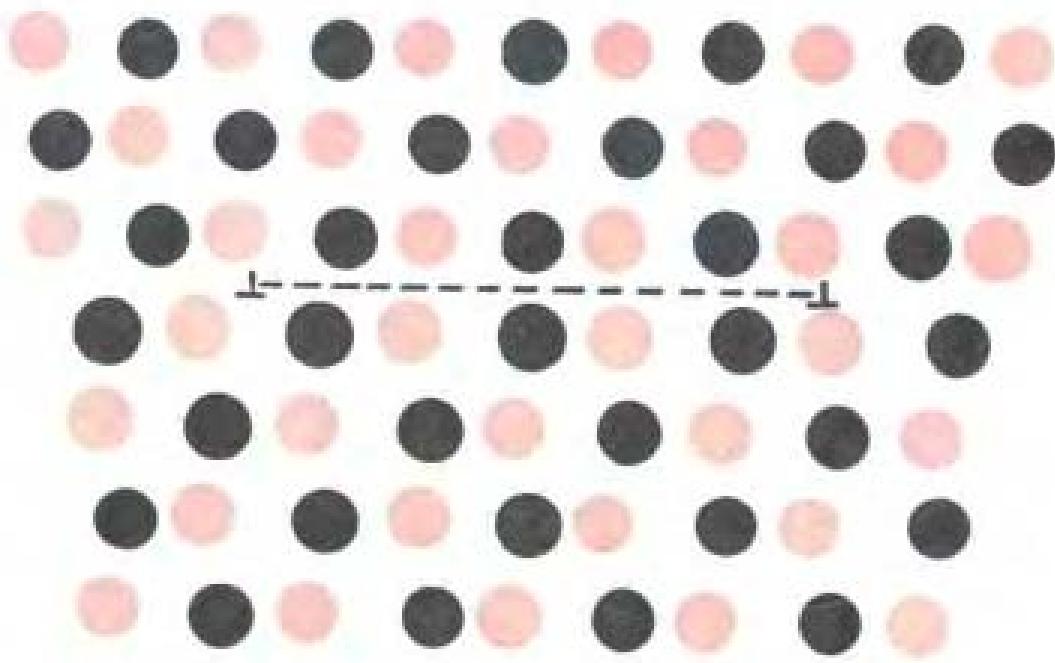


哈尔滨工业大学研究生教材

DISLOCATIONS AND STRENGTHENING
MECHANISMS OF METALS



杨德庄 编著

位错与金属强化机制

哈尔滨工业大学出版社

位错与金属强化机制

杨德庄 编著

哈尔滨工业大学出版社

内 容 提 要

本书阐述位错理论的基本概念，探讨各种强化机制的微观力学本质，为充分发挥金属材料的性能潜力提供理论依据。全书共分七章，主要内容包括：位错的基本性质及在弹性介质中的行为，晶体中位错的行为，位错强化机制，晶界强化机制，固溶强化机制，第二相强化机制，以及强化机制在金属材料组织设计中的应用等。

本书是针对金属材料及热处理专业硕士研究生学习金属强化理论的需要而编写的，也可供有关从事金属材料专业的工程技术人员参考。

位错与金属强化机制

杨德庄 编著

哈尔滨工业大学出版社出版
新华书店首都发行所发行
哈尔滨建筑工程学院附属印刷厂印刷

开本787×1092 1/16 印张13.5 字数310 000
1991年8月第1版 1991年8月第1次印刷
印数1—2000

ISBN 7-5603-0336-6/TG·24 定价：3.85元

前　　言

金属强度问题是金属物理学科中的一个重要领域。位错理论的发展为深刻理解金属的强化机制提供了微观理论基础。本书是针对金属材料及热处理专业硕士研究生学习金属强化理论的需要而编写的，也可供有关工程技术人员参考。主要目的是在深入理解位错理论的基础上，建立强化的物理模型，为探讨金属材料的强化途径以充分发挥性能潜力提供理论依据。

培养建立理论模型的能力是硕士研究生学习阶段的重要任务。要善于从所研究的复杂现象中找到其物理本质，并力求作到定量描述。这是一种抽象思维的能力。是否具有这种能力应该作为区别研究生与本科生的重要标志。本书着眼于引导学习前人用以建立金属材料强化机制的方法，启发思路，开阔视野，以求举一反三。

本书前两章旨在本科生阶段已学过内容的基础上，加深对位错基本概念的理解，为进一步探讨强化机制打下必要的基础。后四章分别针对不同强化机制加以具体论述。论述中主要以分析问题为主，对在有关本科生教科书中涉及较多的内容不再简单重复，不求系统的完整性。最后一章讨论强化机制应用的基本思路。

在本书定稿过程中，费维栋讲师曾参予有关文字的整理与审阅工作，并提出许多宝贵意见，在此表示衷心的感谢。

由于编者水平有限，编写时间仓促，书中难免有不妥之处，敬请读者批评指正。

编　　者

1990年12月



作者简介

杨德庄，男，
1937年6月生，教授（博士导师），
哈尔滨工业大学金属材料及热处理教研室主任。1960年
毕业于哈工大机械工艺系金相专业。
1982年至1984年，美国科罗拉多矿冶学院冶金工程系访问
学者；1990年6月
至12月，美国弗吉尼亚大学材料科学系高级访问学者。
长期从事金属材料微观结构与力学行
为研究，研究领域涉及双相钢、铝-
锂合金及金属间化
合物等。已在国内外刊物上发表论文
50余篇。合编或主
编《金属材料学》、
《钢的形变热处理》
及《材料与力学治
金》等教材和专著
5种。

目 录

第一章 位错的基本性质及在弹性介质中的行为	1
§ 1-1 位错的定义及柏氏矢量	1
一、位错的定义	1
二、柏氏回路与柏氏矢量	2
三、柏氏矢量的守恒性	3
四、弗兰克处理柏氏回路和柏氏矢量的方法	4
§ 1-2 位错的几何性质与运动特性	5
一、刃型位错	5
二、螺型位错	6
三、混合位错	7
四、位错环	8
§ 1-3 位错的弹性性质	9
一、复杂应力状态下应力与应变的关系	10
二、位错的应力场	12
三、位错的弹性应变能	17
四、位错的线张力	19
§ 1-4 作用在位错上的力	21
一、作用在刃型位错上的力	22
二、作用在螺型位错上的力	23
三、作用在混合位错上的力	24
§ 1-5 位错间作用力	25
一、平行螺型位错间的作用力	25
二、平行刃型位错间的作用力	26
三、两相互垂直螺型位错间的作用力	28
四、螺型位错与相互垂直的刃型位错间的作用力	29
§ 1-6 位错与界面的交互作用	30
一、位错与自由表面的交互作用	30
二、不同弹性介质界面与位错的交互作用	32
参考文献	33
第二章 晶体中位错的行为	35
§ 2-1 派-纳位错模型与派-纳力	35

一、派-纳位错模型	35
二、Peierls位错的能量与派-纳力	39
§ 2-2 位错的弯折与割阶	42
一、弯折	42
二、割阶	46
§ 2-3 全位错的能量条件与滑移系统	49
一、Frank 能量准则	50
二、晶体的滑移系统	51
§ 2-4 扩散滑移与攀移机制	52
一、弯折的扩散滑移	52
二、位错的扩散攀移	54
三、割阶位错的攀移	55
四、位错心扩散引起的攀移	57
§ 2-5 割阶位错的滑动	59
一、保守性滑动	59
二、非保守性滑动	61
§ 2-6 面心立方晶体中的层错与部分位错	63
一、FCC 点阵中层错的类型	64
二、FCC 点阵中的部分位错	66
三、FCC 点阵中的扩展位错	68
四、Thompson记号	71
§ 2-7 面心立方晶体中几种重要的位错反应	73
一、Lomer位错	73
二、压杆位错	74
三、Lomer-Cottrell位错锁	76
四、会合位错	77
五、扩展偶极子	79
六、扩展位错结点	79
§ 2-8 面心立方晶体中扩展位错的运动	80
一、扩展位错运动的派-纳障碍	80
二、扩展位错的滑移	81
三、扩展位错的交滑移	82
四、扩展位错的攀移	83
五、扩展割阶的运动	84
§ 2-9 密排六方晶体中的层错与位错反应	85
一、密排六方晶体中的层错	85
二、密排六方晶体中的部分位错	86
三、密排六方金属中位错的扩展	91

§ 2-10 体心立方晶体中的层错与位错反应	92
一、体心立方晶体中的层错	92
二、体心立方晶体中的部分位错	94
三、体心立方晶体中的扩展位错	95
四、体心立方晶体中螺型位错心的结构	97
五、体心立方晶体中的全位错合成反应	98
§ 2-11 过饱和空位对位错组态的影响	98
一、过饱和空位的形成机制	99
二、过饱和空位对位错组态的影响	100
参考文献	105
第三章 位错强化机制	107
§ 3-1 金属单晶体塑性变形的一般特点	107
一、单晶体塑性变形的基本方式	107
二、Schmid 定律与滑移系统的开动	109
三、金属单晶体的应力-应变曲线	111
四、金属单晶体加工硬化行为	114
§ 3-2 位错增殖机制	115
一、Frank-Read 源位错增殖机制	115
二、双交滑移位错增殖机制	116
三、空位盘位错增殖机制	117
四、位错增殖的极轴机制	117
五、晶界增殖位错机制	119
§ 3-3 位错的交互作用	119
§ 3-4 位错塞积	120
§ 3-5 孪生的位错机制	123
一、孪生位错	124
二、孪晶形成机制	125
三、发射位错	126
四、滑移位错与孪晶界的交互作用	127
§ 3-6 位错强化的数学表达	128
一、位错运动阻力的估算	128
二、流变应力的表达式	131
§ 3-7 应变速率与位错运动速率关系的推导	131
§ 3-8 温度及应变速率对流变应力的影响	133
参考文献	134
第四章 晶界强化机制	135
§ 4-1 金属多晶体塑性变形条件	135
§ 4-2 晶界的位错模型	136

一、晶界结构模型	136
二、晶界与位错的交互作用	140
三、晶界的运动	142
四、晶界发射位错的机制	143
§ 4-3 双晶体变形模型	144
一、双晶体变形条件	144
二、双晶体弹性变形的不匹配性	145
三、双晶体塑性变形的不匹配性	146
§ 4-4 晶界强化作用	147
一、直接强化作用	147
二、间接强化作用	147
§ 4-5 晶界强化的数学表达	148
§ 4-6 亚晶界及相界的强化效应	150
一、亚晶界强化	150
二、相界强化	151
参考文献	151
第五章 固溶强化机制	153
§ 5-1 错配球模型	153
一、无限大基体中的应力-应变场	153
二、球内的应力-应变场	155
三、在有限大基体中的错配球	156
四、 δv 、 Δv 与 δV 的关系	158
五、错配球模型的适用性	159
§ 5-2 置换式溶质原子与位错的弹性交互作用	160
一、置换式溶质原子的错配球效应	160
二、溶质原子间的弹性交互作用	161
三、溶质原子与刃型位错间的弹性交互作用	162
四、溶质原子与螺型位错间的弹性交互作用	164
§ 5-3 间隙式溶质原子与位错的弹性交互作用	164
一、FCC结构中间隙原子的错配球效应	164
二、BCC结构中间隙原子的错配球效应	165
三、 α -Fe中碳原子之间的弹性交互作用	166
四、 α -Fe中碳原子与螺型位错的弹性交互作用	166
五、 α -Fe中碳原子与刃型位错的弹性交互作用	167
§ 5-4 溶质原子与位错的化学相互作用	167
§ 5-5 位错与有序分布的溶质原子间的交互作用	170
一、短程有序引起的强化	170
二、长程有序引起的强化	171

