

《材料科学基础》 课本知识复试资料

导论

- 1、工程材料按属性可分为三类：金属材料、陶瓷材料和高分子材料。
- 2、在有色金属中，铝及其合金用得最多，这主要因为：①重量轻 ②有良好的导热性和导电性 ③耐大气腐蚀。
- 3、高分子材料又称聚合物，按用途可分为塑料、合成纤维和橡胶三大类型，而塑料中通常又分为通用塑料和工程塑料。
- 4、现在的复合材料可分为三大类型：塑料基复合材料、金属基和陶瓷基的复合材料。
- 5、电子材料是指在电子学和微电子学中使用的材料，主要包括半导体材料、介电功能材料和磁性材料等。
- 6、材料科学是研究各种材料的结构、制备加工工艺与性能之间关系的科学。

第一章 材料结构的基本知识

- 1、电子运动的“轨道”由四个量子数所确定，它们分别是主量子数 n ，次量子数 l ，磁量子数 m 和自旋量子数 m_s 。
- 2、主量子数 $n=1, 2, 3, 4\cdots$ ，确定电子离核远近和能级高低。习惯上以K、L、M、N... 表示。
- 3、磁量子数 $l=0, 1, 2, 3\cdots$ ，习惯上以s, p, d, f 表示，也影响着轨道的能级。
- 4、磁量子数 $m=0, \pm 1, \pm 2\cdots$ ，确定轨道的空间取向，s, p, d, f分别有1, 3, 5, 7... ($2l+1$)种空间取向。
- 5、自旋量子数 $m_s=+1/2, -1/2$ ，表示每个状态下可以存在自旋方向相反的两个电子，在s, p, d, f各个亚层中可以容纳的最大电子数分别为2, 6, 10, 14。
- 6、各壳层能够容纳的电子总数为 $2n^2$ 个。
- 7、泡利不相容原理：一个原子不可能存在有四个量子数完全相同的两个电子。因此，主量子数为 n 的壳层，最多容纳 $2n^2$ 个电子。
最低能量原理：电子总是优先占据能量低的轨道，使系统处于最低的能量状态。
- 8、电负性是用来衡量原子吸引电子能力的参数，电负性越强，吸引电子能力越强，数值越大，在同一周期内，自左至右电负性逐渐增大，在同一族自上至下电负性数据逐渐减小。
- 9、根据结合力的强弱可把结合键分为两大类：
一次键——结合力较强，包括离子键、共价键和金属键。
二次键——结合力较弱，包括范德瓦耳斯键和氢键。
- 10、共价键具有明显的方向性，由于共价结合时电子对之间的强烈排斥力。这是其他键所不具备的。
- 11、金属键没有方向性，正离子之间改变相对位置并不会破坏电子与正离子之间的结合力，因而金属具有良好的塑性。
- 12、范德瓦耳斯键、氢键是通过原子的偶极吸引力（偶极矩）结合在一起的。氢键的结合力较范德瓦耳斯键为强。
- 13、排斥力具有短程力的性质，当距离很远时，排斥力很小，当原子间接近至电子轨道互相重叠时，排斥力明显增大，并超过了吸引力。
- 14、在某距离 r_0 下吸引力与排斥力相等， r_0 称原子间距。
- 15、键能：离子键>共价键>金属键>氢键>范德瓦耳斯键
- 16、金属的高密度有两个原因：第一，金属元素有较高的相对原子质量；第二，也是更重要的，金属键的结合方式没有方向性，所以金属原子总是趋于密集排列。

17、弹性模量是材料应力-应变曲线上弹性变形段的斜率，在拉伸变形中通常称它为杨氏模量，以E表示之， $E = \sigma / \epsilon$ 。

18、液体向晶体的转变不是简单的冷却过程，还具有结构转变（称为结晶），这一原子重排过程是通过在液体中不断形成有序排列的小晶核（形核）以及晶核的逐渐生长（生长）二个过程实现的。

