

第六章

位错

(Dislocations)

引言

- 学习本章的意义:

晶体非完整性/
力学性能与缺陷密度的关系;

- 位错理论形成;

理论、实际强度的差异;

- 位错与其它章节的联系;

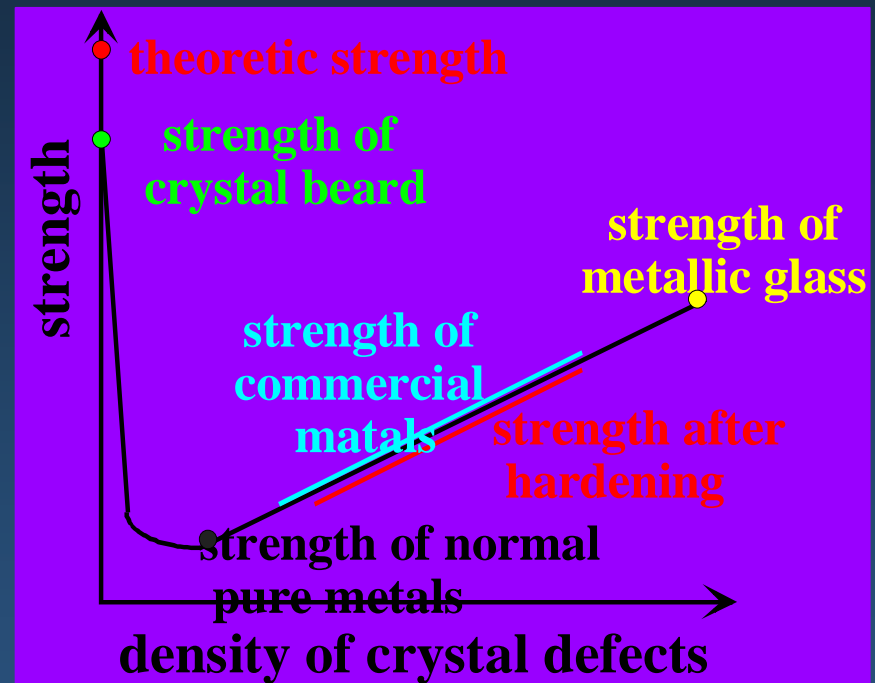
- 本章讨论的内容;

位错本身性质、应力场/能量;
和其它缺陷的交互作用;

位错的运动;

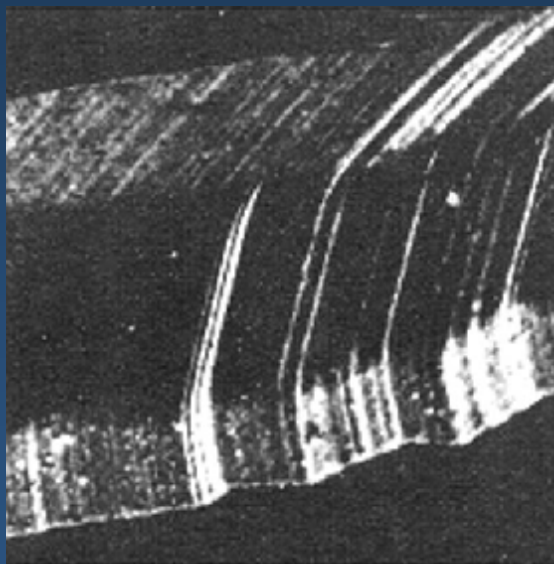
位错的产生;

实际晶体中的位错;

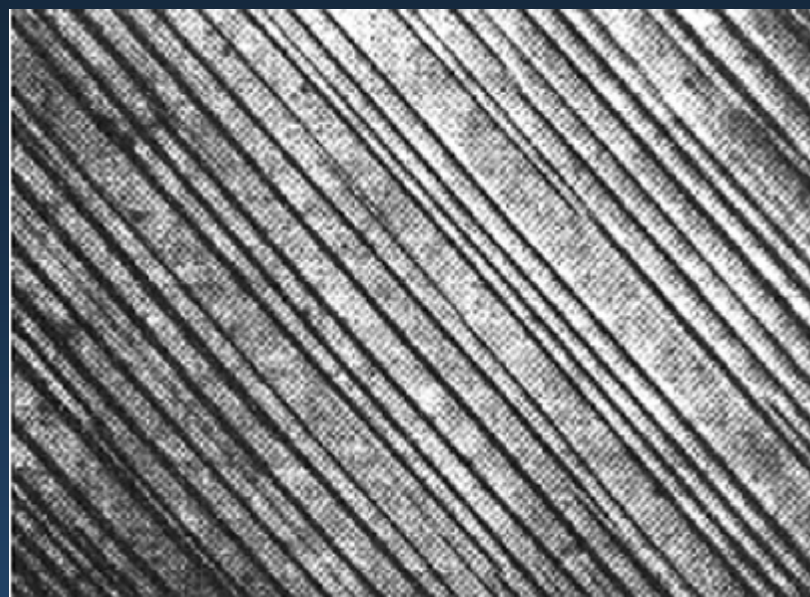


6.1 单晶体滑移

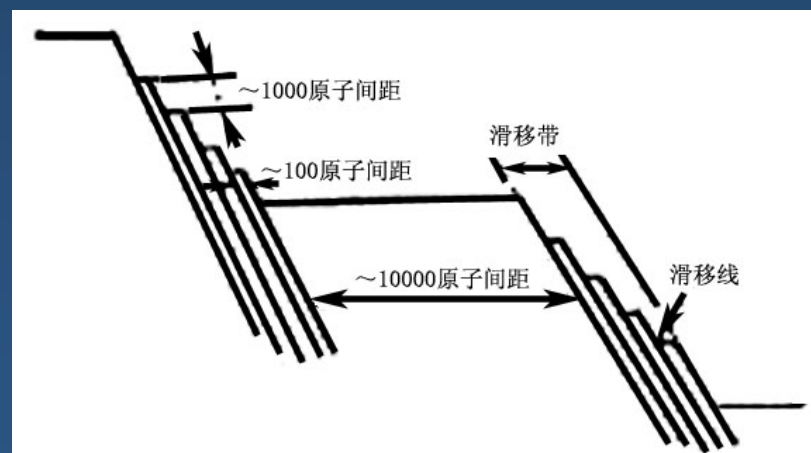
滑移是指在外力作用下晶体沿某些特定的晶面和晶向相对滑开的形变方式。



用扫描电镜观察到形变钴单晶的表面形貌



用光学显微镜观察经7%形变的铝的表面图象



滑移的特定晶面称**滑移面**，特定晶向称**滑移方向**。**滑移面和滑移方向合称为滑移要素（滑移系）**。对于一定的晶体结构，不论载荷大小或载荷的取向如何，**滑移要素的类型一般都是确定的**。在一般情况下，**滑移面和滑移方向是晶体的密排和较密排的面及密排方向**。

典型结构金属的滑移要素（滑移系）

晶体结构	金属	滑移面	滑移方向
FCC	Al, Cu, Ag, Au, Ni	{111}	<101>
BCC	α -Fe	{110}, {112}, {123}	<111>
	Mo, W	{112}	<111>
	K	{123}	<111>
	Nb	{110}	<111>

典型结构金属的滑移要素（滑移系）（续）

晶体结构	金属	滑移面	滑移方向	c/a
HCP	Mg	$\{0001\}, \{10\bar{1}0\}$	$\langle 2\bar{1}10 \rangle$	1.623
	Cd	$\{0001\}$		1.886
	Zn	$\{0001\}$		1.856
	Be	$\{0001\}$		1.586
	Ti	$\{10\bar{1}0\} \{0001\}$	$\{10\bar{1}1\} \langle 2\bar{1}10 \rangle \langle 11\bar{2}3 \rangle$	1.587
	Zr	$\{10\bar{1}0\} \{0001\}$	$\{10\bar{1}0\}$	1.593

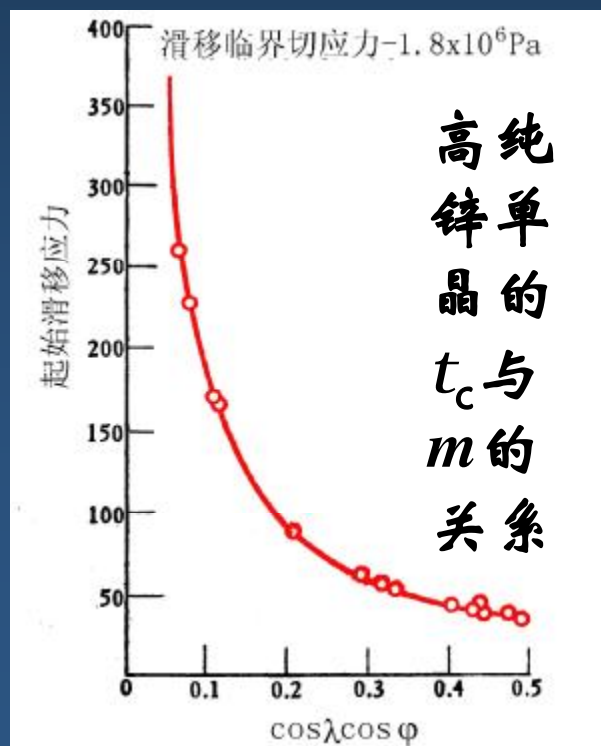
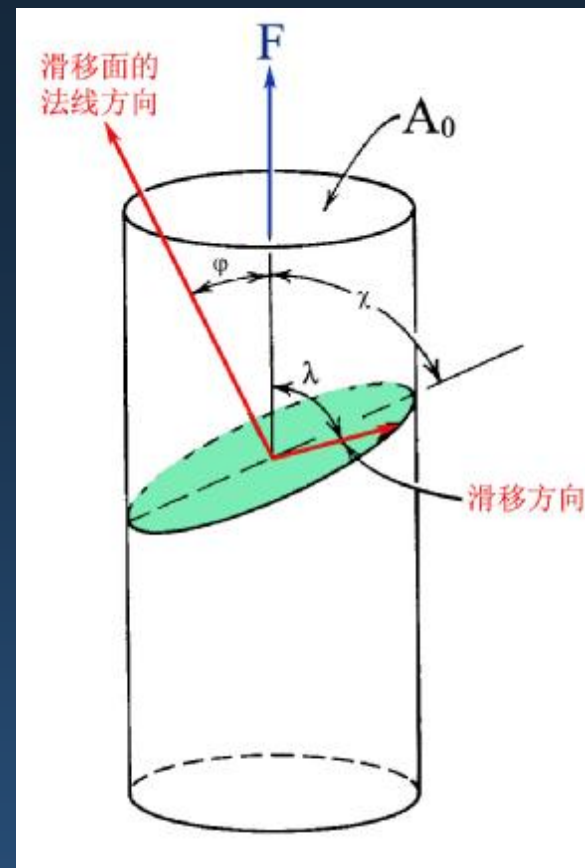
一个滑移面和一个滑移方向组成一个滑移系，面心立方结构有12个滑移系，体心立方结构有48个滑移系，而密排六方结构一般只有3个滑移系。在外力作用下，并不是所有的滑移系都会开动的，只能是其中一个或几个滑移系开动，那些没有开动的滑移系称为潜在滑移系。

Schmid定律

外加拉伸应力 S 和滑移面内沿着滑移方向分切应力 t 之间的关系。

$$t = \frac{F}{A_0} \cos l \cos j = mS$$

$m = \cos l \cos j$ 是外加力相对于晶体滑移系的取向因子，又称Schmid因子。



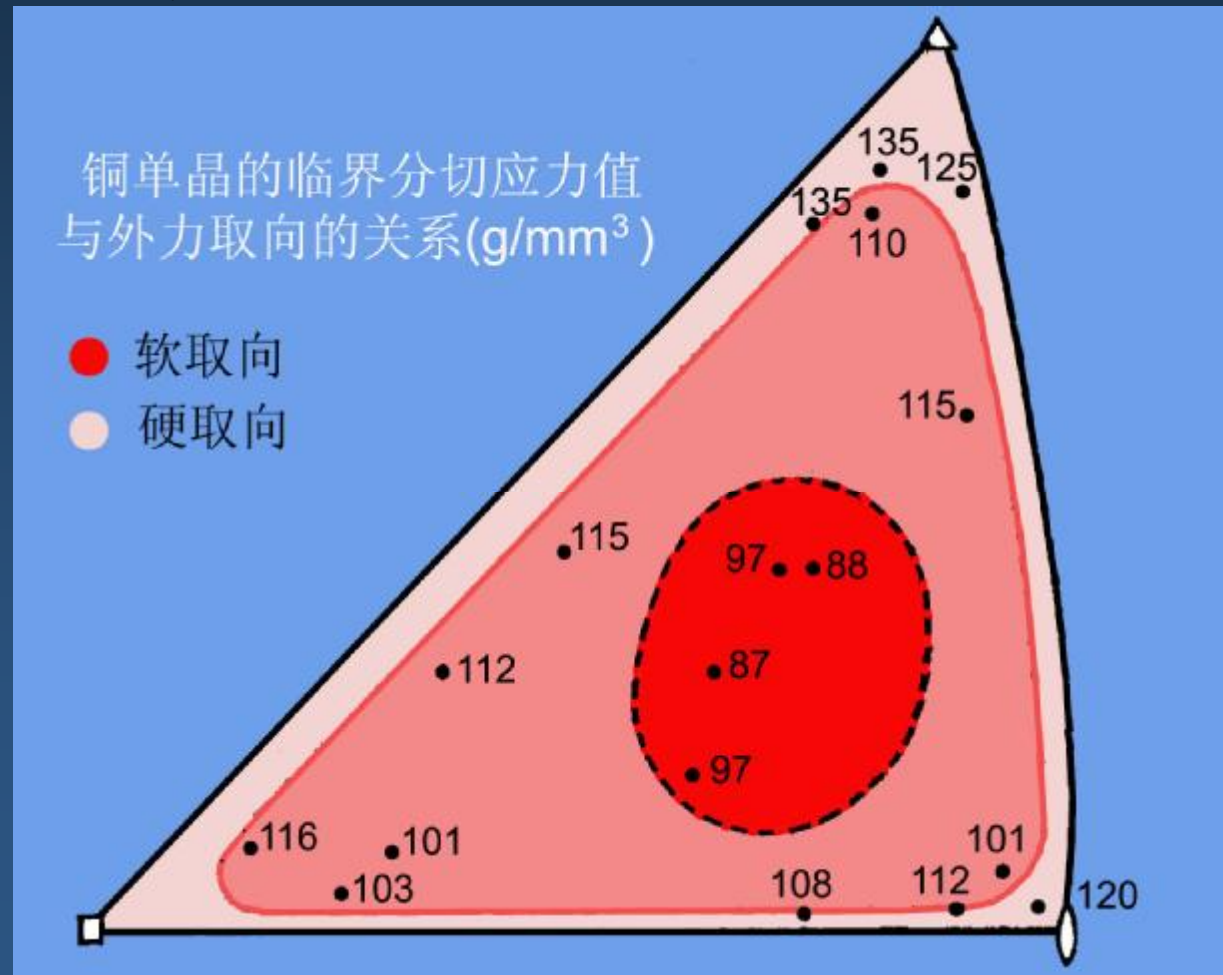
实验看出：滑移系开动所需要的分切应力是一个常数，和外加力的取向无关。滑移系开动所需要的最小分切应力称为**临界分切应力 t_c** 。

滑移系开动所需要的临界分切应力是和外力取向无关的常数的规律称**Schmid定律**或**临界分切应力定律**。

如果把滑移面开动所对应的正应力看作是屈服强度，则屈服强度和外加力的取向有关。 m 的数值越大，屈服强度越小，取向越“软”；屈服强度越高，取向越“硬”。

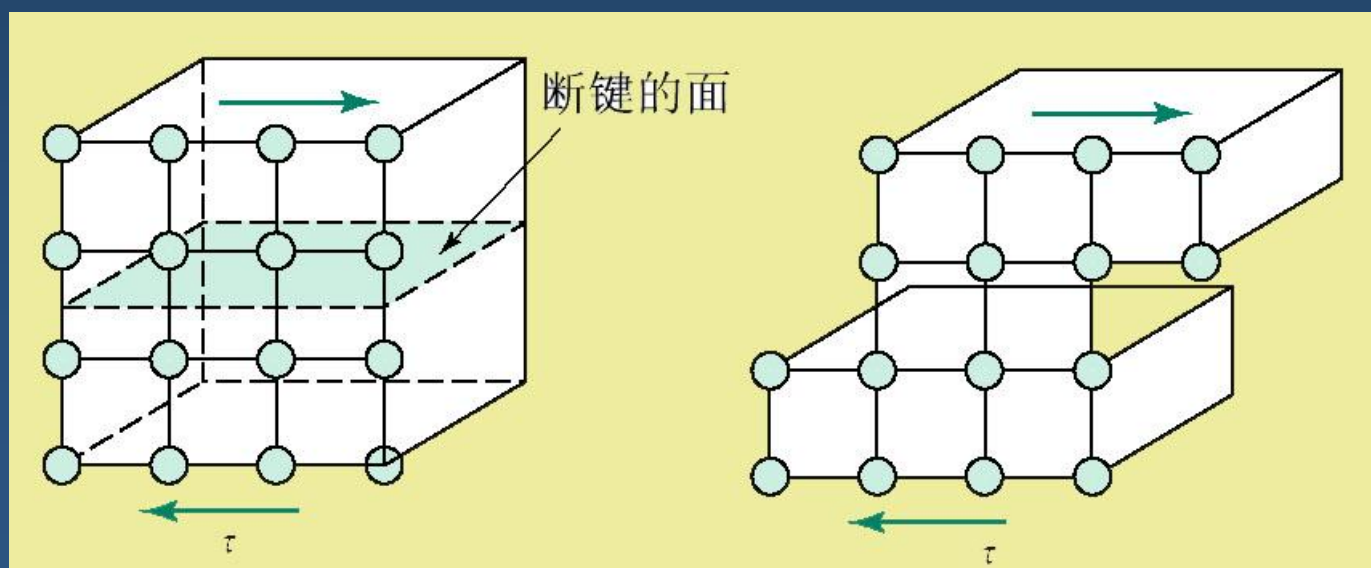
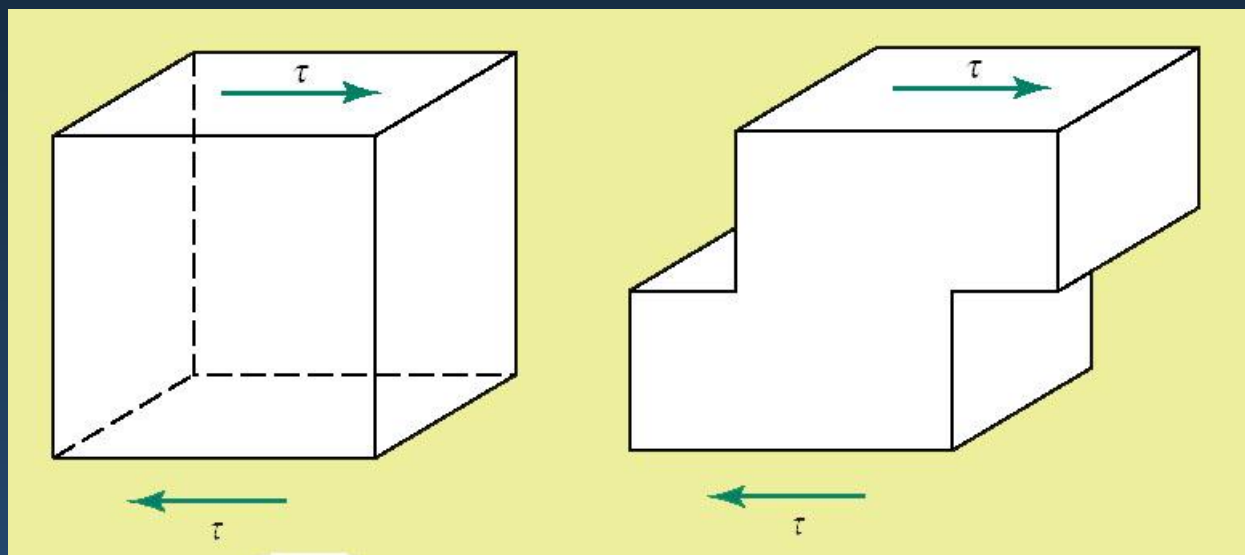
如果有多个滑移系开动，使问题复杂化。这样，Schmid定律只在某些取向范围（只有单系滑移）内才适用。

对于体心立方结构，一般是不遵守Schmid定律，这是由于它的位错核心的特殊结构造成的。



变形时，若晶体在滑移面两侧相对滑过，则在滑移面上**所有的键**都要破断来产生永久的位移。据此，可估算滑移所需的临界分切应力。

这一过程的
宏观描述



这一过程的原子
尺度描述



6.2 位错基本概念

理论切变强度的估算

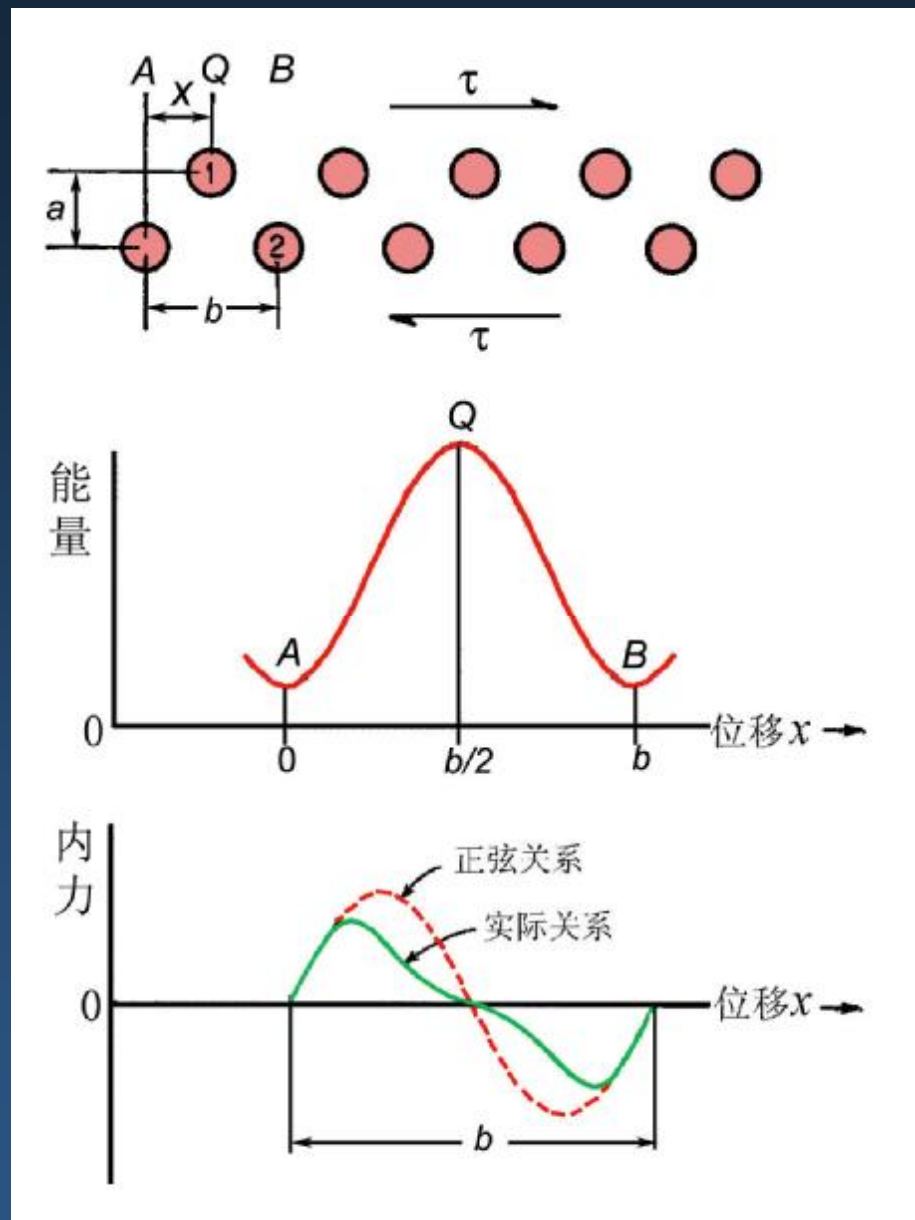
假设能量曲线是正弦形式。这样，要使原子面相对切开所需要的切应力为：

$$t = t_c \sin \frac{2\pi x}{b}$$

在弹性变形范围，应力和应变服从胡克定律： $t = mg$

m 是拉梅系数，对各向同性弹性体，它等于切变模量 G ， g 是切应变。 g 可以近似为 x/a ，上式变成：

$$m \frac{x}{a} \approx t_c \frac{2\pi x}{b} \quad \text{即} \quad t_c \approx \frac{mb}{2\pi a} \approx \frac{m}{2\pi}$$



因原子间斥力的短程性，能量曲线不是正弦形的，所以上面的估计是过高的， t_c 的更合理值约为 $G/30$ 。理论切变强度和切变模量相差约1个数量级。但实验测定的切变强度比理论切变强度低2~4个数量级。

一些金属的理论强度与实验强度的比较

晶体	理论强度 ($G/30$) GPa	实验强度/MPa	理论强度 / 实验强度
Ag	2.64	0.37	$\sim 7 \times 10^3$
Al	2.37	0.78	$\sim 3 \times 10^3$
Cu	4.10	0.49	$\sim 8 \times 10^3$
Ni	6.70	3.2~7.35	$\sim 2 \times 10^3$
Fe	7.10	27.5	$\sim 3 \times 10^2$
Mo	11.33	71.6	$\sim 2 \times 10^2$
Nb	3.48	33.3	$\sim 1 \times 10^2$
Cd	2.07	0.57	$\sim 4 \times 10^3$
Mg (柱面滑移)	1.47	39.2	$\sim 4 \times 10$
Ti (柱面滑移)	3.54	13.7	$\sim 3 \times 10^2$
Be (基面滑移)	10.32	1.37	$\sim 8 \times 10^3$
Be (柱面滑移)	10.32	52	$\sim 2 \times 10^2$

晶体的实际强度和理论计算的强度相差几个数量级，人们就设想晶体中一定存在某种缺陷，由于它的存在和它的运动引起晶体的晶体的永久变形。

晶体变形的宏观现象：

- ①形变的晶体学性（即晶体在固定的晶面和晶向滑移）；
- ②形变的不均匀性和不连续性，即变形不是在整个晶体各处发生；
- ③形变滑移的传播性，形变时，观察到滑移线（带）是从无到有，由浅到深，由短到长（即），数目由少到多；
- ④滑移服从临界分切应力定律（以后会介绍，对于体心立方晶体，会发生例外）
- ⑤温度对临界分切应力有显著的影响，等等。

设想的这种缺陷结构及特性必需和上述观察到的宏观变形现象相符。

设想的缺陷引入晶体必需要：

①它的晶体学要素不依赖于外加力的大小，而由晶体学本身确定。由它运动导致的变形不破坏晶体结构，只是原子间的相对运动。所以引入的缺陷不是完全无规而是有晶体学特性的；

②它能解释变形的不均匀性，即能说明它的结构敏感性；

③它能说明变形过程的传播性；

④引入的这种缺陷是易动的，能解释实验强度比理论强度低的原因。但它又不能像空位那样易受热起伏的影响；

⑤它应有合理的增殖机制。

现在已经知道，这种缺陷就是这里要讨论的**位错**。

位错理论发展简史

1907年 Volterra解决了一类弹性体中的**内应力不连续的弹性问题**，把它称为**位错**。

1934年 M.Polanyi, E.Orowan和G.I.Taylor差不多同时地独立提出有关这类晶体缺陷（位错）的模型，特别是Taylor明确地把Volterra位错引入晶体。

约菲用正交的尼科耳镜观察岩盐形变，看到岩盐形变时有亮线从晶体一侧传播到另一侧，说明晶体形变滑移时局部地区有应力集中，并说明滑移是从一侧传播到另一侧的。

Taylor注意到这种实验现象，根据设想的位错排列形状，计算了位错运动所产生的晶体硬化曲线。

1939年 Burgers提出描述位错的一个重要特征量-柏氏矢量，同时引入了螺位错。

1940年 Peierls提出后来在**1947年**由Nabarro修正的位错点阵模型，它突破了一般弹性力学范围，提出了位错宽度的概念，估算了位错开动的应力，这一应力正是和实际晶体屈服应力的同一数量级。

1947年 Cottrell阐明溶质原子和位错的交互作用并用以解释低碳钢的屈服现象，第一次成功地利用位错理论解决金属机械性能的具体问题。

同年 Shockley描绘了面心立方形成扩展位错的过程。

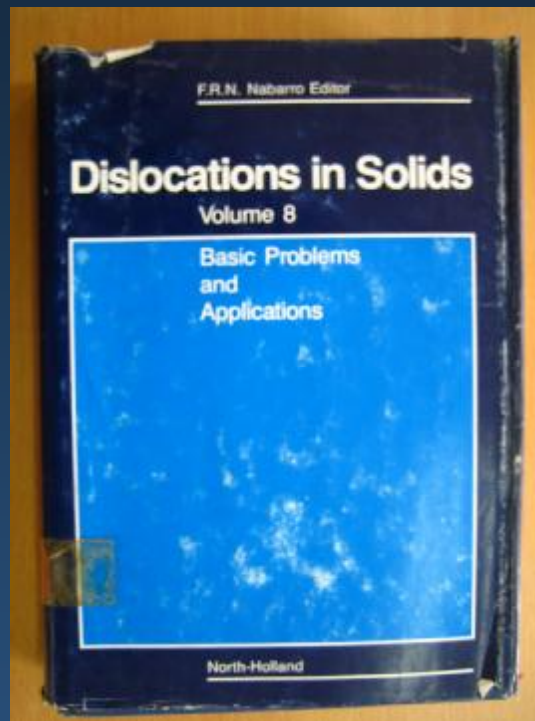
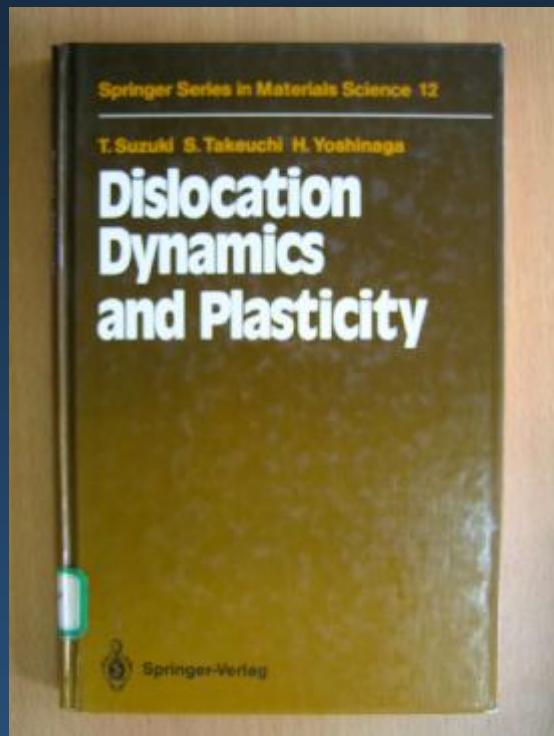
1950年 Frank和Read共同提出了位错的增殖机制。

上面所列出的是早期位错理论的发展的重要过程，到那时，对于单个位错的运动规律，位错的交互作用等理论基本已经解决。

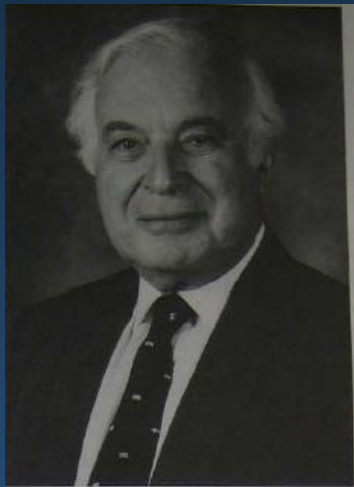
1953年 Nye和**1954年** Bilby以及以后的kröner提出的无限小位错连续分布模型，为研究更复杂位错组态提供方法。

在解决任意形状的位错线的性质方面，由Burgers在**1939年**提出的位移公式、Peach和kröner在**1950年**提出的应力场公式和位错受力公式及Blin在**1955年**提出的交互作用能公式等基本上能得到解决。**1956年** Menter直接在电镜观察了铂钛花青晶体中位错的存在，同年，Hirsch等应用相衬法在电镜观察到位错的运动，位错理论就在更坚实的基础上发展了。

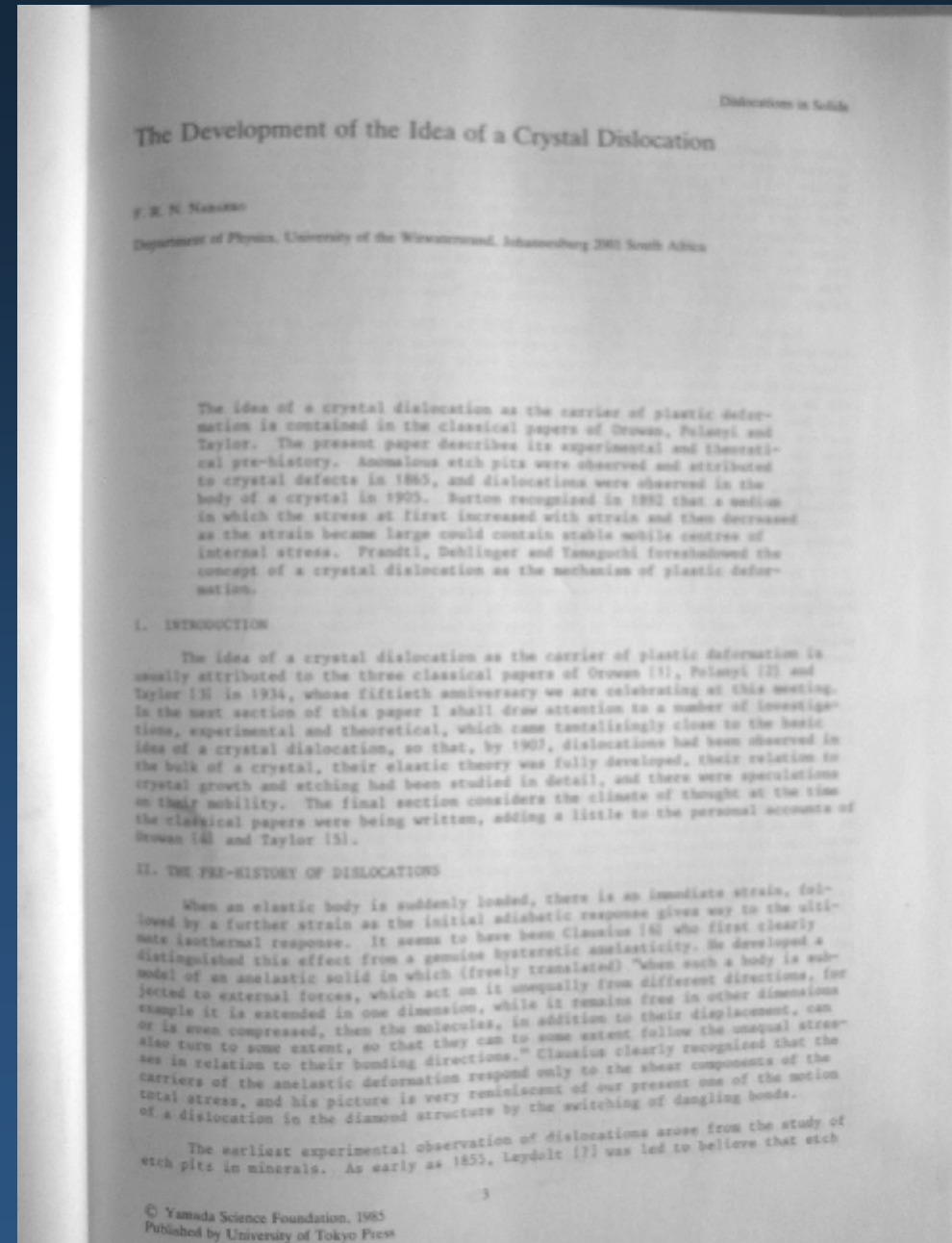
近几十年，随着实验设备和计算机的发展，研究位错核心的组态以及在复杂结构中的位错方面取得很多很有成效的结果。



The 1995 Institute of Metals Lecture and R.F.Mehl Award, Frank R.N.Nabaron.