§ 5-6 均匀固溶强化.....	174
一、稀固溶体的均匀固溶强化.....	175
二、浓固溶体的均匀固溶强化.....	176
参考文献.....	177
第六章 第二相强化机制.....	178
§ 6-1 质点障碍模型.....	178
一、Orowan 模型.....	178
二、Friedel 模型.....	179
§ 6-2 沉淀强化机制.....	181
一、共格应变强化.....	182
二、化学强化.....	183
三、有序强化.....	184
四、模量强化.....	185
五、层错强化.....	186
六、派-纳力强化	187
§ 6-3 弥散强化机制.....	188
一、有效粒子间距的确定.....	188
二、Orowan公式的修正.....	189
三、硬粒子与基体变形不协调对强化的影响.....	190
§ 6-4 第二相强化合金的加工硬化行为.....	191
一、沉淀强化合金的加工硬化行为.....	192
二、弥散强化合金的加工硬化行为.....	192
§ 6-5 纤维强化机制.....	195
一、纤维增强复合材料的变形行为.....	195
二、长纤维增强复合材料的抗拉强度.....	196
三、短纤维增强复合材料的抗拉强度.....	197
参考文献.....	198
第七章 强化机制在金属材料组织设计中的应用.....	199
§ 7-1 晶界强化效应的利用.....	199
一、晶界强化在单相合金中的利用	199
二、晶界强化在复相合金中的利用	200
§ 7-2 固溶强化效应的利用	200
§ 7-3 可变形粒子强化效应的利用	201
§ 7-4 不可变形粒子强化效应的利用	203
§ 7-5 纤维强化效应的利用	204
§ 7-6 加工硬化效应的应用	204
参考文献.....	204

第一章 位错的基本性质及在弹性介质中的行为

位错的概念早在本世纪初就已提出^[1]，但对它的研究，无论是理论上还是实验上，主要是在30年代^[2-4]以后才得到长足的发展。现在，位错理论已影响到金属材料科学的各个领域，成为分析金属材料许多重要行为，特别是力学行为的理论依据^[5-8]。

金属强化的着眼点是提高塑性变形抗力。塑性变形的元过程是位错运动，因而强化金属材料的基本途径就是造成某种障碍用以阻碍位错运动。所以，深入理解位错的基本性质与行为，对于建立金属强化机制将具有重要的理论和实际意义。

§ 1-1 位错的定义及柏氏矢量

一、位错的定义

1934年泰勒(G.I.Taylor)、波朗依(M.Polanyi)和奥罗万(E.Orowan)三人几乎同时将位错的概念引入晶体，用以同晶体的不均匀滑移变形相联系。特别是泰勒以较清晰的图象表明，位错是一种同晶体内局部原子排列畸变有关的线性晶体缺陷。晶体滑移不是整体进行，而是在较小的切应力作用下逐步发生。在逐步滑移的任何阶段，必然在滑移面内存在一条围绕着已滑移区的边界，通常便称之为滑移位错。由这个定义可知，位错线包围着滑移面内的一个面积，因而必然在晶体内形成一个闭合的回线，或者终止在晶体的自由表面，也可以与晶体内任何界面相通。

晶体中位错线的一般形式如图1-1所示。设想将晶体沿画阴影的S面剖开，再将分开的上下两面 S_1 和 S_2 相对作一个刚性位移 \vec{b} 。矢量 \vec{b} 可以是晶体的任一点阵平移矢量。显然，此操作会使 S 面上不平行于 \vec{b} 的地方出现空隙或原子的重叠。再设想将重叠的原子去掉或在空隙处填入同种质料的晶体后，把经过相对滑移的两个截面 S_1 和 S_2 胶合起来，并撤去加在截面上的外力。

由于 \vec{b} 是点阵矢量，使胶合后在 S 面上不留下任何痕迹，但 S 面的周界C由于是滑移区与未滑移区的分界线，其附近的原子组态必然会发生某种错排。其错排程度与相对滑移矢量 \vec{b} 有关。在这里，滑移矢量

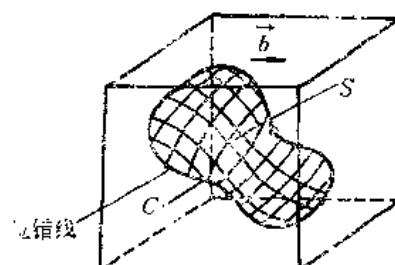


图1-1 一般形式的位错线

由上所述可见，柏氏回路的作用在于把位错中心周围原子间的畸变叠加起来，并用柏氏矢量的形式加以表达。只要柏氏回路所包含的位错没有变更，则柏氏矢量与柏氏回路起点的选择无关。由此又可以将位错定义为：在晶体中围绕某一缺陷画其柏氏回路时，所得柏氏矢量不为零者，即称此晶体缺陷为位错。可以用位错线的单位矢量 ξ 和柏氏矢量 b 综合表征位错线的特征。例如，当 $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = 0$ 时为刃型位错。而对右螺型位错， $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = b$ ；对左螺型位错， $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = -b$ 。

三、柏氏矢量的守恒性

柏氏矢量代表着位错线最基本的、不变的特征，具有守恒性。主要表现在以下几方面：

1. 位错线在中途分叉时，分叉前位错的柏氏矢量等于分叉后诸位错柏氏矢量的和。如图1-3所示，位错线1分叉为2和3两段，则2和3两位错的柏氏矢量之和 $\vec{b}_2 + \vec{b}_3$ 应与位错线1的柏氏矢量 \vec{b}_1 相等。位错线1的柏氏回路为 B_1 ，若前进并扩大可与位错线2和3的柏氏回路 B_{2+3} 相合，而回路 B_{2+3} 的柏氏矢量为 $\vec{b}_2 + \vec{b}_3$ ，则 $\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$ 。

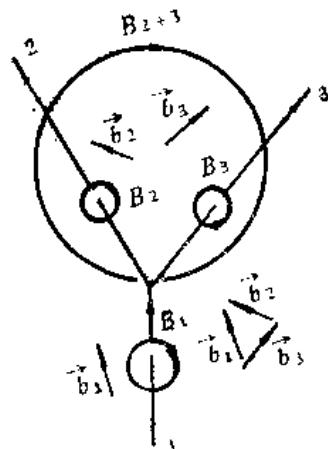


图1-3 位错中途分叉前后柏氏矢量守恒

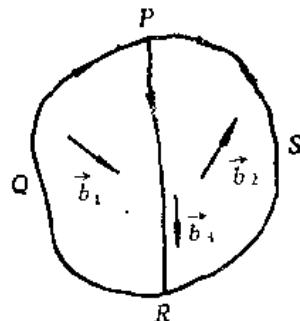


图1-4 位错环只能有一个柏氏矢量

2. 一个位错环只有一个柏氏矢量。这可以用反证法加以证明。如图1-4所示，先假定位错环PQRS有两个不同的柏氏矢量，

即 PQR 的柏氏矢量为 \vec{b}_1 ， PSR 的柏氏矢量为 \vec{b}_2 。按位错的基本性质， PQR 和 PSR 两区域的变形就应有所不同，以致在两区域之间必须有一位错线加以分开，如 PR 线。并且，该 PR 线的柏氏矢量应为 $\vec{b}_3 = \pm (\vec{b}_1 - \vec{b}_2)$ 。如欲消除 PR 这条位错

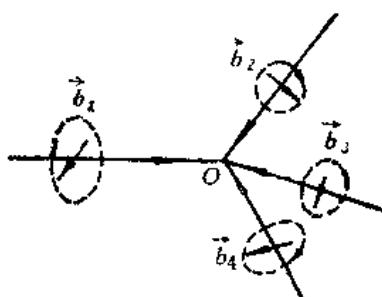


图1-5 指向结点的各位错线的柏氏矢量之和为零

线，必须 $\vec{b}_3 = 0$ ，则 $\vec{b}_1 = \vec{b}_2$ ，亦即 $PQRS$ 位错环只有一个柏氏矢量。

3. 几条位错线相遇一点（称为位错的结点）时，朝向结点的各位错的柏氏矢量之和等于离开结点的位错的柏氏矢量之和。显然这一点与1.是等价的，只是叙述有所不同。因而若在结点处相遇的各位错的方向都是指向或离开结点时，则这些位错线的柏氏矢量之和为零，如图1-5所示。

四、弗兰克处理柏氏回路和柏氏矢量的方法

弗兰克 (F.C.Frank) 在1951年提出了一种比较严格的处理柏氏回路和柏氏矢量作方法^[2]。其基本思路是取两个晶体，一个是非完整晶体，其中存在着位错；另一个是的为参考的完整晶体，其晶体结构与实际的非完整晶体相同。在两个晶体中各作一个相同的四边形，其四个顶点为晶体中相邻的四个原子，则两个晶体中的四个原子分别相对应。如图1-6(a)中1、2、3、4为实际晶体中的四个原子；图1-6(b)中1'、2'、3'、4'为参考晶体中四个相对应的原子。先在实际晶体中：放弃原子1，取邻近的原子5，与2、3、4原子构成一新四边形2 3 4 5。与此相似，在参考晶体中放弃原子1'，取与实际晶体中原子5相对应的原子5'，构成新四边形2' 3' 4' 5'。因此，在两晶体中，逐步放弃一个原子，取邻近原子，再分别将两晶体中所放弃的原子连成线，便构成两个相似的回路。对实际晶体中所选择的回路必须避开位错中心，要在所谓“好”的区域加以选择。回路的方向需视位错线的方向依照右手螺旋法则而定。经这样操作的结果，实际晶体中回路围绕着位错线形成闭路之后，在参考晶体中的回路尚没有封闭，或许闭路已过头。弗兰克将实际晶体中围绕着位错的回路称为柏氏回路，而将在参考晶体中从相当于柏回路中最后一点到起点的矢量称为柏氏矢量。

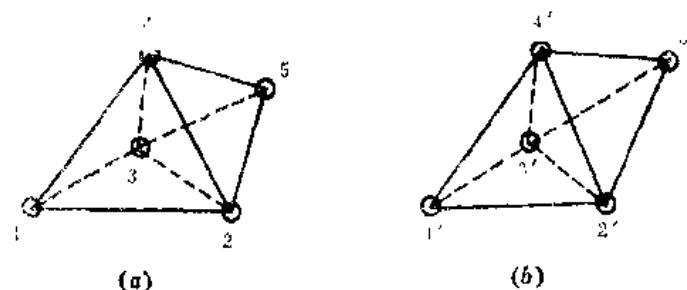


图1-6 在(a)非完整晶体与(b)参考晶体中由相应的四个原子所组成的四边形

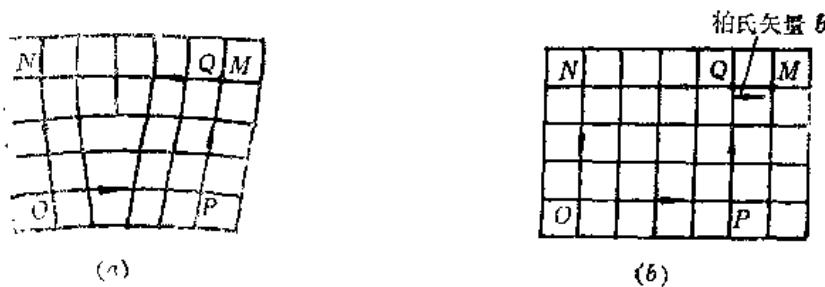


图1-7 围绕(a)实际晶体中位错与(b)完整晶体的柏氏回路

如图1-7所示，非完整晶体中柏氏回路从M到Q已形成一闭路，而在参考晶体中回路的起点M和终点Q不重合，故需从终点M引一矢量 \overrightarrow{QM} 使回路闭合。这就是非完整晶体中位错的柏氏矢量。由于此处晶体为立方体，故不必用上述两个相应的四边形而在两个晶体中得到相似的回路。但需注意，如此得出的柏氏矢量与前面直接由柏氏回路所得到的柏氏矢量方向相反。通常对柏氏矢量的方向容易搞混，需要选定一种求柏氏矢量的方法。

§ 1-2 位错的几何性质与运动特性

刃型位错与螺型位错是位错的两种基本形式。由这两种位错又可进一步组成混合位错以及位错环等多种常见的位错形态。下面简要回顾这几种常见的位错形式及其几何性质和运动特性。

一、刃型位错

1. 几何性质

刃型位错的特点是其位错线与柏氏矢量相垂直。从几何形状上看，刃型位错可以是一条直线，也可以是在一个平面上任何形状的曲线。但实际上，位错线不是一种严格的几何线，一般应具有以下三个特点：

1) 有一定宽度。所谓位错线实际上是具有一定宽度的原子畸变区域，其宽度常以原子间距畸变超过正常值四分之一的区域为限，一般为2~5个原子间距。

2) 有一定的原子畸变结构。对于刃型位错而言，原子畸变结构的特点是表现为有一个多余的半原子面，使点阵畸变具有面对称性。若多余的半原子面位于晶体的上半部时，称为正刃型位错；反之，若多余半原子面位于下半晶体时，称为负刃型位错。