19、由很多晶粒组成的晶体材料称为多晶体。

20、布拉格定律： $2d \sin \theta = n \lambda$ 。

21、观察组织前首先必须对要观察的试样部位进行反复的磨光和抛光，以获得完整而光滑的表面，然后进行化学浸蚀。

化学浸蚀的目的是将晶界显示出来，由于晶界处原子往往处于错配位置，它们的能量较晶内原子的高，因此在化学浸蚀下比晶内容易受蚀，形成沟槽。进入沟槽区的光线以很大的角度反射，因而不能进入显微镜，于是沟槽在显微镜下呈黑色的晶界轮廓。

22、所有晶粒的化学组成相同，晶体结构也相同的相为单一相。

23、有些合金中合金元素可以完全溶解于基体中，形成均匀的合金相，也可以形成单相固溶体组织，是单一的相，在固体状态时称为固溶体。

24、同一种材料在不同条件下可以得到不同的结构，其中能量最低的结构称为稳态结构或平衡态结构，而能量相对较高的结构则称为亚稳态结构。

25、材料制备及加工过程中的冶金反应或结构转变，它们的反应速度大多可用化学反应动力学的阿累尼乌斯方程表示，即在反应速度v与热力学温度T之间满足：

$$v = A \exp \frac{-Q}{RT},$$

式中R为气体常数，Q为过程的激活能。

要实现从始态到终态的自发转变，原子首先必须达到激活能态，始态能量与激活态的差值称为激活能。原子一旦越过激活能垒，就必然能达到能量较低的终态，所以可以把激活能看做过程的阻力，激活能低，阻力小，过程易于实现；激活能高和温度两项参数都出现在方程式的指数项内，表面过程速度随温度升高或激活能减小呈指数关系上升，而方程中的常数项A对过程速度的影响相对较小，因此从材料的角度看，激活能对过程的速度起了决定性的作用。

26、从原则上讲，亚稳态结构有可能向稳态结构转变，以达到能量的最低状态，但这一转变必须在原子有足够活动能力的前提下（达到激活能）才能实现，而在常温下这一转变往往难以进行，因此亚稳态结构仍可以保持相对稳定，甚至长期存在。

27、材料最终是否形成晶体在取决于激活能的大小。

第二章 材料中晶体的结构

- 1、空间点阵——是指由几何点在三维空间作周期性的规则排列所形成的三维阵列。
- 2、构成空间点阵的每一个点称为阵点或结点，将阵点用一系列相互平行的直线连接起来形成空间框架，称为晶格，构成晶格的最基本的单元称为晶胞。
- 3、晶胞的选取应满足下列条件：（1）要能充分反映整个空间点阵的对称性；（2）在满足（1）的基础上，晶胞要尽可能多的直角；（3）在满足（1）、（2）的基础上，所选取的晶胞体积要最小；（4）平行六面体内的棱和角相等的数目应最多。
- 4、布拉菲证明晶格的空间点阵只有14种，并称为布拉菲点阵。实际存在的晶体结构是无限的。
- 5、晶向——空间点阵中含阵点列的方向代表晶体中原子排列的方向，称为晶向。
晶面——通过空间点阵中的任意一组阵点的平面代表晶体中的原子平面，称为晶面。
- 6、晶向指数——晶向指数是表示晶体中点阵方向的指数，由晶体上阵点的坐标值决定，其确定步骤如下：
 - （1）建立坐标系：以晶胞中待定晶向上的某一阵点O为原点，以过原点的晶轴为坐标轴，以晶胞的点阵常数a, b, c分别为x, y, z坐标轴的长度单位，建立坐标系；
 - （2）确定坐标值：在待定晶向OP上确定距原点最近的一个阵点P的三个坐标值；
 - （3）化整并加方括号：将三个坐标值化为最小整数u, v, w，并加方括号，即得待定晶向OP的晶向指数 $[u, v, w]$ ，如果u, v, w中某一数为定值，则将负号标注在该数的上方。
- 7、对于晶向指数需作如下说明：
 - （1）一个晶向指数代表着相互平行，方向一致的所有晶向；
 - （2）若晶体中的两晶向相互平行但方向相反，则晶向指数中的数字相同，而符号相反，如 $[11-2]$ 和 $[-1-12]$ 等；
 - （3）晶体中原子排列情况相同但空间位向不同的一组晶向称为晶向族，用 $\langle u, v, w \rangle$ 表示。
- 8、如果不是立方晶系改变晶向指数的顺序所表示的晶向可能不是等同的，如 $[100][010][001]$ 就不是等同晶向。
- 9、晶面指数——晶面指数是表示晶体中点阵平面的指数，由晶面与三个坐标轴的截距值所决定，其确定步骤如下：
 - （1）建坐标：以晶胞的某一阵点O为原点，以过原点的晶轴为坐标轴，以点阵常数a, b, c为三个坐标轴的长度单位，建立坐标系，但应注意坐标原点的选取应便于确定截距，且不能选在待定晶面上。
 - （2）求截距：求出待定晶面在三个坐标轴上的截距，如果该界面与某坐标轴平行，则其截距为 ∞ 。
 - （3）取倒数：取三个截距值的倒数。
 - （4）化整并加圆括号：将上述三个截距的倒数化为最小整数h, k, l，并加上圆括号，即得待定的晶面的晶面指数 (h, k, l) ，如果晶面在坐标轴上的截距为负值，则将符号标注在相应指数的上方。