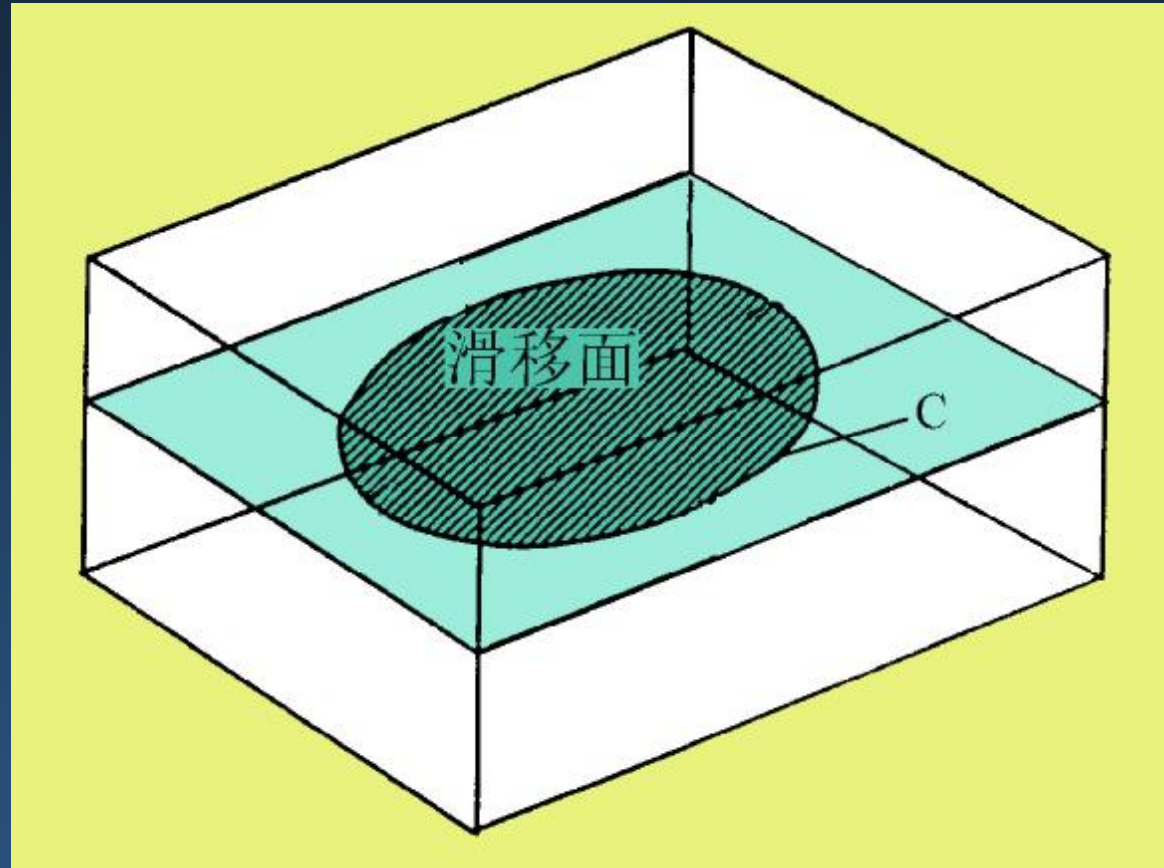


[15] 1991. 22A. No.8. 1693-
1708. L.M.Brown, R.F.Mehl
Medalist. Toward a sound
understanding of dislocation
plasticity



在晶体中位错概念的引入

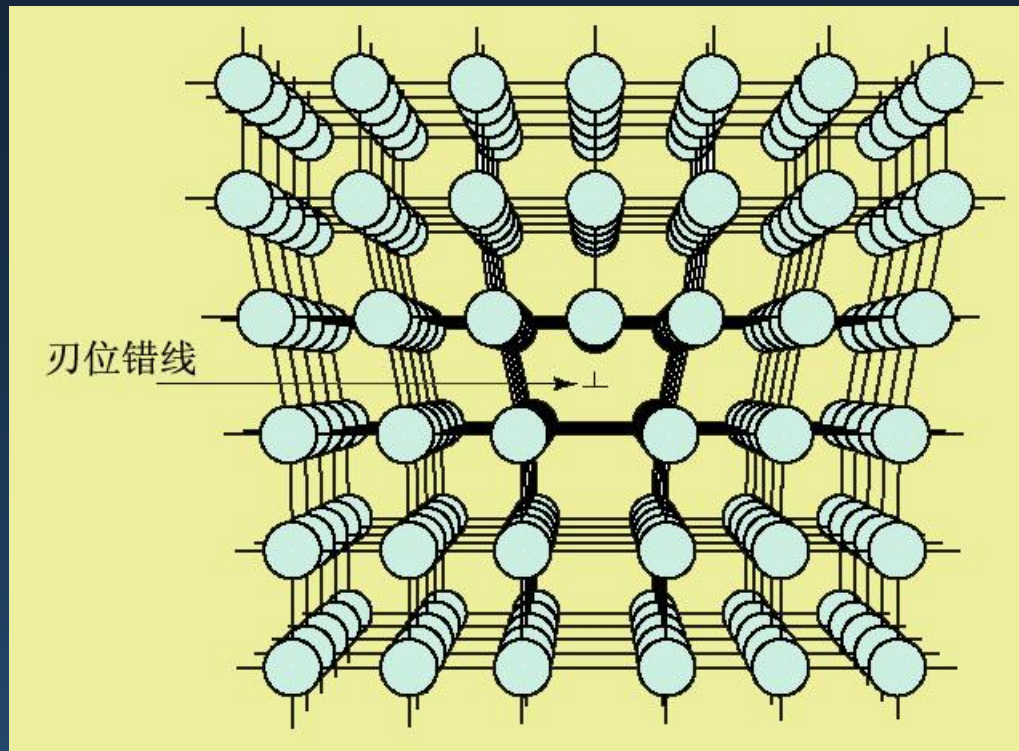
假设在滑移面上有部分面积已经滑移，上下侧相对滑移了 b 矢量，在已滑移区域和没有滑移区域的交界处必然存在很大畸变，它就是我们要寻找的缺陷，称之为**位错**。



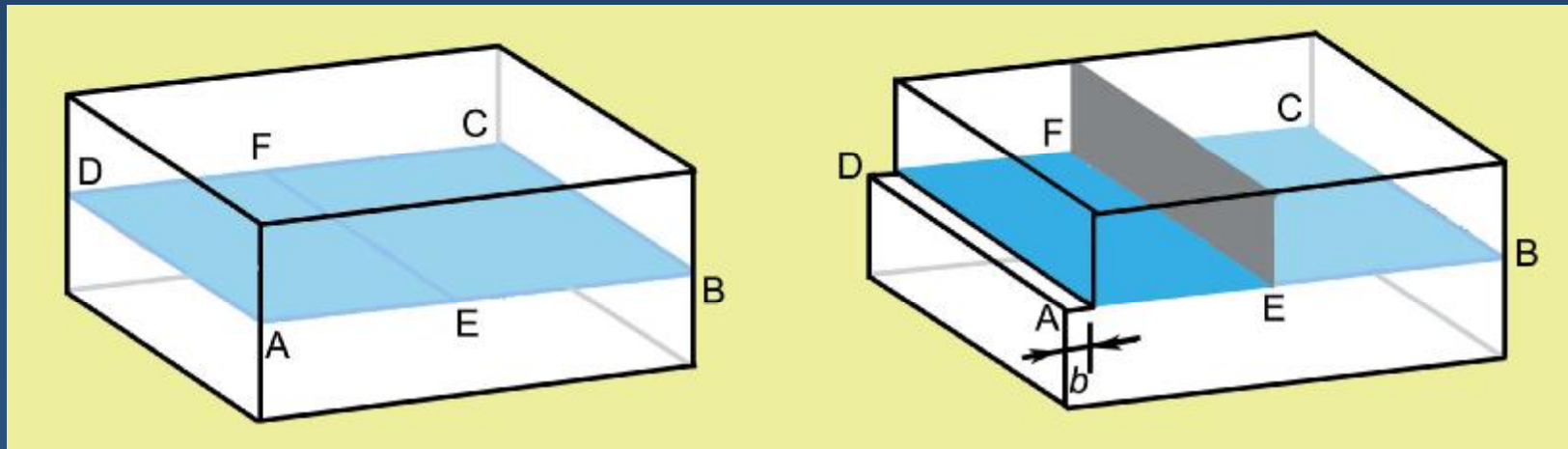
6.3 位错的几何形态

刃型位错

刃位错的原子模型

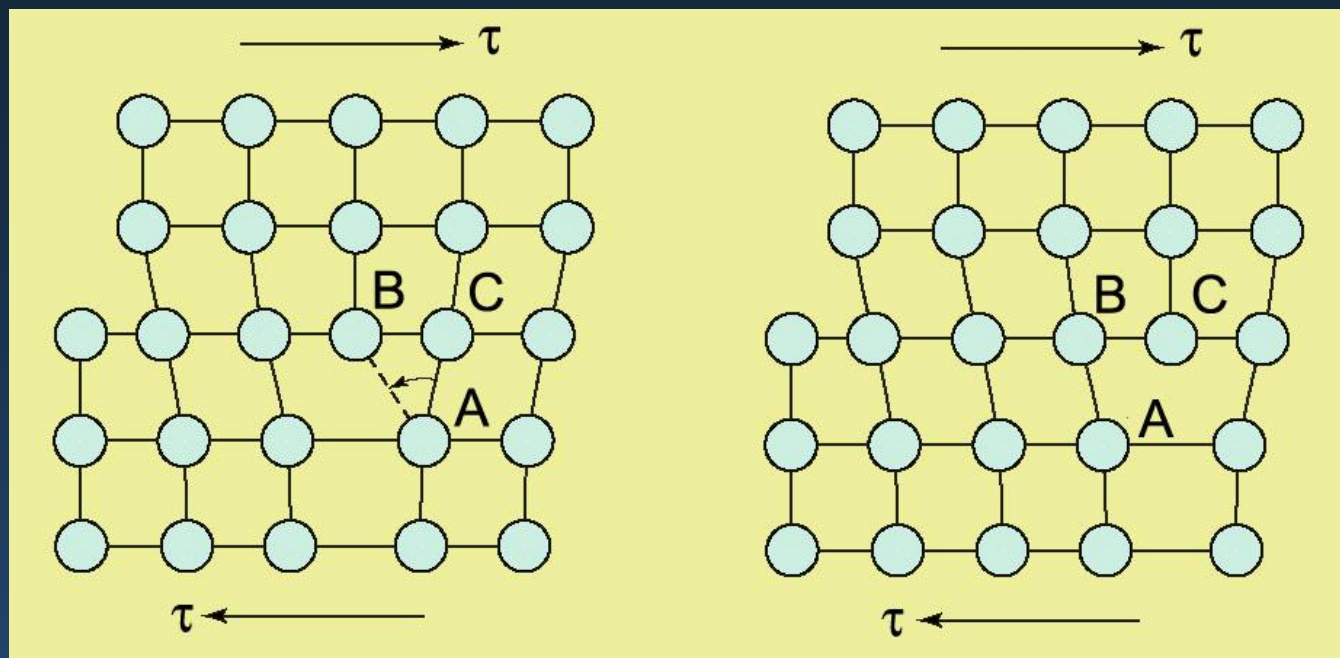


产生刃位错的Volterra过程

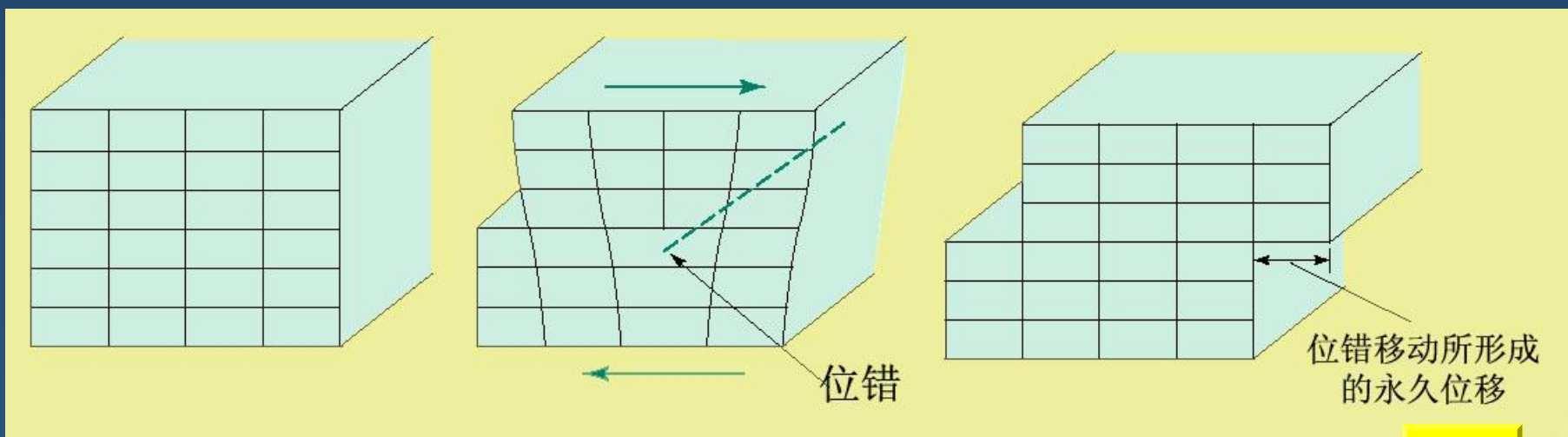


半原子面在上侧，称正刃位错，“ \perp ”；若半原子面在下侧，称负刃位错，“ \dashv ”。

位错易动性的示意说明



位错移动所引起的永久变形的示意说明

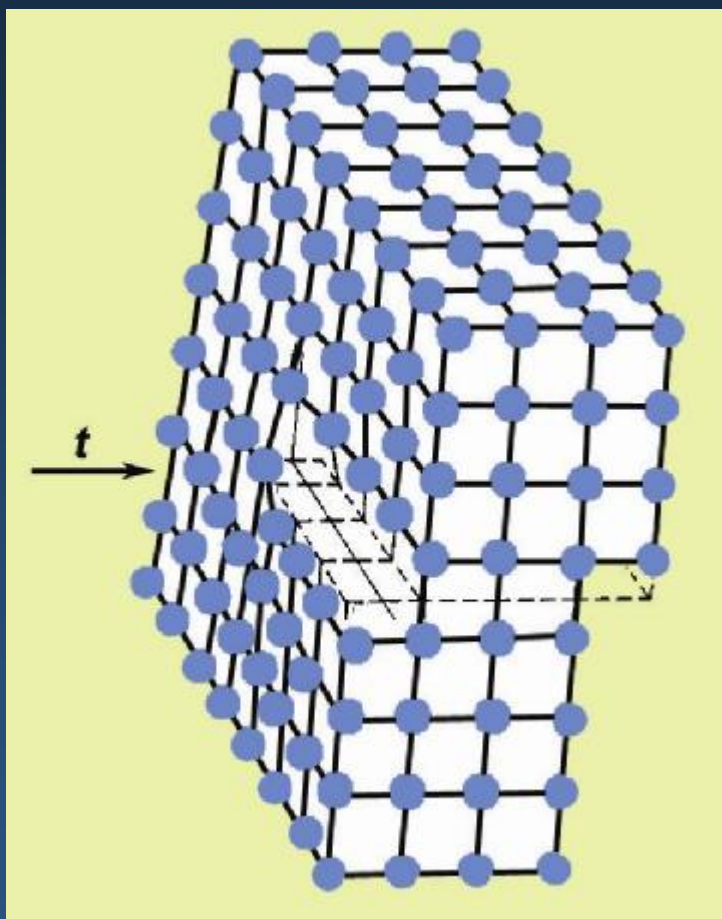


观看刃位错的运动

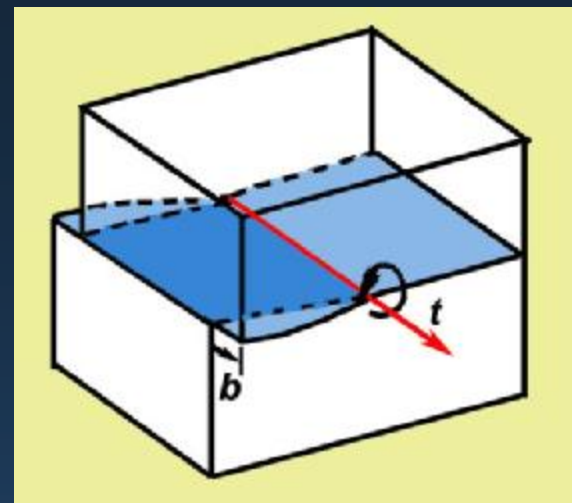


螺型位错

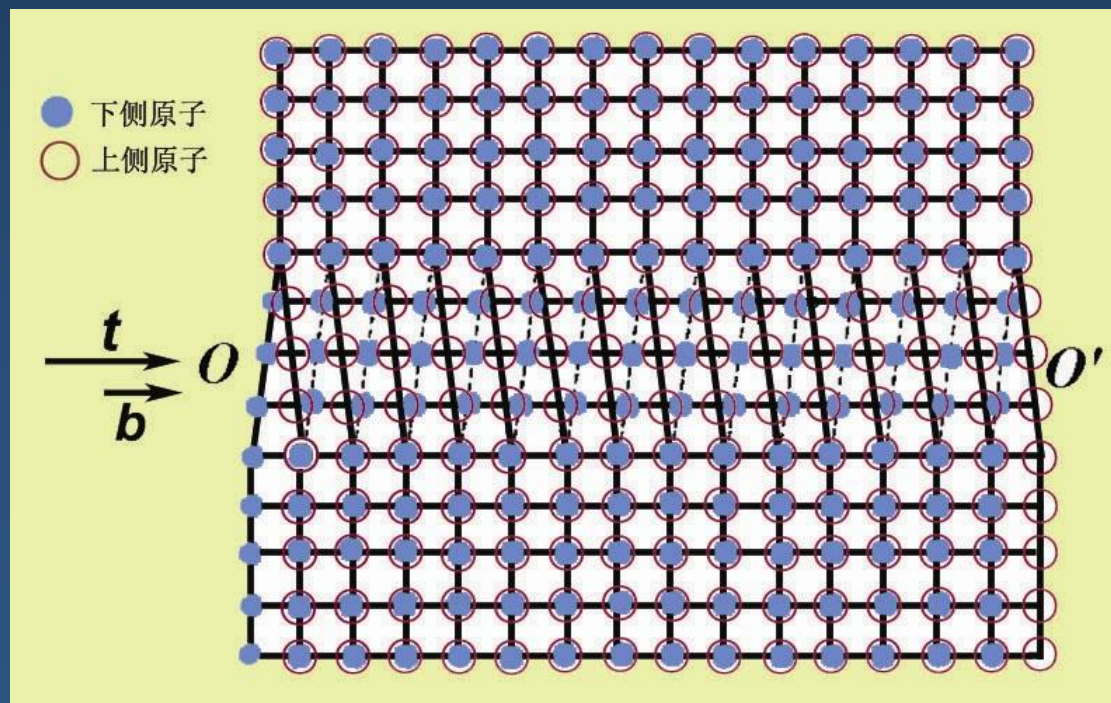
右螺位错的原子模型



产生右螺位错的
Volterra过程



右图的顶视投影图

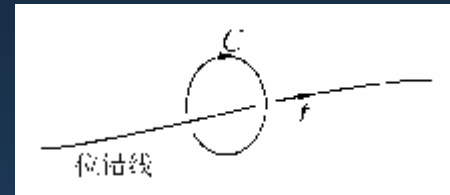


观看螺位错的运动



柏氏回路及柏氏矢量

位错线在晶体中产生应力和应变场，从“制造”位错的Volterra过程可知，剖面的相对位移矢量 b 是位错的最根本特征，绕位错的回路 C 的弹性位移 u 的线积分值应该等于 b ：



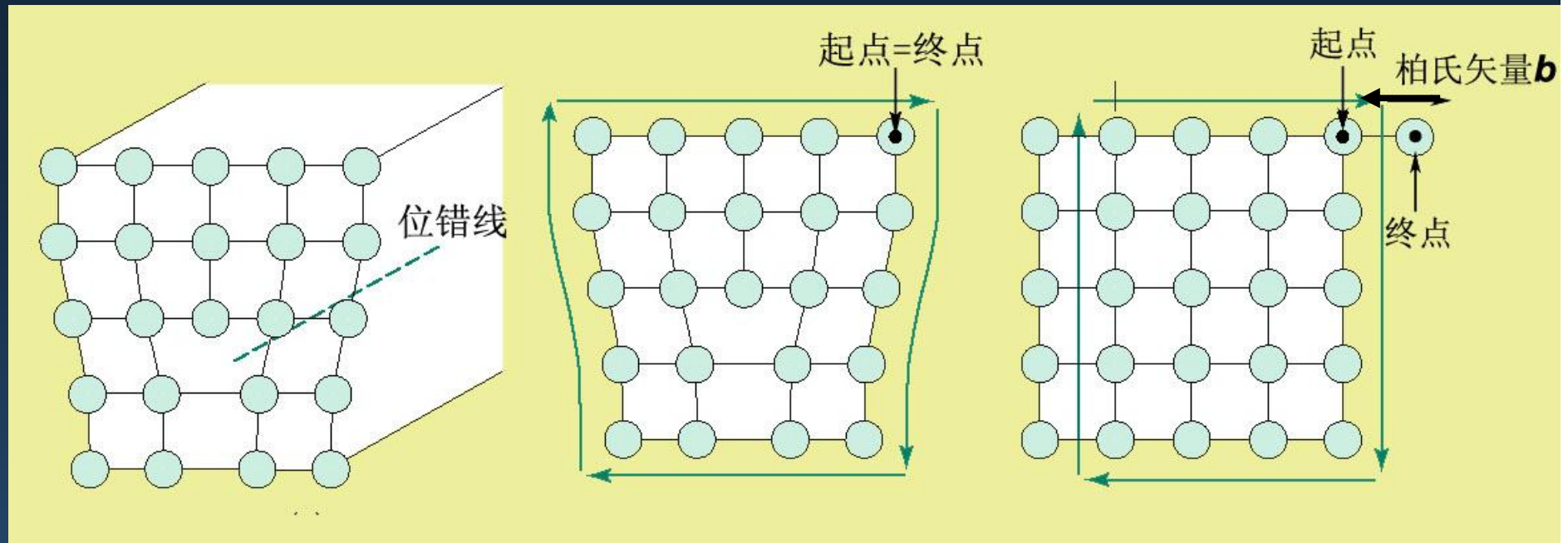
$$b = \oint_C du$$

b 称**柏氏矢量**。按照这样的概念，可以用简单的作图法来定出位错的柏氏矢量。其步骤如下：

- ①人为规定位错线正向 t （单位矢量）；
- ②以位错线正向为轴环绕位错线在位错线附近的原子错排区作右螺旋闭合回路（称**柏氏回路**）；
- ③用同样方法在不含位错的完整晶体中作相同回路；
- ④比较这2个回路，绕位错线所作的回路是闭合的，则在完整晶体中所作的相同回路是不闭合或是重叠的，从这个回路的终点向始点连接所得的矢量就是位错线的柏氏矢量 b 。

这种方法记为**RH/FS**法。在确定柏氏矢量时，若位错线的正向相反时，所得的柏氏矢量也同时反向。

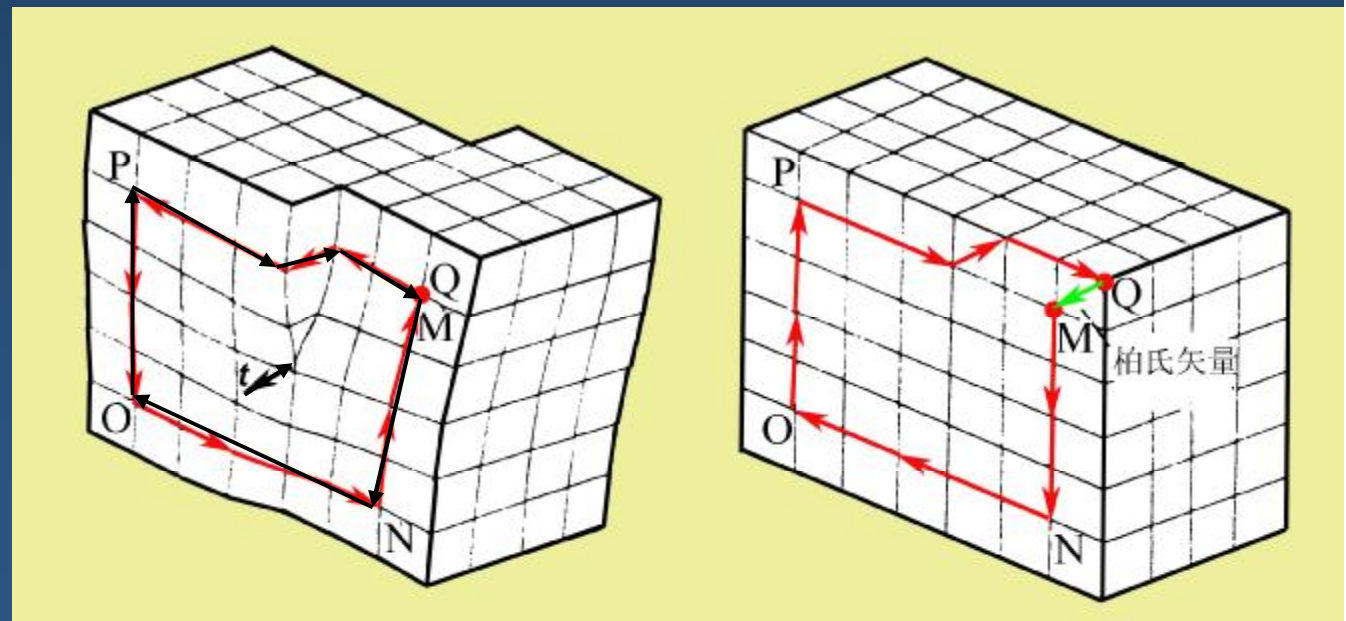
刃位错的柏氏回路和柏氏矢量



螺位错的柏氏回路和柏氏矢量



复习 b 的确定方法



柏氏矢量是位错线的一个特征量，可以用它来明确地定义位错的类型：

$t \cdot b = 0$ 刃位错；

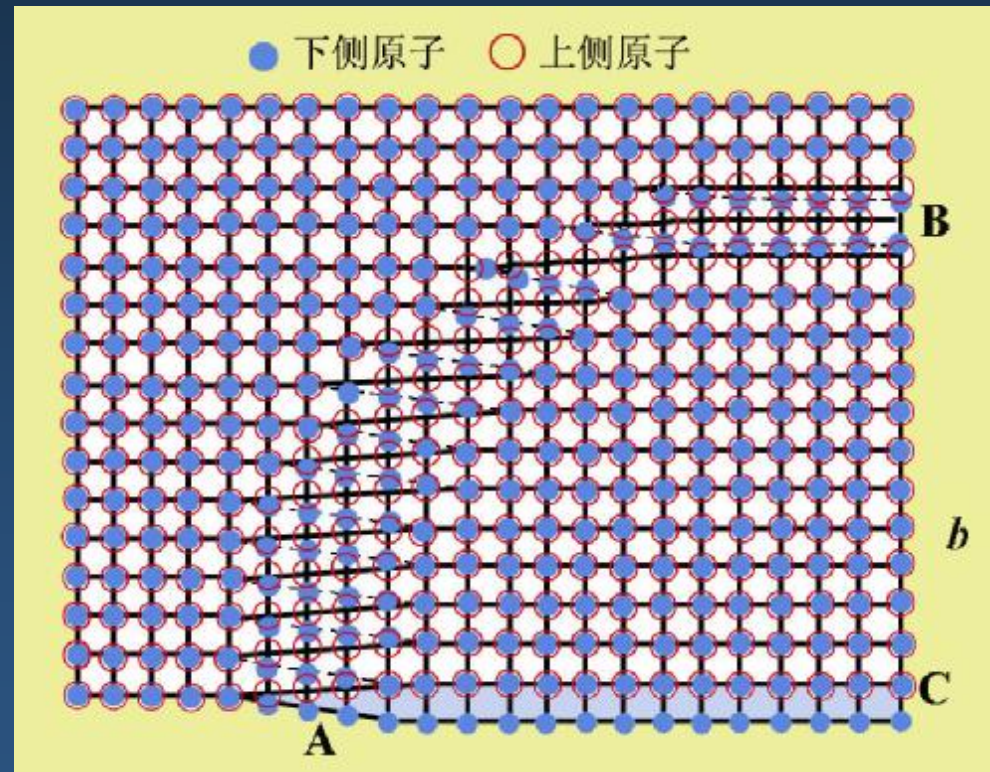
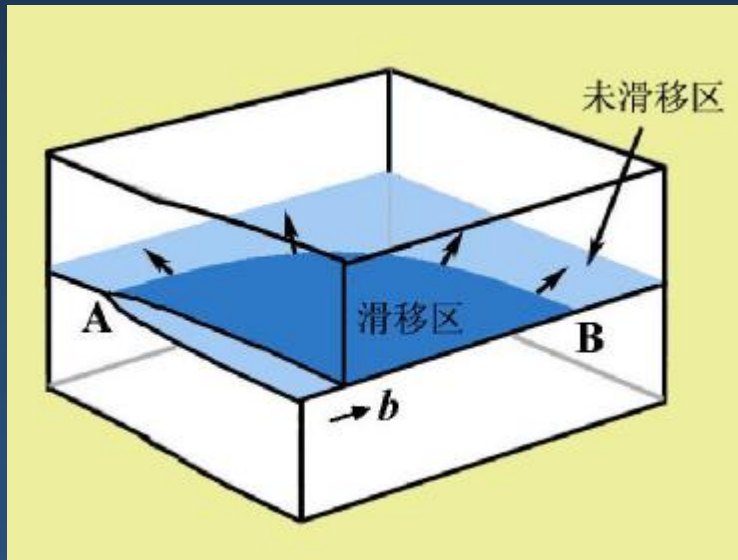
$t \cdot b = |b|$ 右螺位错，

$t \cdot b = -|b|$ 左螺位错

位错线和其柏氏矢量既非垂直又非平行的是混合位错。

右图的顶视投影原子模型图

产生混型位错的Volterra模型



一个柏氏矢量 b 与位错线 t 夹角为 j 的混位错，可以看成是柏氏矢量为 $b \sin j$ 的刃位错和柏氏矢量为 $b \cos j$ 的螺位错的叠加。

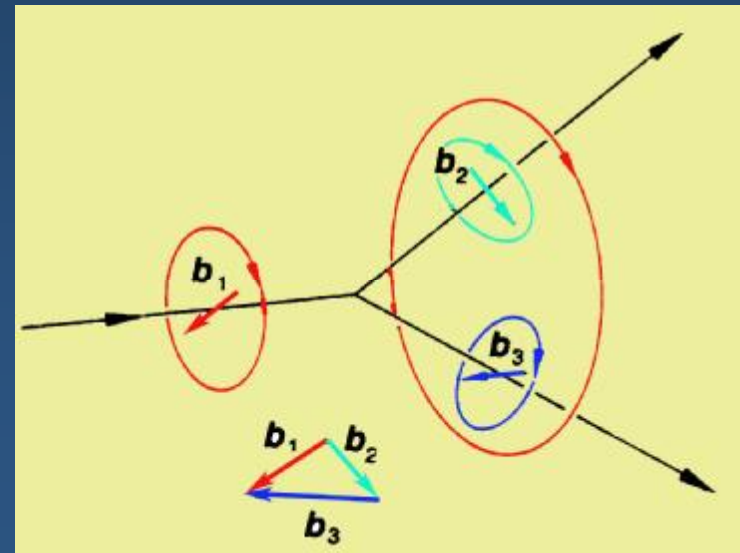


柏氏回路任意扩大、移动，只要在扩大和移动过程不和原位错线或其它位错线相遇，由它确定的柏氏矢量也不会改变，这就是**柏氏矢量的守恒性**。从这一点引伸，我们可以得到如下的重要概念：

- ①一根不分岔的位错线不论它的形状如何变化，它只有一个恒定的柏氏矢量。
- ②一根位错线不能终止在晶体内部，只能终止于晶体表面或晶界；若它终止在晶体中部，它必和其他位错线相连接，相交于一个接点，或者自成封闭的位错环。
- ③汇聚在一点的各位错线，如果从汇聚点向外的方向定为正向，则它们的柏氏矢量总和为零。

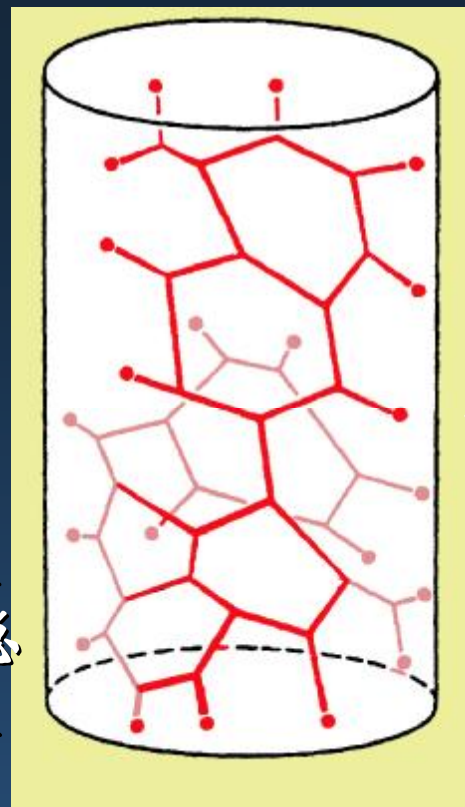
绕 b_1 的位错的柏氏回路扩大，移动到包围其它2个位错的区域，这个回路所确定的柏氏矢量始终不变，仍为 b_1 。故

$$b_1 = -(b_2 + b_3) \quad \text{即} \quad \sum b_i = 0$$



晶体中的位错组态常是位错网络。除了位错网络外，位错还可以单独的以位错环的形式存在。在经强烈冷加工后，晶体中的位错组态很复杂，经常出现现象发团一样的位错“缠结”。

单位体积中含位错的总长度称**位错密度** r ， $r=L/V$ ，其中 L 为体积 V 中的位错线总长度。另一种有时使用更为方便的定义是：在单位面积上截过的位错数目。



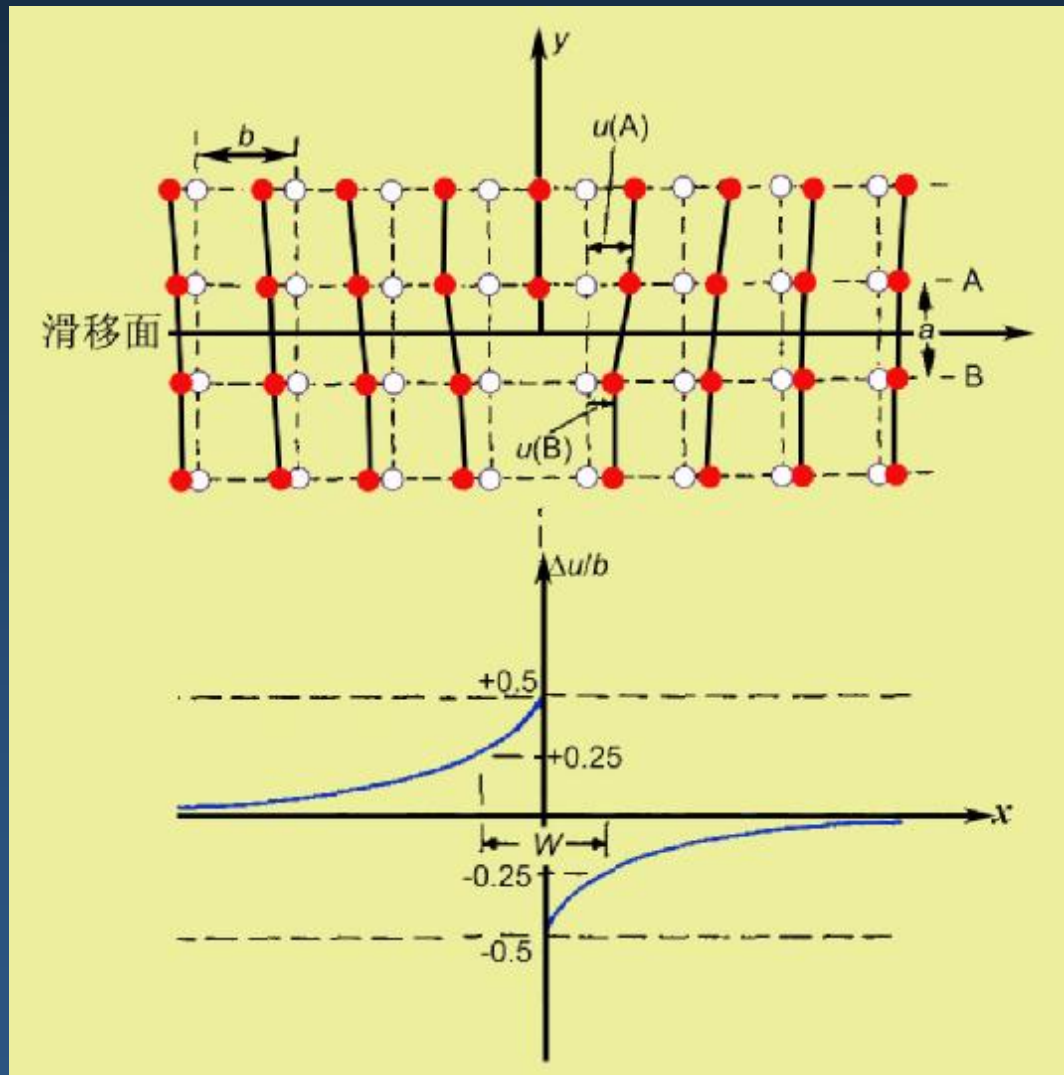
如果所有的位错线平行且垂直于表面，这两种定义的密度值是相同的。对于完全**随机排列的位错组态**，**体密度是面密度的2倍**。

在充分退火的金属晶体中 r 通常在 $10^6 \sim 10^8 \text{cm}^{-2}$ 之间。位错密度随塑性变形而快速增加，强烈冷加工金属的典型值约为 $10^{11} \sim 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 。在非金属晶体中 r 通常低些。

