵的结点上，为两个晶体所共有，属于自然地完全匹配是无畸变的完全共格晶面。

（2）如果孪晶界相对于孪晶面旋转一角度，即可得到另一种孪晶界——非共格孪晶界。

3. 相界

具有不同结构的两相之间的分界面称为“相界”。按结构特点，相界面可分为共格相界、半共格相界和非共格相界三种类型。

(1) 共格相界。

所谓“共格”是指界面上的原子同时位于两相晶格的结点上，即两相的晶格是彼此衔接的，界面上的原子为两者共有。它是一种无畸变的具有完全共格的相界，其界面能很低。

(2) 半共格相界。

若两相邻晶体在相界面处的晶面间距相差较大，则在相界面上不可能做到完全的一一对应，于是在界面上将产生一些位错，以降低界面的弹性应变能，这时界面上两相原子部分地保持匹配，这样的界面称为半共格界面或部分共格界面。

(3) 非共格相界。

当两相在相界面处的原子排列相差很大时，即 δ 很大时，只能形成非共格界面。这种相界与大角度晶界相似，可看成是由原子不规则排列的很薄的过渡层构成。相界能也可采用类似于测晶界能的方法来测量。

二、细晶强化、加工硬化、固溶强化及粒子强化的微观机制 (重点)

1. 细晶强化 (晶界强化)

由霍尔 - 配奇公式 $\sigma_s = \sigma_0 + K \times d^{-1/2}$, 晶粒细化后 σ_s 增大相当于屈服强度增大, 故细化晶粒可以达到强化的目的。

主要是由于:

- (1) 晶界处的原子排列不规则;
- (2) 晶界处杂质原子富集形成各种气团;
- (3) 晶界两侧的晶粒取向不同, 滑移不能从一个晶粒直接延续到另一个晶粒。因此常温下晶界的存在会对位错的运动起阻碍作用致使塑性变形抗力提高。宏观表现为晶界比晶内具有较高的强度和硬度。

2. 加工硬化

(1) 位错间交互作用产生位错增殖，位错密度急剧增加，位错难于移动。

(2) 位错交割形成大量割阶，钉孔位错，位错交割形成位错网，位错反应形成位错锁，以上都会阻止位错的运动滑移都有利于硬化。

3. 固溶强化的原因（单相固溶体）

(1) 溶质原子与位错的弹性交互作用、化学交互作用和静电交互作用，阻碍位错运动。

(2) 位错运动改变了溶质原子在固溶体中以短程有序或偏聚形式存在的分布状态，引起系统能量升高，增加了滑移变形的阻力。

(3) 一些溶质原子或杂质原子可以与位错交互作用形成溶质原子气团，对位错有钉扎作用。

4. 粒子强化

(1) 绕过粒子（弥散强化）。

强化效果取决于粒子尺寸以及粒子间距,与粒子本性无关。位错绕过机制（奥罗万机制）：运动中心位错在滑移面上受到第二相质点阻碍时，如质点尺寸和间距较大，则位错线将绕其弯曲，且形成包围质点的位错环，同时原位错继续前进,但位错间这种方式运动所受阻力大。

(2) 切割粒子（沉淀强化）。

第二相强度不大时，可随基体一起变形，且第二相质点与位错间作用力不足以把位错组织在质点处时，位错会直接切过质点使质点分成两部分，除质点周围应力场阻碍位错运动外，质点本身对位错亦有阻力。强化效果取决于粒子的本性（界面共格错配度、界面能、弹性模量差、层错能差、有序度等）。

三、位错的起源、增殖机制

1. 位错的起源

- (1) 温度剃度热应力引起的塑性变形;
- (2) 生长晶体自重引起的塑性变形;
- (3) 初生晶粒中位错的遗传;
- (4) 液体对流引起的晶体的塑性变形;
- (5) 空间集团的崩溃;
- (6) 多相材料线膨胀系数的差别;
- (7) 晶体表面微缺口应力集中。

2. 增殖机制

F-R (弗兰克—李德) 位错源增殖。由于钉扎作用使位错线只能弯曲运动并不断扩展，形成了一个又一个位错环，造成了位错的增殖。(详见教材109)

四、晶界对金属材料常温及高温力学性能的影响规律、机理 (北航特色)