10、对于晶面指数需作如下说明：

(1) 晶面指数 (h, k, l) 不是指一个晶面，而是代表着一组相互平行的晶面。

(2) 平行晶面的晶面指数相同或数字相同，而正负号相反，如 (h, k, l) 与 $(-h, -k, -l)$ 。

(3) 晶体中具有等同条件（即这些晶面上的原子排列情况和晶面间距完全相同）而只是空间位向不同的各组晶面称为晶面族，用 $\{h, k, l\}$ 表示，晶面族 $\{h, k, l\}$ 中所有晶面的性质是等同的。对于正交晶系，由于晶面 (100) (010) (001) 上原子排列情况不同，晶面间距不等，故不属于同一晶面族。

(4) 在立方晶系中，具有相同指数的晶向和晶面必须相互垂直，如 $[100] \perp (100)$ ，但此关系不适用于其他晶系。

11、对六方晶系的晶向和晶面通常采用密勒-布拉菲指数表示，该种表示方法是采用 a_1, a_2, a_3 和 c 四个坐标轴。 a_1, a_2, a_3 位于同一底面上，并互成 120° ， c 轴与底面垂直，晶面指数的标定方法与三轴坐标系相同，但需用 $(h \ k \ i \ l)$ 四个数来表示，其中 $i = -(h+k)$ 。

12、同样，在四轴坐标系中晶向指数的确定方法也和三轴坐标系相同，但需要用 $[uvtw]$ 四个数来表示，其中 $t = -(u+v)$ 。

13、晶向指数的标定步骤如下：从原点出发，沿着平行于四个晶轴的方向依次移动。使之最后达到待定晶向上的某一结点，移动时必须选择适当的路线，使沿 a_3 轴移动的距离等于沿 a_1, a_2 两轴移动的距离之和的负值。将各向移动距离化为最小整数值，加上方括号，即为此晶向的晶向指数，但我们通常是先用三轴坐标系统标出待定晶向的晶向指数 $[UVW]$ ，再换算成四轴坐标系的晶向指数：

$$u = (2U - V) / 3 \quad v = (2V - U) / 3 \quad t = -(U + V) / 3 \quad w = W$$

14、晶面间距是指相邻两个平行晶面之间的距离，晶面间距越大，晶面上原子的排列就越密集，晶面间距最大的晶面通常是原子最密排的晶面。

15、晶带——相交和平行于某一晶向直线的所有晶面的组合称为晶带（此直线叫晶带轴）。

16、晶带轴 $[uvw]$ 与该晶带任一晶面 (hkl) 之间均满足下列关系：

$$hu + kv + lw = 0$$

凡满足这个关系式的晶面都属于以 $[uvw]$ 为晶带轴的晶带，此称为晶带定律。

17、推论：(1) 已知两个不平行晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ ，则由其决定的晶带轴 $[uvw]$ 由下式求得： $u = k_1l_2 - k_2l_1$ $v = l_1h_2 - l_2h_1$ $w = h_1k_2 - h_2k_1$