3) 有一定的方向。这是为了分析问题方便而人为加以规定的。刃型位错的方向可由位错的正负号和柏氏矢量的方向由右手定则决定，如图1-8所示。由位错线的柏氏矢量的守恒性可知，在一条连续的位错线中，位错线的方向必须是一顺的。

2. 运动特性

一般而言，刃型位错只有在切应力作用下才能运动。确切地说，此切应力必须平行于刃型位错的柏氏矢量，并且要作用在滑移面上。由位错线与柏氏矢量构成的平面叫做滑移面。刃型位错运动时，有固定的滑移面，只能平面滑移，不能交叉滑移。

刃型位错运动的方向平行于柏氏矢量，垂直于位错线。由刃型位错运动所引起的晶体变形方向平行于位错线移动的方向，在位错线移出的晶体表面上形成滑移台阶，其大

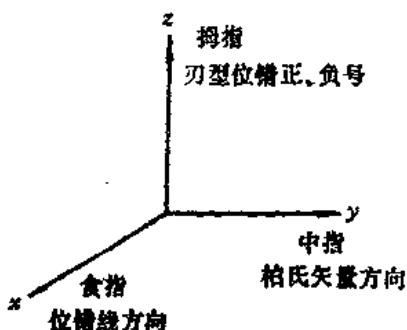


图1-8 刃型位错的正负号、柏氏矢量与位错线之间的右手定则关系

小等于柏氏矢量的量值。

刃型位错有较大的滑移可动性。这是由于刃型位错使点阵畸变有面对称性所致。在滑移面上，位于多余半原子面两侧的原子对位错中心原子的作用力相平衡，稍一加力，便可使位错中心滑移。而且，位错中心附近原子已有滑动，使位错中心滑移时仅需附近的原子在位置上稍有变动即可。实际上，在刃型位错移动过程中所涉及的原子移动距离远小于一个原子间距，如图1-9所示。

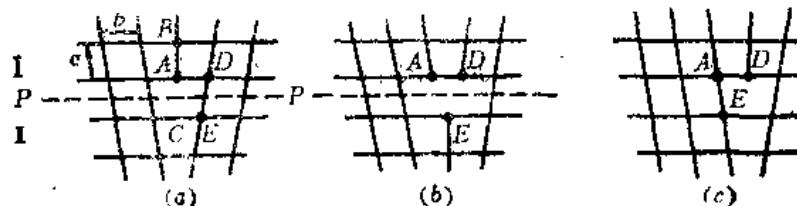


图1-9 刃型位错通过滑移运动

刃型位错有两种运动形式。一是滑移，位错线在滑移面上运动，不涉及物质迁移或原子扩散，属于保守运动，可在一般条件下进行。二是攀移，位错线垂直于滑移面运动，涉及物质的迁移或原子扩散，属于非保守运动，一般需在高温下进行。

二、螺型位错

1. 几何性质

螺型位错的主要特征是位错线平行于柏氏矢量。从几何形状上看，螺型位错一定是一条直线，这是满足其柏氏矢量守恒性的必然结果。如图1-10所示，螺型位错可由晶体的一部分（如右半部）的上下两部分的原子作前后相对位移一个原子间距而成。在左、右两半晶体交界处造成原子错排，可以把错排原子连成一个矩形的螺旋线。所以，位于螺型位错中心区的原子都排列在一个螺旋线上，而不是一个原子列，使点阵畸变具有轴对称性。

由螺型位错造成原子错排的结果是使与位错线垂直的原子面成为绕位错线旋转的螺旋面，如图1-11所示。按照螺旋的方向，可将螺型位错分为右手螺型位错与左手螺型位错两种。右手螺型位错的柏氏矢量与位错线的方向相同；反之，左手螺型位错的柏氏矢量与位错线的方向相反。

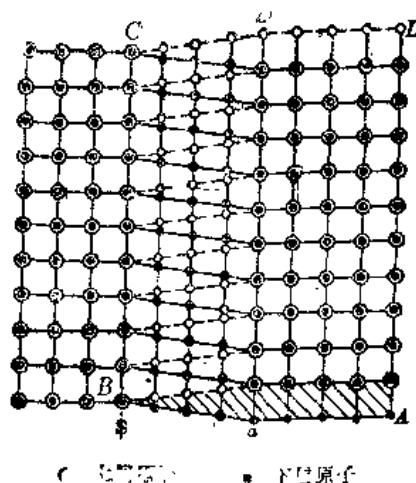


图1-10 螺型位错原子排列顶视图

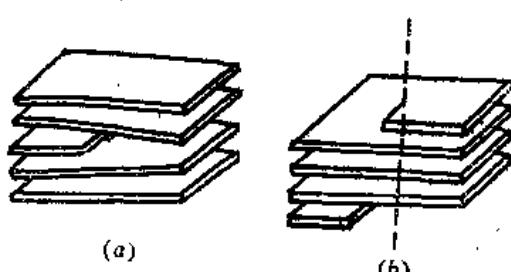


图1-11 (a)刃型位错与(b)螺型位错的晶面形态示意图

2. 运动特性

螺型位错也在与柏氏矢量平行的切应力的作用下运动，切应力的方向与位错线平行。螺型位错运动的方向垂直于位错线或其柏氏矢量，而由此产生的晶体变形的方向与位错线运动的方向不同，平行于柏氏矢量。螺型位错扫过晶体时，在垂直于位错线的表面上形成台阶，或留下滑移痕迹，如图1-12所示。

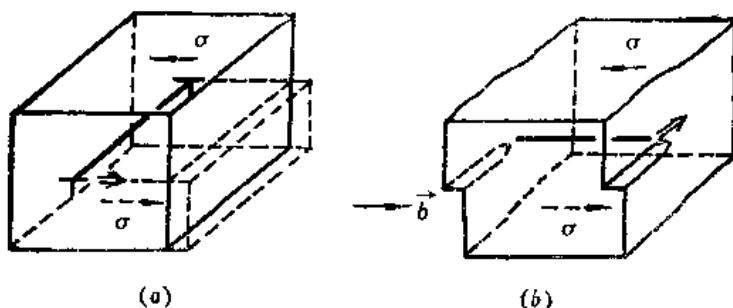


图1-12 刃型(a)与螺型(b)位错在外力作用下运动时在晶体表面上形成台阶

螺型位错的滑移面可以改变，有不唯一性。螺型位错能够在通过位错线的任一平面上滑移，表现出易于交滑移的特性。

同刃型位错相比，螺型位错的易动性较小。前面已谈到，螺型位错使点阵畸变具有轴对称性，位错中心的原子绕螺旋线分布，故与刃型位错使点阵畸变有面对称性不同，由位错中心两侧的原子在滑移方向上对位错中心的作用力不能完全抵消。这一点同以后估算位错运动的晶格阻力时，螺型位错因其宽度较小而使派-纳力较大相一致。

另外，由于没有与滑移面垂直的多余的半原子面，使螺型位错只能滑移，不能攀移。螺型位错只能作保守运动，而不会涉及物质的迁移。

三、混合位错

实际晶体中，大量存在的位错形式是混合位错。其主要特点是位错线与柏氏矢量即不垂直也不平行。位错线的形状可以是直线，也可以是曲线。

可以设想，一个混合位错 AB 是由许多个纯螺型位错和纯刃型位错交替组成，相应的柏氏矢量都是 \vec{b} ，如图1-13(a)所示。也可以直接将混合型位错分解成纯螺型位错和纯刃型位错两部分，如图1-13(b)所示。图中位错线 AB 与其柏氏矢量的夹角为 θ ，可将 \vec{b} 分解成为与 AB 垂直的分量 \vec{b}_\perp （刃型部分）和平行的分量 \vec{b}_\parallel （螺型部分），则：

$$\vec{b} = \vec{b}_\perp + \vec{b}_\parallel \quad (1-3)$$

于是，混合位错 AB 可以看成是刃型位错与螺型位错的叠加。它们各自在混合位错中所占的分量，取决于柏氏矢量和位错线的夹角 θ 。对刃型位错分量： $\vec{b}_\perp = \vec{\xi} \times (\vec{b} \times \vec{\xi})$ ；对螺型位错分量： $\vec{b}_\parallel = (\vec{b} \cdot \vec{\xi}) \vec{\xi}$ 。

这两种分解方法究竟哪种合理，要根据分解后位错的能量变化来判断。前一种分解方法使位错线呈“之”字形，长度明显增加，对应的位错线自然要较后者为大。所以，混合位错分解时，通常采取后一种直线方式。

错所具有的能量，位错线张力，位错间的作用力，以及位错与其它晶体缺陷之间的相互作用等一些特性。为此，一般采用位错的连续介质模型，把晶体作为各向同性的弹性体来处理，直接采用虎克定律和连续函数进行理论计算。对螺型位错可用如下办法建立连续介质的弹性切变模型：在半径为 R 的弹性圆柱体中心挖一个半径为 r_0 的小孔，沿着轴线方向将其一半切开，然后沿着切开面顺着轴线方向相对位移 b ，再将切开面粘合起来，便形成了一个螺型位错，如图1-19(a)所示。同样，也可以用类似的办法建立刃型位错的连续弹性介质模型，如图1-19(b)所示。在构成这种连续介质模型时，要在中心挖一个半径为 r_0 的圆孔的原因是避免位错中心畸变很大，以致不服从虎克定律。所以，用弹性力学处理问题时，要将位错中心区去除是合理的。至今对位错中心的细节尚不清楚，用连续介质模型所导出的结果不能应用于位错中心区，但对位错中心以外的区域还是适用的。这一点已为很多实验事实所证实。

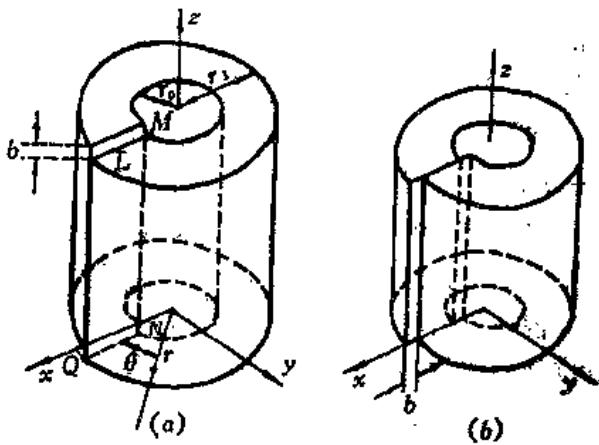


图1-19 位错的连续介质模型

(a)螺型位错 (b)刃型位错

一、复杂应力状态下应力与应变的关系

1. 应力和应变分量

在实际受力的物体中，应力难于均匀分布，各点的应力状态不同。如要研究某一点的应力状态，可以该点为中心截取一个极小的单元体，如图1-20所示。在单元体的六个面上都有内应力的作用。由于单元体取得极小，可以认为在每个面上内应力是均匀分布的。在一般情况下，每个平面上作用的内力都是任意取向的，可以在直角坐标系中分解成方向与 X 、 Y 、 Z 轴平行的三个分量。与之相应，每个平面上作用三个应力分量，其中一个与小平面垂直，是正应力分量；另两个与其平行，是切应力分量。由于小单元体处于平衡状态，在相对应的两面上作用的内力大小相等而方向相反，各应力分量也大小相等而方向相反。因此，为了表示一点的应力状态需要有九个应力分量（见图1-20）。又根据小单元体所受力偶矩平衡条件，可得出

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_{x,y} = \sigma_{y,x} \\ \sigma_{y,z} = \sigma_{z,y} \\ \sigma_{z,x} = \sigma_{x,z} \end{array} \right\} \quad (1-4)$$

其中 σ_{ij} ($i, j = x, y, z$) 表示在 i 平面上平行于 j 方向的应力分量。所以，对任意点的应力状态，需要六个独立的应力分量来表征，即： $\sigma_{x,x}, \sigma_{y,y}, \sigma_{z,z}, \sigma_{x,y}, \sigma_{y,z}, \sigma_{z,x}$ 。其中前三个是正应力分量，后三个是切应力分量。