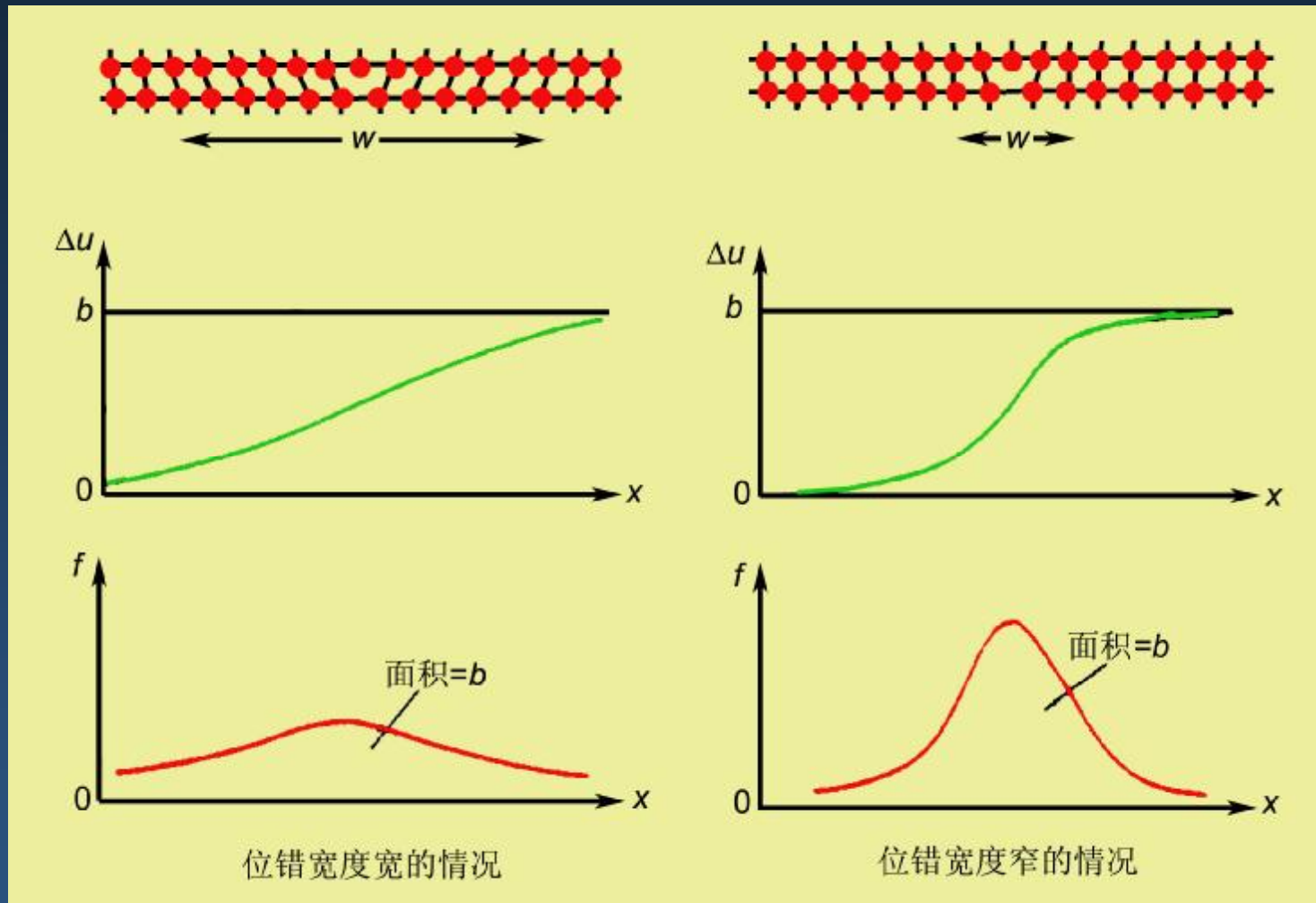
位错核心结构

位错所引起的畸变大部分集中在原子排列不太精确的核心区域。按如下的方法来定量描述这种错排：

滑移面上侧(A)和下侧(B)的原子分别发生了位移 $u(A)$ 和 $u(B)$ ，即沿滑移面原子的错排 $Du = u(B) - u(A)$ 。Du的最大值为 $b/2$ ，并随离开位错中心迅速减小。把错排大小大于其最大值一半($\pm b/4$)的那段距离定义为位错宽度 w 。位错宽度通常在 $b \sim 5b$ 之间，取决于原子间势能和晶体结构。密排金属的位错宽度比较大；共价键材料例如硅、金刚石等的位错宽度比较窄。



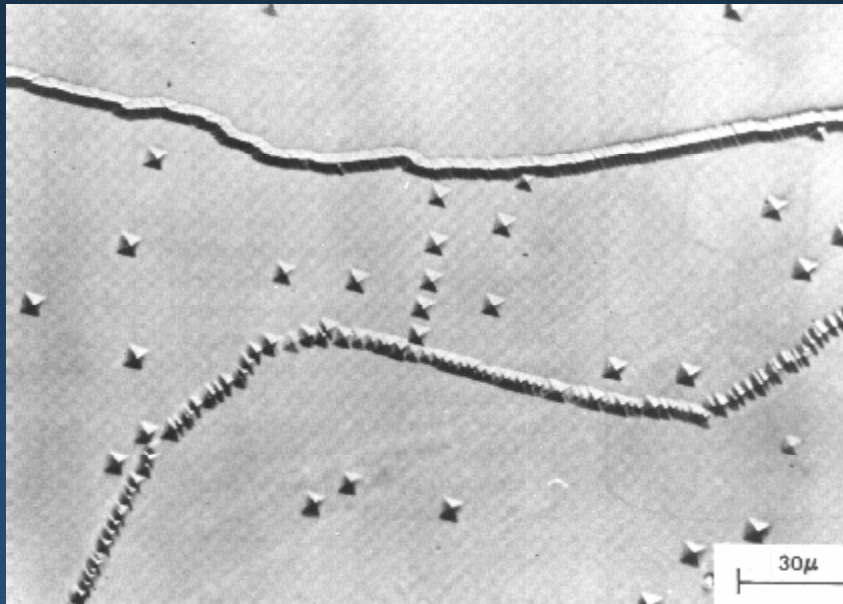
把错排曲线变成连续曲线 这时，对错排曲线求导数得 $f(x) = \frac{d(\Delta u)}{dx}$



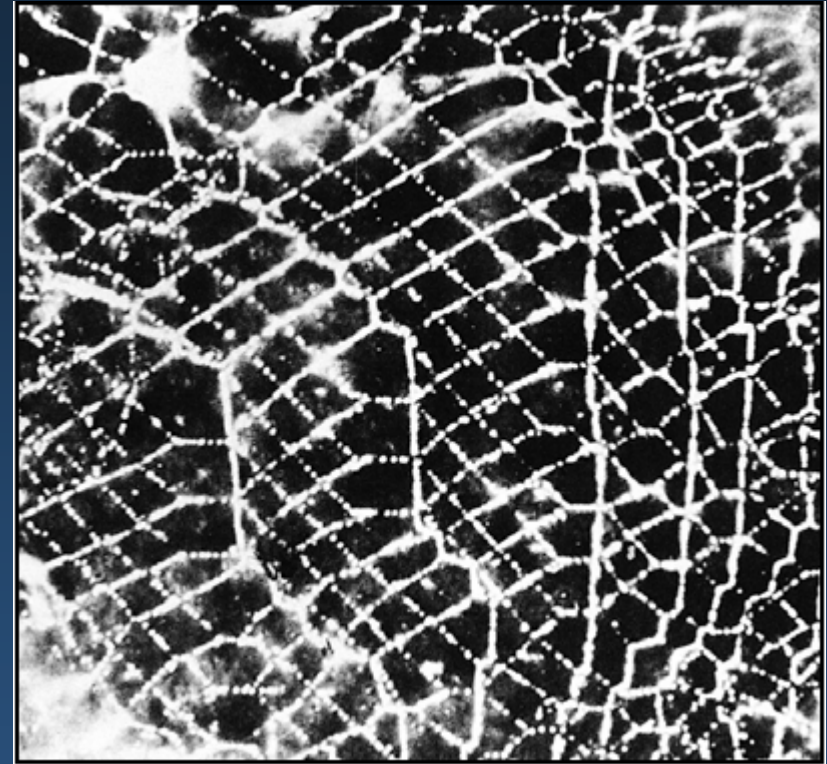
因为 $f(x)$ 曲线下面的面积等于 b ，所以称 $f(x)$ 为柏氏矢量分布函数。分布函数清楚地显示错排集中于何处。

位错的观察

早期对位错的观察的例子：

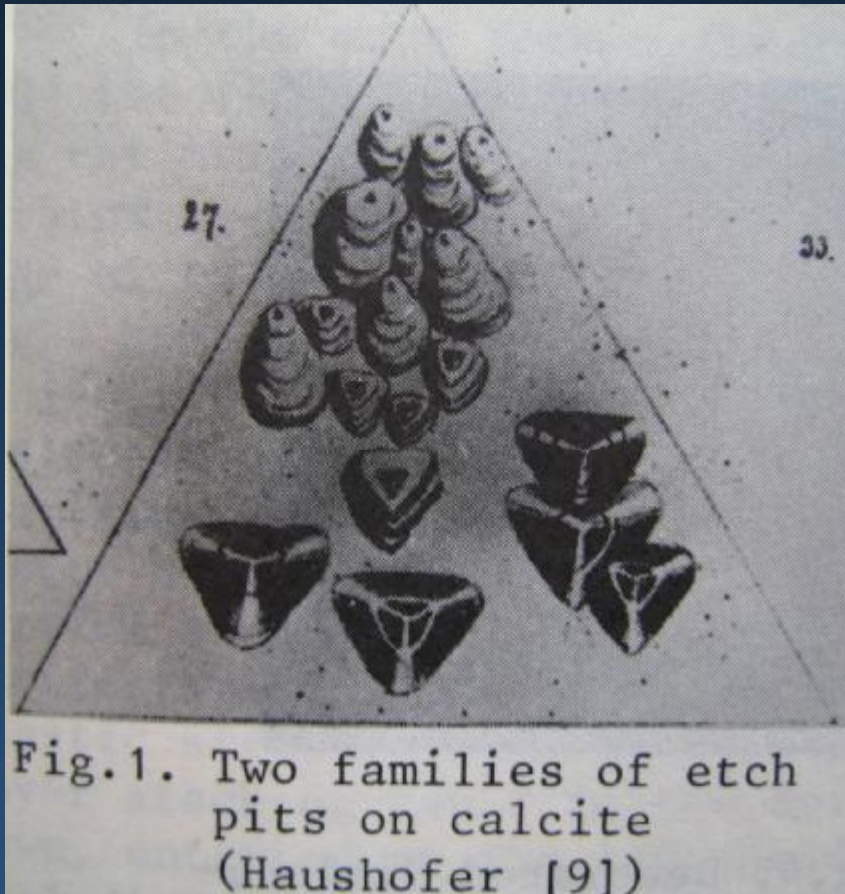


氯化锂表面浸蚀出的位错露头的浸蚀坑



KCl中的位错

KCl晶体是透明的，用杂质“辍饰”位错以便可以见到它（白色）。位错形成网络



方解石

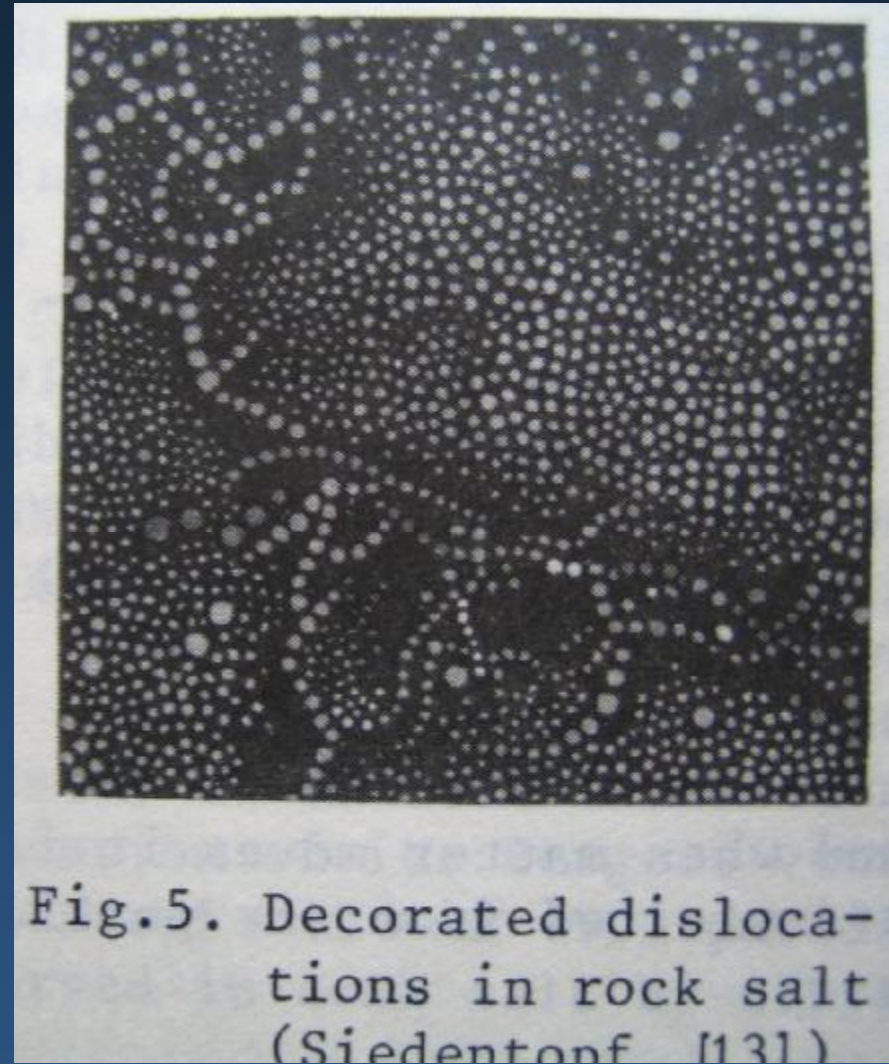




Fig.11. Growth spiral on
paraffin (Heck [32])



石蜡



Fig.10. Growth spiral on carbo-
rundum (Menzies and
Sloat [31])

金刚砂

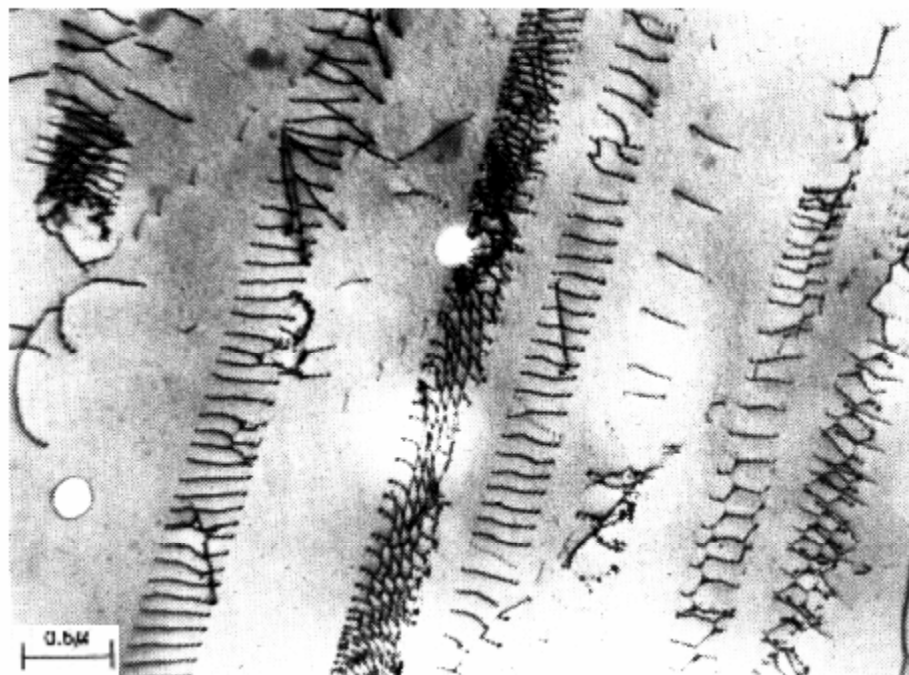
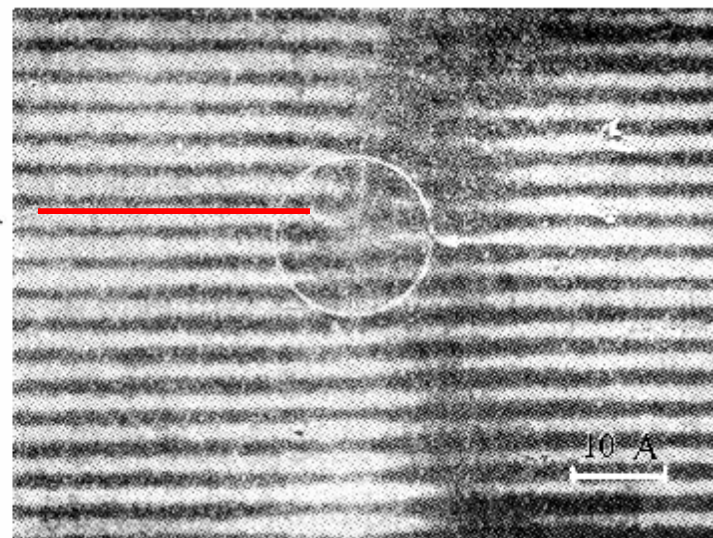
甲苯胺双螺位错生长中心

位错的电子显微镜观察的例子

锗晶体中位错的
电子显微镜图象



额外半原子面的位置



在薄膜中排列在滑移面上的位错的示意图

18Cr-Ni不锈钢中的平面排列的位错

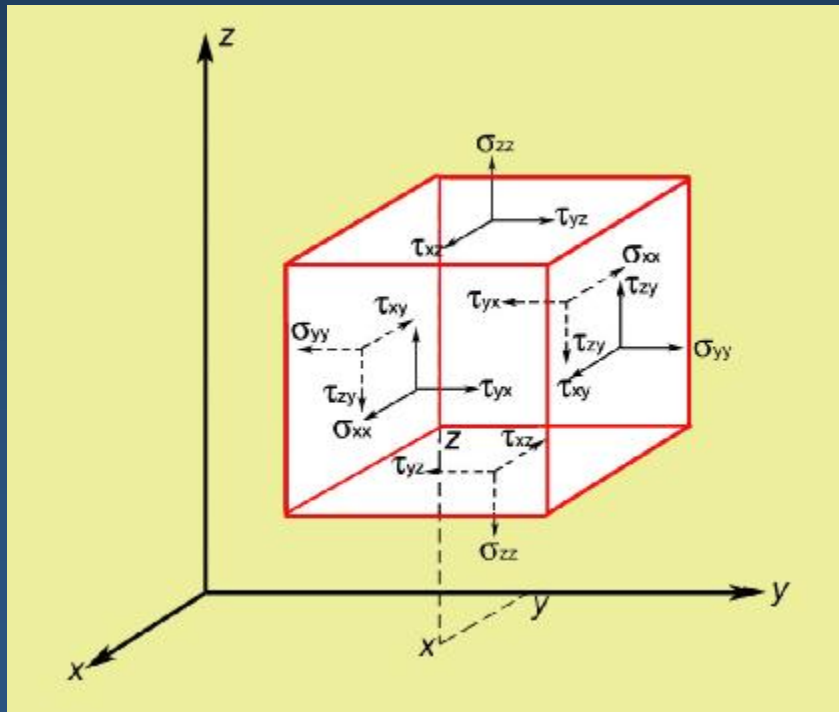


6.4 在弹性介质中的位错

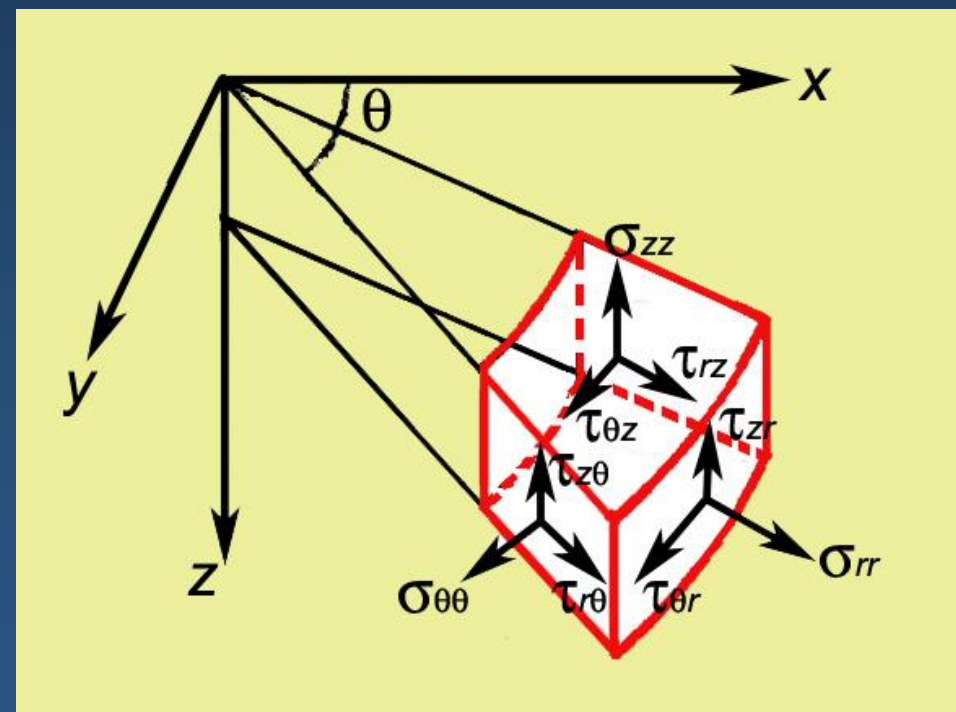
设晶体是一个连续的各向同性弹性介质，并忽略位错中心附近的点阵结构的影响，根据线弹性理论就可获得非常接近真实情况的位错应力场的表达形式。

应力的表示

在均匀应力场下直角坐标的一个微元的各应力分量

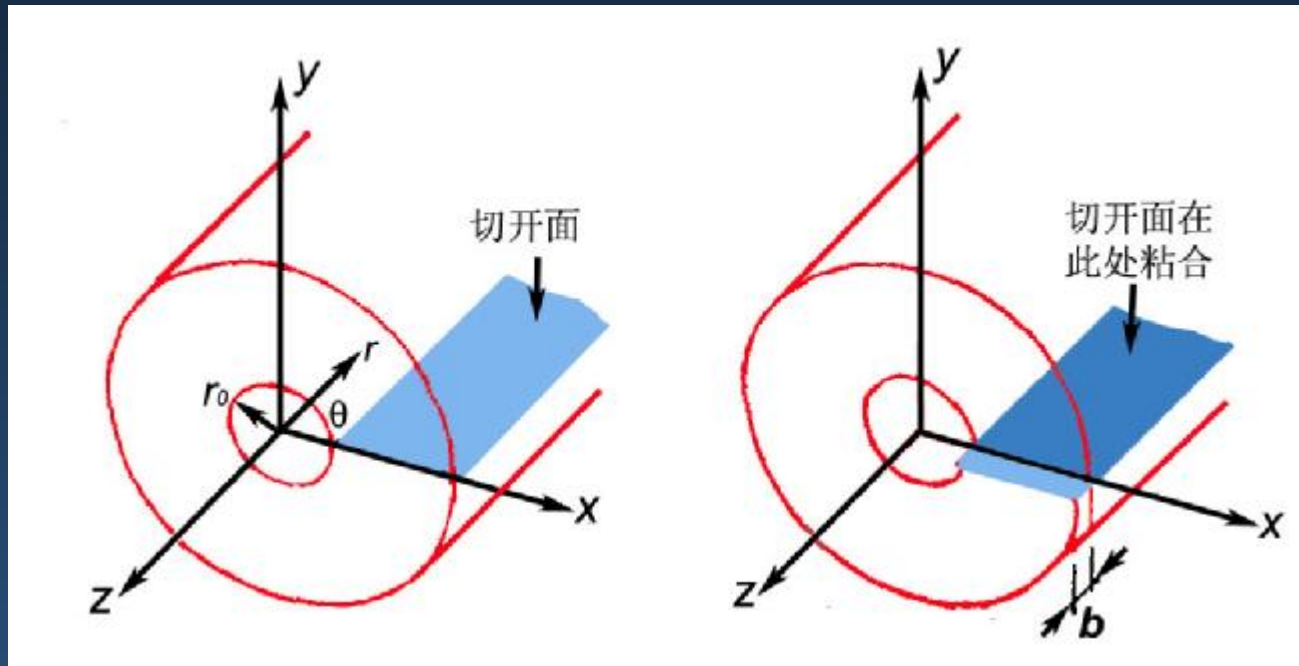


在均匀应力场下柱坐标的一个微元的各应力分量



直螺位错的应力场

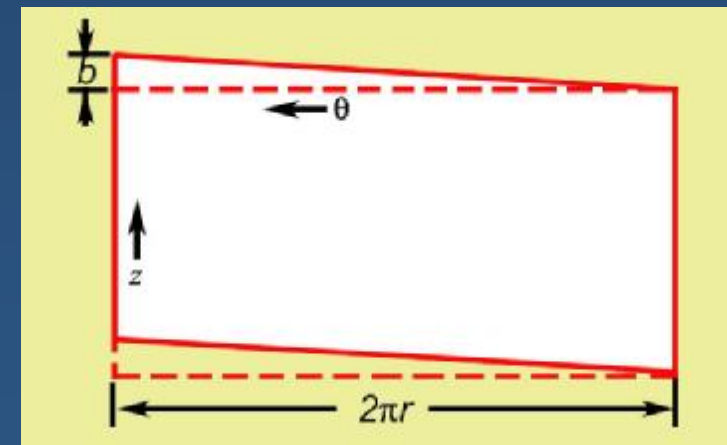
计算直螺位错应力场的模型



位移只有 u_3 分量，整体只有切应变和切应力。

把半径为 r (他可以为任意值) 处的柱面展开，很容易计算其切应变 g_{zq} :

$$g_{zq} = \frac{b}{2\pi r}$$



按Hook's law, 相应的切应力 t_{zq} 为:

$$t_{zq} = Gg_{zq} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad \text{其它分量为} \quad s_{rr} = s_{qq} = s_{zz} = t_{rq} = t_{rz} = 0$$

应力场的值与 z 无关。对于左螺位错, 它的应力场的所有分量均反号。当 $r \rightarrow 0$ (即 $r \rightarrow 0$) 时, 应力发散, 因而上述结果不适用于位错中心区域, 为严重畸变区, 线弹性理论不适用, 这也是弹性模型采用空心 (半径 r_0) 圆柱的原因, 空心区域是核心区域。

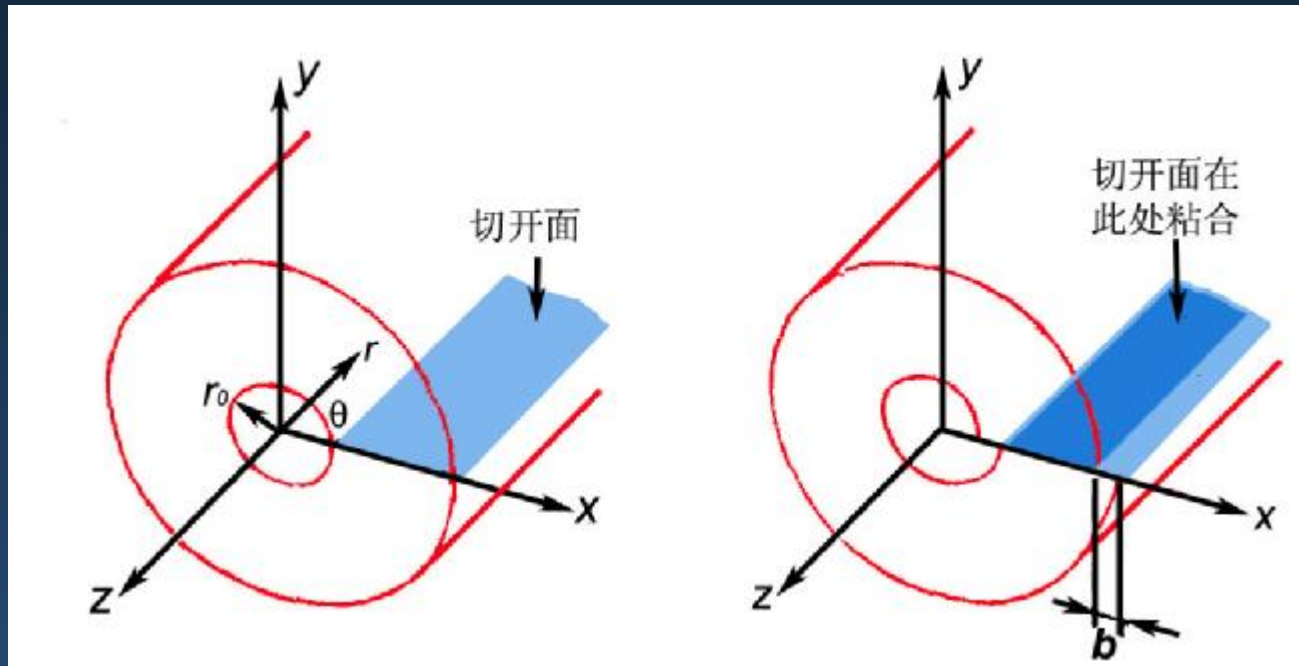
当 $r \gg b$ 时应力达到理论切变强度, 并且应变超过10%, 因而合理的 r_0 取值范围在 b 到 $4b$ 之间, 即绝大多数场合 $r_0 \approx 1\text{nm}$ 。

把应力场用直角坐标表达, 得:

$$t_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)}, \quad t_{yz} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{(x^2 + y^2)}, \quad s_{xx} = s_{yy} = s_{zz} = t_{xy} = 0$$



计算直刃位错应力场的模型



位移的 $u_3=0$, 并且 u_1 和 u_2 不是 z 的函数。

根据边界条件，按弹性理论求得其应力场为

$$s_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-n)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$s_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-n)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

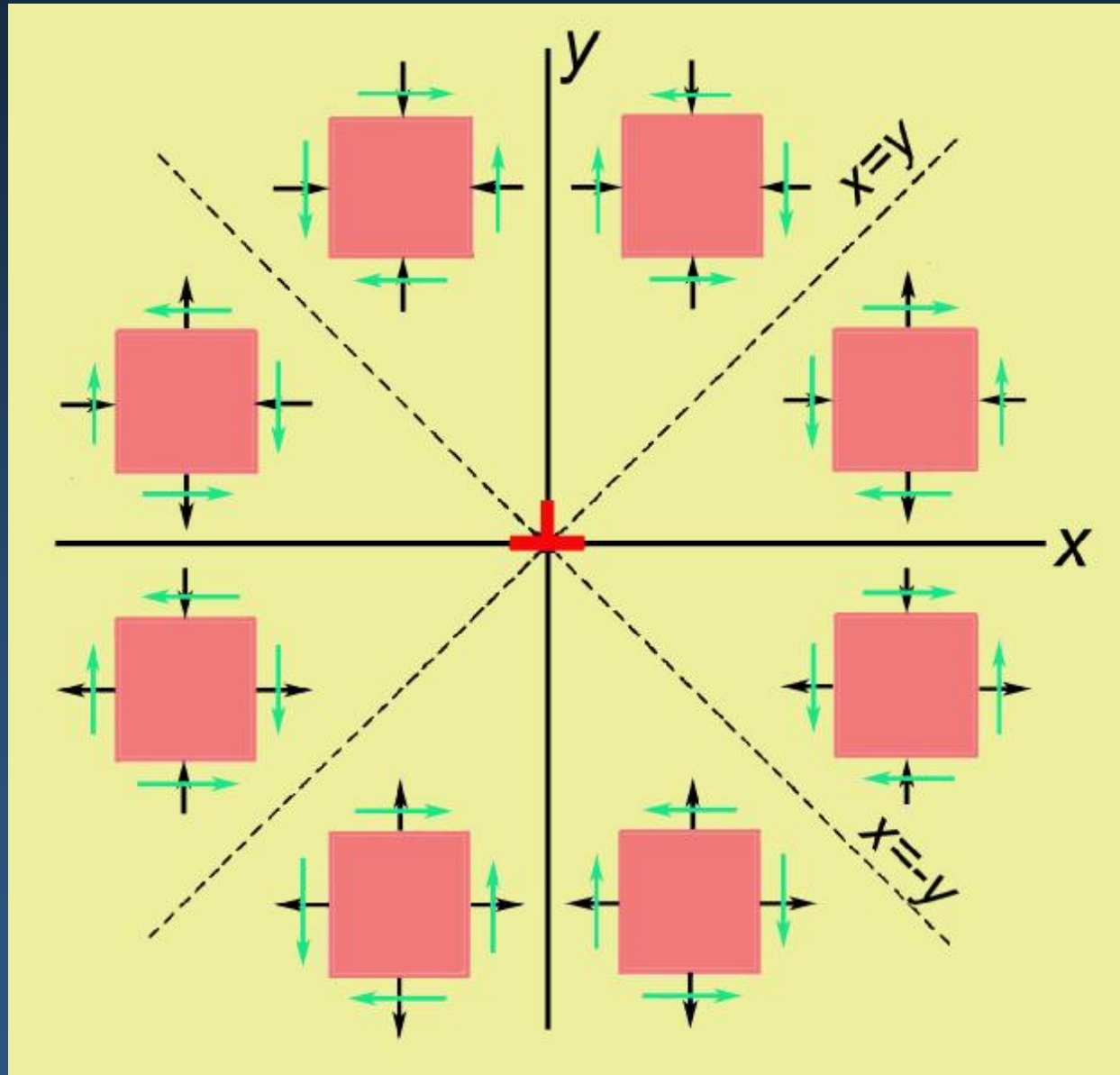
$$t_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-n)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$s_{zz} = n(s_{xx} + s_{yy})$$

$$t_{xz} = t_{yz} = 0$$

应力场的值与 z 无关。同样，上述结果不适于位错中心区域。

正刃位错周围的应力场的正值和负值的分布



为了了解各应力分量大小的分布，常在x-y平面上画出应力场的等应力线。为此，以 r 和 q 表达 ($r^2=x^2+y^2$, $\tan q=y/x$)，得

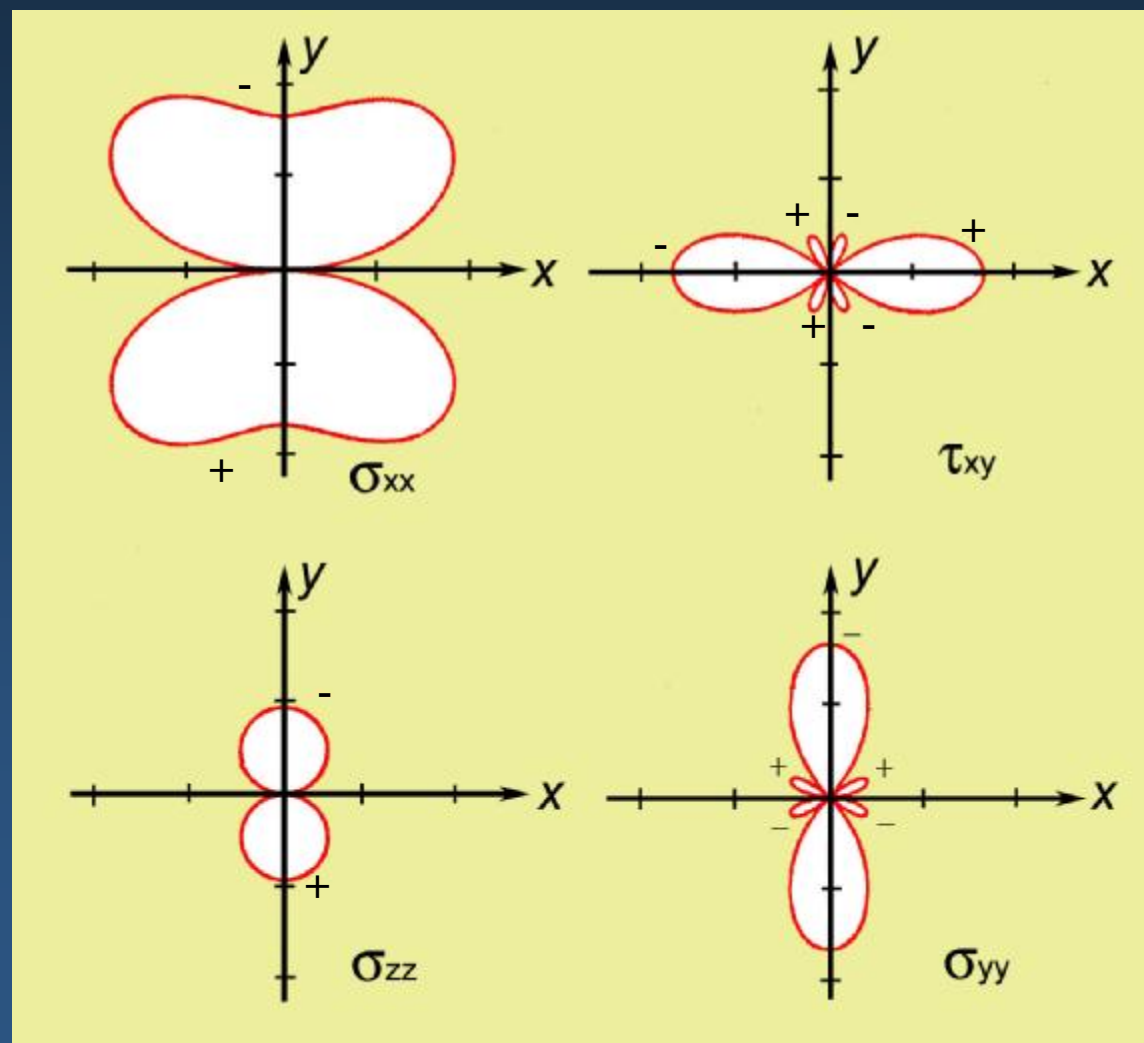
刃位错各应力分量的等应力线

$$\sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin q (2 + \cos 2q)}{r}$$

$$\sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin q \cos 2q}{r}$$

$$\tau_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos q \cos 2q}{r}$$

看两类位错的
应力场分布



混型直位错的应力场

因为混型直位错可看成是刃型分量和螺型分量位错的迭加，所以混型直位错的应力场也可以由刃型分量和螺型分量位错的应力场叠加得出。如果混位错的柏氏矢量的螺型分量是 b_s 、刃型分量是 b_e ，则其应力场为：

$$S_{xx} = -\frac{Gb_e}{2p(1-n)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$S_{yy} = \frac{Gb_e}{2p(1-n)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$S_{zz} = n(S_{xx} + S_{yy})$$

$$t_{xy} = -\frac{Gb_e}{2p(1-n)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$t_{xz} = -\frac{Gb_s}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}$$

$$t_{yz} = \frac{Gb_s}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}$$

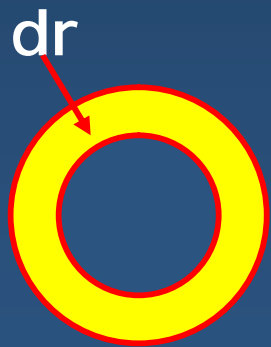
应该注意到，混型位错的应力场包含全部的六个分量。

6.4.2 位错线的能量

和位错引起的畸变相关的应变能 E 包括弹性应变能 E_{el} 和核心能量 E_{core} 两部分。我们讨论的能量都指单位长度位错线的能量。

螺位错的弹性应变能

把应力场的应变能密度 $w (=Sg_{ij}t_{ij}/2)$ 与单位长度位错线对应的晶体体积积分就能求出位错的应变能 E_{el} 。螺位错的 $w = g_{zq}t_{zq}/2$ ，对中空圆柱域积分，得



$$\begin{aligned} E_{el(S)} &= 2\pi \int_{r_0}^R w r dr = 2\pi \int_{r_0}^R g_{zq} t_{zq} r dr \\ &= \frac{Gb^2}{4p} \int_{r_0}^R \frac{dr}{r} = \frac{Gb^2}{4p} \ln \frac{R}{r_0} \end{aligned}$$