(2) 已知两个不平行晶向 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$ ，则由其决定的晶面指数 (hkl) 由下式求得： $h = v_1w_2 - v_2w_1$ $k = w_1u_2 - w_2u_1$ $l = u_1v_2 - u_2v_1$

18、最常见的典型金属通常具有面心立方（A1 或 fcc）、体心立方（A2 或 bcc）和密排六方（A3 或 hcp）三种晶体结构。

19、面心立方密排面的堆垛顺序为 ABCABC...，密排六方密排面的堆垛次序为 ABAB...

20、

晶体类型	原子密排面	原子密排方向	晶胞中原子数	配位数	致密度	点阵常数	四面体间隙大小数量	八面体间隙大小数量
FCC	{111}	<110>	4	12	0.74	$a=b=c=2\sqrt{2}r$	数量 8 大小 0.225R	数量 4 大小 0.414R
BCC	{110}	<111>	2	8	0.68	$a=b=c=4\sqrt{3}r/3$	数量 12 大小 0.291R	数量 6 大小 0.154R 0.633R
HCP	{0001}	<11-20>	6	12	0.74	$a=b \neq c=2r$	数量 12 大小 0.225R	数量 6 大小 0.414R

21、配位数——晶体结构中任一原子周围最近邻且等距离的原子数 (CN)

致密度——晶体结构中原子体积占总体积的百分比 (K)

22、多晶型转变——当外界条件改变时，元素的晶体结构可以发生转变，把金属的这种性质称为多晶型性，这种转变称为多晶型转变或同素异构转变。

23、铁在912℃以下为体心立方结构，称为 α -Fe，在912℃-1394℃为面心立方结构，称为 γ -Fe，在1394℃以上又变成体心立方结构，称为 δ -Fe。

24、共价晶体——由同种非金属元素的原子或异种元素的原子以共价键结合而成的无限大分子，由于共价晶体中的粒子为中性原子，所以也叫做原子晶体。

25、共价键具有明显的饱和性和强烈的方向性，使共价键晶体中原子的配位数要比离子型晶体和金属型晶体的小。

第三章 晶体缺陷

1、晶体缺陷可分为点缺陷（空位、间隙原子、异类原子等）、线缺陷（位错）、面缺陷（晶界、相界）。

2、肖脱基缺陷：脱位原子一般进入其他空位或者逐渐迁移至晶界或表面，这样的空位通常称为肖脱基空位，也称肖脱基缺陷。

3、弗兰克耳缺陷：晶体中的原子有可能挤入结点的间隙，则形成另一种类型的点缺陷-间隙原子，同时原来的结点位置也空缺了，产生一个空位，通常把这一对点缺陷（空位和间隙原子）称为弗兰克耳缺陷。

4、晶格畸变：由于点缺陷的存在，破坏了原有的原子间作用力平衡，因此点缺陷周围的原子必然会离开原有的平衡位置，作相应的微量位移，这就是晶格畸变或应变。

5、普通金属主要是肖脱基缺陷，离子晶体结构配位数低的主要是弗兰克耳缺陷，结构配位数高的主要是肖脱基缺陷。

6、熵增随缺陷数量的变化是非线性的。随着晶体中缺陷数目的增多，自由能先是逐渐降低，然后逐渐增高，这样体系中在一定温度下存在着一个平衡的点缺陷浓度，在该浓度下，体系的自由能最低。晶体中存在这些缺陷时自由能是降低的；相反，如果没有这些缺陷，自由能反而升高。