在一般情况下，受力物体中任意点的应变状态也需要用小单元体的应变分量来表示。

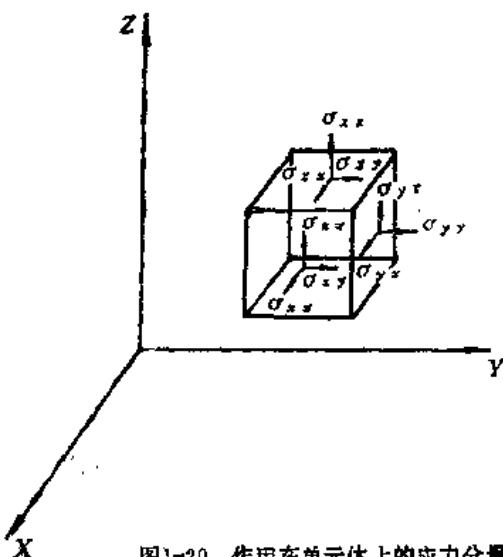


图1-20 作用在单元体上的应力分量

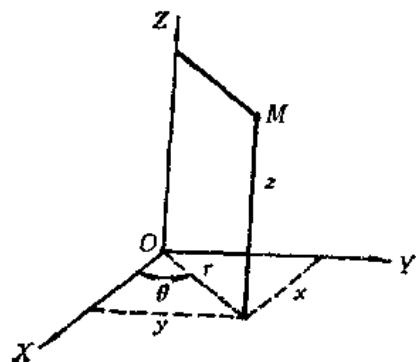


图1-21 直角坐标和圆柱坐标的关系

征。独立的应变分量也是六个，即： ϵ_{xxx} 、 ϵ_{yyy} 、 ϵ_{zzz} 、 ϵ_{xxy} 、 ϵ_{xyy} 、 ϵ_{xzz} 。

由于位错产生的畸变往往具有轴对称性，有时采用圆柱坐标系更为方便。如图1-21所示，某一点M的直角坐标可用圆柱坐标表示为：

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = z \quad (1-5)$$

反之，圆柱坐标也可用直角坐标表示为：

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \theta = \arctg \frac{y}{x}, \quad z = z$$

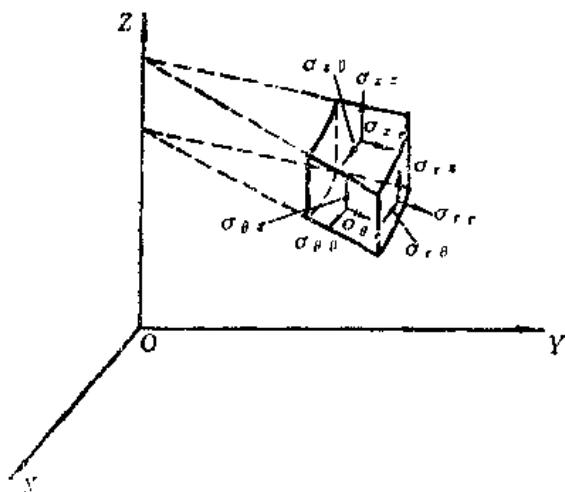


图1-22 圆柱坐标的正应力和切应力表示法
(1-6)

同样，在圆柱坐标系中，任意点的应力状态也可用三个正应力分量和三个切应力分量表示，如图1-22所示。

2. 广义胡克定律

一般说来，金属晶体是各向异性的，其弹性常数随晶体方向而变化，相应有21个独立的弹性系数分量（此时，弹性常数应作为张量来考虑）。随着晶体的对称性的提高，独立的弹性系数分量减少。例如，对六方晶体可减少到5个；对立方晶体，可减少到3个。对于各向同性介质而言，还可以进一步减少到仅有两个弹性系数分量。常用到的各向同性的弹性系数有：正弹性模数或杨氏模量（E）、剪切弹性模数或切变模量（G）、泊松系数（ν）、拉梅常数（λ）和体弹性模量（B）。这五个弹性系数间的相互关系如下：

$$E = \frac{G(3\lambda + 2G)}{G + \lambda} = \frac{9GB}{3B + G} = 2G(1 - \nu)$$

$$\left. \begin{aligned} \nu &= \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} = \frac{\lambda}{2(G + \lambda)} = \frac{E - 2G}{2G} \\ G &= \frac{E}{2(1 + \nu)} \\ \lambda &= \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} = \frac{2\nu G}{1 - 2\nu} \\ B &= -\frac{P}{e} = \frac{3\lambda + 2G}{3} \end{aligned} \right\} \quad (1-7)$$

式中 $P = -(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3 = -\sigma_{11}/3$, 称为内水静压力, 它在数值上与平均正应力(三个主应力的平均值)相等, 而方向相反。 $e = \Delta V/V = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$, 称为体应变, 它在数值上等于三个主应变之和。只有正应变才造成体应变, 而切应变不造成体积的变化。

因此, 对于各向同性的弹性体, 可通过以上弹性系数中的某两个加以联系, 建立应力-应变关系:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{11} &= (\lambda + 2G)\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22} + \lambda\varepsilon_{33} \\ \sigma_{22} &= \lambda\varepsilon_{11} + (\lambda + 2G)\varepsilon_{22} + \lambda\varepsilon_{33} \\ \sigma_{33} &= \lambda\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22} + (\lambda + 2G)\varepsilon_{33} \\ \sigma_{23} &= 2Ge_{23} \\ \sigma_{31} &= 2Ge_{31} \\ \sigma_{12} &= 2Ge_{12} \end{aligned} \right\} \quad (1-8)$$

或者,

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{11} &= -\frac{1}{E} [\sigma_{11} - \nu(\sigma_{22} + \sigma_{33})] \\ \varepsilon_{22} &= -\frac{1}{E} [\sigma_{22} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{33})] \\ \varepsilon_{33} &= -\frac{1}{E} [\sigma_{33} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})] \\ \varepsilon_{23} &= \frac{1}{2G}\sigma_{23} \\ \varepsilon_{31} &= \frac{1}{2G}\sigma_{31} \\ \varepsilon_{12} &= \frac{1}{2G}\sigma_{12} \end{aligned} \right\} \quad (1-9)$$

二、位错的应力场

1. 螺型位错的应力场

以上述连续弹性介质模型为基础, 可由位错所引起的相对位移出发求得应变, 再借

助虎克定律求得位错的应力场。

1) 无限大弹性介质中螺型位错的应力场

设在无限大的弹性介质中，有一右手螺型位错，如图1-19 (a)所示。这是在切开面LMNO上产生了大小为 b 的位移。由于其应力场和应变场具有轴对称性，采用圆柱坐标比较方便。取Z轴与位错线重合，则可以证明，在半径为 r 的圆柱面上任意一点的位移分量为：

$$u_z(r, \theta) = b \frac{\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \operatorname{tg}^{-1} \frac{y}{x} \quad (1-10)$$

和切应变为：

$$\varepsilon_{\theta z} = \frac{b}{4\pi r} \quad (1-11)$$

相应的切应力为：

$$\sigma_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad (1-12)$$

由于圆柱体只在Z方向产生位移，在X和Y方向没有位移，所以其余的应力分量都为零，即：

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

所以，螺型位错周围的应力场中不存在正应力分量，只有一个独立的切应力分量。确切地说，有两个切应力分量不为零， $\sigma_{\theta z}$ （在径向平面上平行于Z方向）和 $\sigma_{z\theta}$ （在垂直于Z轴的平面上垂直于半径方向）。螺型位错的应力场是平面应力状态，具有轴对称性。对于符号相反的左手螺型位错，各应力场分量的符号与上面讨论的右手螺型位错相反。由于应力分量的大小与该点到轴线的距离 r 成反比， $r \rightarrow 0$ 时则上述结果无意义。所以，一般将线弹性解不成立的区域叫做位错中心，其半径 r_0 常在 b 到 $4b$ 之间。

采用直角坐标时，则螺型位错的应力场可表达如下：

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} &= \sigma_{zz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{yz} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \\ \sigma_{xx} &= \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{yz} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (1-13)$$

2) 位于有限大圆柱体中心的螺型位错的应力场

当图1-19所示的圆柱体有限时，其圆柱面与两端面均为自由表面，相应的应力分量为零。所以，计算位错在有限大弹性介质中所产生的应力场时，还要考虑到边界条件的影响。

对位于有限大圆柱体中心的螺型位错而言， $\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} = 0$ ，可使由圆柱体表面给定的边界条件自然得到满足。然而，在两端面上，由于 $\sigma_{z\theta}$ 的存在，会产生使圆柱体扭转的力偶矩：

$$M_z = \int_0^{2\pi} \int_0^R r(\sigma_{z\theta} r dr d\theta) = \frac{GbR^2}{2} \quad (1-14)$$

于是，为满足边界条件应在两端面上附加力偶矩 M'_z 。其大小与 M_z 相等，而方向相反，如图1-23所示。由 M'_z 在圆柱体端面上产生附加应力 $\sigma'_{z\theta}$ ：

$$\sigma'_{z\theta} = -\sigma_{z\theta} = -\frac{Gb}{2\pi r} \quad (1-15)$$

其结果便可使端面上应力分量为零。但是，在圆柱体内要相应引起附加应力 $\sigma''_{z\theta}$ ，其大小与单位轴长上的扭转角 α 成正比，则

$$\sigma''_{z\theta} = \alpha Gr \quad (1-16)$$

所以

$$M'_z = \int_0^{2\pi} \int_0^R r(\sigma''_{z\theta} r dr d\theta) = \int_0^{2\pi} \int_0^R \alpha Gr^3 dr d\theta = \frac{\pi\alpha GR^4}{2} \quad (1-17)$$

又

$$M'_z = -M_z = -\frac{GbR^2}{2} \quad (1-18)$$

将(1-18)式代入(1-17)式得：

$$\alpha = -\frac{b}{\pi R^2} \quad (1-19)$$

所以

$$\sigma''_{z\theta} = -\frac{Gb\tau}{\pi R^2} \quad (1-20)$$

实际上，位于有限大圆柱体中心的螺型位错的应力场($\sigma_{\theta z}^T$)应是无限大圆柱体内螺型位错的应力场($\sigma_{\theta z}$)与为满足边界条件而得到的应力场($\sigma''_{\theta z}$)二者之和，即

$$\sigma_{\theta z}^T = \sigma_{\theta z} + \sigma''_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi} \left(\frac{1}{r} - \frac{2r}{R^2} \right) \quad (1-21)$$

2. 刃型位错的应力场

1) 无限大介质中直线刃型位错的应力场

刃型位错的应力场比螺型位错复杂，但仍可用同样的方法加以分析，如图1-19(b)所示。在直角坐标系中，直刃型位错沿Z轴时，位移的Z分量 $u_z = 0$ ，其它两个位移分量(u_x, u_y)不随Z变化，即 $\partial u_x / \partial z = 0$ 和 $\partial u_y / \partial z = 0$ 。这样，问题就成了平面应变问题了。因此，可以通过寻求合适的应力函数 ϕ ，按如下关系得出直刃型位错的诸应力分量：

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad \sigma_{xy} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \quad (1-22)$$

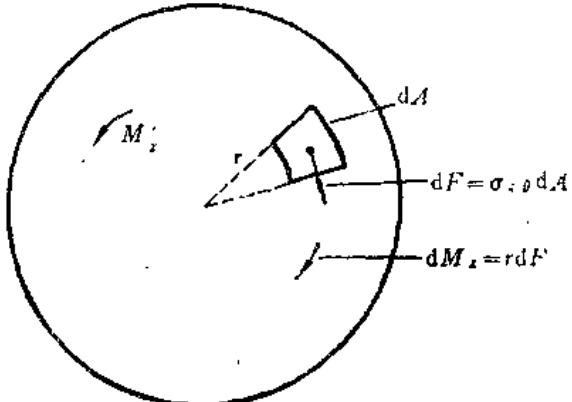


图1-23 螺型位错所在圆柱体端面上的边界条件
(M_z —由 $\sigma_{z\theta}$ 引起的力偶矩； M'_z —由边界条件给出的力偶矩)

在圆柱坐标系中，应力函数与应力分量有如下关系：

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{rr} &= -\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \\ \sigma_{r\theta} &= -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \right\} \quad (1-23)$$

可以证明，在无限大介质中直线刃型位错的应力函数为

$$\phi = -Dy \ln(x^2 + y^2)^{1/2} = -Dr(\ln r) \sin \theta \quad (1-24)$$

$$\text{其中, } D = Gb/2\pi(1-\nu) \quad (1-25)$$

则可分别代入 (1-22) 式和 (1-23) 式得到直线刃位错的应力场为：

在直角坐标系中，

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} &= -D \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{yy} &= D \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{xz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \\ \sigma_{xy} = \sigma_{yx} &= D \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{zz} = \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{yz} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1-26)$$