1/2

刃位错的弹性应变能

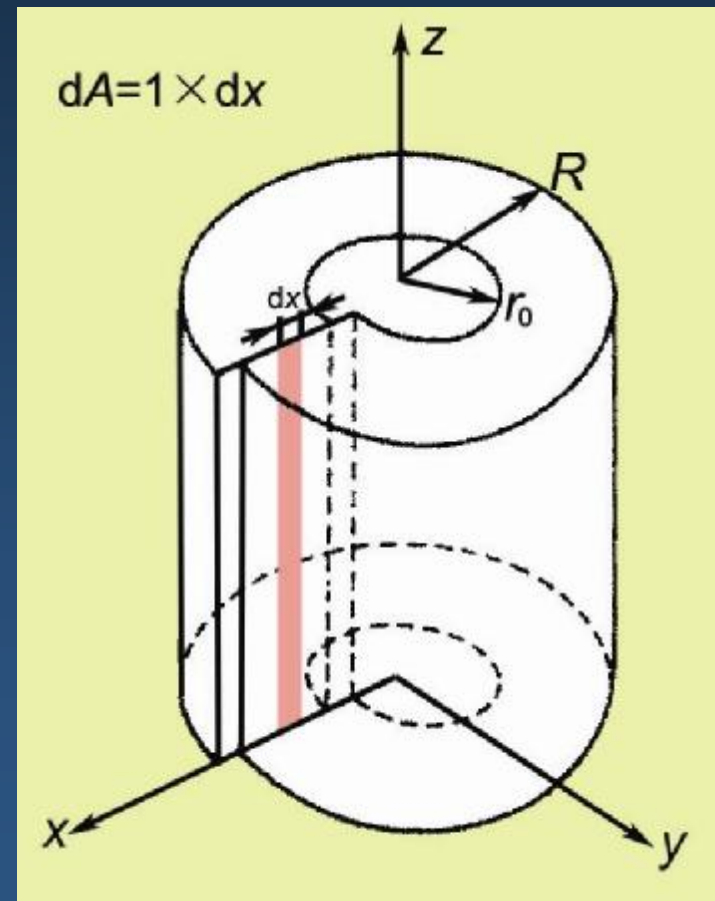
可以把 E_{el} 看作是“制造”位错时使剖面位移 b 时反抗位错自身应力场所作的功。这样，计算能量就简单得多。

剖面上单位长的面积元 $dA=1 \times dx$ ，
在 x 方向相对位移 ab 时
($0 \leq a \leq 1$)，
相当已形成一个柏氏矢量大小为
 ab 的刃位错，这个位错在滑移面
上 ($y=0$) x 处的切应力 t'_{xy} 为

$$t_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-n)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$



$$t_{xy} = \frac{Gab}{2\pi(1-n)} \frac{1}{x}$$

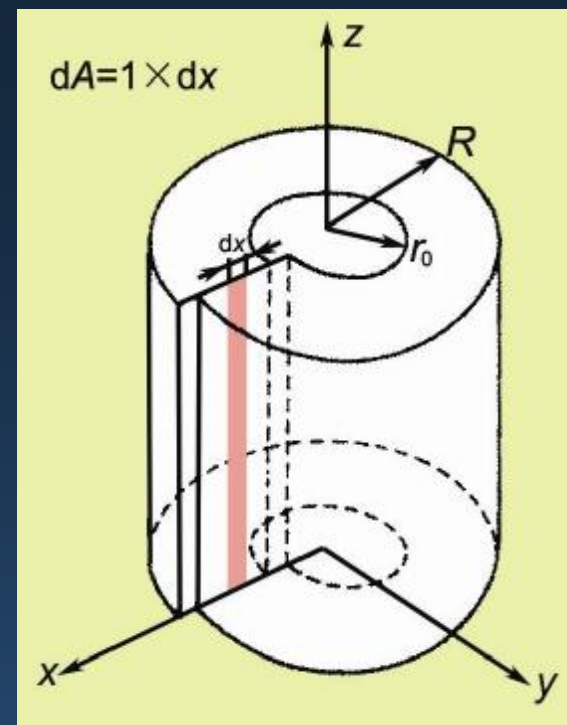


在这个切应力的作用下，
剖面 dx 位移 bda 作的功 dW 为：

$$dW = \frac{G a b^2 da}{2\pi(1-n)} \frac{dx}{x}$$

若剖面位移从0到 b （即 a 从0到1），
整个剖面克服应力场作的功（即位错的 E_{el} ）为

$$\begin{aligned} E_{el(R)} &= \int_0^1 \int_{r_0}^R \frac{G b^2 a}{2\pi(1-n)} \frac{da dx}{x} = \frac{1}{2} \int_{r_0}^R \frac{G b^2}{2\pi(1-n)} \frac{dx}{x} \\ &= \frac{G b^2}{4\pi(1-n)} \ln \frac{R}{r_0} \end{aligned}$$



混型位错的弹性应变能

混型位错的 E_{el} 可简单地由它的刃型分量 ($b\sin j$) 和螺型分量 ($b\cos j$) 的应变能加和得出。

$$E_{el(M)} = \frac{Gb^2}{4\pi} \left(\frac{\sin^2 j}{1-n} + \cos^2 j \right) \ln \frac{R}{r_0} = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{r_0}$$

其中

$$\frac{1}{K} = \frac{\sin^2 j}{1-n} + \cos^2 j$$

刃位错的应变能比螺位错高即约1.5倍。从上式看出，当 $r_0 \rightarrow 0$ 及 $R \rightarrow \infty$ 时，位错应变能均趋于无限大。 $r_0 \rightarrow 0$ 是不适用的， $R \rightarrow \infty$ 是没有实际意义的。

位错中心部分的能量约为直位错总能量的10%~25%。把这一数值计算入内，可以把位错的总能量改写为：

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{lb}$$

对于金属来说， $l \gg 1/4$ 。

单位长度位错的能量与位错类型、 R 和 r_0 值的变化关系不大。
如果取 $r_0 \gg b$ （约为 $2.5 \times 10^{-8} \text{cm}$ ），取 $R \gg 10^{-4} \text{cm}$ （近似于一般的晶粒大小或位错平均距离），则单位长度位错应变能约为

$$E = k_0 G b^2 = 2.5 \text{ nJ} \cdot \text{m}^{-1}$$

0.5~1.0 40GPa 0.25nm

晶体中位错存在的稳定性？

位错的存在引起体系的排列熵值并不大，在含许多位错的晶体中，即使在高温，位错的排列熵也不足以使系统的吉布斯自由能变为负值。所以，**从热力学角度来看，晶体中的位错是不稳定的**。但由于位错间相互作用，形成一种亚稳组态，即使经长时间充分退火，也不能完全消除位错（一般经充分退火的金属，其位错密度 r 仍达 $10^6 \sim 10^8 \text{cm}^{-2}$ ）。

6.4.3 位错受力

广义力定义:

物体的能量 E_t 随广义坐标 h 的变化而变化, 则认为物体在 h 方向受广义力 F_h

$$F_{\eta} = -\frac{\partial E_t}{\partial \eta}$$

位错受力的概念:

加到晶体上的外应力通过和位错应力场的作用使位错受到‘力’。

外应力可是: 外加机械力

晶体内应力 (如其它位错、点缺陷, 界面, 自身力等)。

位错保守运动与非保守运动的概念

位错运动扫过的面的两侧相对移动 b ，单位长度位错 t 向任意方向移动了 dd ，位错线扫过的面积 ds 为

$$ds = t \times dd = n ds$$

位错运动引起的体积变化为 $\Delta V = b \cdot ds = b \cdot n ds$

• 当位错线在 t 与 b 共面的面运动时， $b \cdot n = 0$ ， $DV=0$ ，称**保守运动**，称滑移， t 和 b 共面的面称位错的**滑移面**。

• 当位错不在滑移面上运动时， $DV \neq 0$ ，称**非保守运动**。
非保守运动可分解为在滑移面上运动（滑移，保守运动）
和垂直于滑移面运动（攀移，非保守运动）的合成。

位错所受的机械力

(按位错在滑移及攀移方向的受力讨论)

- 设滑移面滑移方向的分切应力 t_g ，长度为 dL 位错在滑移面扫过 dd 距离，则在 $dLdd$ 面积上在 b 方向的切力为 $t_g dLdd$ ，位错移动时外力做功为 $b t_g dLdd$ ，这相当于晶体势能减小 $dW_p = -b t_g dLdd$ 。故单位长度位错在滑移面上受的滑移力 F_g 为

$$F_g = -\frac{\delta W_p}{dL \delta d} = \tau_g b$$

力的方向与位错运动方向相同，
即处处和位错线垂直。

- 当长度为 dL 的位错向上攀移 dd 间距时，体积变化 $DV = -bdLdd$ ，外加应力场 S 中只有 S_{xx} 分量对这一体积变化做功，等于 $-S_{xx} bdLdd$ 。故单位长度位错线受的攀移力 F_c 为

$$F_c = -\frac{\delta W_p}{\delta L \delta d} = -\sigma_{xx} b$$

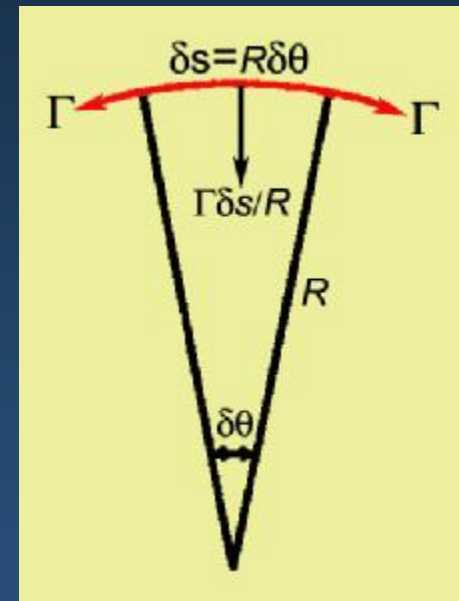
受力方向是攀移 y （垂直滑移面）方向，
力也是和位错线垂直的。

位错的线张力

把位错线看成是一根有张力的弹性绳，所以位错就有线张力。线张力 G 的单位就是单位长度位错线的能量： $G=E$ 。

位错弯曲时，位错的线张力使位错线受一指向曲率中心的力，这力力求把位错线变直。只有存在反向外力时位错才能保持弯曲状态。设加在单位长度位错线上滑移力为 $t_g b$ ，则

$$b \tau_g \delta s = G \frac{\delta s}{R} \quad \text{即} \quad \tau_g = \frac{G}{bR} = \frac{kGb}{R}$$



注：线张力为常数时，弯曲位错线是一段圆弧。

若考虑位错类型，线张力会产生一**力矩**把位错线转至螺位错取向，使整体位错的形状近似为椭圆形，它的主轴平行于柏氏矢量，轴比近似为 $1/(1-n)$ 。

位错所受的化学力

化学力（渗透力）的含义：晶体中的过饱和**点缺陷**会在**刃**位错上沉积，使位错**攀移**。相当于过饱和点缺陷对位错施加一个附加的攀移力，

设作用在单位长度正刃位错攀移方向的力 F 使 dl 位错正攀移了 ds 距离，做功 Fdl ，引起 bdl 的体积变化，并吸收了 bdl/W 个空位（ W 是单个原子体积）。因而空位形成能变化了 FW/b ，这样在存在位错时空位平衡浓度**减少**为：

$$c = \exp[-(E_f^v + FW/b)/kT] = c_0 \exp(-FW/bkT)$$

如果在刃位错附近出现过饱和或欠饱和空位时，相当于**对单位长度位错线施加一个如下的力：**

$$F_s = \frac{bkT}{W} \ln \frac{c}{c_0} \approx \frac{kT}{b^2} \ln \frac{c}{c_0}$$

高温淬火可获得过饱和空位，提供位错的攀移力，但一般情况下渗透力并不大。

映像力

概念：若位错靠近自由表面，它的一部分应变能会被松弛。为降低能量，位错就有逸出表面的倾向，即自由表面对位错有一吸力。

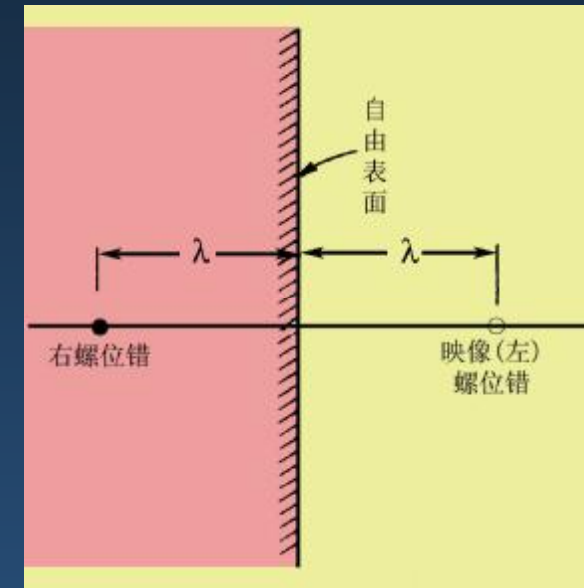
计算：一平行于表面距表面为 l 的直螺位错，

其单位长度的弹性应变能为

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

位错所受自由表面的吸力为

$$F_{im} = \frac{\partial E_{cl}}{\partial \lambda} = \frac{Gb^2}{4\pi\lambda}$$



说明：

- 该力相当于在自由表面外侧与位错成镜面对称的位置放入一个反号螺位错（称映像位错）对真实位错的作用力，故这力称**映像力**。
- 对刃位错也近似用此法计算映像力。
- 在两个弹性模量不同的材料边界附近的位错，界面也会对它产生映像力。
- 在薄膜晶体中映像力将起重要作用。

6.5 位错运动

原因：位错运动是因它沿受力方向改变位置会使系统自由能减少，位错实现运动要求它所受的力足以克服运动阻力。

类型：两种---保守运动和非保守运动。

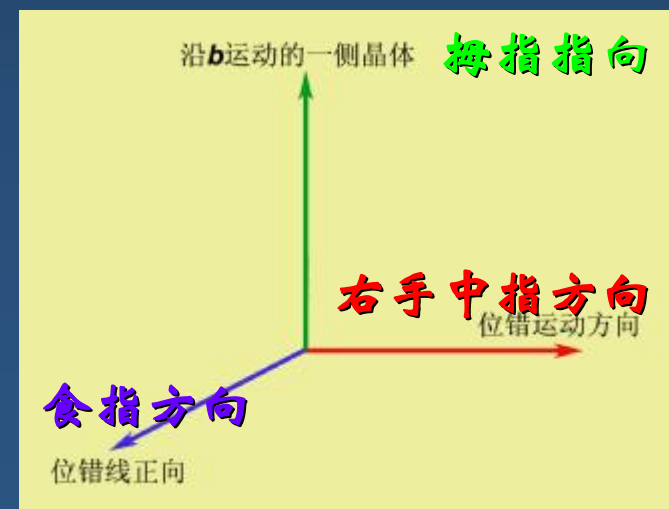
保守运动是位错在滑移面上的滑动或滑移，滑动和滑移通常是同义的。但严格地说，“滑动”指单个位错的行为而“滑移”指多个位错的行为。

非保守运动是离开滑移面的运动，最本质的非保守运动是位错的攀移，只有刃位错才有攀移运动，并引起位错的半原子面扩大和缩小，因此攀移总是伴随着点缺陷的输运。

宏观现象

1) 问题：位错扫过的面两侧会相对滑移 b ，究竟哪一侧滑动了 b ？

判别方法：右手定则：



2) 位错运动引起的塑性应变

位错扫过后两侧相对位移 b 而产生永久变形，这是位错运动引起塑性应变的原因。**大量位错运动后引起多大变形？**

简单推导：如图对应晶体，仅含平行直刃位错，在外加分切应力下，位错将滑动（正位错向右、负向左）。试样上下相对位移 D 。一根位错完全扫过滑移面对 D 贡献为 b ；则走过距离 x_i 的 i 位错对 D 的贡献是 $(x_i/d)b$ 。位错数目为 N 造成的总位移是：

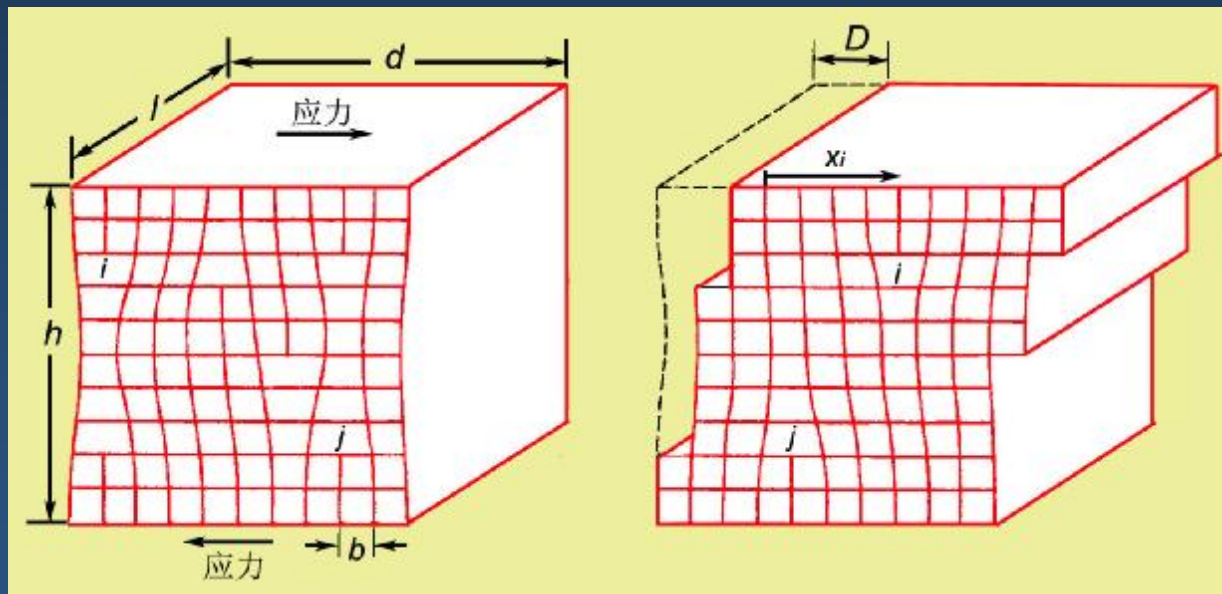
$$D = \frac{b}{d} \sum_{i=1}^N x_i$$

宏观塑性切应变
 $\gamma_p = D/h$ 。因位错
 密度

$$r_m = Nl/hld,$$

得出塑性切应变

$$\gamma_p = br_m \bar{x} \quad \text{及} \quad \gamma_p = br_m \bar{v}$$



注：该关系对螺、刃位错都成立；但攀移引起的应变是正应变。

位错滑动和滑移(微观)

位错所受滑移力大于滑移的阻力时，位错就可滑动。位错核心区域的原子错排导致位错核心具有能量并阻碍位错运动，当位错在周期排列的点阵移动时会改变其能量，从而位错移动时受到周期性的**晶格阻力**，称**Peierls-Nabarro力**（P-N模型）。

晶格阻力的定量计算

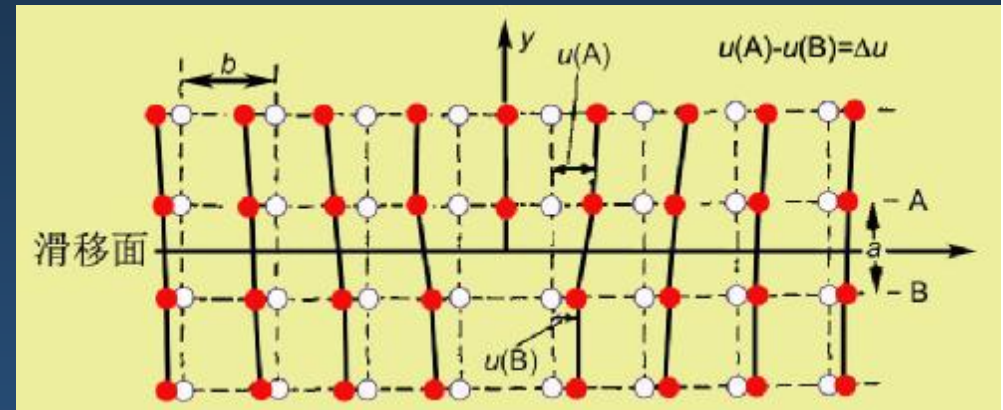
已知单位长度位错能量为：

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi(1-n)} \ln \frac{R}{z} \quad \text{其中} \quad z = \frac{a}{2(1-n)}$$

a 是滑移面间距， z 称**位错半宽度**。

位错移动时错排能升高，其最大振幅（称P-N能）为：

$$E_p = \frac{Gb^2}{\pi(1-n)} \exp\left(-\frac{4pz}{b}\right)$$



能量函数的最大斜率就是使单位长度位错在晶体内克服晶格阻力运动的**临界力**。它**除**以 **b** 后得出**P-N应力**：

$$t_p = \frac{2\pi}{b^2} E_p = \frac{2G}{1-n} \exp\left(-\frac{4\pi z}{b}\right) = \frac{2G}{1-n} \exp\left(-\frac{2\pi a}{b(1-n)}\right)$$

此式说明的意义：

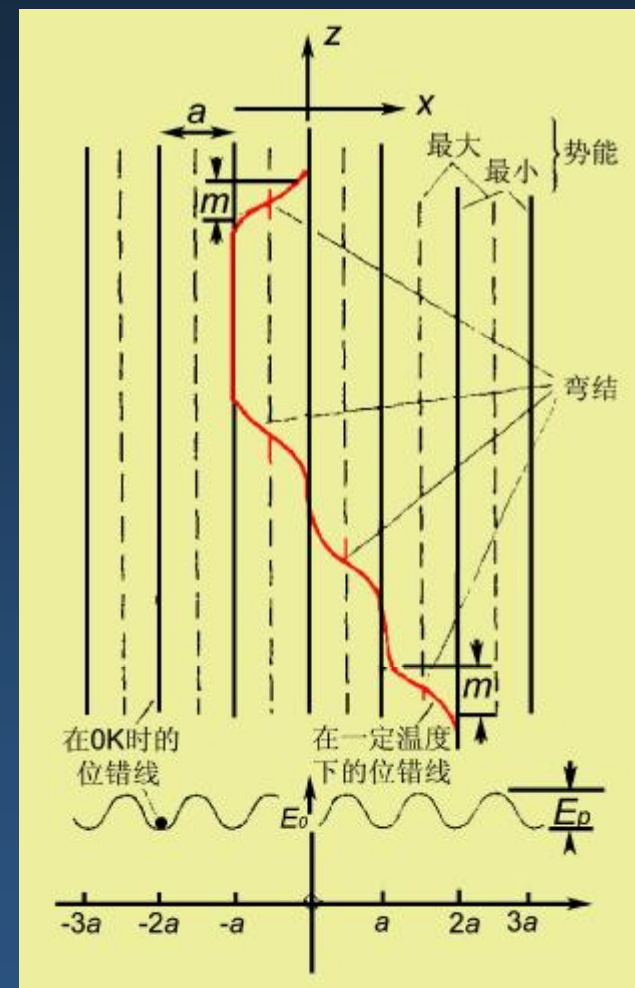
- 设 $a \gg b$ 和 $n=1/3$, $t_p \gg 10^{-4}G$ 。说明切变强度比理论切变强度低，正确地预测了实际切变强度的数量级。
- E_p 和 t_p 都和 $\exp(-a/b)$ 成正比，位错处在低指数面，柏氏矢量为密排方向时，位错运动要克服的 t_p 最小，位错最易动，这 and 实际观察到的滑移系由密排面及密排方向组成相符。

基本常识：

- **位错宽度越窄， t_p 越高**。密排金属位错宽度较大， t_p 很小 ($\sim 10^{-6} \sim 10^{-5}G$)，甚至可忽略；而一些如硅和金刚石等共价键的晶体，位错宽度很窄， t_p 很高 ($\sim 10^{-3}G$)，以致几乎不能变形。
- t_p 和晶体的屈服应力有区别， t_p 是位错在晶体中滑移所需的临界分切应力，而屈服应力是晶体宏观塑性形变的临界分切应力。

位错滑移时进一步降低阻力的方式---形成弯结

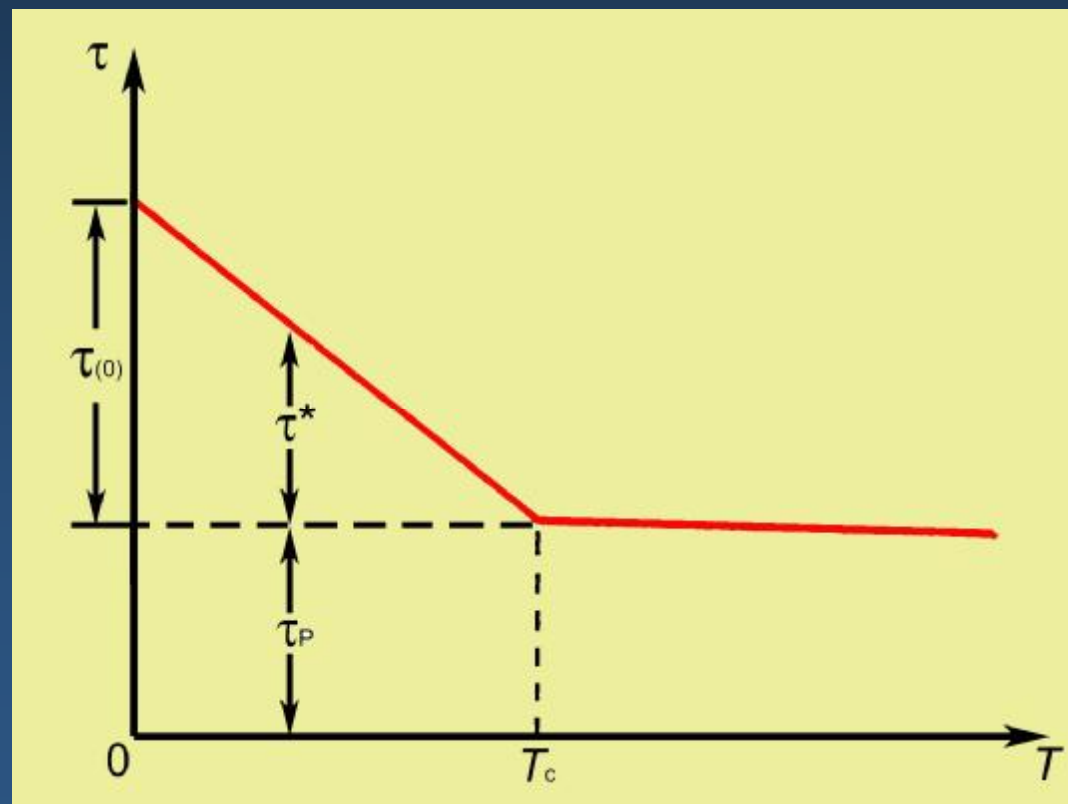
位错处于P-N能谷时其能量最低。在低温时，位错要整根翻越P-N势能垒才能滑动。但在一定温度以上，因原子热运动会使位错中心排列稍为“模糊”，从而使 t_p 有所降低。同时，因热激活使位错在某些地方翻越P-N势能而出现**弯结**。如果 t_p 比较高，位错滑动往往靠弯结侧向（ z 方向）运动来使整根位错向前（ x 方向）运动。弯结的形状和长度 m 由 E_p 和位错张力之间的平衡来决定。但是，双弯结两端的位错是反号的，它们会相互吸引。拱起的长度要足够大（约为 $20b$ ）才能稳定存在。



热激活与流变应力的关系：

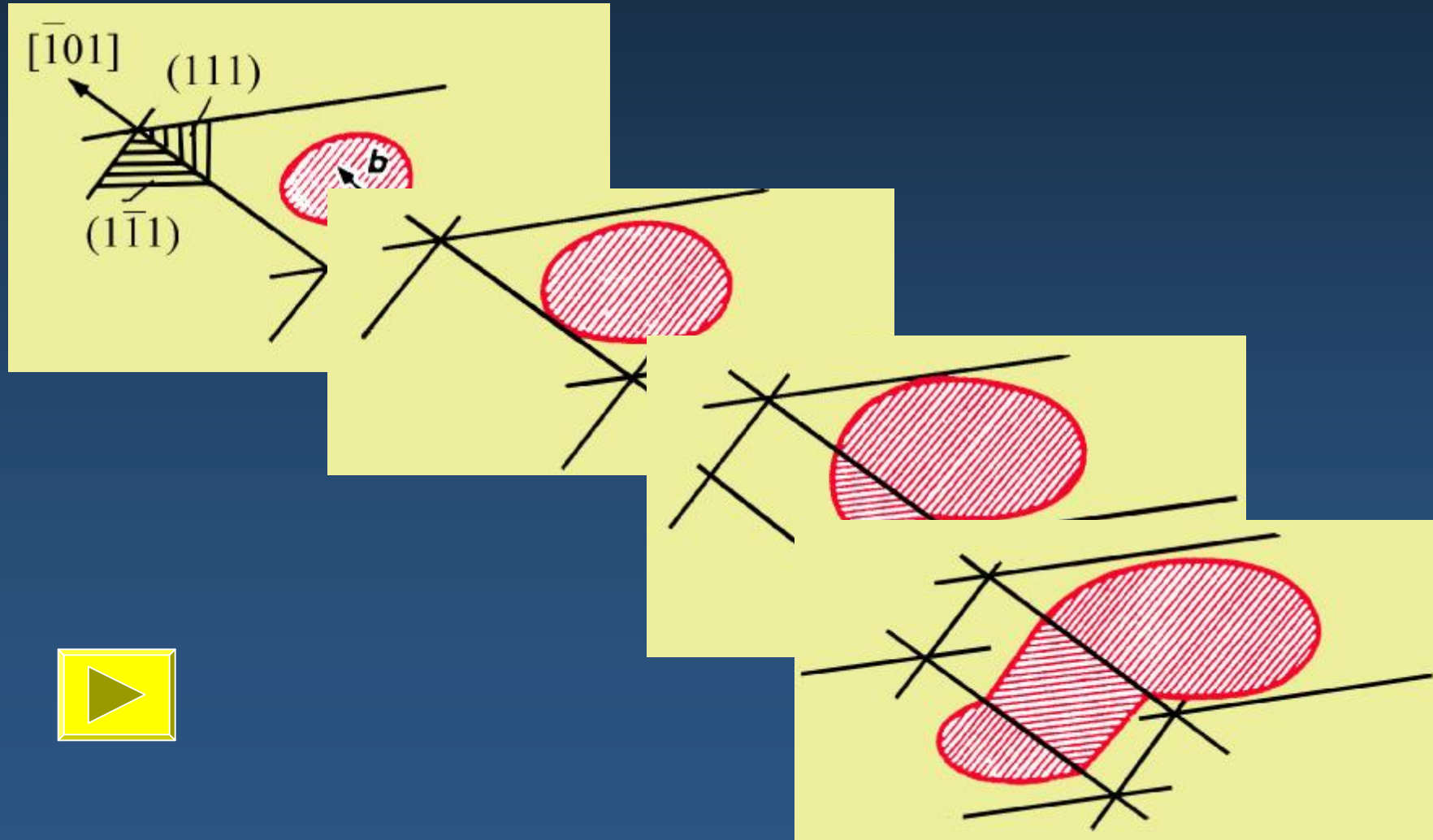
随着温度升高，热激活变得越来越重要，在给定应变速率下流变应力（即维持塑性变形的应力）下降，直到某一临界温度 T_c 时流变应力几乎维持不变。通常把流变应力 t 分成几乎和温度无关的非热分量 t_m 及一个和温度有关的热分量 t^* 。

对f.c.c金属，双弯结形成能很低，随温度升高，流变应力很快降低到 t_m 的水平。所以，这类晶体只有在非常低的温度时晶格阻力对流变应力才会有明显的影响。



6.5.2 交滑移

交滑移含意：**螺位错**从一个滑移面转到与其滑移面相交的另一个滑移面上滑移。



6.5.3 位错的滑移速度

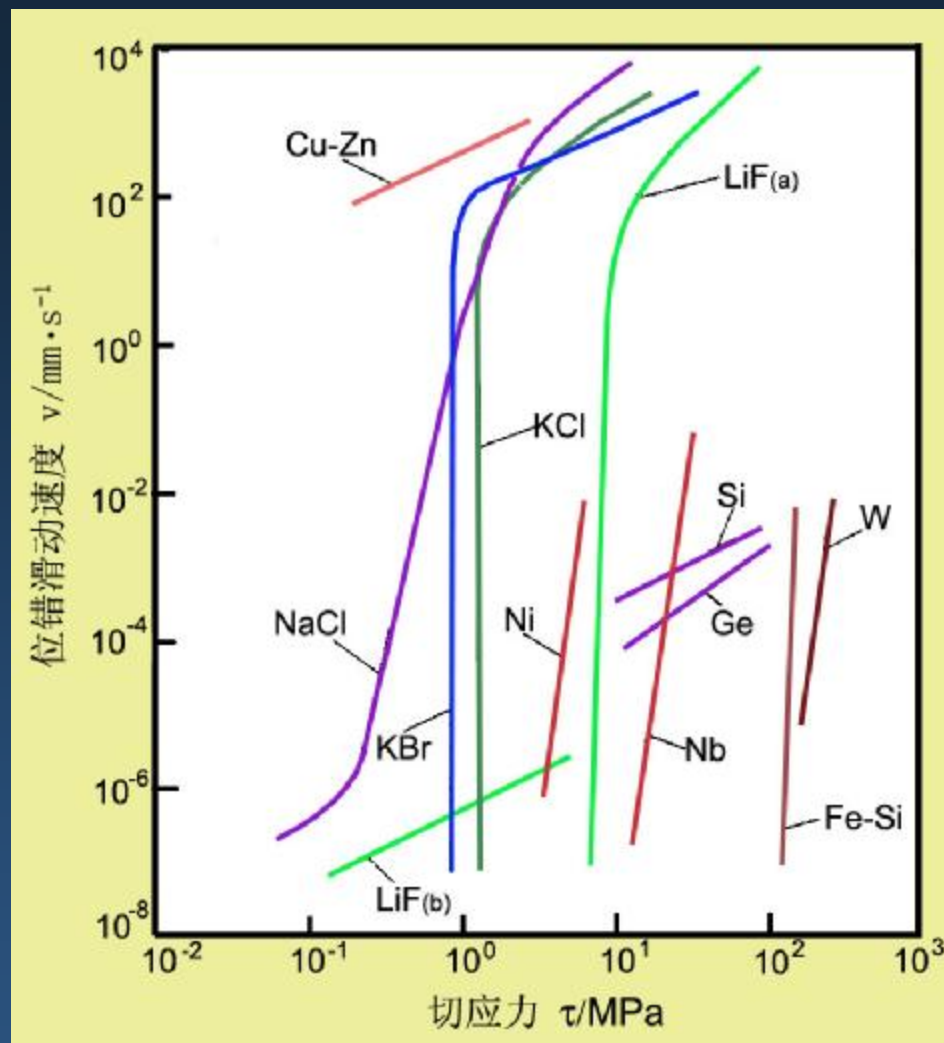
位错可在很大速度范围内滑动，滑动速度取决于外加的切应力、温度、晶体纯度和位错类型。

- **高速运动**： $>0.1c_t$ (c_t 为横波声速， $\sim 10^6 \text{mm/s}$) 的速度运动。此时位错的应力场、能量会改变。

- 在 $10^{-3}c_t \leq v \leq 0.5c_t$ 范围内，位错运动速度由声子和电子散射引起的粘性阻尼决定： $t = Bv/b$
 B 是粘滞拖曳系数。

- $v \leq 10^{-3}c_t$ 时， v 对应力非常敏感，有经验关系： $v = (t/t_0)^m$

t_0 是位错以单位速度滑移时的切应力。 m 太大的材料此式不适用。



6.5.4 位错攀移

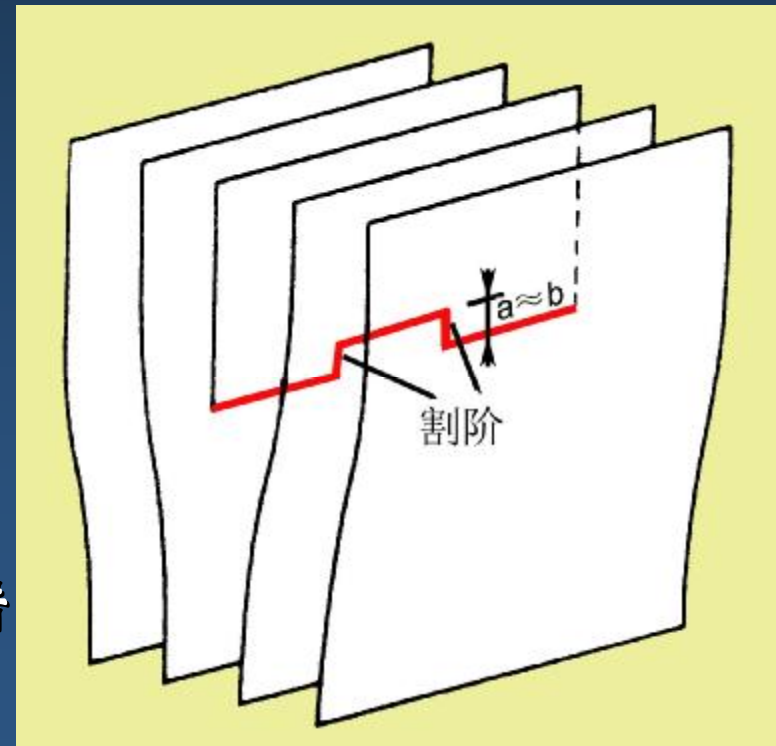
位错攀移伴随点缺陷形成，因而引起攀移的外力所作的功应能补偿点缺陷形成所需的能量。