7、点缺陷的浓度是由原子热运动引起的热激活过程，对于点缺陷形成而言，只有比平均能量高出缺陷形成能的那部分原子才可能形成点缺陷，所以点缺陷的平衡浓度随温度升高呈指数关系增加。

8、产生过饱和点缺陷的原因有高温淬火（形成淬火空位）、辐照（过量的间隙原子）、冷加工等。

9、塑性变形是晶体在外力作用下进行的永久变形。滑移是塑性变形的的基本方式。

10、晶体中位错的基本类型分为刃型位错和螺型位错。实际上位错往往是两种类型的复合，称为混合位错。

1

1、晶体中的某一晶面，在其上半部有多余的半排原子面，好像一把刀刃插入晶体中，使这一晶面上下两部分晶体之间产生了原子错排，称为刃型位错。

12、位错的一个重要特征是它们或者在表面露头，或者终止于晶界和相界，或者与其他位错线相交，或者自行在晶体内部形成一个封闭环。

13、在刃型位错中，晶体发生局部滑移的方向是与位错线垂直的。

14、如果局部滑移是沿着与位错线平行的方向移动一个原子间距，那么在滑移区与未滑移区的边界上形成位错，其结构与刃位错不同，原子平面在位错线附近已扭曲为螺旋面，在原子面上绕一固定点转一周就推进一个原子间距，所以在位错线周围原子呈螺旋状分布，故称为螺型位错。

14、在位错线周围作一个一定大小的回路，称柏氏回路，显然这回路包含了位错发生的畸变，然后将这同样大小的回路置于理想晶体之中，回路当然不可能封闭，需要额外的矢量连接回路才可能封闭，这个矢量就是该位错线的柏氏矢量。

15、刃型位错的柏氏矢量与位错线垂直，并与滑移面平行。螺型位错的柏氏矢量与位错线平行。它们的错位量都是一个原子间距。

16、对于刃型位错，滑移区的滑移方向垂直于位错线；螺型位错的滑移方向平行于位错线。

17、任何一根位错线，不论其形状如何变化，位错线上各点的 b 都相同，或者说一条位错线只有一个 b 。凡与 b 平行的为螺型位错，与 b 垂直的则为刃型位错，两者以任意角度相交的则为混合位错。

18、柏氏矢量的表示方法：在晶向指数的基础上把矢量的模表示出来，同时标出该矢量在各个晶轴上的分量。如晶向指数为 $[110]$ ，柏氏矢量 $b=1a+1b+0c$ ，对于立方晶体 $a=b=c$ 可简单写为 $b=a[110]$ 。

19、位错在晶体中运动有两种方式：滑移和攀移，其中滑移最为重要。

20、位错的滑移是在切应力的作用下进行的，只有当滑移面上的切应力分量达到一定值时才能滑移。

21、刃型位错和螺型位错的差别：第一，不论是刃还是螺型位错，使位错滑移的切应力方向和柏氏矢量 b 都是一致的；第二，两种位错滑移后，滑移面两侧晶体的相对位移也是与柏氏矢量 b 一致的，即位错引起的滑移效果（即滑移矢量）一用柏氏矢量来描述。

22、位错在滑移面上自行封闭形成位错环，位错环的柏氏矢量正好处于滑移面上，所以可理解为滑移面上圆形区域内沿着柏氏矢量方向局部滑移，位错环就是滑移区与未滑移区的边界。根据位错线与柏氏矢量的相对夹角可以判断各段位错线的性质。尽管各段位错线运动方向不同，但最终它们造成的晶体滑移还是由柏氏矢量 b 所决定。

23、位错在某个面上滑移就会使该面上、下部晶体产生一个柏氏矢量 b 的位移，所以位错线与 b 组成的原子面就是位错的滑移面。对于刃型位错，位错线与 b 垂直，所以刃型位错的滑移面是唯一的；对于螺型位错，由于位错线与柏氏矢量 b 平行，所以螺型位错可以有多个滑移面。