在圆柱坐标系中，

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} &= -D \frac{\sin \theta}{r} \\ \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta}) \\ \sigma_{r\theta} &= D \frac{\cos \theta}{r} \\ \sigma_{rz} = \sigma_{\theta z} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1-27)$$

结果表明，在刃型位错周围的应力场中，同时存在有正应力分量和切应力分量。刃型位错的应力分布有明显的面对称性，如图1-24和1-25所示。在滑移面以上的部分，即 $0 < \theta < \pi$ ，为受压状态 ($\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} < 0$)；而在滑移面以下部分，即 $\pi < \theta < 2\pi$ ，为受拉状态 ($\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} > 0$)。当 $\theta = 0$ 或 $\theta = \pi$ 时， $\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = 0$ ，而 $\sigma_{r\theta}$ 达到最大，即最大切应力是在滑移面 ($y = 0$) 上。在位错线附近区域，有效水静压力为

$$p = \frac{2}{3}(1+\nu)D \frac{y}{x^2 + y^2}$$

2) 位于有限圆柱体中心处的直线刃型位错的应力场

在上述推导直刃型位错的应力场时，没有考虑圆柱体边界条件的影响。如果考虑有限圆柱体内外表面上应力为零的话，应满足

$$\vec{\sigma}_{ij} \cdot \vec{n}_j = 0 \quad (1-28)$$

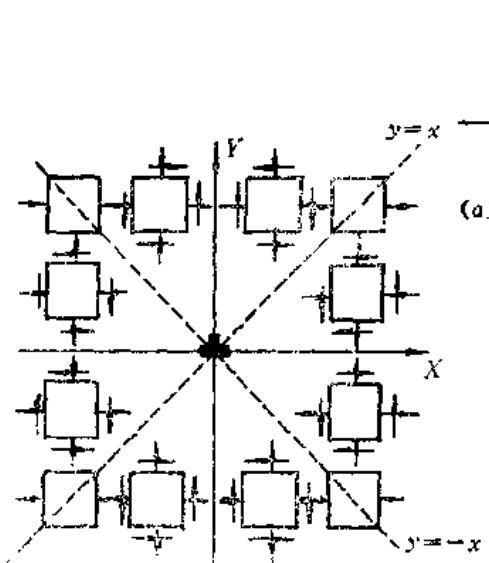


图1-24 刃型位错周围的应力场

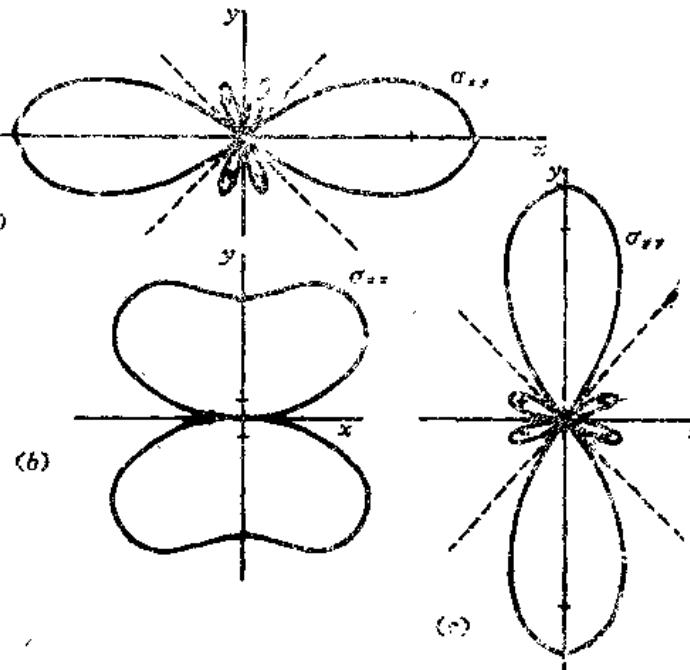


图1-25 刀型位错周围恒定应力分布图：
(a) σ_{xy} , (b) σ_{xx} 和(c) σ_{yy}

式中， $\vec{\sigma}_{ij}$ 为作用于与 j 方向垂直的表面上的应力， \vec{n}_j 为局部表面法向的单位矢量。因此，需要对在无限大介质中所得到的应力函数进行修正。在 $r=R$ 处，使圆柱体的外表面应力为零的应力函数可以写成

$$\phi_1 = \frac{Dr^3}{2R^2} \sin\theta \quad (1-29)$$

在 $r=r_0$ 处，使圆柱体的内表面应力为零的应力函数可以写成

$$\phi_2 = -\frac{r_0^2}{2r} \sin\theta \quad (1-30)$$

于是，可以分别求出与 ϕ_1 和 ϕ_2 相对应的应力，并与(1-27)式相加，便可以近似得出在有限大的圆柱体中，由直线刃位错引起的应力场为：

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{rr} &= -D \sin\theta \left(\frac{1}{r} - \frac{r}{R^2} - \frac{r_0^2}{R^3} \right) \\ \sigma_{\theta\theta} &= -D \sin\theta \left(\frac{1}{r} - \frac{3r}{R^2} + \frac{r_0^2}{r^3} \right) \\ \sigma_{rz} &= D \cos\theta \left(\frac{1}{r} + \frac{r}{R^2} + \frac{r_0^2}{r^3} \right) \\ \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta}) \end{aligned} \right\} \quad (1-31)$$

3. 混合位错的应力场

对直线混合位错而言，其应力场应由两部分组成。如图1-13(b)所示，一是由螺型位错分量($b_s = b\cos\theta$)引起的应力场；二是由刃型位错分量($b_t = b\sin\theta$)引起的应力场。所以，对于一个直线混合位错可以分别按以上方法求出螺型位错应力场分量和刃型

$$\left(\frac{W}{L}\right)_c = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \int_{r_0}^R \frac{dx}{x} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} \quad (1-38)$$

对于直线混合位错，由于两个位错分量的柏氏矢量相互垂直，在这两个分量之间没有弹性交互作用，所以整个位错的应变能就是两个位错分量的自能之和。如果直线混合位错的柏氏矢量 \vec{b} 与位错线的夹角为 θ ，则该混合位错的刃型分量强度是 $b\sin\theta$ ，螺型分量的强度是 $b\cos\theta$ 。故直线混合位错单位长度的应变能是：

$$\left(\frac{W}{L}\right)_n = \left[\frac{Gb^2 \sin^2 \theta}{4\pi(1-\nu)} + \frac{Gb^2 \cos^2 \theta}{4\pi} \right] \ln \left(\frac{R}{r_0} \right) = \frac{Gb^2 (1 - \nu \cos^2 \theta)}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{R}{r_0} \right) \quad (1-39)$$

从以上分析结果可见，位错的弹性应变能与位错中心半径 r_0 和晶体尺寸 R 呈对数关系，其敏感性较小。但当 $R \rightarrow 0$ 或 $r_0 \rightarrow 0$ 时， W/L 会出现奇异现象。所以，很难说位错具有一定的特征能量。在晶体中有一个位错的情况下，可取 R 约为到表面的最短距离。当晶体中含有许多混乱分布位错时，位错易于形成彼此的长程应力场相互抵消的组态，使各位错的能量减少，故可取 R 约等于位错间平均距离的一半。通常将 r_0 取为 $5b$ 左右。

在相同的 r_0 和 R 值下比较时，刃型位错的应变能约为螺型位错的 $3/2$ 倍。混合位错的应变能界于具有相同强度的刃型位错与螺型位错的应变能之间。一般而言，位错的弹性应变能对位错的性质不十分敏感。在对 R 和 r_0 的合理取值的条件下，可将位错的应变能写成：

$$\frac{W}{L} = \alpha G b^2 \quad (1-40)$$

式中， $\alpha \approx 0.5 \sim 1.0$ 。应该注意的是，应变能的分布具有不均匀性。离位错中心愈近，应变能密度愈高；离位错中心愈远，则应变能密度愈低。但应变能不是集中在位错中心的地方，如果取 $R = 1\text{ cm}$ ， $r_0 = 10^{-7}\text{ cm}$ ，则约有一半以上的应变能集中在 $R = 10^{-4}\text{ cm}$ 以外的区域内。

2. 一对异号位错的应变能

一个单独位错的应变能随着到位错距离的增大而按对数规律增加。但是，对于一对平行的异号位错来说，情况便有所不同。因为这两个异号位错的应力场方向相反，在远处两者的应力场大体上彼此相消，结果便使应力场和应变场被局限在位错附近。

前已指出，对于一根位错线来说，其应力分量与距离呈反比关系（见1-12式和1-27式）。但可以证明，由两个平行的异号位错所构成的应力场与到位错距离的平方成反比。假如有两根符号相反的螺型位错，都平行于Z轴，相互间距为 d 。将一根的坐标取为 $x = d/2, y = 0$ ；另一根的坐标取为 $x = -d/2, y = 0$ 。则沿X轴距位错较远处的复合切应力便为：

$$\sigma_{xz} = \pm \frac{Gb}{2\pi} \left[\left(x - \frac{d}{2} \right)^{-1} - \left(x + \frac{d}{2} \right)^{-1} \right] \quad (1-41)$$

将此式近似简化便得到：

$$\sigma_{xz} = \pm \frac{Gbd}{2\pi x^2} \quad (1-42)$$

3. 位错环的应变能

由于位错环属于曲线型位错，其应变能的计算比较困难。在粗略的计算时，忽略 $(1-\nu)$ 对位错应力场的影响。不言而喻，位错环的应力场随距离下降的趋势要比一对异号平行位错更加剧烈。距位错环稍远处，其应力场便显著减少，可以忽略不计。

设位错环的半径为 R_0 ，则对靠近位错环的区域($r_0 < r < R_0$, r_0 为位错中心半径)而言，临近的位错环线段可以近似地看成是直线，其应力场要受到另外两个符号相反的对边位错线段的作用。因而，该区域的应力场可以看成是由一对符号相反的位错线段共同作用的结果，要比一根位错线段时小。

因此，一般而言，位错环的应变能小于直线位错。对位错环在单位长度上的应变能可以近似地表达如下：

$$\frac{W}{L} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R_0}{r_0} \quad (1-43)$$

由于对数项中的变数影响较小，使位错环的应变能对其本身的尺寸不敏感，而主要取决于柏氏矢量。

四、位错的线张力

位错同任何热力学系统一样，有降低自身势能的趋势。这主要表现在位错线的能量随其长度缩短而减小。故可将位错线张力定义为：

$$T = \frac{\delta W}{\delta l} \quad (1-44)$$

式中， δl 为位错线长度增量， δW 为由长度增量 δl 引起的位错线能量的增量。所以，位错的线张力在数值上等于单位长度位错线的能量。和液体的表面张力相似，位错的线张力是一种组态的作用力，作用方向是沿着位错线的方向。对于曲线位错而言，线张力沿着位错线的切线方向。

位错的线张力的数值和位错线的具体形状有关。前已述及，位错的能量为其应力场中畸变能的总和，而应力场的状况又取决于位错线的形状。对于任意形状的位错线，由于远处的应力场要相互抵消一部分，其线张力总要小于直线位错。可以对任意形状位错的线张力作如下粗略估计^[10]：

如图1-26所示，设想将一根位错线弯成波浪形，波长为 λ ，使位错线的长度从直线时的 l 增为 $l + dl$ 。则可以将弯曲后位错的应力场分成远程($r > \lambda$)和近程($r < \lambda$)两部分。在远程区域，由于位错弯曲造成偏远和偏近现象，则该区域的应力场会相互抵消一部分，使这个区域中的总能量为：

$$W_1 \approx \frac{Gb^2 l}{4\pi K} \ln \frac{R}{\lambda} \quad (1-45)$$

式中， K 为与位错性质有关的系数， $(1-\nu) < K < 1$ 。在位错线附近区域，位错线的能量和长为 $l + dl$ 的直位错线相近，即：

$$W_2 \approx \frac{Gb^2}{4\pi K} (l + dl) \ln \frac{\lambda}{r_0} \quad (1-46)$$