在外力场下单位长度位错受的攀移力为 sb ，设 b 长度位错攀移了 b 距离，则外力做功为 $F_c b^2 = sb^3$ 。设点缺陷形成能为 E_f （约等于 $Gb^3/5$ ），则位错攀移所需的应力为：

$$s = E_f / b^3 \approx G/5$$

这应力 s 和切变模量 G 同一数量级，因而单靠外力使位错攀移是不可行的。

点缺陷只能单个地移出或移入刃位错，此时在位错线上产生一对割阶。和空位相似，割阶亦具有平衡浓度 C_j 。割阶的侧向攀移速度 v_j 与整根位错的攀移速度 v 为 $v = bC_j v_j$



割阶侧向负攀移移动了一个原子间距，放出一个空位。这个空位还必须再移动至少一个原子间距才能保证它不再被割阶吸收而复原。若外加应力场使割阶受力为 $F_c b$ ，设 Q_m 是空位迁移能，则这个过程的激活能 U 是：

$$U = E_f + Q_m - F_c b^2$$

设 z 为空位可以跳出的位置数，则单位时间空位跳出的数目为

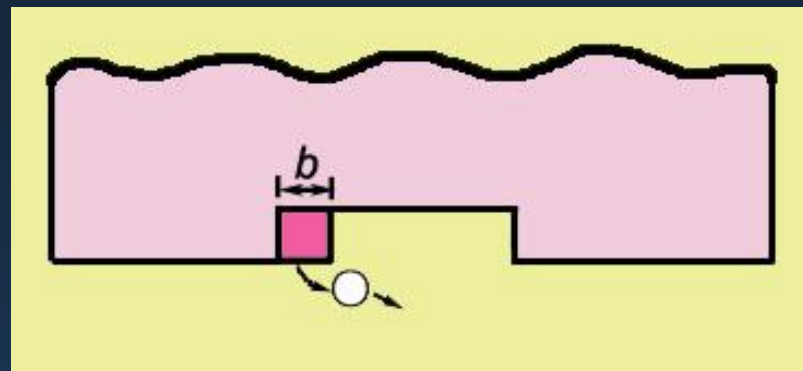
$$n = zn \exp\left(-\frac{E_f + Q_m - F_c b^2}{kT}\right)$$

若位错附近有过饱和空位存在，它对位错产生渗透力 F_s ，这个力使割阶按相反的方向移动。因而，单位时间空位跳入的数目是：

$$n = zn \exp\left(-\frac{E_f + Q_m - F_s b^2}{kT}\right)$$

单位时间割阶放出的净空位的数目 $n = (n_c - n_a)$ 为

$$n = zn \exp\left(-\frac{E_f + Q_m}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{F_c b^2}{kT}\right) - \exp\left(\frac{F_s b^2}{kT}\right) \right]$$



每放出1个空位，割阶向左移动 b 距离，所以 v_j 为

$$v_j = zbn \exp\left(-\frac{E_f + Q_m}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{F_c b^2}{kT}\right) - \exp\left(\frac{F_s b^2}{kT}\right) \right]$$

因自扩散系数 $D_s \approx zb^2n \exp\left(-\frac{E_f + Q_m}{kT}\right) \Rightarrow v_j = \frac{D_s}{b} \left[\exp\left(\frac{F_c b^2}{kT}\right) - \exp\left(\frac{F_s b^2}{kT}\right) \right]$

把 v_j 代入 $v = bC_j v_j$ 式子，
得出整根位错的攀移速度

$$v = D_s C_j \left[\exp\left(\frac{F_c b^2}{kT}\right) - \exp\left(\frac{F_s b^2}{kT}\right) \right]$$

因攀移是高的温度行为，有
 $F_c b^2 \ll kT$ 及 $F_s b^2 \ll kT$ ，则上式可简化
为：

$$v = D_s C_j \frac{(F_c - F_s) b^2}{kT}$$

- 若 $F_s > F_c$ 时，则会使割阶产生正攀移，反之，是负攀移。当 $F_s = F_c$ 时， $v = 0$ ，这是不稳定平衡。
- 位错负攀移放出空位，在割阶附近的空位浓度比远处高，空位扩散降低割阶附近的空位浓度，又引起负攀移。
- 攀移过程由扩散控制，故攀移速度是很慢。

6.6 位错的产生和增殖

现象：形变是位错扫过晶体，位错数应减少；但实际在增多！
所以必须回答位错是如何产生和如何增殖的。

位错的起源

在完整晶体中萌生一个位错，需要的应力的数量级相当于理论强度值，因此，**晶体中不可能有位错的均匀形核。**

在刚**长成**的晶体中有各种产生位错的源。这些源如：

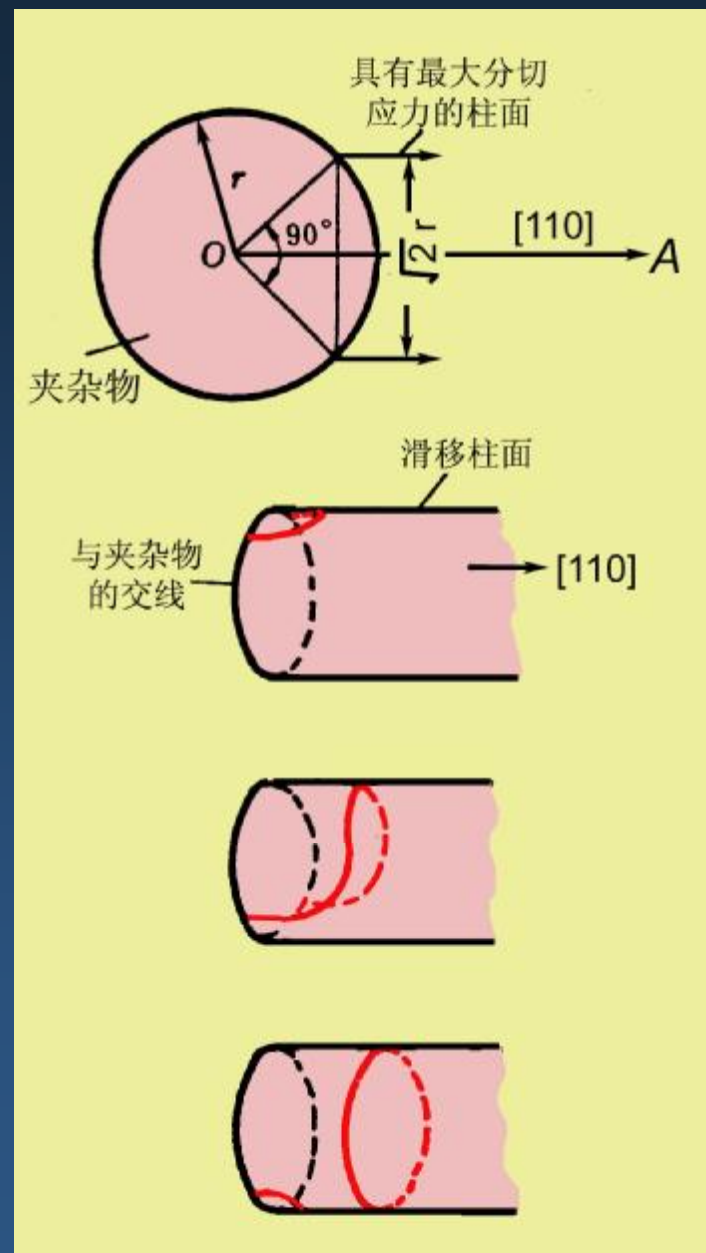
- ①在“籽晶”中已存在位错和其它缺陷，其中一些位错穿出表面导致晶体绕着它生长，位错随晶体生成一起进入成长着的晶体中。
- ②凝固界面不同部分的碰挤而产生位错。
- ③在杂质颗粒或在很大的温度梯度区域由于热收缩不同而产生的内应力使位错非均匀形核。
- ④材料之间在外延时接触产生的点阵错配引起位错。
- ⑤在急冷或受辐照的材料中的过饱和空位或间隙原子萌生位错环及位错环的长大。

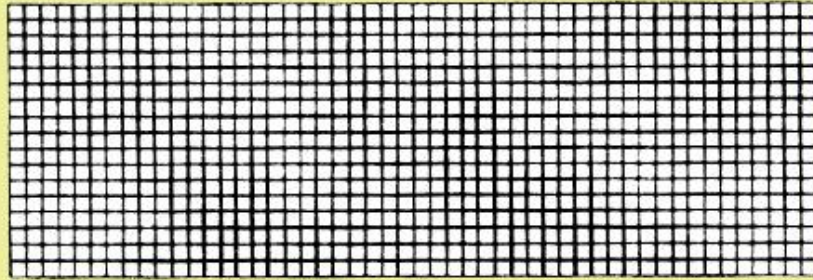
例：环绕在SiC中的螺型位错在气相中生长的晶体。出现螺旋长大台阶，它提供原子附着的有利位置。



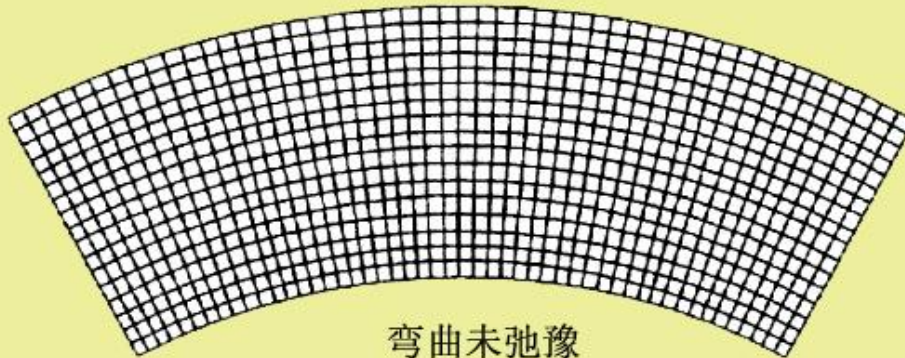
6.6.2 在应力集中处位错的非均匀形核的例子

晶体中一刚性球形夹杂，其膨胀系数与基体不同。冷却时基体和夹杂的收缩量不同而引起大应力。在平行于晶体滑移方向上，以过球心为轴直径为 $\sqrt{2}r$ 的圆柱与球面相交的界面上获得最大切应力集中（可接近理论强度值），从而在柱面上萌生一小段位错环，它的刃型部分在圆柱面上朝远离夹杂表面的方向移动，位错环的2个螺型部分平行于轴线沿柱面向相反的方向移动，当2个螺位错相遇后就放出1个沿柱面的位错环。这个过程不断重复就放出一串位错环，直至应力集中被松弛到不足以萌生位错为止。

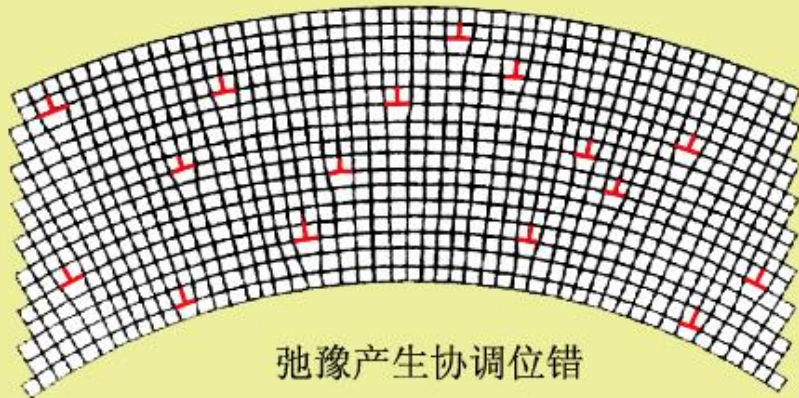




未弯曲晶体



弯曲未弛豫



弛豫产生协调位错

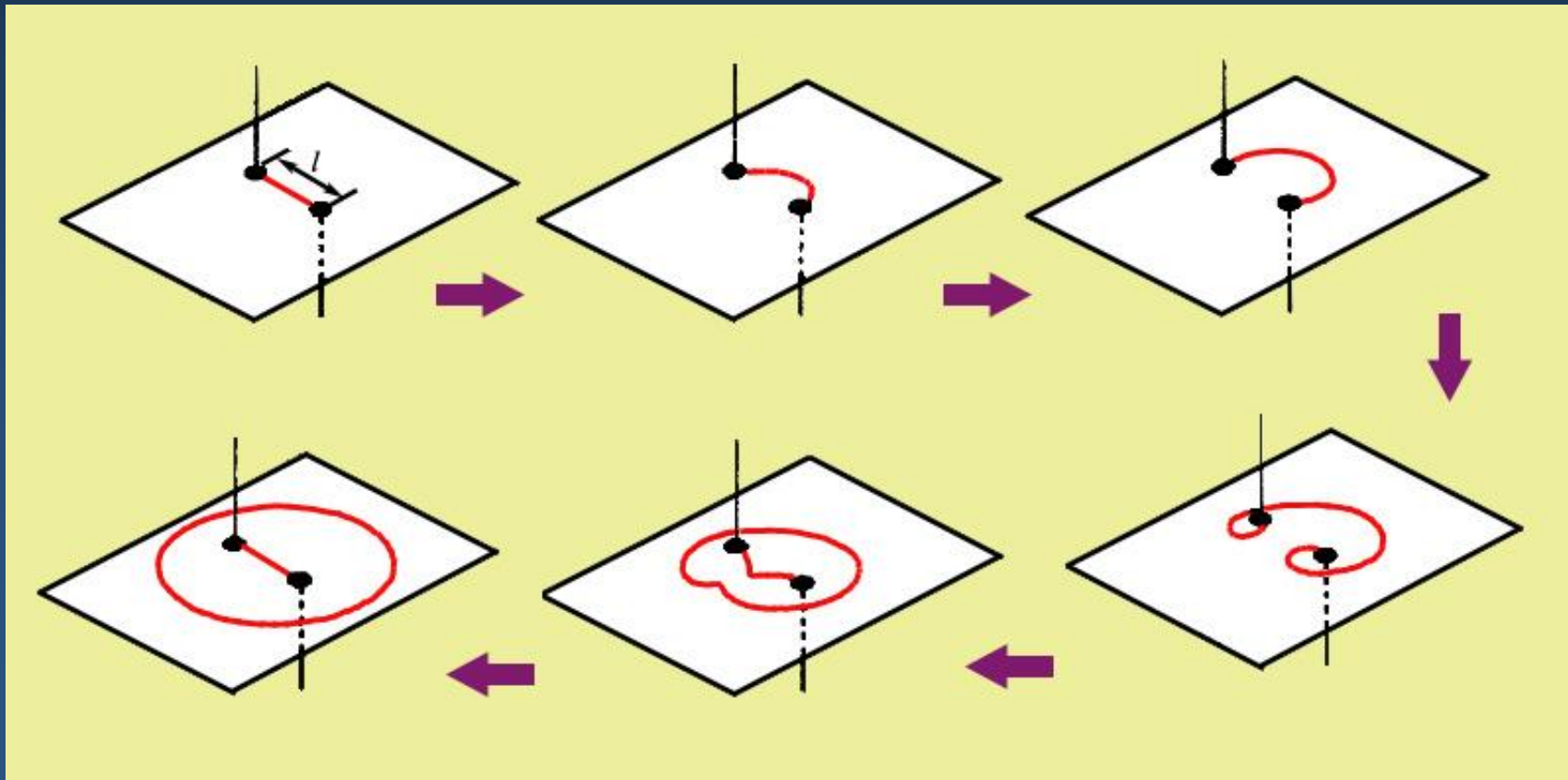
完整晶体经受弯曲后，
将会通过在晶体内产生
一定数量的刃位错，以
补偿由于弯曲造成的出
现矢径不同的表面上的
尺度差异。



6.6.3 位错的增殖

增殖方式有**多种**；增殖位错的地方称为**位错源**。在塑性较好的晶体中以滑移方式进行。

常见的滑移增殖机制：**Frank-Read位错源(F-R源)**和**双交滑移机制**：

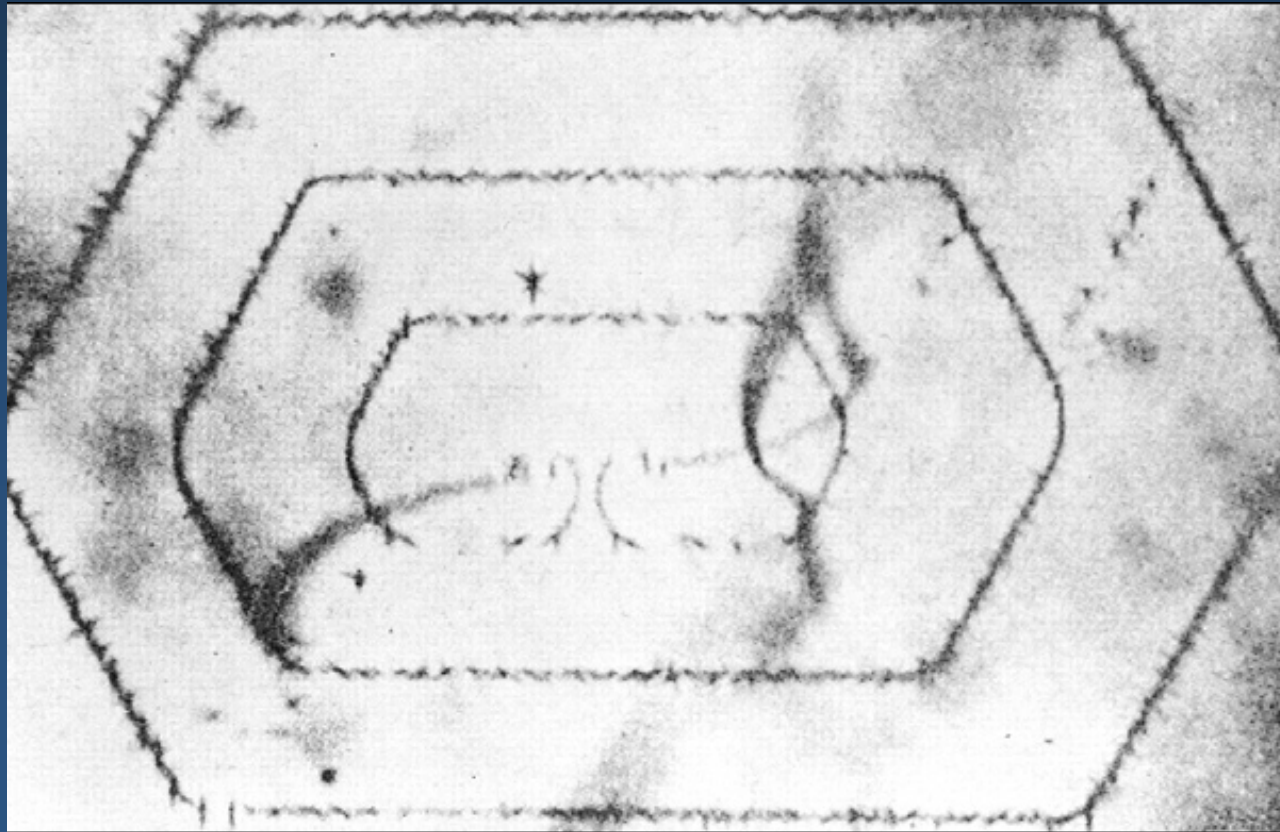


开动F-R源的最小分切应力？

F-R源开动时，位错弯曲的最小曲率半径是 $l/2$ ，因位错张力而受的向心力 $F=2G/l \approx Gb^2/l$ ，所以**最小分切应力** $\tau = Gb/l$ 。

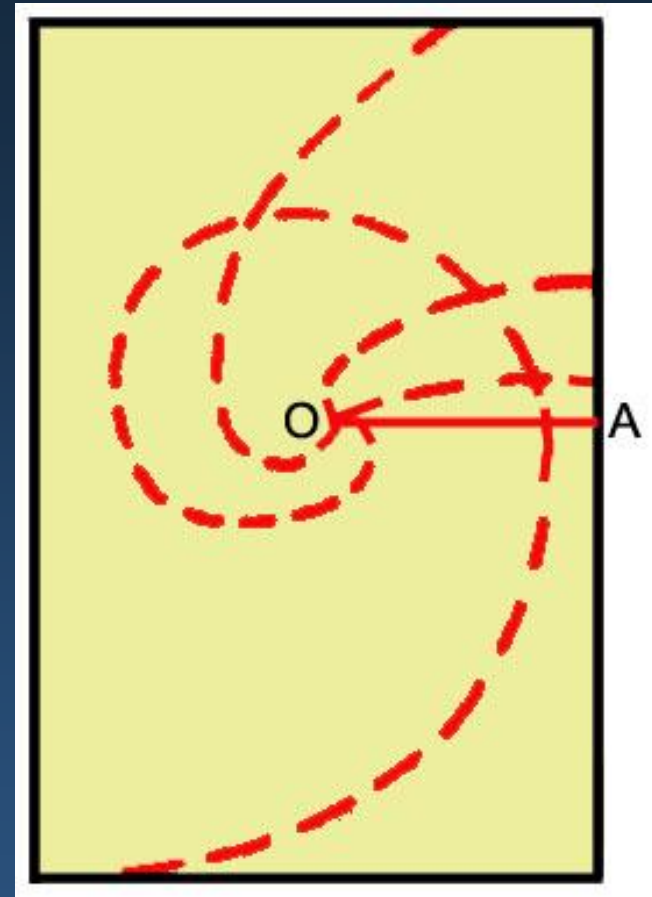
$l \gg 1\text{mm}$ ， $b \gg 0.1\text{nm}$ ，故 $\tau \gg 10^{-4}G$ 。该值接近晶体的屈服应力。

实例：
Si单晶中的
F-R源，位
错线以Cu
沉淀缀饰
后，以红外
显微镜观察

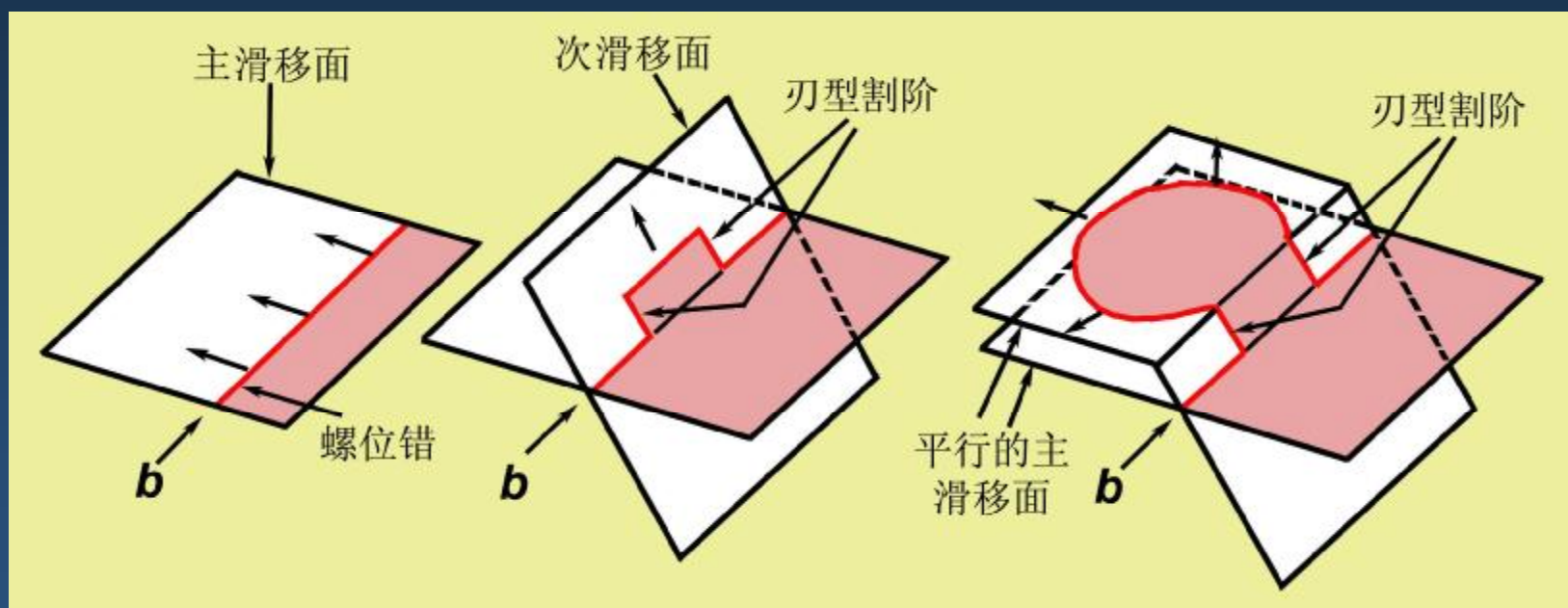


• 单边F-R源:

位错线在滑移面上一端被钉扎，另一端伸出自由表面，在切应力作用下位错在滑移面上运动。因钉锚点不能动，整根位错线绕不动点作旋转运动。位错转动一周后，相当于一个位错扫过整个滑移面，即有一个位错逸出晶体，因而也相当于增殖了一个位错。在均匀应力作用下，位错线各处的绕固定端点旋转的角速度不同。这样，位错线在扫动的过程中形成一条蜷线。



双交滑移源：螺位错滑移时因局域切应力变化而改变滑移面，又因局域切应力减弱而回到原滑移面而发生双交滑移。但这种局域切应力的作用仅使一段位错发生双交滑移，因而在双交滑移发生由次滑移面至主滑移面转化时，出现相对固定的两点，它就以F-R源开始增殖。



割阶高度很大时（大于20nm），割阶两端所连接的位错间的相互作用可忽略，它们各自可自由地在滑移面上运动。但因这两个位错的一端被割阶钉扎，它们只能以这点为轴心作旋转运动，以单边F-R源开动。

6.7 在整体中的位错

6.7.1 位错间的长程交互作用

两位错间的交互作用能随2个位错间距的变化率，就是这2个位错间的交互作用力。

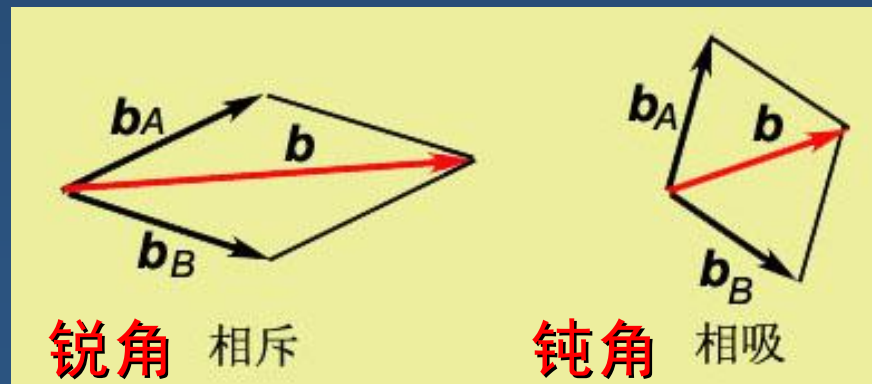
Frank能量判据：用以了解两位错是相斥还是相吸；

判别方法：考察2位错叠加前后的能量变化；若能量增加，则2位错是相斥的，反之是相吸的。

具体计算：设柏氏矢量分别为 b_A 和 b_B 2个位错，合成后位错的柏氏矢量 $b=b_A+b_B$ 。因位错能量分别正比于柏氏矢量的平方，因此

$$b^2 > b_A^2 + b_B^2 \quad \text{两位错相斥；} \quad b^2 < b_A^2 + b_B^2 \quad \text{两位错相吸。}$$

几何上看，

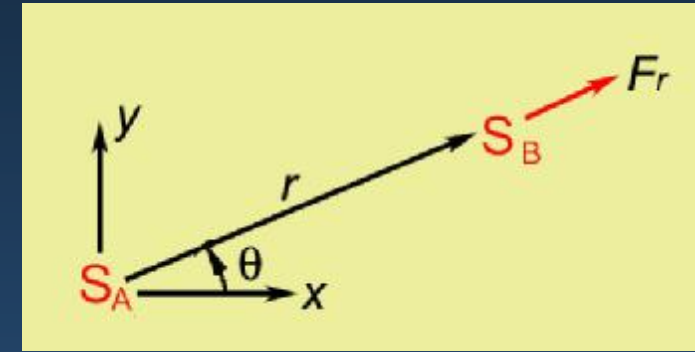


计算2个位错间相互作用力的方法:把其中一个位错 (A) 的应力场看作是另一位错 (B) 的“外加应力场”，A应力场对B位错的作用力就是A位错对B位错的作用力。

两平行螺位错间的交互作用

S_A 和 S_B 2个平行 z 轴的右螺位错，柏氏矢量分别为 b_A 和 b_B ，A位错在 z 轴，B位错处在 (x, y) 处。使B位错受径向力的外应力场分量是A位错的 $t_{zq}=Gb_A/2\pi r$ ，并且是唯一的分量，故A位错对B位错的作用力为：

$$F_r^{A \rightarrow B} = (t_{rz})_A b_B = \frac{Gb_A b_B}{2\pi r}$$



这个力可分解为 x 方向的力 (F_x) 和 y 方向的力 (F_y)：

$$F_x^{A \rightarrow B} = F_r^{A \rightarrow B} \cos q = \frac{Gb_A b_B}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}$$

$$F_y^{A \rightarrow B} = F_r^{A \rightarrow B} \sin q = \frac{Gb_A b_B}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}$$

因螺位错的滑移面是任意的，所有方向的受力都是滑移面上的受力，只要找出应力场在所选择的滑移面上滑移方向的分切应力在乘以柏氏矢量就是所受的力。

两平行刃位错间的交互作用

两同号刃位错A和B的柏氏矢量分别为 b_A 和 b_B ，A位错放在 z 轴，柏氏矢量平行于 x 轴；B位错在 (x,y) 位置。B位错在 x 方向受力是B位错在滑移面上的受力，A位错在B位错滑移面上滑移方向的分切应力为 $(t_{xy})_A$ ，故B位错在 x 方向受力为：

$$F_x^{A \rightarrow B} = (t_{xy})_A b_B = \frac{Gb_A b_B}{2\pi(1-n)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

在 y 方向受力是使B位错攀移的力，能使B位错攀移的正应力是 $(s_{xx})_A$ ，故B位错在 y 方向受力为

$$F_y^{A \rightarrow B} = \frac{Gb_A b_B}{2\pi(1-n)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

应力的分布：

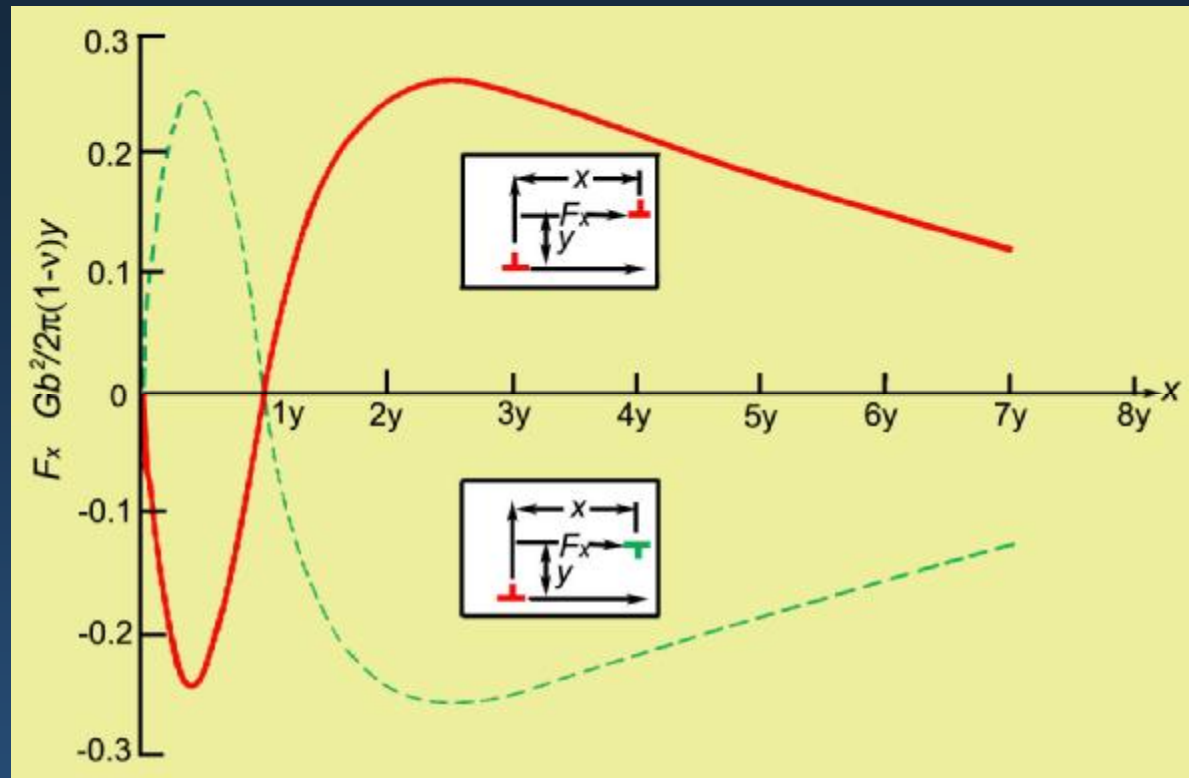
滑移是塑性形变的主要机制，使位错滑移的力是大家主要关心的；B位错滑动在滑移面（ xz 上）进行，滑动时 y 坐标不变。为了讨论方便，用 $n=x/y(=\text{ctg}q)$ 代入 F_x 式，得

$$F_x = \frac{Gb_A b_B}{2\pi(1-n)y} \frac{n(n^2 - 1)}{(n^2 + 1)^2}$$

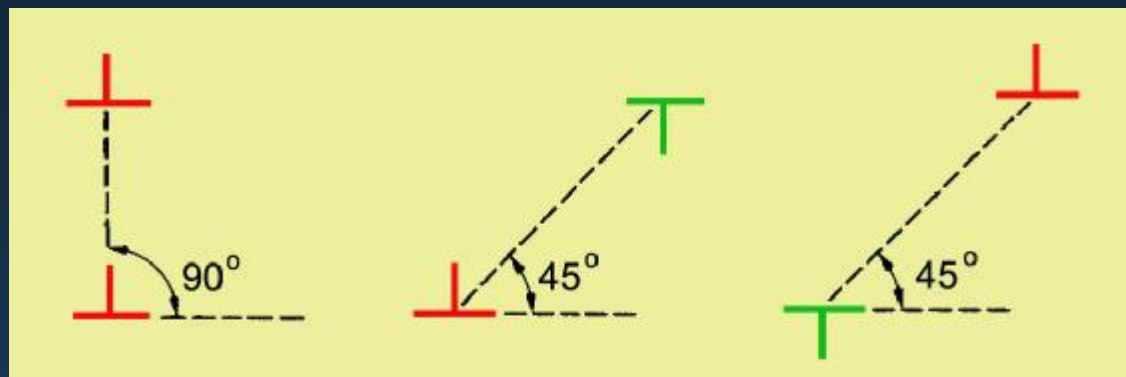
在 $x=\pm y(\theta=45^\circ)$ 及
 $x=0(\theta=0^\circ)$ 时 $F_x=0$ ，同
 时在 $x\rightarrow\pm\infty$ 时 F_x 也为
 零。 $n=\pm 2.414$ （即
 $q=3\pi/8$ ）是相斥极大
 值位置。 $n=\pm 0.414$
 （即 $q=\pi/8$ ）是相吸的
 极大值位置。对应的
 F_x 的最大值为：

$$\pm 0.25 Gb^2/2\pi y(1-n)。$$

意义：当A位错存在时，B位错在滑移面运动迟早会受到
 $0.25Gb^2/2\pi y(1-n)$ 的附加阻力，这种阻力对晶体的塑性变形的加工硬
 化起很大作用。



两平行刃位错交互作用的
稳定位置。



平行刃位错和螺位错间的交互作用

因为平行的刃位错和螺位错的应力场没有重叠的分量，所以，它们间的交互作用为零。

平行混型位错间的交互作用

因平行的刃位错与螺位错之间无交互作用，所以一个直的混合位错可看成是平行螺位错和刃位错的叠加。2个平行的混合位错间的相互作用可直接把它看成是它们间的螺型分量的交互作用及刃型分量的交互作用之和。

6.7.2 位错间的短程交互作用

短程交互作用：指两位错靠近时才有重要影响的交互作用。

短程交互作用的范围：取决于两个位错的交角 q 和两个位错间距 r ：交互作用涉及的位错长度集中在中间一段长度约为 $\pi r \cos q$ 的位错段上。

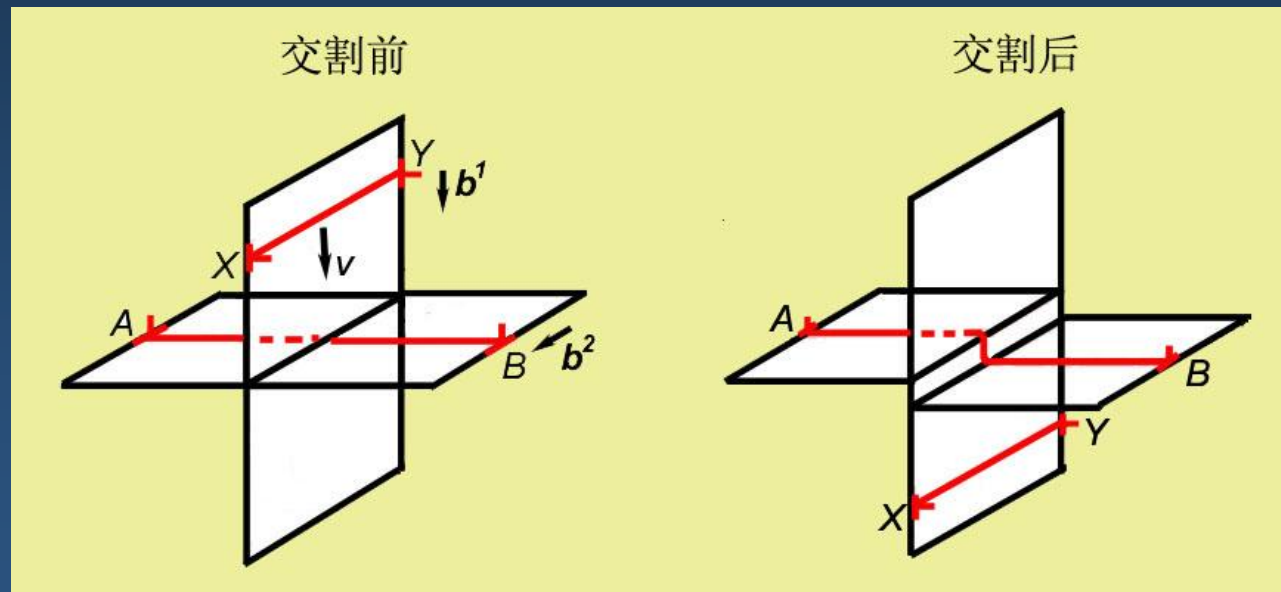
认识的意义：无论两位错相吸或相斥，都需要有附加力才能使2个位错交割而过，在交割后位错有可能留下**割阶**，割阶对位错的继续运动会产生**阻力**。