24、

类型	柏氏矢量	位错线运动方向	晶体滑移方向	切应力方向	滑移面个数
刃	\perp 于位错线	\perp 位错线本身	与 b 一致	与 b 一致	唯一
螺	$//$ 于位错线	\perp 位错线本身	与 b 一致	与 b 一致	多个
混合	与位错线成一定角度	\perp 位错线本身	与 b 一致	与 b 一致	

25、只有刃型位错才能发生攀移运动，螺型位错是不会攀移的。攀移的本质是刃型位错的半原子面向上或向下移动，于是位错线也就跟着向上或向下运动，因此攀移时位错线的运动方向与柏氏矢量垂直。攀移是通过原子的扩散实现的，通常在高温下攀移才对位错的运动产生重要影响。螺型位错没有多余的半原子面，因此，不会发生攀移运动。

26、攀移时位错线并不是同步向上或向下运动，而是原子逐个的加入，所以攀移时位错线上带有很多台阶（常称为割阶）。

27、只有正应力才会协助位错实现攀移，切应力是无效的。在半原子面两侧施加压应力时，位错发生正攀移，相反，拉应力使位错发生负攀移。

28、使位错发生滑移的力 $F = \tau b$ ，方向垂直于位错线，即指向位错运动的方向；使位错发生攀移的力 $F = \sigma b$ ，作用力的方向也是指向位错攀移的方向，与位错线垂直。

29、位错密度 $\rho = S/V$ ，它的意义是单位体积晶体中所包含的位错线总长度， V 是晶体的体积， S 为该晶体中位错线的总长度， ρ 的单位为 m/m^3 ，也可化简为 $1/m^2$ ，此时位错密度可理解为穿越单位截面积的位错线的数目，即 $\rho = n/A$ ，式中， A 为截面积， n 为穿过面积 A 的位错线数目。

30、金属经过冷变形或者引入第二相，会使位错密度大大升高，此时晶体的强度反而大幅度升高，这是由于位错数量增加至一定程度后，位错线之间相互缠结，以至使位错线难以移动所致。

31、观察晶体中的位错常用的有以下两种方法：浸蚀技术和透射电镜。

32、位错线周围的原子偏离了平衡位置，处于较高的能量状态，高出的能量称为位错的应变能，简称位错能。

33、单位长度螺型位错的应变能： $U_s = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{r_1}{r_0}$ ，单位长度刃型位错的应变能

$$U_e = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_1}{r_0}。$$

其中 ν 为泊松比，约为0.33。单位长度位错线的应变能可简化写作： $U = \alpha Gb^2$ 。其中 α 的值可取0.5-1.0，对于螺型位错 α 取下限0.5，刃型位错则取上限1.0。可知：位错的能量与切变模量成正比，与柏氏矢量的模的平方成正比，所以柏氏矢量的模是影响位错能量最重要的因素。

34、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。对于位错而言，它的应变能远大于空位的形成能。但它所引起的熵增却远比空位的小，不可能抵消应变能的增加，所以位错的存在肯定使体系的自由能增加，是不平衡的缺陷。

35、位错线张力 T 与位错能 U 两者在数值上相等，均为 αGb^2 ，只是两者量纲的表现形式不同而已，应变能为 J/m，而线张力为 N。

36、螺型位错周围晶格应变是简单的纯剪切，而且应变具有径向对称性，其大小仅与离位错中心的距离 r 成反比，所以切应变与切应力可简单地表达为 $\gamma = b/2\pi r$ ， $\tau = Gb/2\pi r$ 。

37、压缩和拉伸正应变是刃型位错周围的主要应变，此外，从压缩应变和拉伸应变的逐渐过渡中必然附加一个切应变，最大切应变发生在位错的滑移面上，该面上的正应力为零，故为纯剪切。所以刃型位错周围既有正应力，又有切应力，但正应力是主要的，它对刃型位错的交互作用起了决定性作用。压缩应力和拉伸应力的大小随离开位错中心距离的增大而减小。