又因未弯曲前长度为 l 的直线位错的能量为：

$$W_0 = \frac{Gb^2}{4\pi K} l \ln \frac{R}{r_0}$$

则位错弯曲后的能量增加为：

$$Td\ell = W_1 + W_2 - W_0 = \frac{Gb^2}{4\pi K} dl \ln \frac{\lambda}{r_0} \quad (1-47)$$

故

$$T = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{\lambda}{r_0} \quad (1-48)$$

取 $\lambda = 100r_0$ 时，则得：

$$T \approx \frac{1}{2} Gb^2 \quad (1-49)$$

这个数值常作为线张力的粗略估计值。

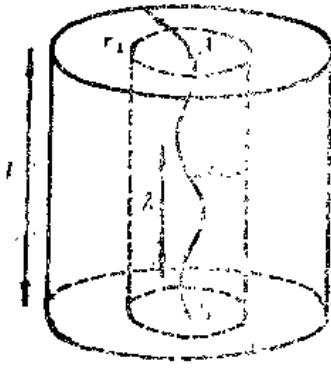


图1-26 波浪形位错的线张力

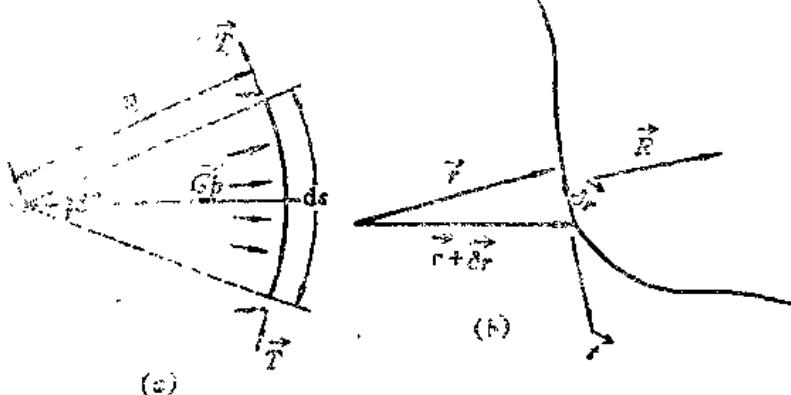


图1-27 位错线弯曲

在线张力的作用下，曲线位错的各段均受有径向回复力，以使位错线在切应力作用下保持平衡，成为曲线状。如图1-27(a)所示，位错线弧长为 ds ，曲率半径为 R ，在曲率中心处所张开的角度为 $d\theta = ds/R$ 。作用在这段位错线上的由外加切应力 σ 所引起的径向向外的力是 $\sigma b ds$ ，而由于在圆弧两端的线张力 T 所引起的反向回复力是 $2T \sin(d\theta/2) \approx Td\theta$ 。在平衡时，便有

$$\sigma b ds \approx T d\theta$$

或

$$\sigma b ds \approx T \frac{ds}{R}$$

所以

$$\sigma b \approx \frac{T}{R} \quad (1-50)$$

应力。内应力的来源有溶质原子、第二相粒子以及其它位错等。

计算作用在位错上的力时，可采用虚功原理法。先假设晶体在外加应力 σ 作用下产生微量变形，求出外加应力所作的变形功 dW ，再假设在晶体变形过程中，位错在力 F 的作用下移动了 dx 的距离，力 F 所作的功为 $F dx$ ，于是

$$dW = F dx \quad (1-55)$$

由此便可求出作用在位错上的力 F 。下面利用这种方法求出各种情况下作用在位错上的力。

一、作用在刃型位错上的力

1. 滑移力

如图1-28所示，晶体中有一正刃型位错。将位错线取为指向 Z 轴的正方向。若在切应力 σ_{xy} 的作用下使位错在 x 方向移动 dx 时，在位错掠过的面积内上层晶体相对于下层晶体要产生柏氏矢量大小的滑移，则变形功为

$$dW = \sigma_{xy} b L dx$$

式中， L 为位错线长度。又设位错线受有作用力 F ，则在位错移动 dx 过程中所作的功为 $F dx$ 。于是，便得到

$$\frac{F}{L} = \sigma_{xy} b \quad (1-56)$$

这便是由外切应力作用在刃型位错线上的力的表达式。一般文献中，谈到作用在位错线上的力时，如不特别指出，都是指作用在单位长度位错线上的力。公式中 σ_{xy} 和 b 的符号有正负之分，从而影响 F/L 的方向和位错运动的方向。

由于外加切应力作用于刃型位错上的力平行于滑移面，而垂直于位错线，故称为滑移力。可以下面的公式加以表达：

$$\frac{\vec{F}}{L} = (\sigma_{xy} b) \vec{i} \quad (1-57)$$

式中， \vec{i} 为 X 轴的单位矢量。

2. 攀移力

如图1-29所示，在正应力 σ_{xx} 作用下，有可能使正刃型位错沿垂直于滑移面的方向向下运动（负攀移）。刃型位错攀移时，要涉及物质迁移或原子扩散。在 σ_{xx} 的作用下，刃型位错的受拉区体积膨胀，易于诱发晶体中原子向插入面下端扩散。反之，如果晶体中有均匀的压应力场时，则在 $-\sigma_{xx}$ 作用下，刃型位错受拉区体积压缩，

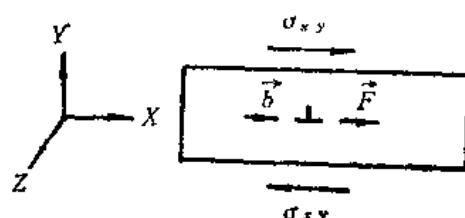


图1-28 作用在刃型位错上的滑移力

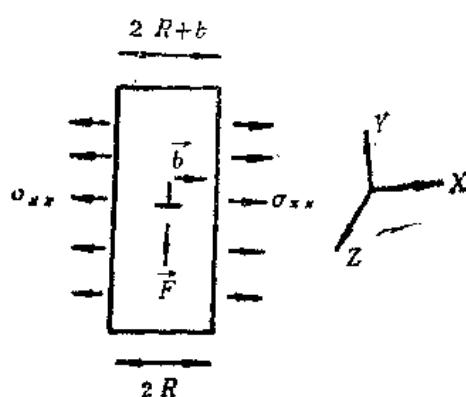


图1-29 作用在刃型位错上的攀移力

有利于插入面下端形成空位，引起正攀移。在一般条件下，原子扩散较难发生，攀移过程难于进行，正应力的作用主要表现为对刃型位错施加垂直于滑移面的作用力，称为攀移力。

在 σ_{xx} 的作用下，正刃型位错向下攀移 dy 距离时，相当于在位错插入面的下方新插入厚度为 b 的一层原子。相应地，要使晶体受影响部分的宽度增加一个原子层厚。于是，便可以求出由 σ_{xx} 所作的变形功为：

$$dW = \sigma_{xx} b L dy$$

同时，攀移力 F 使位错线向下移动 dy 距离时，所作的功为 $-F dy$ 。因此，可得：

$$-F dy = \sigma_{xx} b L dy$$

所以，

$$\frac{F}{L} = -\sigma_{xx} b \quad (1-58)$$

当把坐标系取为使位错线指向Z轴的正方向时，可写成如下的矢量形式：

$$\frac{\vec{F}}{L} = -(\sigma_{xx} b) \vec{j}$$

式中， \vec{j} 为Y轴的单位矢量。 σ_{xx} 和 b 的方向都可变，使相应的攀移力可以为正也可以为负。所以，同切应力的影响不同，正应力对刃型位错造成垂直于滑移面的作用力。拉应力易于促使刃型位错作负攀移；压应力易于促使刃型位错作正攀移。

由于攀移涉及原子扩散，在一定温度下临界攀移力将取决于点缺陷（空位或间隙原子）的形成能的大小，如下式所示：

$$\frac{F_c}{L} = \frac{U_f}{b^2} \quad (1-59)$$

式中， U_f 为点缺陷的形成能。温度愈高， U_f 愈低，相应使临界攀移力 F_c 下降。所以，一般攀移易于在高温下发生。

二、作用在螺型位错上的力

如图1-30所示，晶体中有一右手螺型位错，可以用类似的虚功原理方法证明，切应力 σ_{yy} 作用在位错线上的力有如下表达式：

$$\frac{F}{L} = \sigma_{yy} b \quad (1-60)$$

或用矢量表达式：

$$\frac{\vec{F}}{L} = (\sigma_{yy} b) \vec{i} \quad (1-61)$$

式中， \vec{i} 为X轴的单位矢量。可见，作用

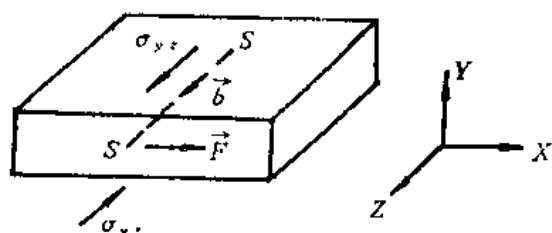


图1-30 作用在螺型位错上的滑移力

在螺型位错上的力也是一种滑移力，在数值上等于外切应力与柏氏矢量的乘积，其作用

意的是，位错所受的作用力恒与位错线垂直。而且，一般而言，作用在位错线上的力可用如下简单形式表示：

$$\frac{F}{L} = \sigma b \quad (1-66)$$

式中， σ 可以是切应力，也可以是正应力。

§ 1-5 位错间作用力

晶体中位错间的作用力来源于彼此间通过应力和应变场产生弹性交互作用。设晶体中同时存在两个位错，其各自的应变能分别为 W_1 和 W_2 ，则系统的总应变能为

$$W_T = W_1 + W_2 + W_{12} \quad (1-67)$$

式中， W_{12} 称为位错间的交互作用能。其物理意义可以看成是一个位错的应力场在另一个位错形成过程中所做的功。如图1-31所示，设在坐标原点O与 (x, y) 处各有一个刃型位错，则可以把在 (x, y) 处位错的形成看成是沿A面割一道缝，并使割缝的两面彼此沿X方向整体位移量为 b 。由于位于原点的刃型位错具有应力分量 σ_{yz} ，便会在 (x, y) 处位错形成过程中作功：

$$W_{12} = \int_A \sigma_{yz} b dA \quad (1-68)$$

显然，这种能量变化与两位错间相对位置有关。两位错相距愈近时，交互作用愈强。于是由(1-54)式可知，便会表现有一种力作用在它们之间，并在数值上等于交互作用能随两位错相对位置变化率的负值，即：

$$\frac{F}{L} = -\frac{\partial W_{12}}{\partial x} \quad (1-69)$$

所以，位错间的作用力也是一种组态作用力，可以从系统的弹性应变能变化中加以求得。但这种求法比较麻烦，比较简单的求法是将一个位错看成是应力源以给出应力场，再求另一位错在这个应力场中所受到的作用力。计算时，可以借助于Peach-Koehler方程。下面讨论几种典型情况。

一、平行螺型位错间的作用力

如图1-32所示，两个相互平行的同号螺型位错间距为 r ，其柏氏矢量为 b 和 b' 。将坐标原点取在S位错处，并令位错线指向Z轴的正方向，则在圆柱坐标中，S位错的应力场为

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

于是，便可由(1-66)式进而求出由S位错的应力场作用到S'位错上的作用力在数值上

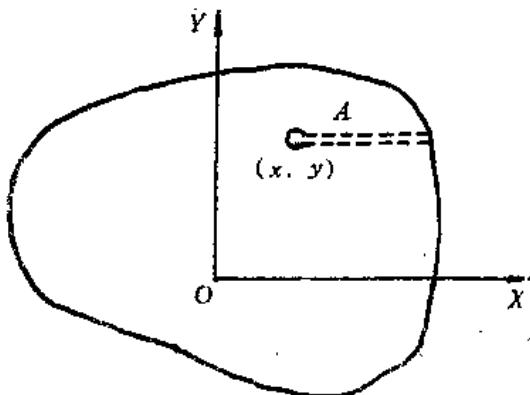


图1-31 位错间的相互作用力

等于

$$\frac{F}{L} = \sigma_{\theta z} b' = \frac{Gbb'}{2\pi r} \quad (1-70)$$

在直角坐标系中， S 位错的应力场为

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2},$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2},$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$$

代入Peach-Koehler方程便可求出作用在 S' 位错上的力：

$$\frac{\vec{F}}{L} = \left(\frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \cdot b'_z \right) \vec{i} +$$

$$\left(\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} \cdot b'_z \right) \vec{j}$$