1. 常温下

(1) 晶粒细化，晶界增多材料强度塑性提高，因为晶界强度大于晶内强度，晶界是位错不可逾越的障碍，所以细化晶粒强度提高；

(2) 晶界偏聚对材料物理化学力学性质及加工制备工艺性能具有重要影响，晶界是溶质原子平衡偏聚的场所；

(3) 晶界使材料的耐蚀性能下降，腐蚀自晶界开始。

2. 高温下

- (1) 晶界处存在一定的粘滞性;
- (2) 高温时晶界会先于晶粒迁移滑动而蠕变;
- (3) 晶界是原子扩散的快速通道;
- (4) 晶粒容易长大, 晶界是固态相变形核的场所。

即晶界强度小于晶内强度, 所以晶粒细化会造成材料高温强度下降, 晶界是材料高温变形的薄弱环节; 腐蚀、氧化、熔化等自晶界开始。

3. 晶界的总体特点

(1) 晶界上原子扩散速率比晶体内部快。因其晶界上结构比较松散，能量较高不稳定。

(2) 常温晶界使得金属强度得以提高，因为晶界能量很高，改变它需要克服很大的能阻。

(3) 温度较高时，原子动能大，就会发生界面平直化和晶粒长大的过程，因为这样可以使其晶界面减少，总能量降低，从而使系统更稳定。

(4) 当应力和腐蚀共同作用时，晶界处往往是容易产生断裂的薄弱环节，因为在腐蚀性介质中，晶界上的原子不稳定，腐蚀速率比晶粒内部快。

(5) 晶界偏析产生溶质或杂质原子在晶界上富集，使晶界强化，还可以使回火脆化，晶界强化由于杂质原子填充了松散的晶界。回火脆化是因为晶界上富集了有害的杂质。

五、晶界迁移的驱动力及影响晶界运动的主要因素 (重点)

1. 晶界迁移的驱动力

(1) 相邻晶粒内能差，包括晶界自由能差（小晶粒缩小消失，大晶粒长大）和应变能差（高应变晶粒消失，低应变晶粒长大）。

(2) 表面自由能：表面曲率引起的晶粒内部附加压力（正曲率晶粒缩小，负曲率晶粒长大；小晶粒缩小大晶粒长大又称为**马太效应**）。

2. 影响晶界运动的因素

- (1) 温度 $D = D_{oe} (-\theta/RT)$;
- (2) 晶界能: 小角度晶界, 低能晶界不易迁移;
- (3) 晶粒内晶体缺陷密度及均匀性;
- (4) 晶体元素偏析情况;
- (5) 晶界第二相对晶界运动有阻碍作用;
- (6) 晶界结构 (锯齿状晶界, 弯曲状晶界更不易运动);
- (7) 晶体性质 (晶体结构, 熔点, 原子间结合力, 层错能等)。

六、共格、半共格及非共格相界面结构及相界面结构对相形态的影响

1. 共格界面

界面能低但是应变能高，界面上的原子同时位于相邻两晶格的阵点上，为两相所共有，两相的晶格在界面上互相平行衔接，相界面成一一对应匹配关系，这种相界面称共格相界面。

影响：共格界面使晶粒趋于碟状、片状、针状从而使比表面积最大应变能最低。

2. 半共格相界面

界面由共格区和非共格区相间组成的，两相的原子在界面上只是部分的相匹配，称半共格相界面。

影响：界面能较共格界面升高，使晶粒趋于椭球形。

3. 非共格相界面

界面能很高、应变能很低，完全没有共格关系的界面。

影响：界面能升高，使晶粒趋于球状从而使比表面积最小表面能最低。

七、从原子扩散及晶界运动观点出发，试述强化高温金属材料可采取的主要方法（重点，北航特色）

思考思路：降低原子扩散速率；阻碍位错运动与交滑移；阻碍晶界滑移与迁移；阻碍晶粒长大。

具体方法如下：

（1）合理选择基体材料。

- ①高熔点金属；
- ②高原子间结合力材料（金属间化合物等）；
- ③致密的晶体结构（FCC、HCP、TCP）；
- ④低的层错能。

（2）合金元素**固溶强化**：加入高熔点、难扩散合金元素固溶强化。

（3）低界面能共格粒子**沉淀强化**（粒子长大驱动力小），目前在先进的Ni基高温合金中常用（ Ni_3Al ）。

（4）高稳定性粒子**弥散强化**：ODS高温合金。

(5) 晶界强化:

- ①阻止晶界滑动: 晶界上析出第二相粒子钉扎晶界、锯齿状晶界、弯曲晶界等;
- ②微合金化降低晶界能(填充晶界空位): 降低晶界移动性、阻止晶界迁移;
- ③减少晶界(粗晶粒);
- ④消除横向晶界: 定向凝固柱状晶合金;
- ⑤消除全部晶界: 单晶合金。

谢谢!