38、间隙原子以及尺寸大于溶剂原子的溶质原子使周围基体晶格原子受到压缩应力，而尺寸小于溶剂原子的溶质又使基体晶格受到拉伸。所有这些溶质都会在刃位错周围找到合适的位置，显然当大的置换原子和间隙原子处于位错滑移面下方，小的置换原子处于滑移面上方的压缩应力区时，不仅使原来溶质原子造成的应力场消失了，同时又使位错的应变及应变能明显降低，从而体系处于较低的能量状态。

39、晶体中间隙原子的扩散速率要比置换型溶质大得多，间隙小原子与刃型位错的交互作用十分强烈，如钢中固溶的C、N 小原子常分布于刃型位错周围。当溶质原子分布于位错周围时使位错的应变能下降，这样位错的稳定性增加了，位错由十分易动变得不太容易移动，使位错的塑性变形抗力（即屈服强度）提高。

40、通常把溶质原子与位错交互作用后，在位错周围偏聚的现象称为气团，是由柯垂尔首先提出，又称为柯氏气团。

41、空位与位错也会发生交互作用，其结果是使位错发生攀移，这一交互作用在高温下显得十分重要，因为空位浓度是随温度升高呈指数关系上升的。

42、螺型位错的应力场是纯切应力，切应力的方向与位错的柏氏矢量一致，它具有径向对称性，其大小为 $Gb/2\pi r$ ，仅与半径成反比。若有柏氏矢量为 b_1, b_2 两根同号的平行的螺型位错，它们的间距为 r ，那么第一根螺位错的切应力场 τ_1 将对第二根位错产生作用，单位长度位错线的作用力大小为： $F = \tau_1 b_2 = Gb_1 b_2 / 2\pi r$ ，其方向垂直于位错线，且使位错间距离 r 逐渐增大。同样第二根位错也对第一根位错产生同样大小的作用力，所以两根同号螺位错互相排斥，这种排斥作用随距离增加而逐渐减小。两根异号螺型位错之间的作用力的方向相反，因此它们相互吸引，直至异号位错互毁，此时位错的应变能完全消失。同一滑移面上两根平行刃型位错间的相互作用也与螺型位错一样。

43、位错反应的条件：

所有自发的位错反应必须满足两个条件：

- (1) 几何条件 $\sum b_{前} = \sum b_{后}$ ，即反应前后位错在三维方向的分矢量之和必须相等。
- (2) 能量条件 $\sum b_{前}^2 > \sum b_{后}^2$ ，即位错反应后应变能必须降低，这是反应进行的驱动力。

44、对于fcc，最短的点阵矢量为原点到面心位置，可用 $a/2\langle 110 \rangle$ 表示，其长度为 $a/2$ ，这是面心立方全位错的柏氏矢量；对于bcc，最短的点阵矢量是 $a/2\langle 111 \rangle$ ，是体心立方晶体全位错的柏氏矢量，对于hcp，最密排的晶向是 $\langle 11-20 \rangle$ ，该矢量上包含了三个原子间距，故全位错的柏氏矢量值为 $a\langle 11-20 \rangle/3$ 。

45、除了全位错以外，晶体中还可能形成一些柏氏矢量小于点阵矢量的位错，即柏氏矢量不是从一个原子到另一个原子位置，而是从原子位置到结点之间的某一位置，这类位错称为分位错或不全位错。 $a\langle 112 \rangle/6$ 分位错在面心立方晶体的塑变中起了重要作用，通常称它为肖克莱分位错。

46、在简单立方晶体中两个位错之间只有排斥力，且它们分开后位错之间的点阵排列仍处于正常情况，但面心立方晶体中分解后两个分位错始终保持联系，成为不可分割的位错对，位错之间的正常排列破坏了，形成一层层错，正是由于层错使两个分位错保持一定的联系。