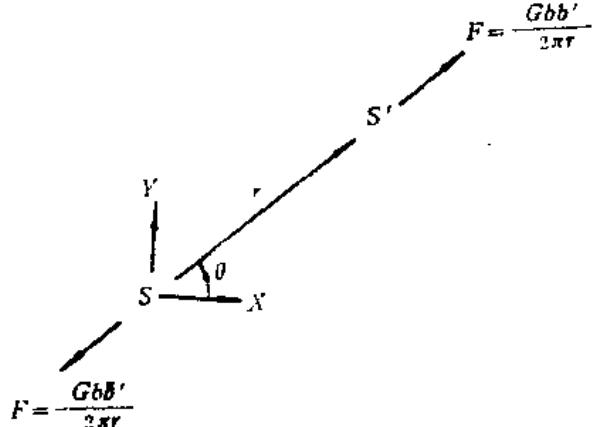


图1-32 平行螺型位错间的作用力

又 $x^2 + y^2 = r^2$, $x = r\cos\theta$ 及 $y = r\sin\theta$,

则

$$\frac{\vec{F}}{L} = \frac{Gbb'}{2\pi r} (\cos\theta \vec{i} + \sin\theta \vec{j}) \quad (1-71)$$

可见，两个平行的螺型位错间仅有径向中心作用力。而且，两位错同号时为斥力。反之，两位错异号时为吸力。

二、平行刃型位错间的作用力

如图1-33所示，两个相互平行的同号刃型位错间距为 r ，其柏氏矢量为 b 和 b' 。将坐标原点取在1位错处，并令Z轴平行于位错线。由Peach-Koehler方程可得位错1的应力场作用在位错2上的力为：

$$\frac{\vec{F}}{L} = (\sigma_{zz} b'_z + \sigma_{yy} b'_z) \vec{i} - (\sigma_{zz} b'_z + \sigma_{yy} b'_z) \vec{j}$$

将式中有关位错1的各应力分量按(1-26)式代入，并变换为圆柱坐标时，则得：

$$\frac{\vec{F}}{L} = \frac{Gbb'}{2\pi(1-\nu)r} [\cos\theta(\cos^2\theta - \sin^2\theta) \vec{i} + \sin\theta(1 + 2\cos^2\theta) \vec{j}] \quad (1-72)$$

可见，若 $\theta = 0$ 时，两同号位错间有径向中心斥力。若 $\theta \neq 0$ 时，位错2在位错1的应力场中同时受有水平方向上的滑移力和垂直方向上的攀移力两种作用。

在(1-72)式中， θ 角的变化实际上是反映位错2在位错1的应力场中所处的位置的变动。下面讨论 θ 角的变化对两平行刃型位错间作用力的影响：

1. 滑移力与 θ 角的关系如下：

$$\frac{\vec{F}_s}{L} = \frac{Db'}{r} [\cos\theta(\cos^2\theta - \sin^2\theta) \vec{i}]$$

可见如图1-34(a)所示， $\theta < 45^\circ$ 时，滑移力为正，使两个同号位错相互排斥； $\theta > 45^\circ$ 时，滑移力为负，使两同号位错相互吸引。当 $\theta = 45^\circ$ 和 $\theta = 90^\circ$ 时，滑移力为零，两位错处于相对平衡状态。其中， $\theta = 45^\circ$ 时为亚稳态平衡， $\theta = 90^\circ$ 时为稳态平衡。若两刃型位错的符号相反，则 $\theta = 45^\circ$ 时为稳态平衡，而 $\theta = 90^\circ$ 时为亚稳态平衡。

2. 攀移力与 θ 角关系如下：

$$\frac{\vec{F}}{L} = \frac{Db'}{r} [\sin\theta(1 + 2\cos^2\theta) \vec{j}]$$

可见，如图1-34(b)所示， $\theta = 0 \sim \pi$ 时，位错1施于同号位错2上的攀移力为正，使位错2趋于向上攀移； $\theta = \pi \sim 2\pi$ 时，攀移力为负，使位错2趋于向下攀移。所以，两同号刃型位错间的攀移力也使两者相互排斥，反之，若两刃型位错的符号相反而，则趋于使两者在垂直于滑移面的方向上相互吸引。

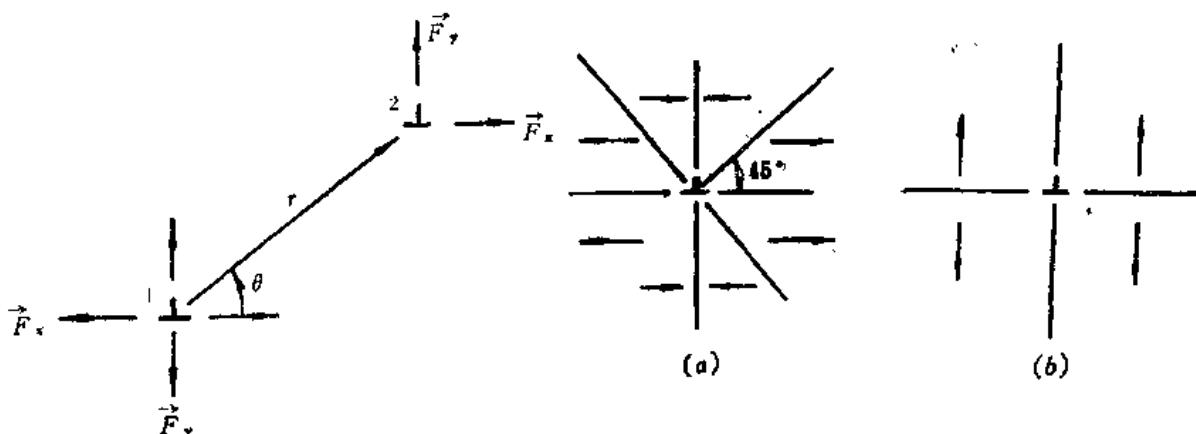


图1-33 平行同号刃型位错间的作用力

图1-34 刀型位错对其周围同号刃型位错的(a)滑移力
和(b)攀移力的方向

在直角坐标系中，可将平行刃型位错间的作用力表达如下：

$$\left. \begin{aligned} \frac{F_s}{L} &= \pm \frac{Gbb'}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \frac{F_x}{L} &= \pm \frac{Gbb'}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \end{aligned} \right\} \quad (1-73)$$

式中，正号表示 b 和 b' 同向；负号表示反向。通常刃型位错仅能在包含位错线与柏氏矢量的平面内滑移，故 F_s/L 会对刃型位错的行为产生重要影响。若以 $Gbb'/2\pi(1-\nu)y$ 为度量 $\frac{F_s}{L}$ 的单位，以 y 为度量 x 的单位，则可获得 F_s/L 与 x 的关系曲线，如图1-35所示。当 $x > 0$ 时，同号位错在 $x < y$ 时相互吸引，而 $x > y$ 时相互排斥；反之，异号位错在

$$\frac{\vec{F}}{L} = G_s \vec{j} = -\frac{Gbb'}{2\pi} \frac{d}{x^2 + d^2} \cdot \vec{j} \quad (1-76)$$

可见，两相互垂直的螺型位错间作用力的特点是在符号相同时，存在吸引力；而符号相反时，存在斥力。

在两个螺型位错都很长的情况下，由位错1作用在位错2上总的合力由 $x = -\infty$ 到 $x = \infty$ 进行积分求得：

$$\vec{F} = -\frac{Gbb'}{2} \vec{j} \quad (1-77)$$

这说明，两相互垂直的长螺型位错间总作用力与位错间距 d 无关。

四、螺型位错与相互垂直的刃型位错间的作用力

如图1-37所示，螺型位错与Z轴重合，柏氏矢量为 \vec{b} 。刃型位错位于 $Z=0$ 的平面内，柏氏矢量为 \vec{b}' 。两位错间距为 d 。采用上节同样的方法，可以求得由螺型位错作用到刃型位错上的作用力为：

$$\frac{\vec{F}}{L} = -G_s \vec{k} \quad (1-78)$$

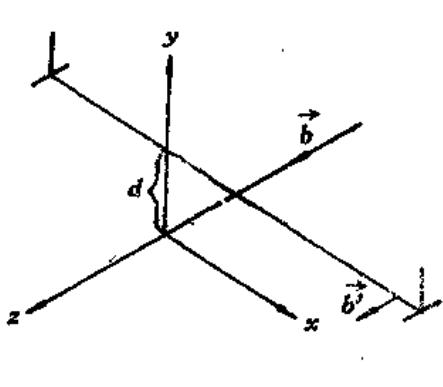


图1-37 螺型位错与相互垂直的刃型位错

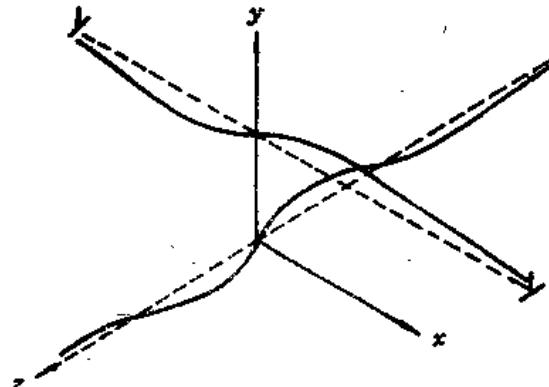


图1-38 螺型位错与相互垂直的刃型位错相互作用使位错线弯曲

由式(1-65)知，

$$G_s = G_{ss} b'_s + \sigma_{yy} b'_y + \sigma_{zz} b'_z$$

式中， $b'_s = b'_y = 0$, $b'_z = b'$ 。又由螺型位错的应力场知， $\sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0$ ，和 $\sigma_{yz} = Gb/2\pi \cdot x/(x^2 + y^2)$ 。而且， $y = d$ ，则

$$\frac{\vec{F}}{L} = -\frac{Gbb'}{2\pi} \frac{x}{x^2 + d^2} \vec{k} \quad (1-79)$$

可见，由螺型位错作用到相垂直的刃型位错上的力平行于Z轴。这种作用力对 $+x$ 和 $-x$ 相对称，使总的合力等于零，但有力矩作用到刃型位错线上。其结果是使位错线发生扭曲，如图1-38所示。

反之，图1-38中的刃型位错也可以对螺型位错产生作用力。可以证明，其表达式为：

$$\frac{\vec{F}}{L} = -\frac{Gbb'}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{z(z^2-d^2)}{(d^2+z^2)^2} \vec{i} \quad (1-80)$$

可见，由刃型位错作用到相互垂直的螺型位错上的力平行于X轴。其方向随着Z的符号而改变，使合力为零，但有力矩作用在螺型位错上。所以，在这种作用下也使螺型位错发生扭曲。

上述几种典型情况表明，位错间存在着相互作用力，其大小和方向都可由Peach-Koehler方程求得。一般而言，不管两位错线分布的几何关系如何，任一位错线的某一段都会受到来自其它位错的作用力。

§ 1-6 位错与界面的交互作用

不言而喻，位错的自能量是位错到自由表而距离的函数。离表面愈近，位错的自能量愈小；到达自由表而时，位错自能量消失。这种情况表明，位错与自由表面存在交互作用，以吸引位错移向自由表面。而且，位错距表面愈近，这种交互作用越强。为了形象地表达这种位错与界面的交互作用，J. S. Koehler引入了镜像位错与镜像力的概念^[12]。这是一种巧妙的处理问题的方法，收到了良好的效果。

所谓镜像位错是假定在自由表面之外，有一个异号位错位于同表而内位错以自由表面为镜而的镜像位置上。如果把这两个位错看成是处于同一无限大的弹性介质中，于是便可由前者对于后者产生吸引力，称为镜像力。实际上，下面将会看到，镜像位错和镜像力是从满足界而处的边界条件而必然引出的概念。

一、位错与自由表面的交互作用

1. 对螺型位错的镜像力

如图1-39(a)所示，S为平行于自由表面的螺型位错，到自由表面距离为+l，其柏氏矢量为 \vec{b} 。显然，对自由表面而言，边界条件是应力为零。由于螺型位错无正应力