割阶的概念

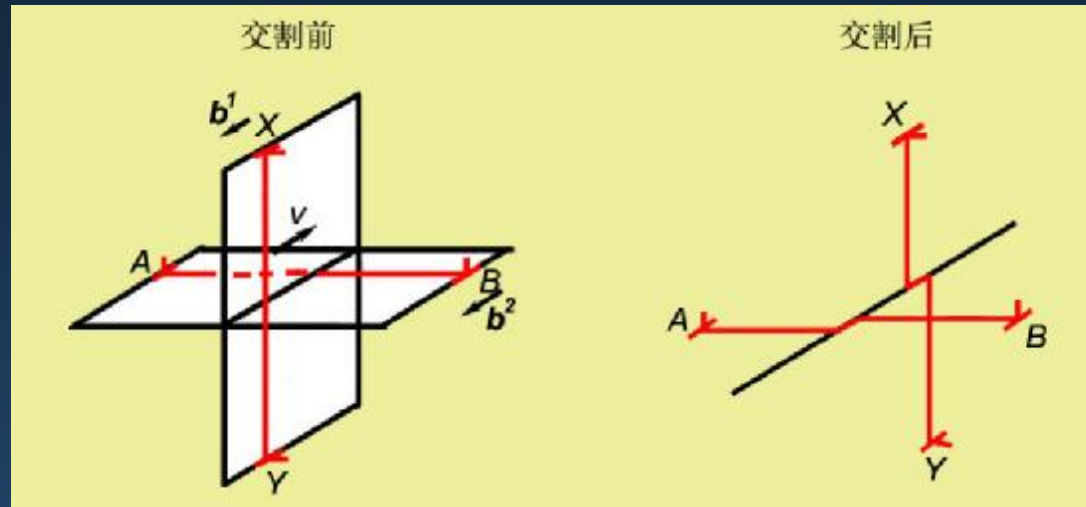
2个位错相交割后，必在对方留下一个和自身柏氏矢量 b 大小和方向相同的一小段位错。如果这小段位错的滑移面和原来（被割）位错的滑移面相同，位错的线张力可使这小段位错通过滑移消失，这种位错小段称作**弯结**。如果这小段位错的滑移面和原来位错的滑移面不同，它不可能靠滑移而消失，这种位错小段称为**割阶**。

位错交割的例子

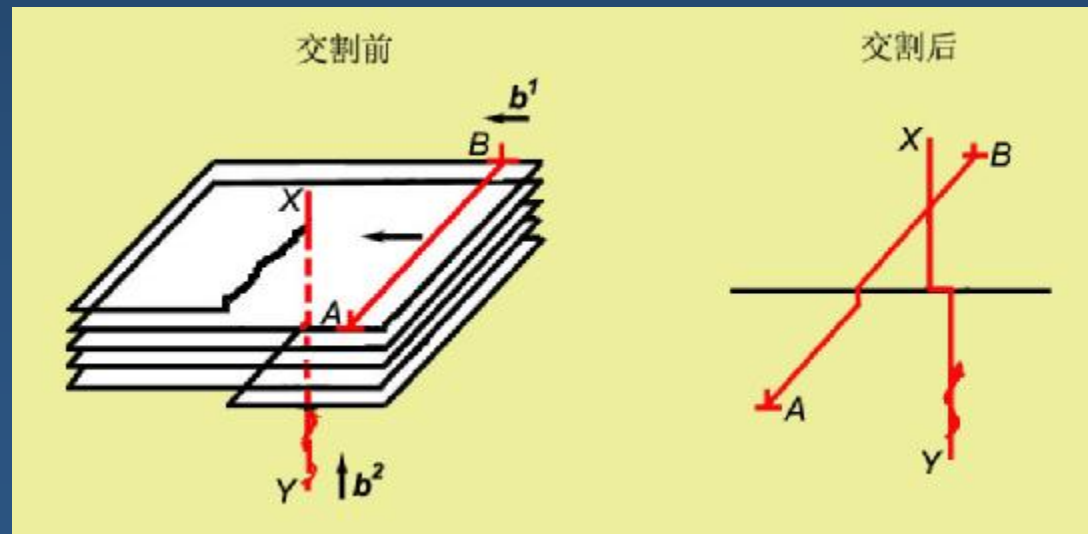
① AB位错被交割后留下**割阶**；因XY位错与AB位错的柏氏矢量平行，交割后在XY上**不**产生任何割阶或弯结。



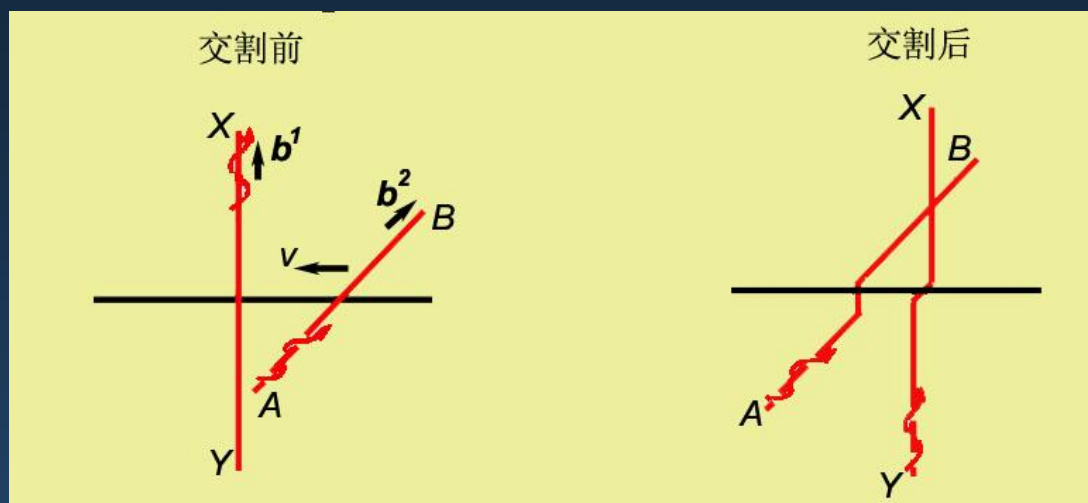
②AB位错与XY位错的柏氏矢量分别与对方（新产生的小段）位错线平行，交割后在对方都留下一段**弯结**。



③AB位错与XY位错交割后，在AB位错留下一段**割阶**，因XY是螺位错，**如果**交割留下的小段位错不在原滑移面，则是**割阶**。



④AB位错与XY位错均为右螺位错，交割后在对方都留下一段**割阶**。

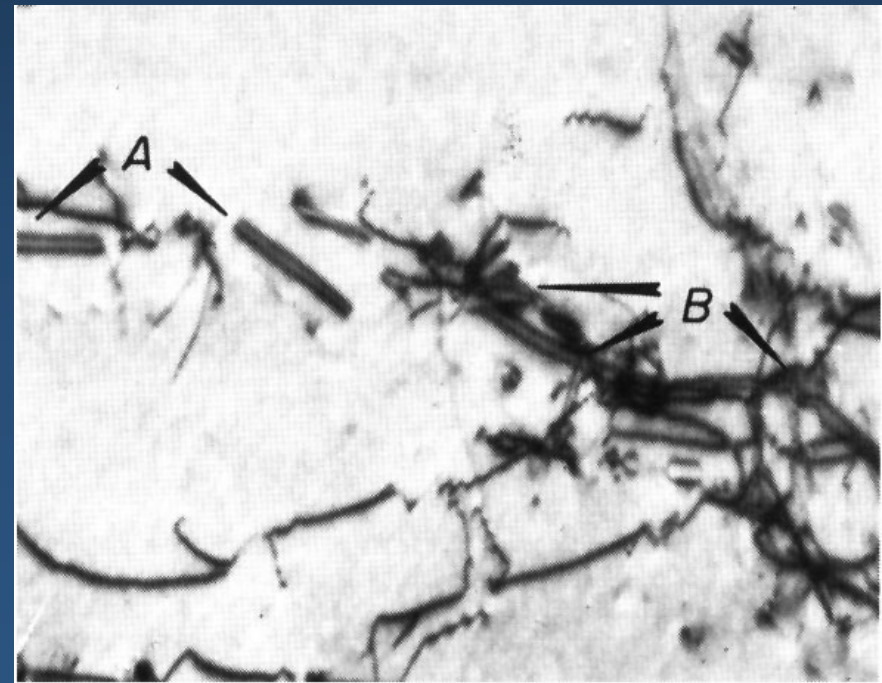
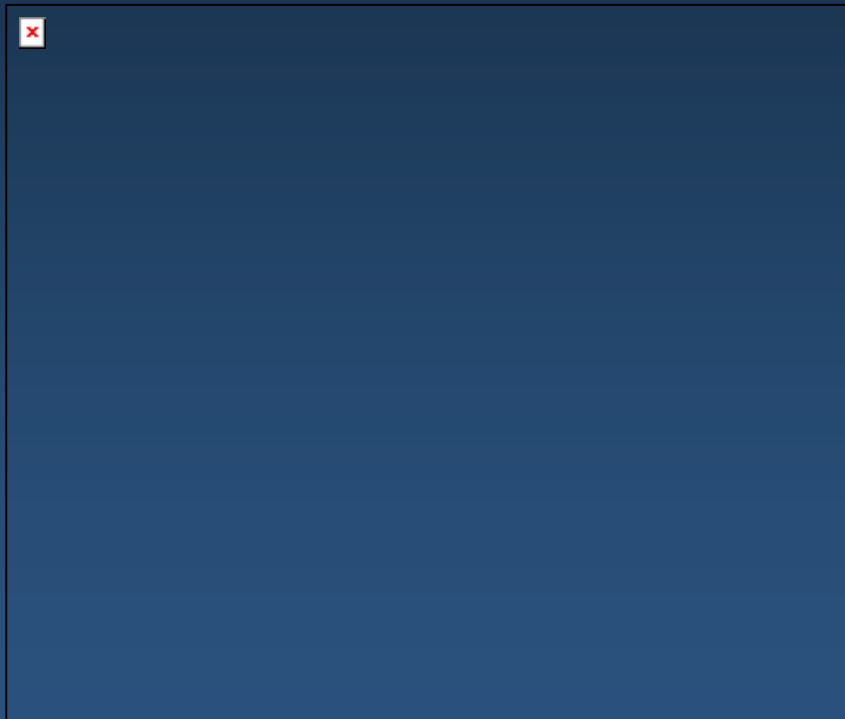


说明：

- 从上面的例子可看出，**割阶都是刃位错**。但不能说相截出来的小段位错是刃位错就一定是割阶。
- 割阶长度一般只有原子间距大小。位错存在割阶，会增加位错能量，需要付出额外的力。长度为1个原子间距的割阶的能量，约为零点几个 Gb^3 （几分之一电子伏特）。
- 若割阶长度较大，增加的能量不能按增加其长度而成比例增加；因割阶的长程应力场会被原位错的应力场抵消。

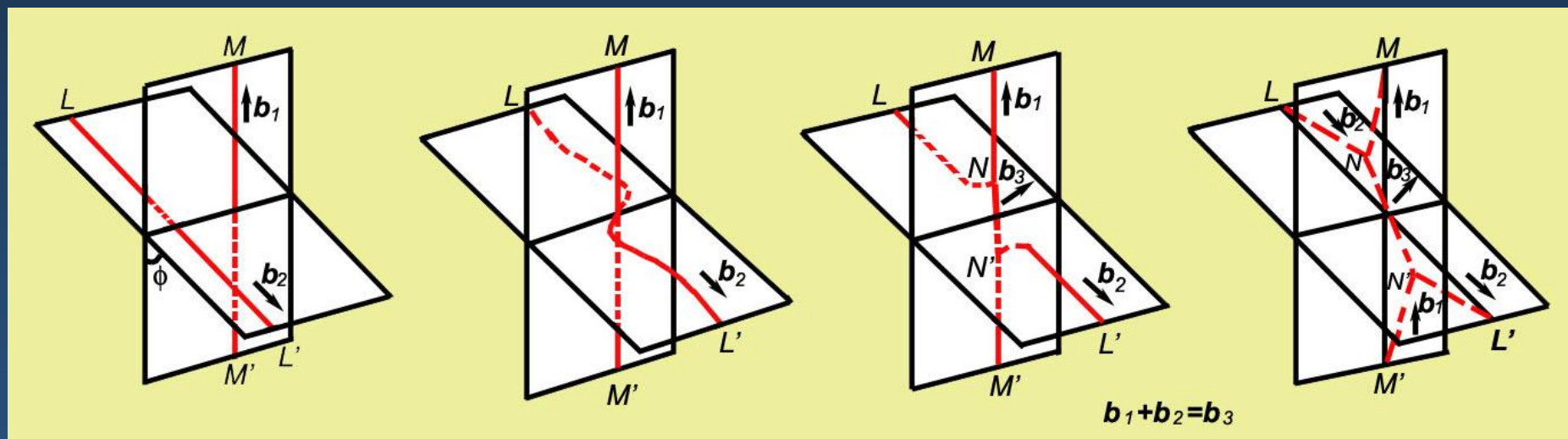
位错偶极子

带有大割阶的螺位错运动时，由于割阶是刃位错，在原螺位错滑移方向只能攀移，它不易移动，使割阶两侧的位错在上、下2个滑移面上运动形成位错偶极子。



会合位错

在2个滑移面上分别有 LLC 及 MMC 螺位错，它们的柏氏矢量 b_2 和 b_1 的交角是钝角，2个位错是相吸的。2位错靠近时，由于吸力作用，在靠近 MMC 的一段 LLC 位错在另一个滑移面滑动使和 MMC 平行，然后结合成新位错段 NN' 。为了进一步减小能量，位错线的排列就转化成新的结构。



两位错继续运动要从这种会合状态拉开，这要作附加功。对面心、体心立方金属进行过估算，附加功是割阶形成能的一半，所以这一项不能忽略。因而，形成会合位错增加了位错交割时的阻力，它对形变阻力有较大贡献。

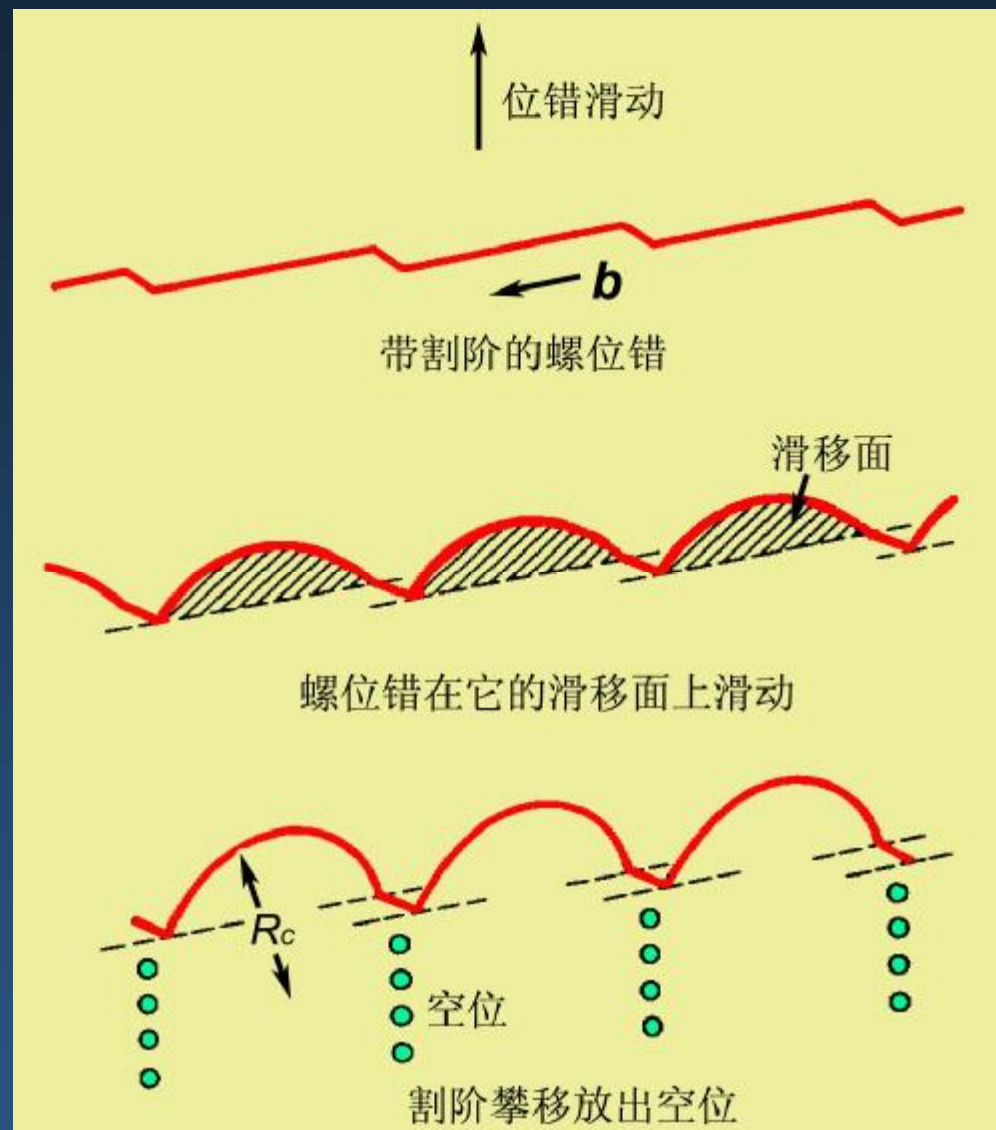
6.7.3 带割阶的位错的滑移

当1个割阶被滑移位错带着运动时，可产生一串空位或一串间隙原子。因攀移速度很慢，所以这根位错的滑移速度由割阶攀移速度所控制。

攀移速度估算：

外力提供的功是外力对位错滑移作的功。位错前进1个原子间距，每L长位错滑移做功 tb^2L ，若无过饱和空位浓度存在，割阶的攀移速度 v_j 为

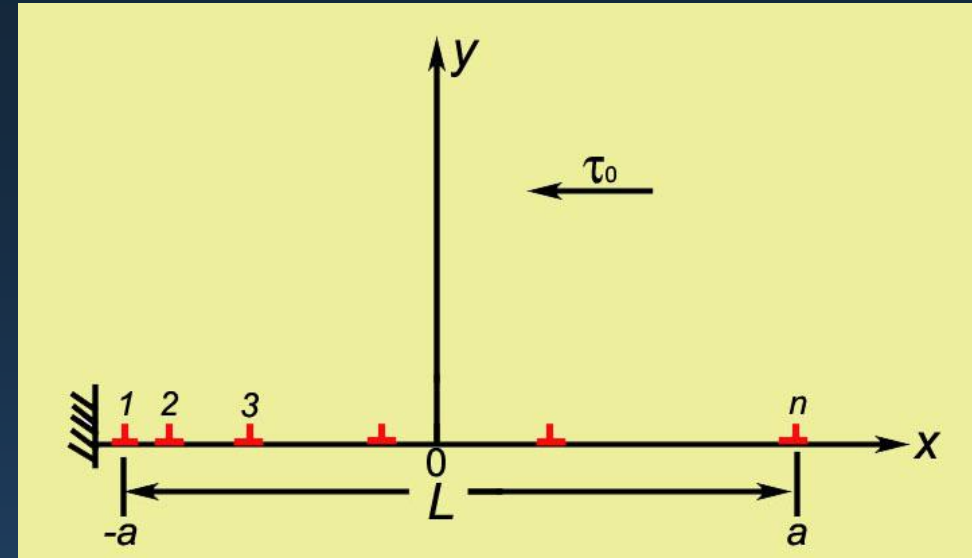
$$v_j = \frac{D_s}{b} \exp\left(\frac{tb^2L}{kT}\right)$$



这也是整根位错滑移的速度

6.7.4 位错塞积群

塞积现象：在分切应力作用下，由同一位错源放出的位错在障碍前受阻，这些位错就在障碍前排列起来，这种位错组态称塞积群。



塞积群中位错受力情况：

把塞积群中位错从障碍物前按1、2、3...顺序编号，第1个位错到最后一个位错间的长度定义为塞积群长度 L ，把坐标原点放在塞积群的中点。障碍物只对塞积群的领头位错有作用力，这样，除了领头位错外，塞积群中每一个位错受到外加切应力的作用同时也受群中所有其它位错的交互作用。平衡时，故第 j 个位错受的总力 F_j 为0：

$$F_j = \frac{Gb^2}{2\pi K} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{1}{x_j - x_i} + t_0 b = 0$$

n 个位错的塞积群有 $n-1$ 个方程，解这 $n-1$ 个联立方程就可求出每个位错的位置(x_j)。塞积群的问题就基本解决了。

塞积群中位错分布:

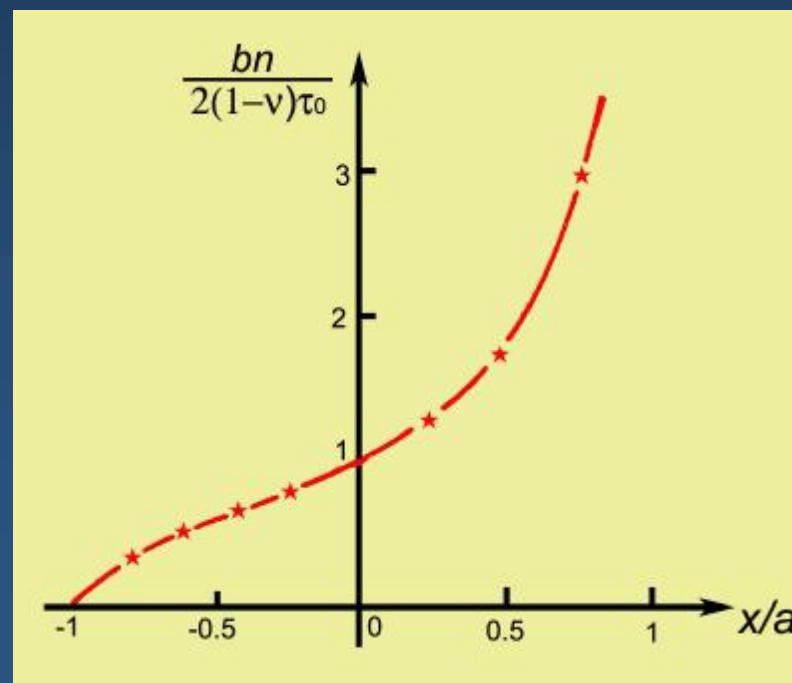
把塞积群看作是位错沿整个塞积长度连续分布的, 这些位错的柏氏矢量相同, 都是 b , 而在各处的位错密度(单位长度的位错数目)不同, 以 $n(x)$ 表示, 在 $x \sim x+dx$ 有 $n(x)dx$ 个位错, 所以, 对于刃位错塞积群, 力平衡的式子可写成:

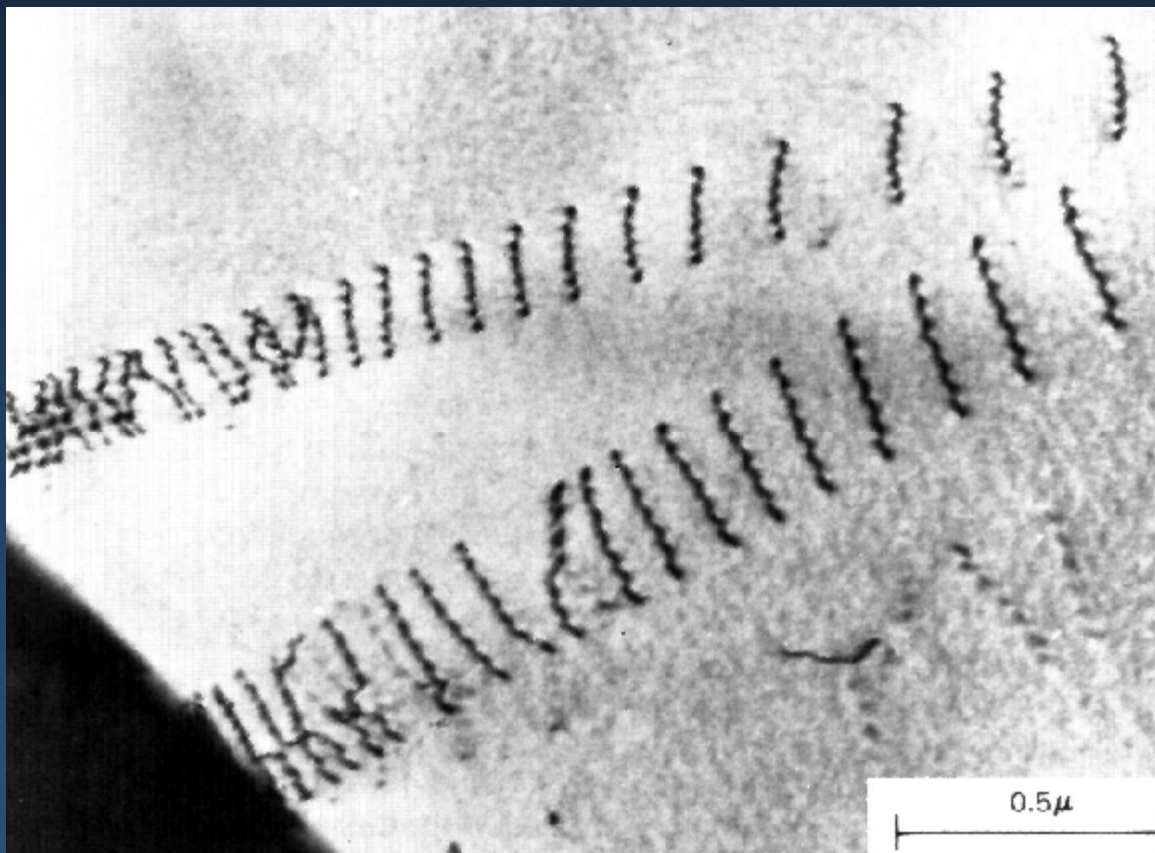
$$t_0 b + \int_{-a}^a \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{n(x')dx'}{x-x'} = 0 \quad \text{式中 } a=L/2。$$

解此方程得

$$n(x) = \frac{2t_0(1-\nu)}{Gb} \left[\frac{x+a}{a-x} \right]^{\frac{1}{2}}$$

塞积群内位错的分布是不均匀的。
在靠近障碍物一边, 位错密度大。





不锈钢中在晶界前的位错塞积群

塞积群对障碍物的作用力：

用虚功原理估算。

设在外应力作用下领头位错向障碍物方向移动了 δx ，因整个塞积群要保持平衡，所以每个位错也移动 δx ，这样，外力对塞积群做功为 $t_0 nb \delta x$ ；障碍物施给领头位错的切应力为 t ，当领头位错移动 δx 时，障碍物这一反作用力做功为 $tb \delta x$ 。上述两种功应相等，故

$$t = nt_0$$

意义：塞积群在障碍物处产生了很大的应力集中（为外应力的 n 倍）。这一应力集中对材料塑性变形行为有很大作用。

塞积群对远处某对象的作用力：可把整个塞积群看成是一个处于塞积群重心处（离位错源到领头位错约 $3/4$ 处）的一个柏氏矢量为 nb 的大位错，用这个大位错的应力场来表示塞积群的应力场。

6.8 特殊晶体结构中的位错

已知为使位错自身能量最低，大多数晶体中的全位错的柏氏矢量是最短的平移矢量，如，简单立方为 $a\langle 100 \rangle$ ，面心立方为 $a\langle 110 \rangle/2$ ，体心立方的 $a\langle 111 \rangle/2$ ，密排六方的 $a\langle 11\bar{2}0 \rangle/3$ 。

问题：位错都以密排方向的平移矢量存在吗？

若柏氏矢量不是晶体的平移矢量，当这种位错扫过后，位错扫过的面两侧必出现错误的堆垛，称**堆垛层错**。若这些错排不导致**增加很多能量**，则这种位错是可能存在的，称**部分位错(不全位错)**。

伴随的新现象：

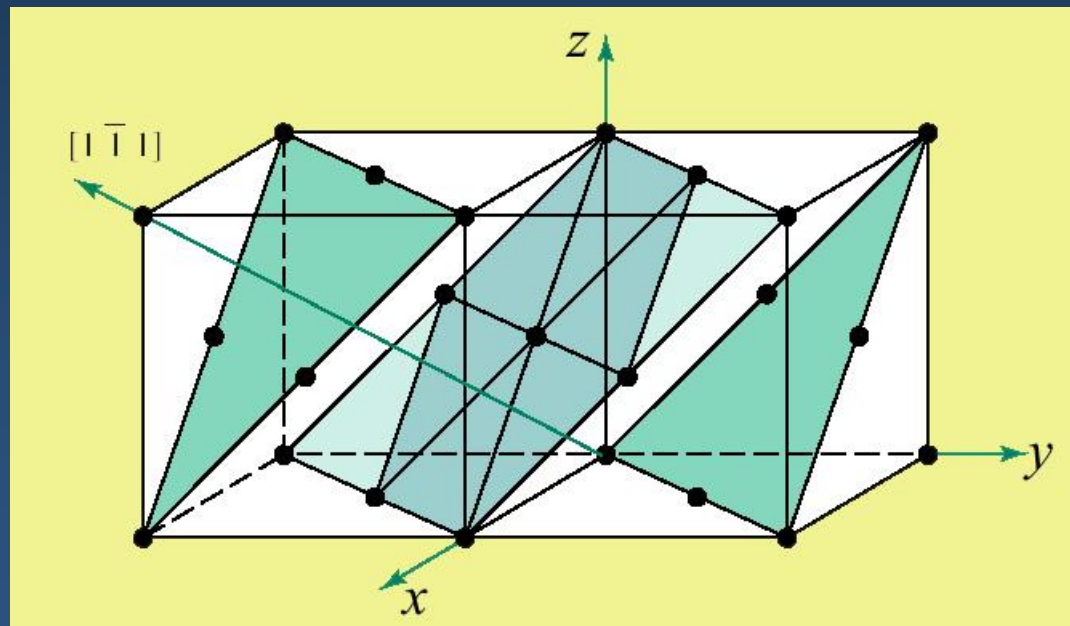
部分位错必伴随有层错，即部分位错线是层错的边界线。

6.8.1 FCC金属

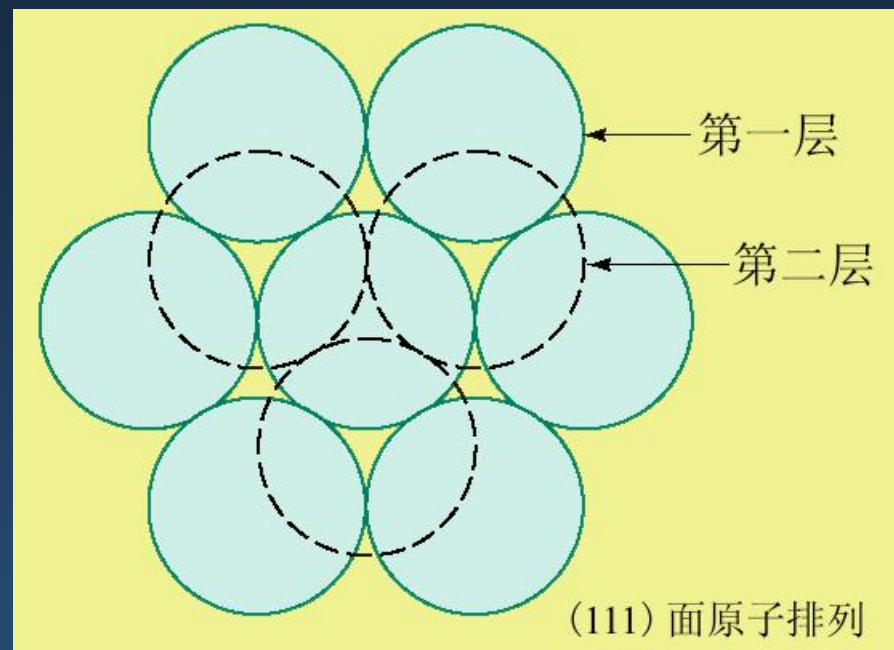
堆垛及堆垛层错

面心立方结构最密排面是 $\{111\}$ ，它是按每3层重复堆垛排列的，即堆垛顺序为

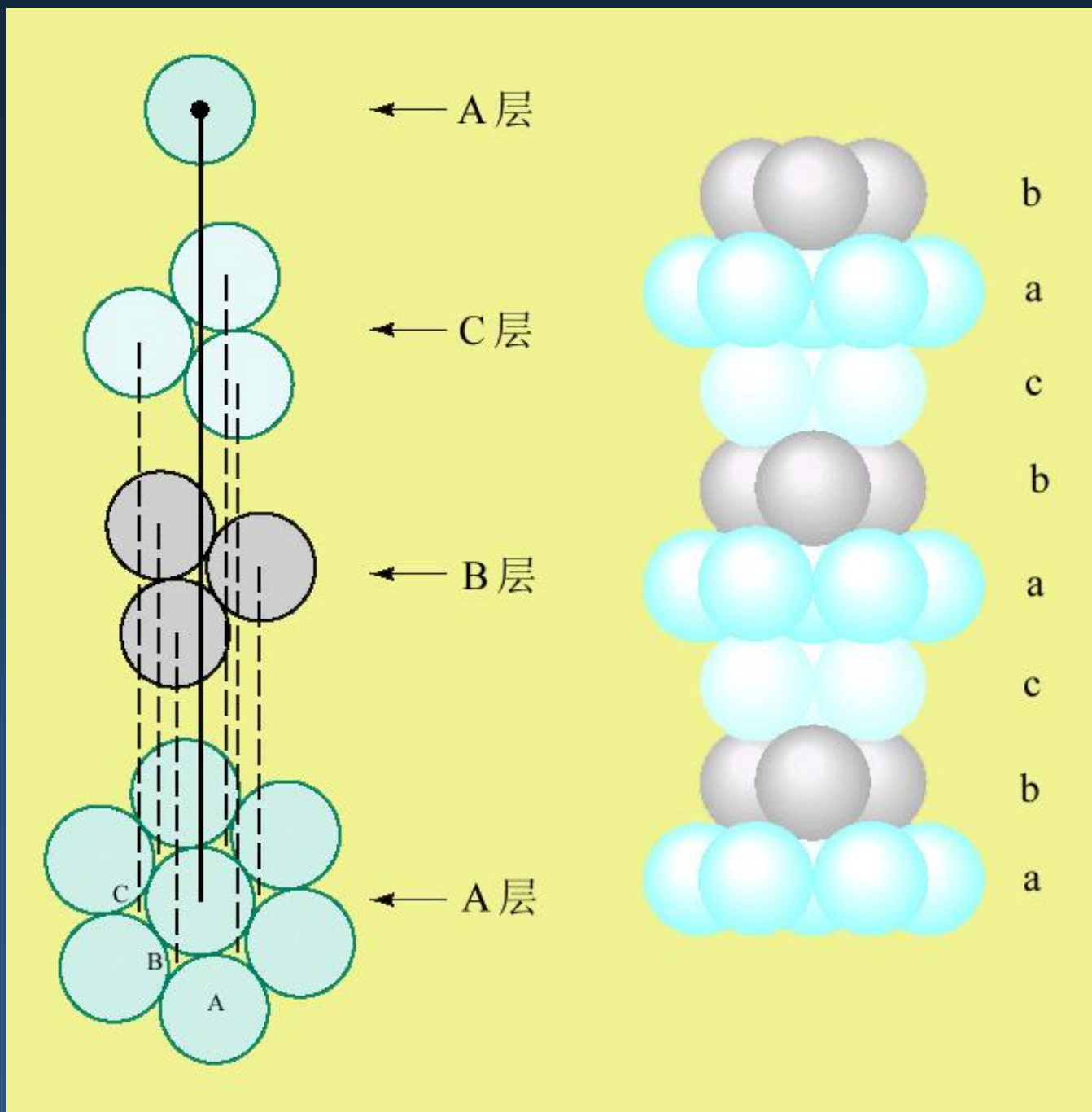
.....ABCABCABC.....