47、通常称一对不全位错及中间夹的层错为扩展位错。

48、在层错能 γ 作用下层错区有收缩的趋势，而分位错间的排斥力又使两位错尽量分开。当这两种相反的力达到平衡时得到扩展位错平衡宽度 d ，即：

$$\gamma = G(b_1 b_2) / 2\pi d, \quad d = G(b_1 b_2) / 2\pi \gamma。$$

49、晶界就是空间取向（或位向）不同的相邻晶粒之间的界面。根据晶界两侧晶粒位向差（ θ 角）的不同，可把晶界分为小角度晶界（ $\theta < 10^\circ$ ）和大角度晶界（ $\theta > 10^\circ$ ）。一般多晶体各晶粒之间的晶界属于大角度晶界。

50、在每一个晶粒内原子排列的取向也不是完全一致，晶粒内又可分为位向差只有几度到几度的若干小晶块，这些小晶块可称为亚晶粒，相邻亚晶粒之间的界面称为亚晶界，亚晶界属于小角度晶界。

51、小角度晶界最简单的情况是对称倾斜晶界，对称倾斜晶界是由一系列柏氏矢量为 b 的相互平行的刃型位错排列而成，其结构和位错墙完全一致。

52、所有小角度晶界均由位错组成，晶界上的位错密度随位向差增大而增加。

53、不论是小角度晶界或大角度晶界，这里的原子或多或少地偏离了平衡位置，所以相对于晶体内部，晶界处于较高的能量状态，高出的那部能量称为晶界能，或称晶界自由能，记作 γ_g ，其单位为 J/m^2 ，有时晶界能以力的形式表示，其单位采用 N/m ，记作 σ 。

54、小角度晶界能 γ_g 与 θ 之间的关系式： $\gamma_g = \gamma_0 \theta (B - \ln \theta)$ ，式中 $\gamma_0 = Gb / 4\pi(1 - \nu)$ 为材料常数，其中 G 为切变模量， b 为柏氏矢量， ν 为泊松比， B 为积分常数，取决于位错中心的错排能。（ θ 为位向差，该公式只适用于小角度晶界）

55、表面原子处于不均匀的力场之中，所以其能量大大升高，高出的能量称为表面自由能（或表面能）记作 γ_s ，有时也可表示为单位表面长度上的作用力，即表面张力记作 σ_s 。表面能大约为晶界能的3倍，即 $\gamma_s = 3\gamma_g$ 。

56、晶体中不同晶面的表面能数值不同，这是由于表面能的本质是表面原子的不饱和键，而不同的晶面上原子密度不同，密排面的原子密度最大，则该面上任一原子与相邻晶面原子的作用键数最少，故以密排面作为表面时不饱和键数最少，表面能量低。

57、不管表面是否平行于密排面，宏观表面基本上由一系列平行的原子密排面及相应的台阶组成的，台阶的密度取决于表面和密排面的夹角，这一现象验证了晶体总是力求处于最低的表面能状态。

58、气体分子或原子在表面吸附可以在不同程度上抵消表面原子的不平衡力场，使作用力的分布趋于对称，于是就降低了表面能，使体系处于较低的能量状态，体系更为稳定，所以吸附是自发过程，是放热反应，物理吸附无选择性，化学吸附有选择性。

59、催化的本质是反应物分子被吸附后，使反应物发生分子变形，削弱了原有的化学键，于是处于活化状态，从而加速化学反映，所以吸附剂或触媒剂必须颗粒很细，有很大的表面积，才能达到催化的目的。

60、少量杂质或合金元素在晶体内部的分布是不均匀的，常偏聚于晶界，这种现象称为晶界内吸附，内吸附是异类原子与晶界交互作用的结果。

61、当第二相的熔点很低，接触角为零时，把材料加热至第二相熔点以上时，晶界第二相融化，晶粒间联系完全破坏，就引起热脆。

62、在工程中为了提高材料的强度，常通过热处理等措施将第二相处理成细片状或弥散的点状，这就增加了相界面，在界面能的驱动下第二相的形状及尺寸会发生变化，片状的第二相会逐渐球化，而点状的第二相会聚集粗化。这些变化的速度取决于体系所处的温度，即动力学条件，温度越高变化速度越快，然而，既是在较低的温度下，这些过程也不会完全停止，这将同时带来强度的下降。