第一层{111}面上有两个可堆放的位置： Δ 和 ∇ 位置，在第二层只能放在一种位置，在面上每个球和下层3个球相切，也和上层3个球相切。

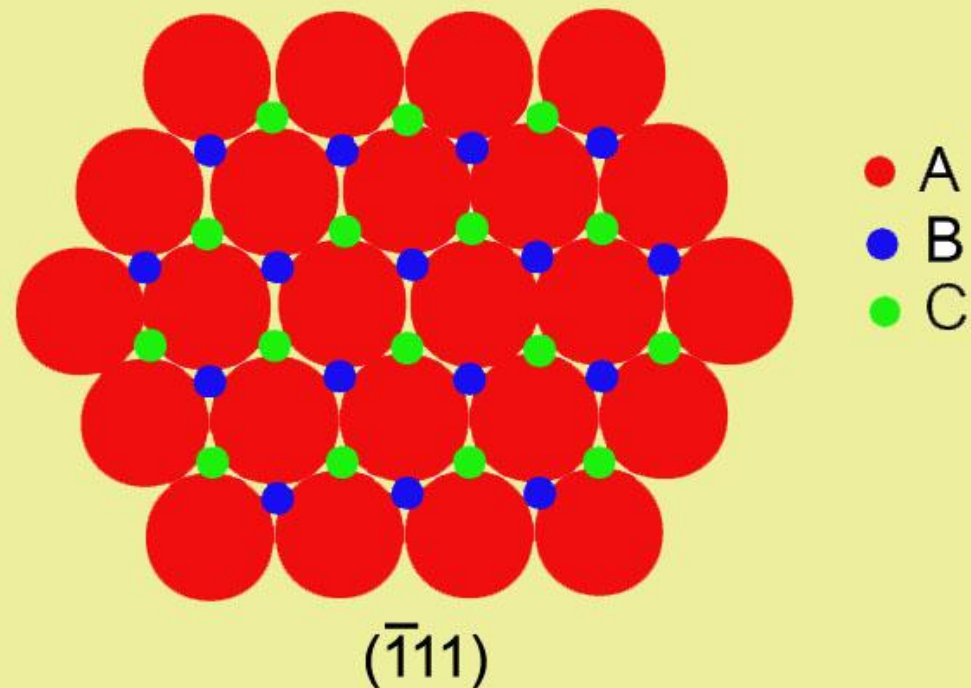
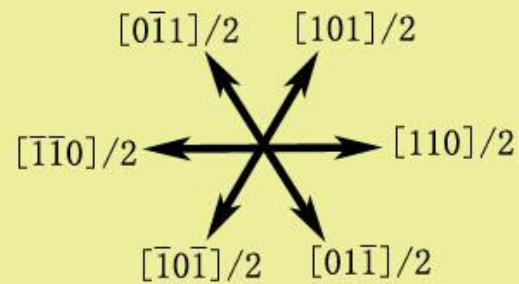
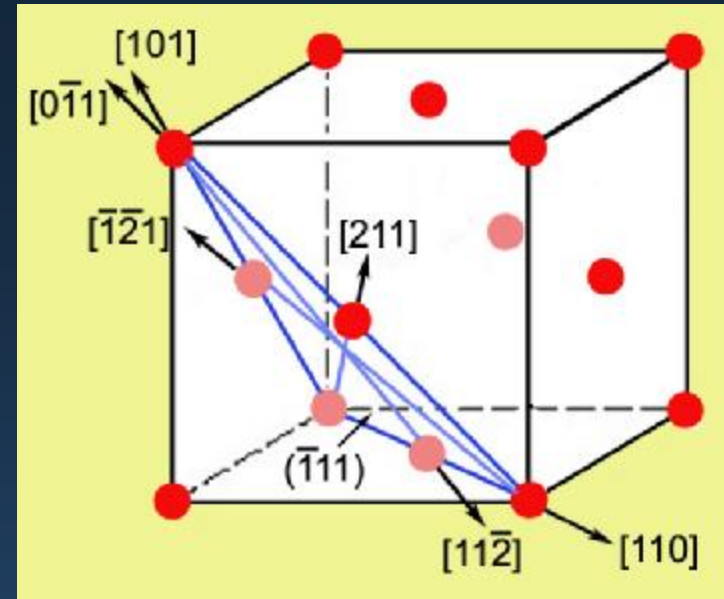


第一层为 A，
第二层放在B
位置，第三层
放在C位置，
第四层在放回
A位置。 $\{111\}$
面...ABCABC
...顺序排列，
这就形成面心
立方结构。

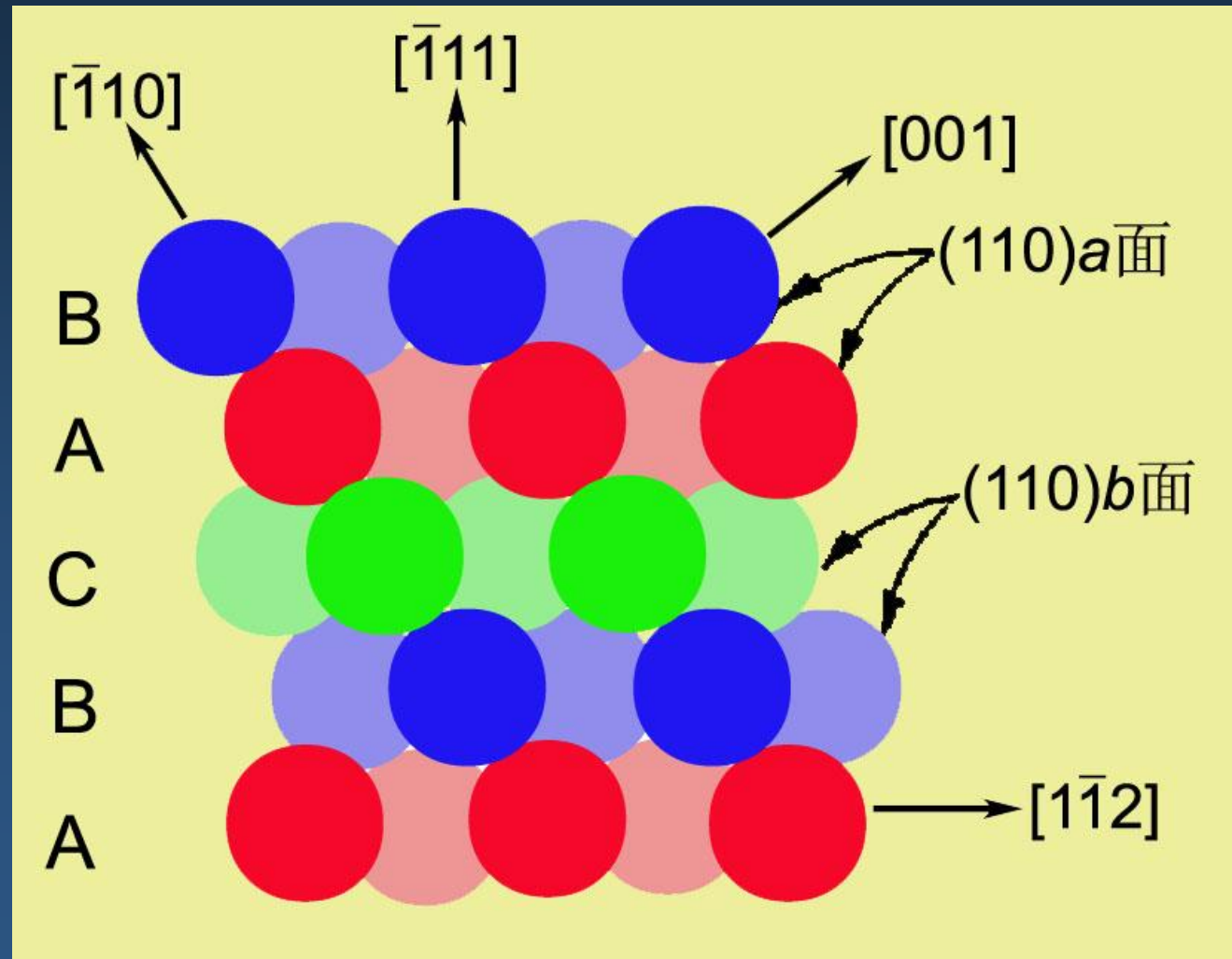


$(\bar{1}11)$ 面以及其中的一些方向 →

面心立方 $(\bar{1}11)$ 面原子排列示意图,并标出一些有用的晶向。



为了清楚地看清 $(\bar{1}11)$ 面的堆垛，应找一个和 $(\bar{1}11)$ 面垂直的面，例如 (110) 面。 (110) 面和 $(\bar{1}11)$ 面的交线是 $[1\bar{1}2]$ 方向，所以在 (110) 面上的一个 $[1\bar{1}2]$ 方向就表示一个 $(\bar{1}11)$ 面。



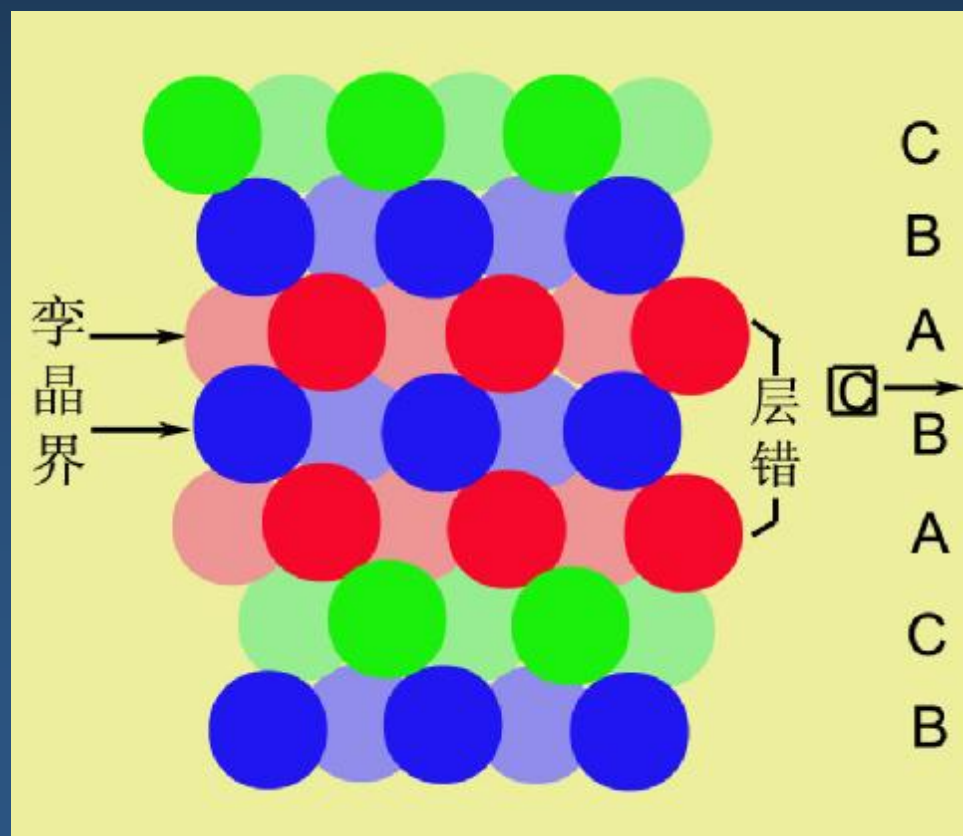
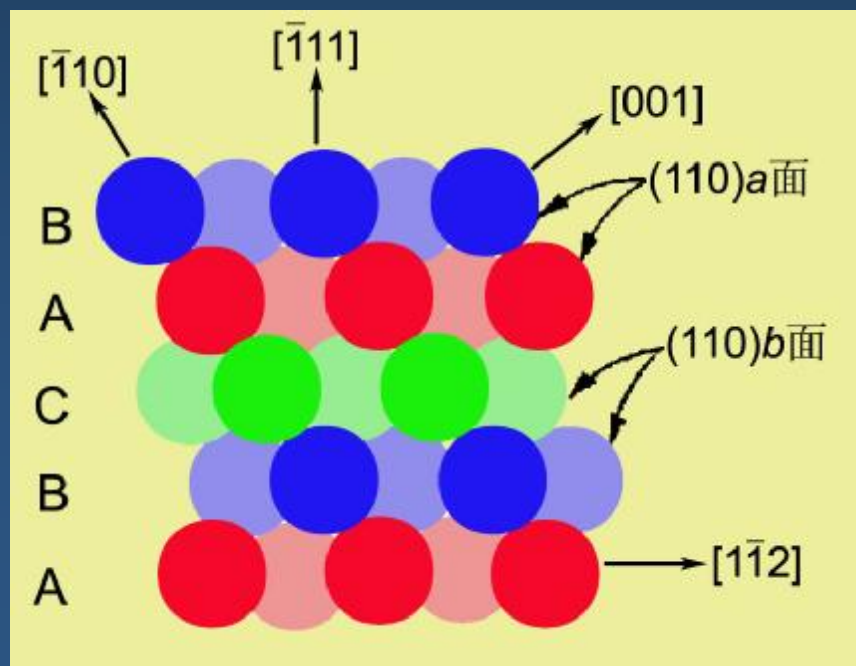
内禀层错 (I型层错)

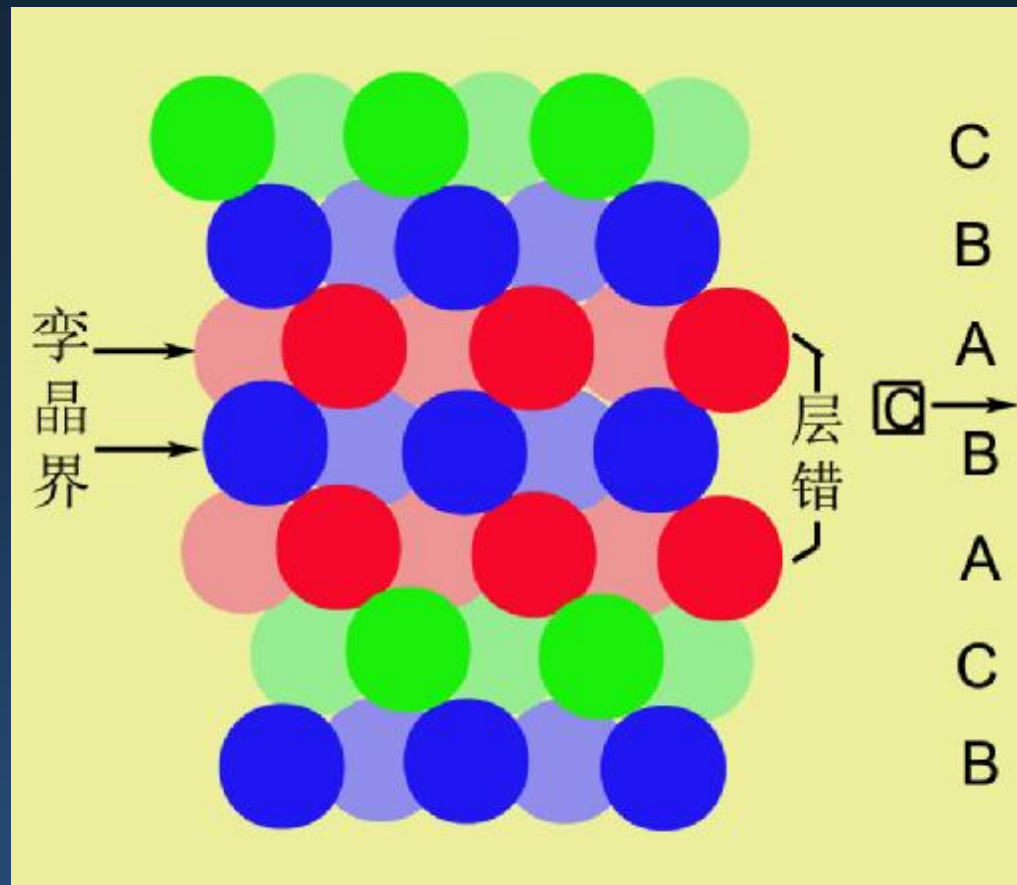
把晶体相对移动而获得层错的移动矢量称**层错矢量**。如果某一层(111)面相对近邻一层**切动** $a\langle 211 \rangle/6$ (层错矢量为 $a\langle 211 \rangle/6$)，即C位置切动到A位置，切动后C层以上的晶体各层位置作如下变化：

$C \rightarrow A, A \rightarrow B, B \rightarrow C$ ，结果变成

.....ABCABCAB | ABCABCABC.....

在B | A处发生了堆垛层错，层错矢量是 $\langle 112 \rangle/6$ ，**这类层错称内禀层错**；因为这种层错是由滑移形成，有时亦称滑移层错。





这类层错也可以由抽去一层 $(\bar{1}11)$ 面（例如C层）而成，这时层错矢量是 $[\bar{1}11]/3$ 。

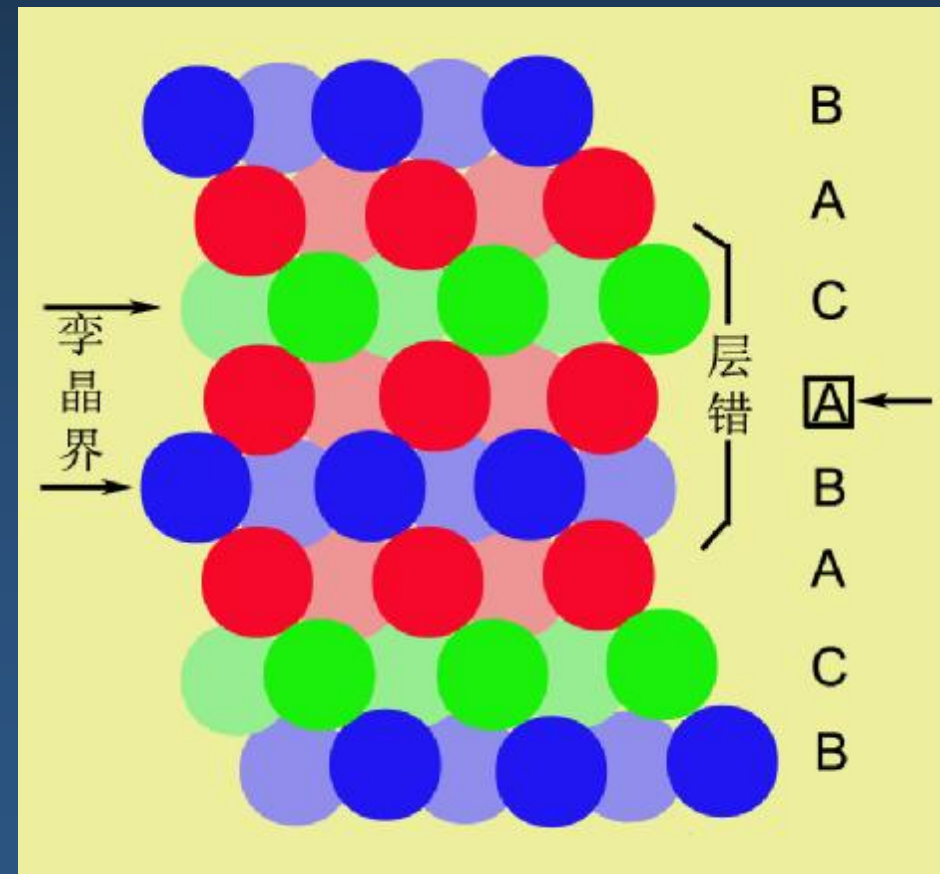
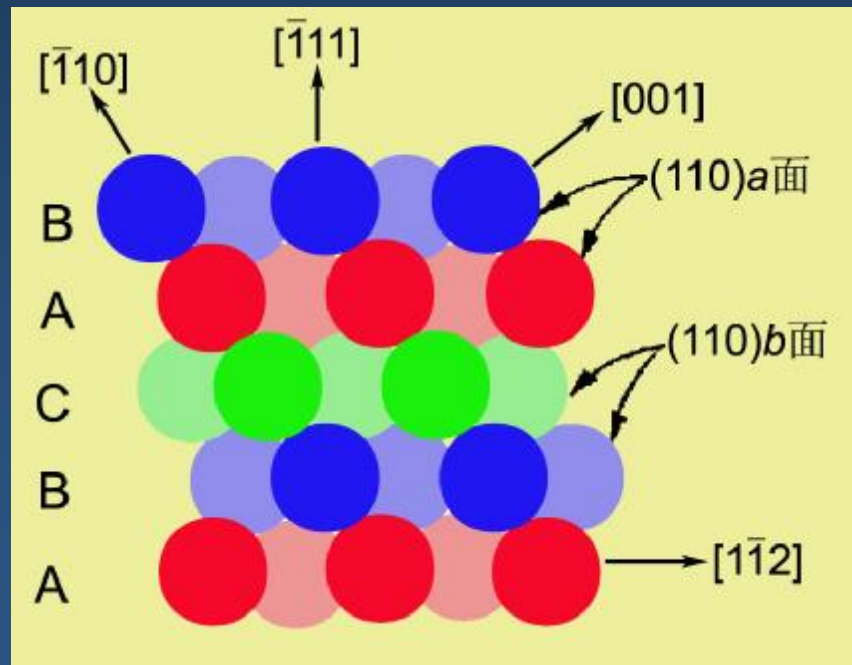
应注意到这类层错在原来密排方向 $[\bar{1}10]$ 发生了2个原子长度的曲折，产生了一个原子厚的孪晶层；在层错处出现了几层密排六方排列（即ABAB排列）

外禀层错 (E型层错)

如果在面的堆垛中任意插入一层 ($\bar{1}11$) 面 (例如在B和C层之间插入一层A)，于是堆垛顺序变成

.....ABCABCAB | A | CABCABC.....

在B | A | C处发生层错，层错矢量是 $[\bar{1}11]/3$ 这类层错称**外禀层错**。这类层错也可以通过在一层 ($\bar{1}11$) 上下两层分别滑动 $[211]/6$ 形成，这时层错矢量是 $[211]/6$ 。

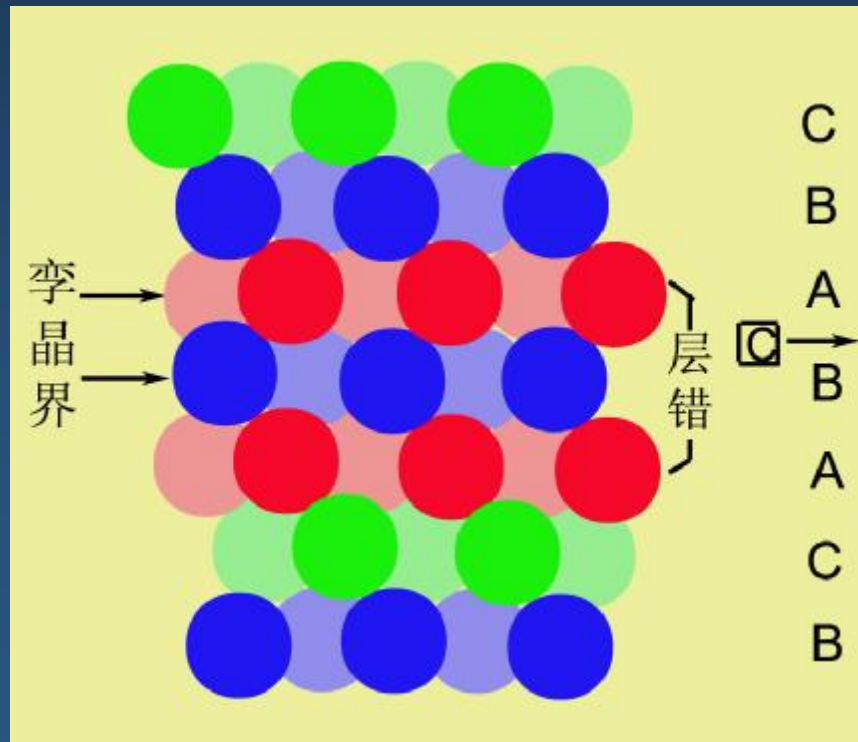


两类层错的比较

I型

...ABCABCAB : ABCABCABC...

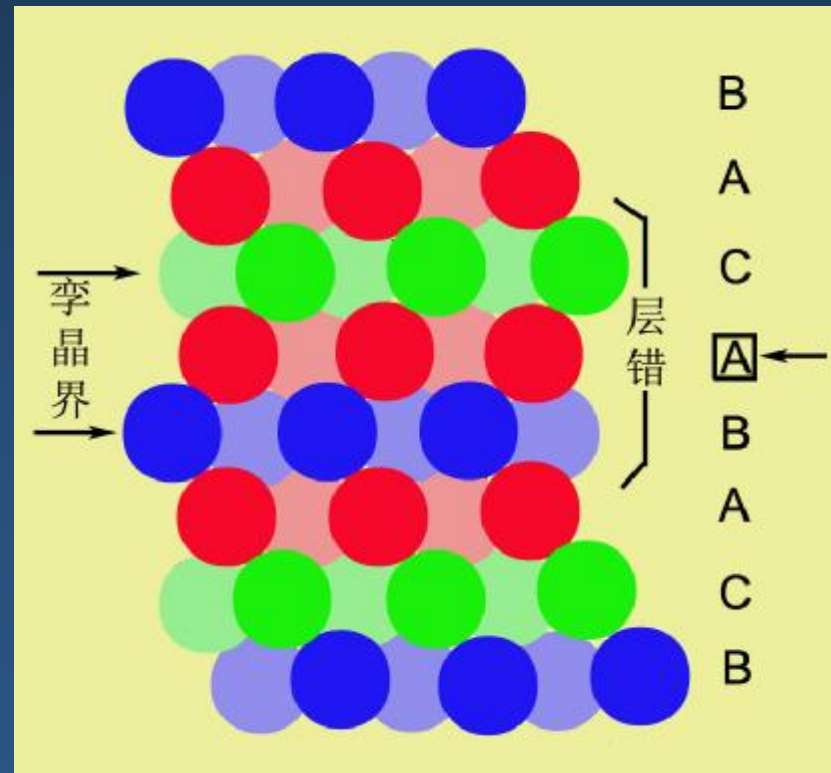
滑移 $[112]/6$ 或抽出一层面，
相应的层错矢量是 $\langle 112 \rangle/6$ 或
 $\langle 111 \rangle/3$ ；
层错为2个原子厚。



E型

...ABCABCAB : A : CABABC...

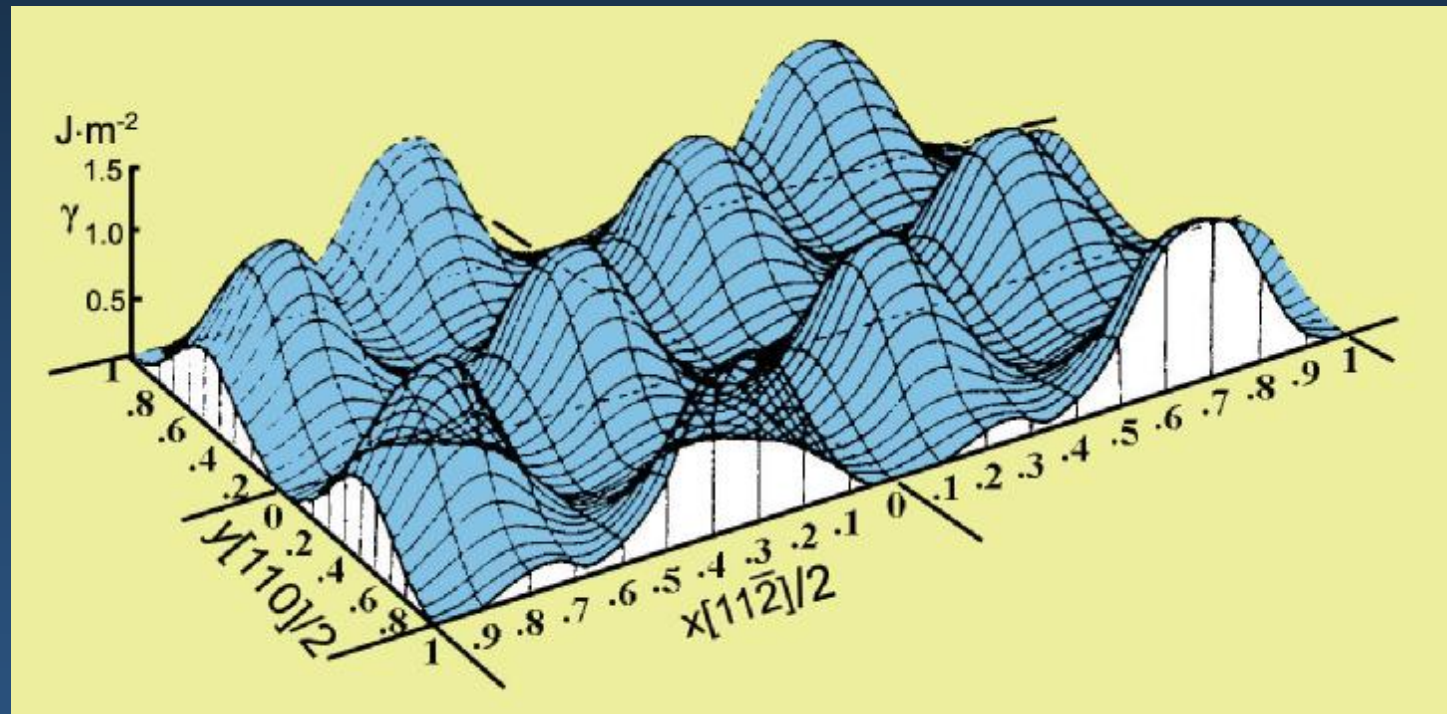
一层面 相邻的上下两侧各滑移 $\langle 112 \rangle/6$ 或插出一层面，相
应的层错矢量是 $\langle 112 \rangle/6$ 或
 $\langle 111 \rangle/3$ ；
层错为3个原子厚。



层错使晶面产生错排，故使能量增加。单位面积层错所增加的能量称**层错能**。对应不同的层错矢量所引起的层错能不同。只有如上所述的少数层错矢量的层错能比较低才可能存在。

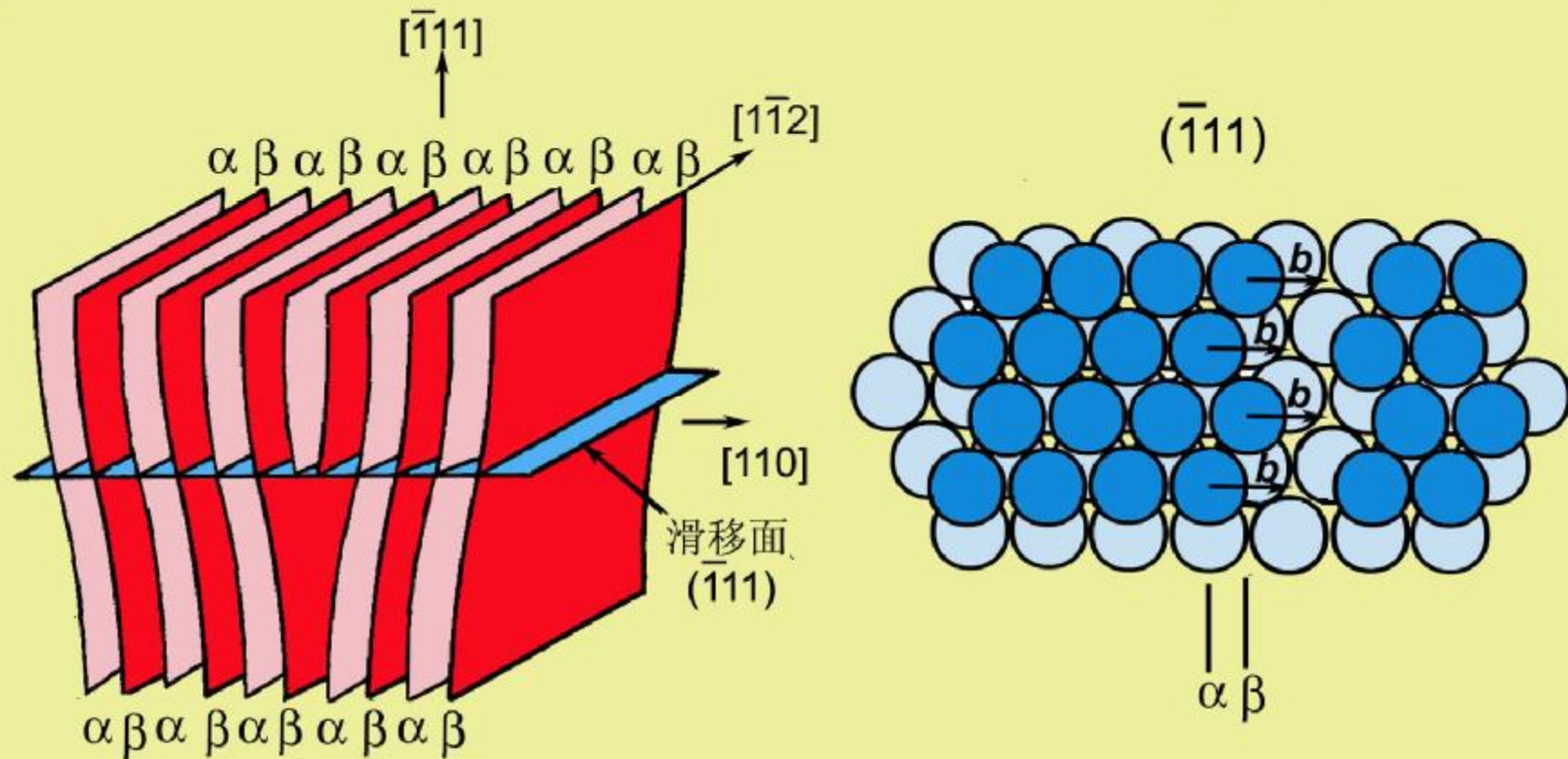
例：对铝计算的层错能随(111)面上的层错矢量的变化。

<110>/2类型的层错矢量及<112>/6类型层错矢量的层错能最小。



常识：Ag、Au和Cu的层错能分别约为 16 、 55 和 $73 \times 10^{-3} \text{J/m}^2$ ，这些层错能是比较低的；Al、Ni的层错能分别约为 200 、 $400 \times 10^{-3} \text{J/m}^2$ ，这些层错能是比较高的。（晶界能约为 $800 \sim 1000 \times 10^{-3} \text{J/m}^2$ ）

全位错



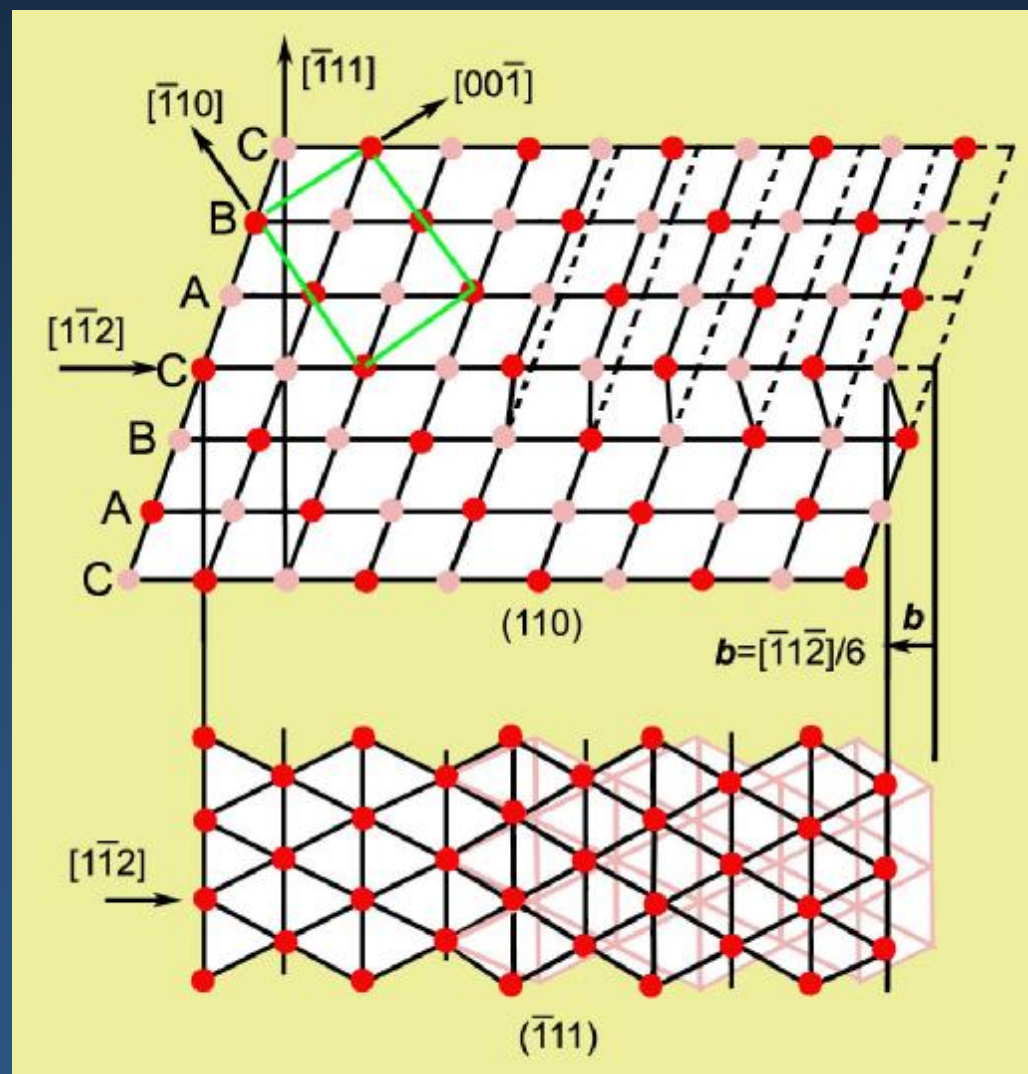
全位错的柏氏矢量是 $\langle 110 \rangle / 2$ 。这个刃位错的半原子面是 (110) 面，在 $a[110]/2$ 间隔内含有 2 层 (110) 面。在 $(\bar{1}11)$ 面上看，这 2 层半原子面表现为弯曲的原子列。若全位错向左移动，则图中上层原子（深蓝圆）向右滑动，滑动的距离为 $[110]/2$ ，即从 Δ 位置到相邻的 Δ 位置，相应 2 层半原子面向左移动 $[\bar{1}\bar{1}0]/2$ 。

部分位错（不全位错）

层错的边界就是位错线，它的柏氏矢量就是产生层错的层错矢量。

• Shockley位错

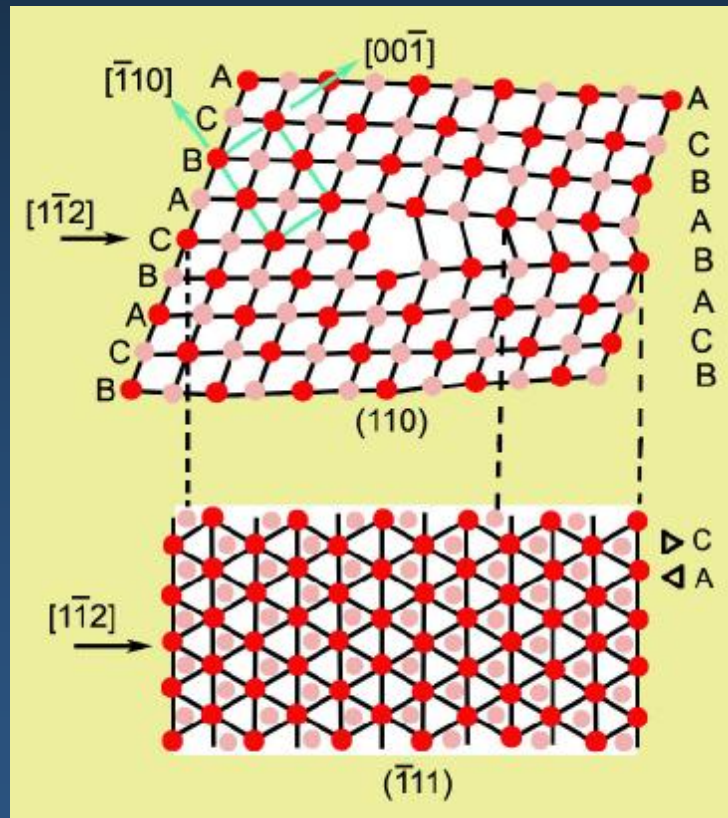
层错矢量为 $a\langle 112 \rangle/6$ 的层错边缘就是Shockley位错。右图的层错是由一部分晶体滑动 $[\bar{1}12]/6$ ，即从图中的C层滑到A位置，C层以上的晶体也跟着一起滑动后产生的。这种部分位错的滑移面就是层错所在面，即 $\{111\}$ 面，位错滑移伴随层错的扩大或缩小。若这位错作离开滑移面运动，则会产生严重错排，故这位错是不可能攀移的。



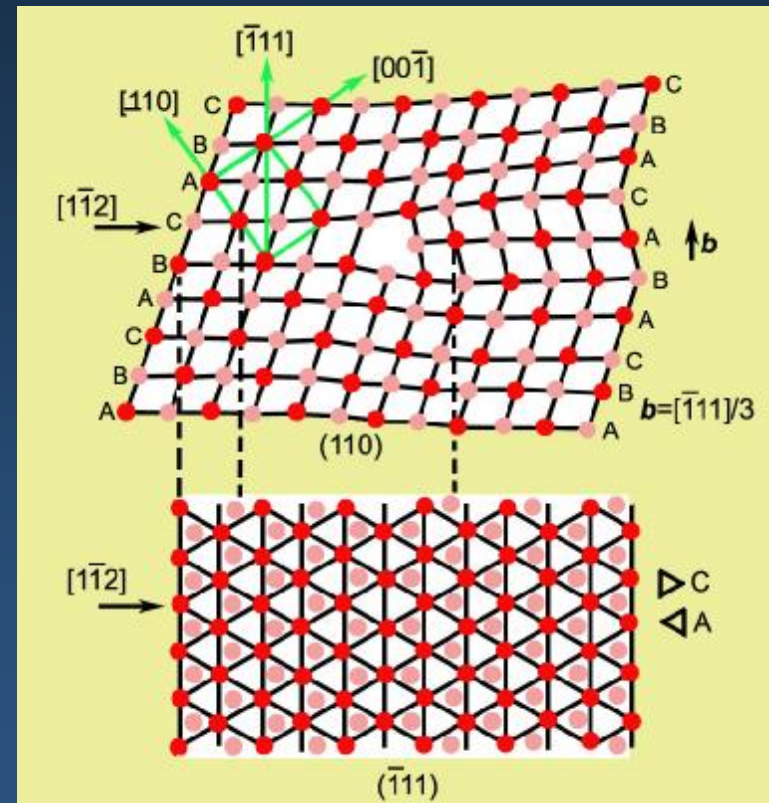
•Frank位错

如果层错是由抽去或插入一层(111)面而形成的，即层错面相对位移了一个(111)面间距($a[111]/3$)，层错与完整部分交界处的位错的柏氏矢量就是 $a[111]/3$ 。这类部分位错称Frank位错。

S-Frank位错



D-Frank位错



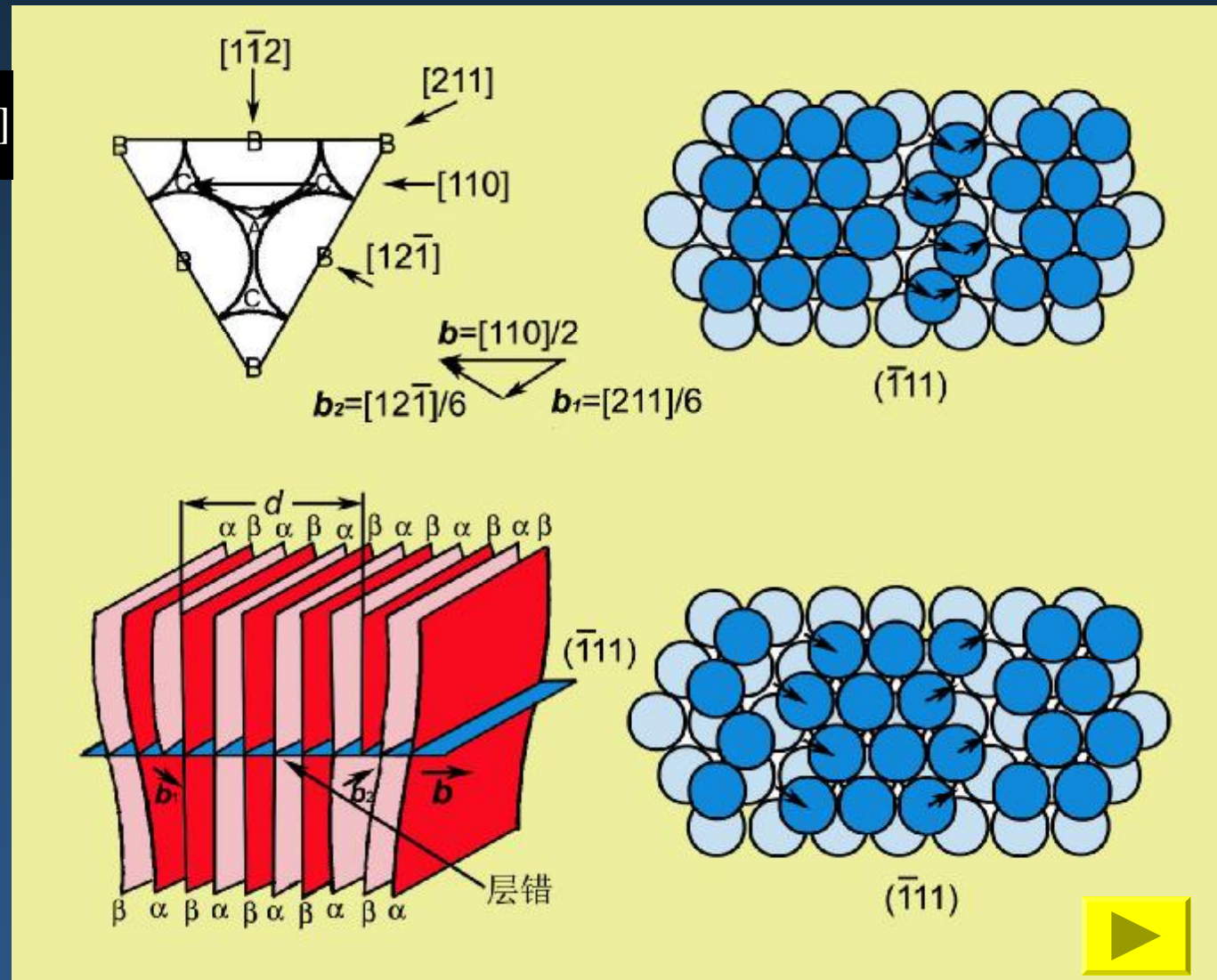
它们在层错所在的面上的运动是攀移运动，这类位错可以攀移，但滑移会导致晶体产生严重错排，所以实际上它是不能滑移的。

扩展位错

指把全位错的滑动分成两步：第一步从C位置到邻近的A位置，即移动 $a[211]/6$ ，然后再从A位置移动到另一个C位置，即移动 $a[12\bar{1}]/6$ 。表示为：

$$\frac{a}{2}[110] \rightarrow \frac{a}{6}[211] + \frac{a}{6}[12\bar{1}]$$

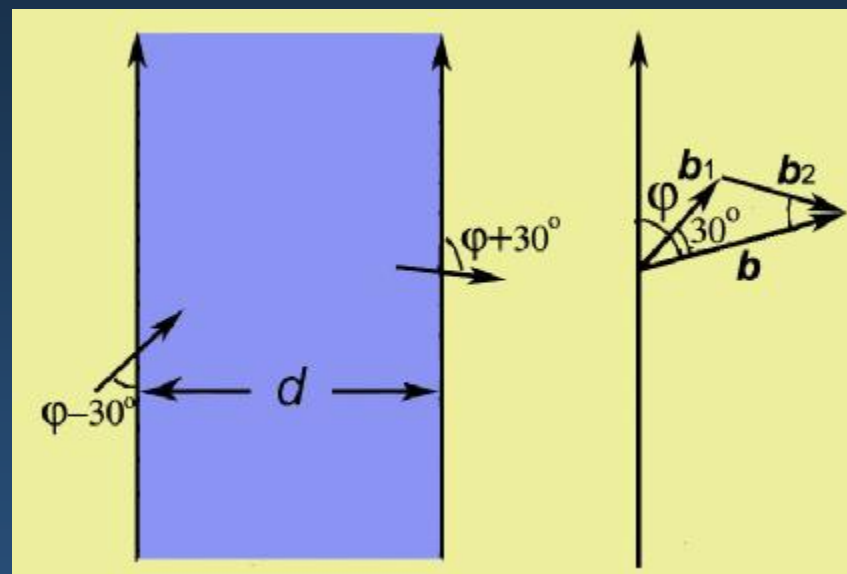
这两步都是从密排缝隙滑过，因而较容易。当完成第一步移动时，相应形成一窄带（约一排原子）的层错，**两个Shockley部分位错推开，形成一个层错带。这一组合称扩展位错。**



从**Frank能量判据**看，全位错的这一分解是可行的。因 $[12\bar{1}]$ 和 $[611]$ 方向的夹角是锐角（ $=60^\circ$ ），即分解前柏氏矢量平方（ $=a^2/2$ ）大于分解后2位错的柏氏矢量平方和 $[(a^2/6)+(a^2/6)=a^2/3]$ 。但分解后2个部分位错相斥，使它们之间包含一定宽度的层错区，还需考虑这部分层错的能量。

可推出：一柏氏矢量和位错线夹角为 j 的混合全位错，分解为两个Shockley位错后，2位错的柏氏矢量与位错线的夹角分别是 $j+30^\circ$ 和 $j-30^\circ$ 。两位错间的斥力为：

$$F = \frac{Gb^2}{8pd} \frac{2-n}{1-n} \left(1 - \frac{2n \cos 2j}{2-n}\right)$$

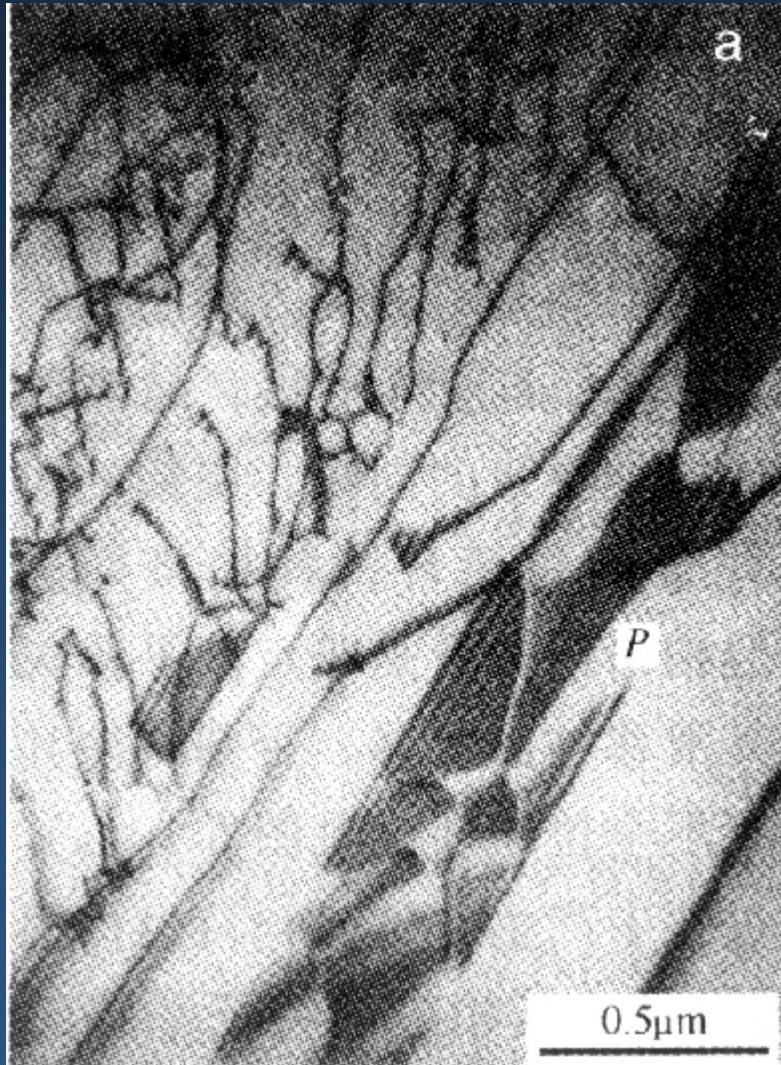


b 是全位错的柏氏矢量， d 为两部分位错的距离。因存在层错，有一个大小为层错能 g 的力使2个部分位错复合，当扩展位错处于力学平衡时，即 $F=g$ 时，2个部分位错的平衡间距 d_0 为

$$d_0 = \frac{Gb^2}{8pg} \frac{2-n}{1-n} \left(1 - \frac{2u \cos 2j}{1-n}\right)$$



不锈钢中扩展位错的 明场衍衬像



不同材料层错能宽度:

层错能越高，扩展位错的平衡宽度越窄。

- Cu的 d_0 在2.2和7.0nm之间。
- Ag的 d_0 约为Cu的两倍；
- Al的层错能较高， d_0 约为Cu的1/4，全位错基本上不可能扩展。

扩展位错的交滑移

螺全位错可交滑移，但分解成扩展位错后部分位错离开层错所在的面会引起严重错排。所以**扩展位错交滑移前一定要以一定方式变回全位错才能交滑移。**

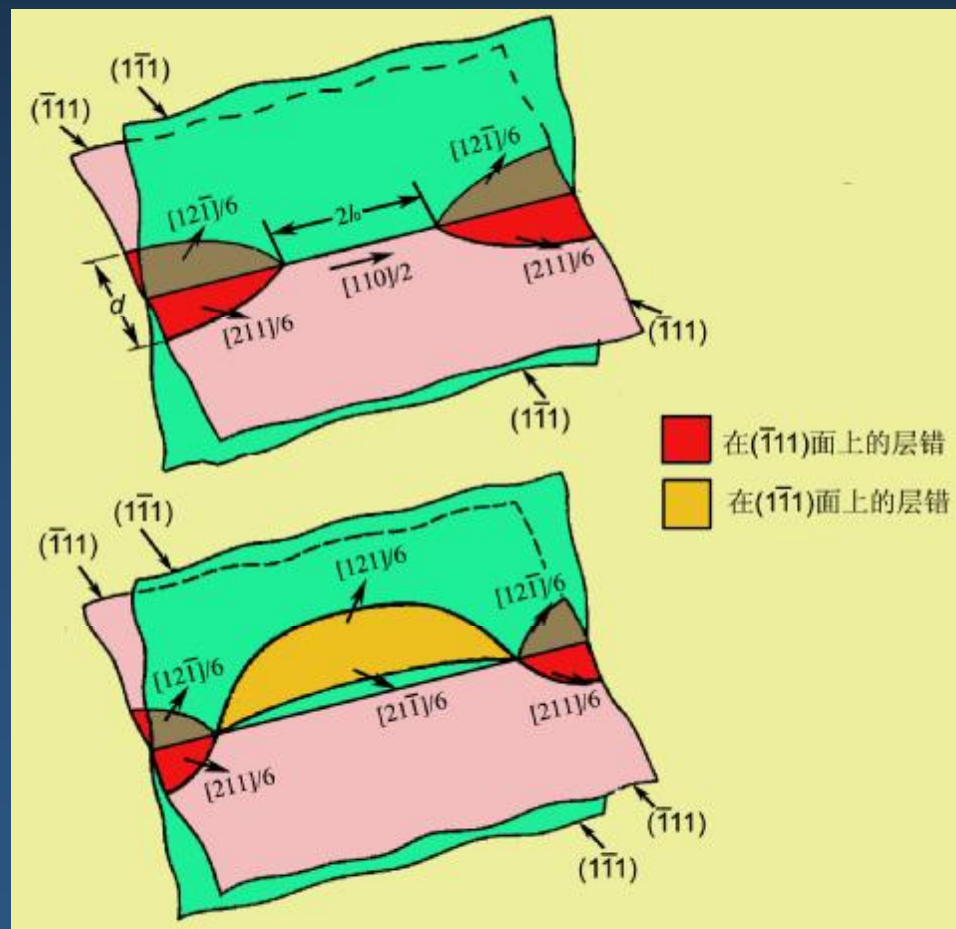
例：在 $(\bar{1}11)$ 面上柏氏矢量为 $[110]/2$ 全位错分解：

$$[110]/2 \rightarrow [211]/6 + [12\bar{1}]/6$$

其中一段位错束集成 $[110]/2$

全位错，它交滑移到 $(1\bar{1}1)$ 面上，然后在 $(1\bar{1}1)$ 面上再分解成扩展位错：

$$[110]/2 \rightarrow [121]/6 + [21\bar{1}]/6$$



扩展位错另一种交滑移方式

扩展位错中领先部分位错 $[12\bar{1}]/6$ 先发生分解

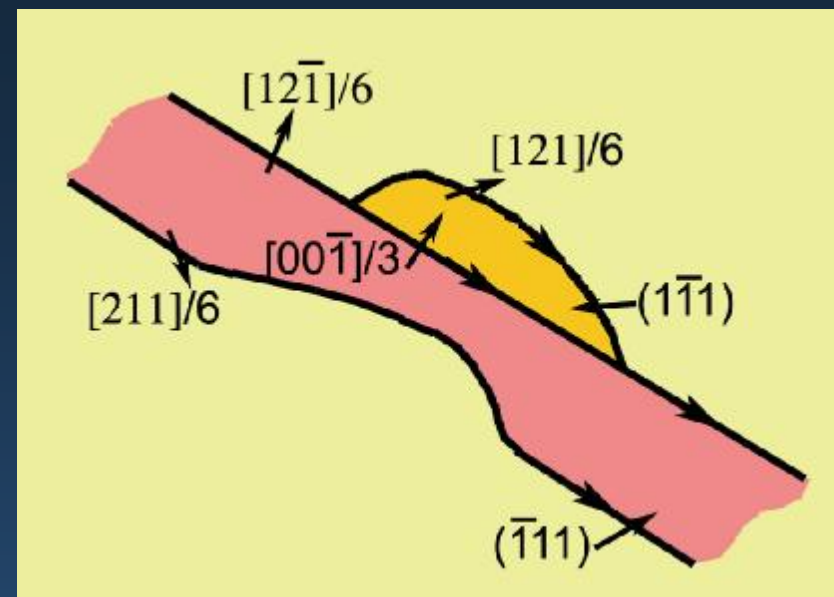
$$[12\bar{1}]/6 \rightarrow [00\bar{1}]/3 + [121]/6$$

其中 $[121]/6$ 位错的滑移面是 $(1\bar{1}1)$ ，而 $(1\bar{1}1)$ 面上的 $[00\bar{1}]/3$ 位错不能动，留在 $(\bar{1}11)$ 面和 $(1\bar{1}1)$ 面的交线上。当在 $(\bar{1}11)$ 面上后面的 $[211]/6$ 位错滑动到 $(\bar{1}11)$ 面和 $(1\bar{1}1)$ 面的交线上时，发生反应：

$$[211]/6 + [00\bar{1}]/3 \rightarrow [21\bar{1}]/6$$

合成的位错的滑移面也是 $(1\bar{1}1)$ 面，结果完成了交滑移。

扩展位错的这两种方式交滑移都要增加能量。这样扩展位错的交滑移就需要外力或热激活的帮助。因此，FCC金属中位错的交滑移的难易程度取决于应力、温度和层错能 g 的数值。

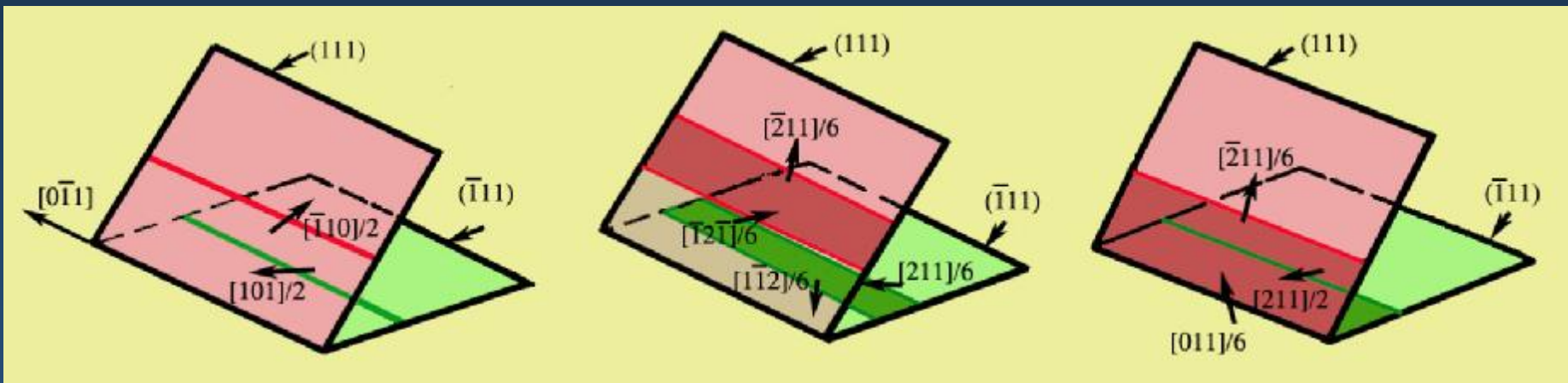


Lomer-Cottrell位错

在两相交的 $\{111\}$ 面上各有一扩展位错，它们相遇后，领头的Shockley位错可能发生反应而形成不动位错。如在 (111) 面及在 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面各有一全位错，柏氏矢量分别为 $[\bar{1}10]/2$ 和 $[101]/2$ ，它们各自分解成扩展位错：

$$[\bar{1}10]/2 \rightarrow [\bar{2}11]/6 + [\bar{1}\bar{2}\bar{1}]/6 \quad (111)$$

$$[101]/2 \rightarrow [211]/6 + [1\bar{1}\bar{2}]/6 \quad (\bar{1}\bar{1}1)$$

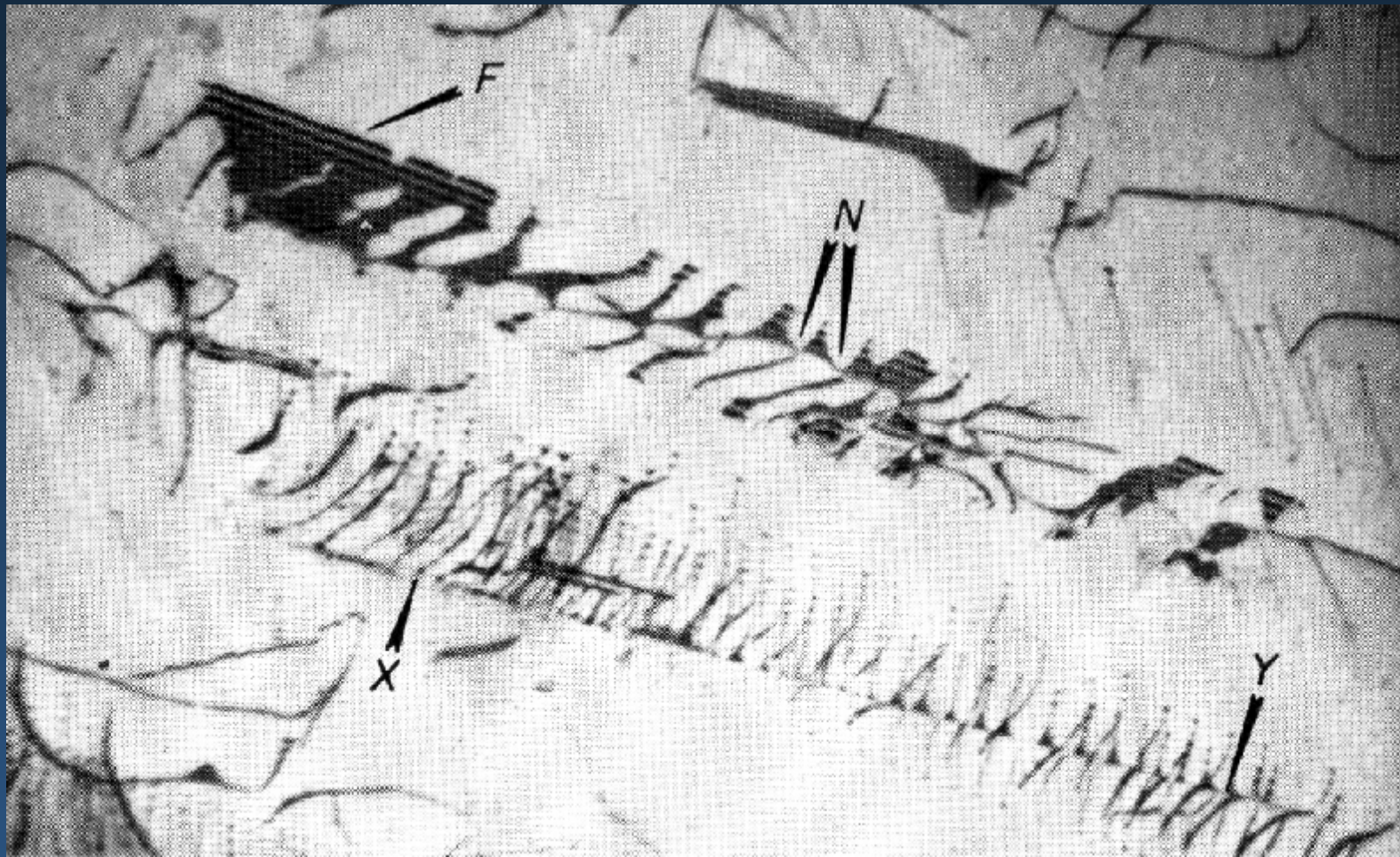


它们的领头位错相遇后发生如下的位错反应：



$[011]/6$ 位错在 (111) 和 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面的交线上。这是一种不可动的结构，称Lomer-Cottrell位错（简称L-C位错），又称面角位错。它成为滑移面上其它位错运动的障碍，所以它又称**L-C阻塞**。

经变形的Cu-7Al合金明场衍衬像



20,000×

在XY线上形成Lomer-Cottrell阻塞；F处是堆垛层错；
N处是一些位错结点。

6.9 位错和溶质原子交互作用

位错与溶质间的交互作用有弹性的、静电的、化学的及有序分布的等几种。

6.9.1 位错和溶质原子的弹性交互作用

Cottrell气团指溶质原子在刃位错周围的汇集。

若位错产生水静压力 p ，溶质原子引起的体积变化为 ΔV ，则位错和溶质原子的交互作用能 $U = p\Delta V$ 。设固溶体中溶剂、溶质的原子半径分别为 R 和 R' ，尺寸错配 $\epsilon = (R' - R)/R$ 。一个溶质原子引起的体积变化为 $\Delta V = 4\pi R^3 \epsilon$ 。极坐标表示的刃位错应力场的水静压力 p 为

$$p = \frac{1}{3}(s_{xx} + s_{yy} + s_{zz}) = \left(\frac{1-n}{1+n} \right) \frac{Gb \sin \theta}{3\pi r}$$

刃位错和溶质原子间的交互作用能为

$$U = p\Delta V = \frac{4(1+n)}{3(1-n)} Gb\epsilon R^3 \frac{\sin \theta}{r} = A \frac{\sin \theta}{r}$$

式中

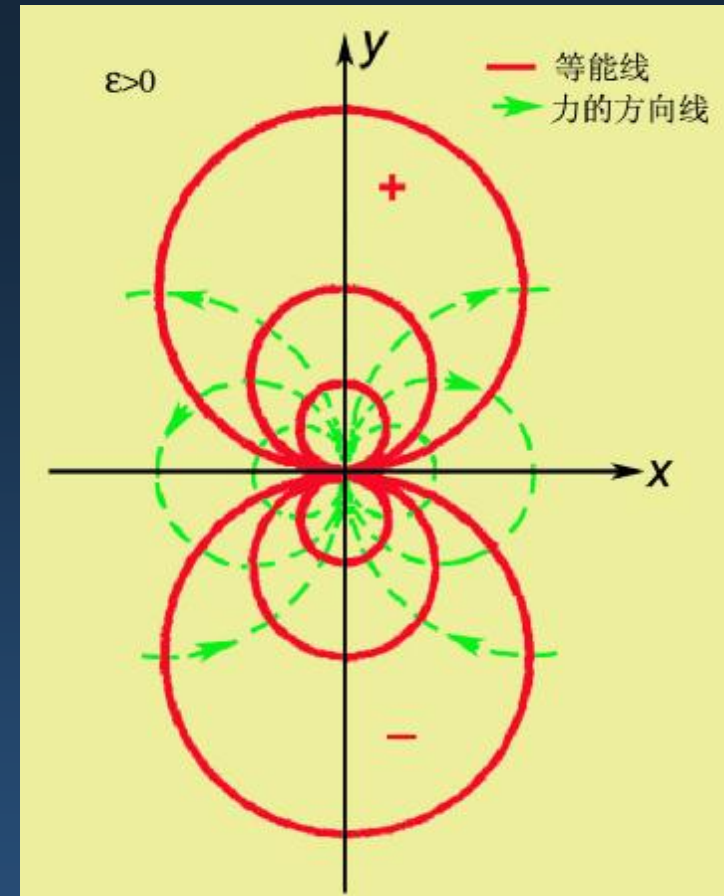
$$A = \frac{4(1+n)}{3(1-n)} Gb\epsilon R^3$$

作用能及力的分布：如图(与X轴相切)。当 $e>0$ 时，作用能在滑移面上侧是正的，在下侧是负的。等能线的梯度就是交互作用力，力的轨迹是与原点及y向相切的圆，驱使溶质原子由滑移面上侧运动到下侧。若 $e<0$ 时，则情况相反。

溶质原子浓度分布遵从Boltzmann分布

$$c(r, q) = c_0 \exp\left(-\frac{U(r, q)}{kT}\right) = c_0 \exp\left(-\frac{A \sin q}{rkT}\right)$$

↓
平均浓度



Cottrell气团的作用：对运动的位错钉扎。

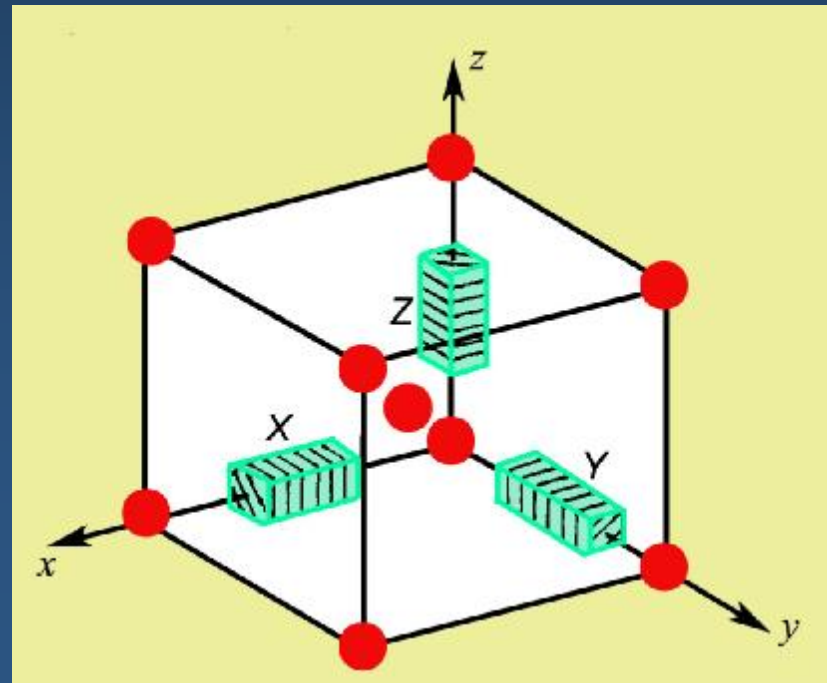
若位错运动很慢，气团能扩散跟上，这时气团拖曳力很小；
若位错运动很快，位错摆脱气团，这时气团对位错的阻力也很小；
位错中速运动时，位错强迫拖着气团一起运动，此时阻力最大。

Snoek气团：位错周围溶质原子有序分布

出现原因：当溶质原子引起的畸变是**非球形对称**时，切应力和它会有交互作用。

分析：BCC结构间隙固溶体的溶质原子处在八面体间隙，引起的畸变是**四方性的**（如碳在 α -Fe中）。在 α -Fe中，碳随机分布在 $[1/2\ 0\ 0]$ ， $[0\ 1/2\ 0]$ 及 $[0\ 0\ 1/2]$ 三种等效位置，这三种位置的最大畸变轴分别是 x ， y 和 z 轴。在螺位错的切应力作用下，这三种位置的溶质原子和位错的交互作用能不同。溶质原子都会跳到交互作用能最低的位置上去，使得溶质原子在位错附近呈有序分布，这就是**Snoek效应**。

形成气团只需跳动短的距离而不需长程扩散，故在很短时间内完成。同样，Snoek气团对位错滑移亦有钉扎作用，它的作用和Cottrell气团同等强烈。在高温时，因原子有序跳动太快，Snoek气团的作用就不明显了。



6.9.3 位错与溶质原子的化学交互作用（铃木Suzuki气团）

产生原因：

FCC结构的**层错**相当于有一薄层六方结构，溶质原子在层错和基体两部分的平衡浓度不同，这种不均匀分布阻碍位错运动。

在层错中富集的浓度：

$$c_1 = \frac{c_0 \exp(H/kT)}{1 - c_0 + c_0 \exp(H/kT)}$$

条件：溶质、溶剂在FCC结构和六方结构中构成**理想溶液**。

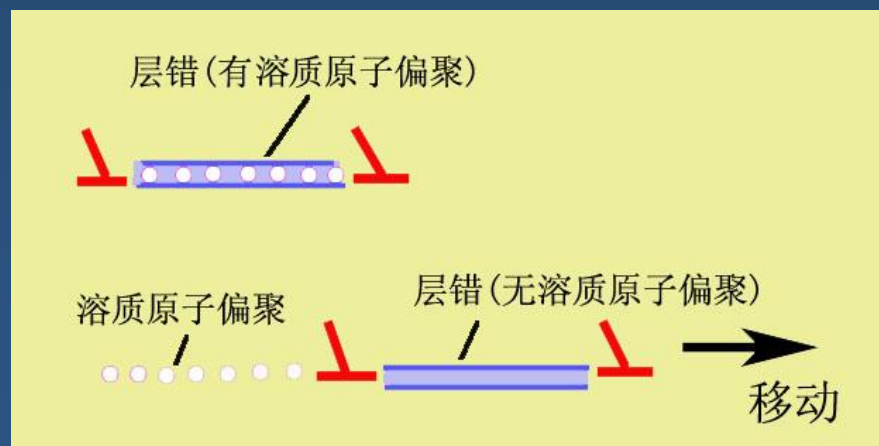
符号意义 c_0 ：平均浓度； $H=W(g_A-g_B)/h$ ； g_A 和 g_B 分别是纯A和纯B的层错能； W 是原子体积； h 是层错厚度。

气团对外界作用：

要把具有铃木气团的扩展位错拉出脱离气团时，引起的吉布斯自由能变化 ΔG 为


$$DG = \frac{h}{W} d_0 [(G^f - G^h)_{c_0} - (G^f - G^h)_{c_1}]$$

d_0 ：扩散位错平衡宽度



该能量变化必须由外力做功来补偿。

外应力使单位长度扩展位错移动 d_0 后就摆脱气团，做功为 tbd_0


$$tb = \frac{h}{W} [(G^f - G^h)_{c_0} - (G^f - G^h)_{c_1}] \leftarrow \text{自由能变化}(d_0 \text{ 削去})$$

代入计算的 c_0 和 c_1 浓度下的自由能，得

扩展位错运动附加的切应力

$$t = \frac{hH}{bW} \frac{c_0(c_0 - 1)[1 - \exp(H/kT)]}{1 - c_0 + c_0 \exp(H/kT)}$$

说明：化学交互作用对强度的贡献比弹性交互作用小，但弹性交互作用随温度上升而减小，而铃木效应不大随温度变化，故在高温时它显得比较重要。

本章小结

- 研究位错的意义；位错的本质、特征、类型、组织形貌；
- 位错的应力场、能量；
- 位错受力 → 线张力/P-N力/外力/渗透力/映像力/其它位错

- 位错的交互作用 →
 - 与点缺陷：气团
 - 与线缺陷：长程、短程；
 - 与面缺陷：塞积

- 位错的运动 → 滑移
攀移 → 塑变量宏观，微观弯结/割阶；
平衡组态；

- 位错的萌生与增殖 → 夹杂；单、双边F-R源

- 实际晶体中的位错 →
 - FCC → 全位错
 - BCC → 肖克来位错
 - HCP → 弗兰克位错 →
 - 层错
 - 扩展
 - 面角位错