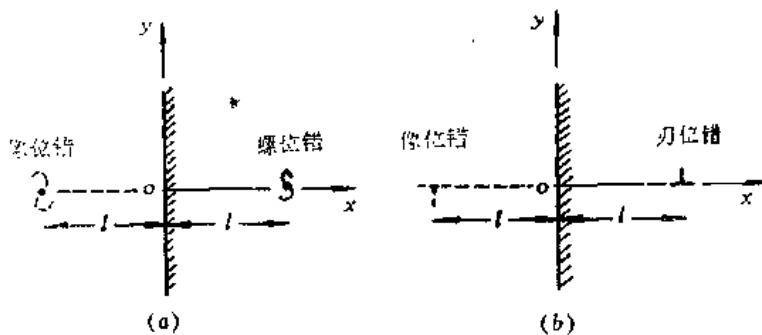


图1-39 自由表面与(a)螺型位错和(b)刃型位错的交互作用

场，这一点可以自然满足。但螺型位错 S 会在表面引起切应力 σ_{xz} ，由(1-13)式可知：

$$\sigma_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{l^2 + y^2}$$

为了满足边界条件，可以设想在自由表面外也充满相同的弹性介质，并在距表面 $-l$ 处有一异号螺型过错 S' ，其柏氏矢量为 \vec{b} 。于是 S' 可在 $x=0$ 的表面上产生切应力 σ'_{xz} ：

$$\sigma'_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{l^2 + y^2}$$

由于在原自由表面处 σ_{xz} 和 σ'_{xz} 大小相等而符号相反，便使原自由表面处总的切应力为零。可见，从满足自由表面的边界条件出发，便要求有镜象位错存在。

在螺型位错 S 和异号螺型位错 S' 之间存在着径向中心吸引作用，并可由(1-70)式得出 S 位错所受到的映像力为：

$$\frac{F}{L} = -\frac{Gb^2}{4\pi l} \quad (1-81)$$

于是，在这种映像力的作用下，螺型位错 S 趋于移向自由表面。

2. 对刃型位错的映像力

刃型位错的应力场中除切应力外，还有正应力，使得对其映像力的计算比较复杂，难于只通过附加一个映像位错满足表面边界条件。如图1-39(b)所示，在距表面 $+l$ 处有平行于表面的刃型位错，柏氏矢量为 b 。若将其应力场与映像位错的应力场相加时，除 σ_{xz} 外各应力在表面处均为零，即 $\sigma_{xx} = \sigma_{zz} = 0$ 。而在表面处有：

$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{\pi(1-\nu)} \frac{l(l^2 - y^2)}{r^4}$$

式中， $r = (l^2 + y^2)^{1/2}$ 。于是，为满足边界条件，需附加应力函数 ϕ ，以给出

$$\sigma_{xy}(0, y) = -\frac{Gb}{\pi(1-\nu)} \frac{l(l^2 - y^2)}{r^4}$$

和 $\sigma_{xx}(0, y) = \sigma_{zz}(0, y) = 0$ 。

可以证明，此应力函数具有如下形式：

$$\phi = -\frac{Gblxy}{\pi(1-\nu)[(x-l)^2 + y^2]} \quad (1-82)$$

由此应力函数可以给出切应力为：

$$\sigma_{xy} = \frac{-Gbl}{\pi(1-\nu)r^4} [(l-x)^4 + 2x(l-x)^3 - 6xy^2(l-x) - y^4] \quad (1-83)$$

于是为满足边界条件，使刃型位错周围的应力场应由三部分组成。一是刃型位错本身的应力场，二是映像位错的应力场，三是由应力函数给出的应力场。因此，对自由表面与刃型位错的交互作用，便可以映像位错和附加的应力函数作用于刃型位错上的力来表征。

- [9] F.C.Frank, Phil. Mag., 42(1951), p.809.
- [10] J.Friedel, «位错»(中译本), 科学出版社,1980。
- [11] J.Weertman and J.R. Weertman, Elementary Dislocation Theory, The Macmillan Company, Collier-Macmillan Ltd., London, 1971.
- [12] J.S.Koehler, Phys. Rev., 60(1941), p.397.
- [13] J. Dundurs and G.P.Sendeckyj, J.Appl.Phys., 36(1965), p.3353.

第二章 晶体中位错的行为

在上一章中讨论位错行为时，是把介质看成均匀的各向同性的弹性体。这种连续介质模型的局限性是很明显的，由于忽略了晶体的点阵结构，无法正确地反映位错线附近的情况。在通常计算时，总是设想将位错线附近半径为 r_0 以内的区域挖去。否则，应用弹性力学将会遇到难以克服的困难。

实际金属大都是晶体，具有一定的点阵结构。因此，有必要进一步分析晶体结构对位错行为的影响，包括点阵周期性以及点阵类型等的影响。这对于深入理解金属的强化机制具有极重要的意义。

§ 2-1 派-纳位错模型与派-纳力

R. Peierls⁽¹⁾ 和 F. R. N. Nabarro⁽²⁾ 两人首先相继考虑了晶体点阵的周期性对位错中心区原子结构的影响，建立了位错的点阵模型。下面介绍派-纳模型的基本概念及有关结果。

一、派-纳位错模型

1. 刀型位错的派-纳模型

如图2-1(a)所示，设想将具有简单立方结构的完整晶体沿滑移面割开，并相对位移

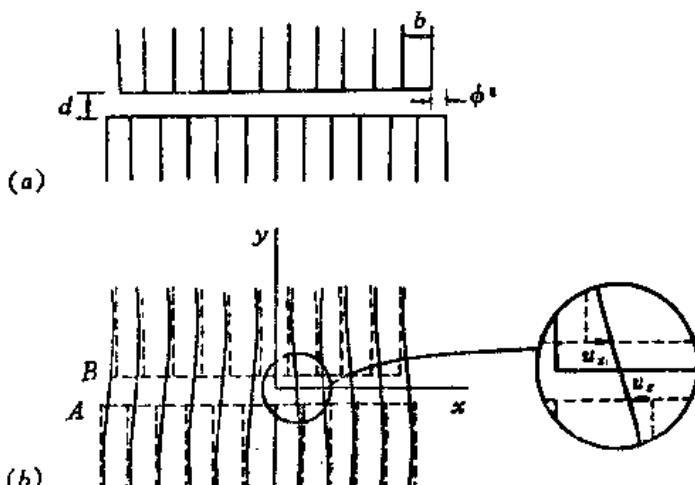


图2-1 两块简单立方晶体凑成的刃型位错

$b/2$ ，则滑移面上下同号原子的相对位移可表达如下：

$$\varphi_s^0 = \begin{cases} \frac{b}{2} & x > 0 \\ -\frac{b}{2} & x < 0 \end{cases}$$

若再令滑移面上层原子沿 x 轴位移 u_s ，而滑移面下层原子作等量而反向的位移 $-u_s$ ，达到如图2-1(b)所示的平衡位置形成刃型位错。其结果是使滑移面上下同号原子的相对位移如下：

$$\varphi_s(x) = \begin{cases} 2u_s(x) + \frac{b}{2} & x > 0 \\ 2u_s(x) - \frac{b}{2} & x < 0 \end{cases} \quad (2-1)$$

由于在 $x = \pm\infty$ 处位错的影响消失，滑移面上下同号原子应对齐，以使 $\varphi_s(\infty) = 0$ ，即得：

$$u_s(\infty) = -u_s(-\infty) = \frac{-b}{4} \quad (2-2)$$

这就是 $u_s(x)$ 所必须满足的边界条件，如图2-2所示。

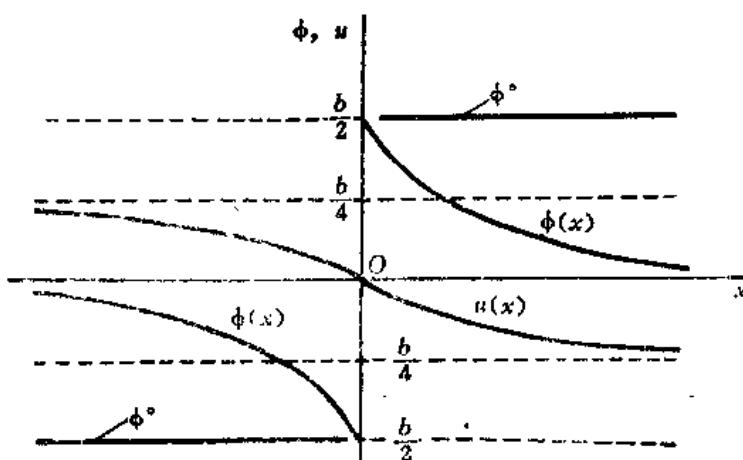


图2-2 刃型位错的位移函数

为求得 $u_s(x)$ 与 x 关系的解析式，可以把如图2-1(b)所示的具有位错的晶体看成是两个半晶体 (A 以下和 B 以上)，并受到切应力 σ_{xy} 作用而结合起来。再假定 A 面以下及 B 面以上的晶体都为各向同性的连续介质，而且 A 和 B 面之间的切应力是两面上原子相对位移 φ 的非线性函数。R.Peirols 采用了周期为 b 的正弦函数，于

是得出作用于 A 面上的切应力 σ_{xy} 与位移 u_s 的关系如下：

$$\sigma_{xy}(x, 0) = C \sin \frac{2\pi\varphi_s}{b} = -C \sin \frac{4\pi u_s}{b} \quad (2-3)$$

由于 φ 很小，也可以将 $\sigma_{xy}(x, 0)$ 用虎克定律表达为：

$$\sigma_{xy}(x, 0) = 2G\varepsilon_{xy} = \frac{G\varphi_s}{d}$$

式中， d 为面间距。由此可定出常数 C ，即

$$C = \frac{Gb}{2\pi d} \quad (2-4)$$

所以，

$$\sigma_{xy}(x, 0) = -\frac{Gb}{2\pi d} \sin \frac{4\pi u_s}{b} \quad (2-5)$$

另外，按着 J.Eshelby 的方法⁽³²⁾，可以把强度为 b 的单位位错线看成沿滑移面连续分布强度为无穷小的许多弹性位错。若将在 dx' 一段滑移面内位错的柏氏矢量写作 $b'(x')dx'$ ，相应的位移为 $-2(du_s/dx)dx'$ ，那么，

$$b = \int_{-\infty}^{\infty} b'(x') dx' = -2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du_s}{dx} \right) dx' \quad (2-6)$$

按 (1-26) 式，可求出由位于 x' 和 $x' + dx'$ 间隔内强度为 $b'dx'$ 的位错在滑移面一点 $(x, 0)$ 上的切应力为 $Gb'dx'/[2\pi(1-\nu)(x-x')]$ 。于是，整个位错的贡献便为

这些无穷小弹性位错的贡献之和，即

$$\sigma_{x,y}(x, 0) = \frac{G}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b' dx'}{x - x'} = -\frac{G}{\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(du_x/dx)_{x=x'}}{x - x'} dx' \quad (2-7)$$

比较 (2-5) 与 (2-7) 式，可得出一积分方程：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{(du_x/dx)_{x=x'}}{x - x'} dx' = \frac{b(1-\nu)}{2d} \sin \frac{4\pi u_x}{b} \quad (2-8)$$

这就是派-纳模型的基本方程。开始在 R. Peierls 的原始文献中得到了这个基本方程及其解，但没有指出推导方法。后来 F. R. N. Nabarro 重新导出了此方程。在满足 (2-2) 式所示的边界条件下，这一方程的解为：

$$u_x = -\frac{b}{2\pi} \operatorname{tg}^{-1} \frac{x}{\xi} \quad (2-9)$$

其中 $\xi = d/2(1-\nu)$ (2-10)

ξ 称为位错的半宽度。当 $x = \pm \xi$ 时， $u_x = \mp b/8 = \frac{1}{2}u_x(\infty)$ ，故以 2ξ 确定刃型位错严重错排区域的范围 ($-\xi < x < \xi$)。在此范围内线弹性力学失效。一般将这样的位错称为 Peierls 位错，以与连续介质模型位错相区别。后者常称为 Volterra 位错。

将 (2-9) 式代入 (2-7) 式，可求出 Peierls 位错的应力场为：

$$\sigma_{x,y}(x, 0) = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x}{x'^2 + \xi^2} \quad (2-11)$$

而且，由 (2-6) 和 (2-9) 两式可得

$$b' = \frac{b}{\pi} \frac{\xi}{x'^2 + \xi^2} \quad (2-12)$$

可以证明，这种位错对应于如下应力函数：

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{G}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} b' y \ln[(x-x')^2 + y^2]^{1/2} dx' \\ &= \frac{Gb\xi y}{4\pi^2(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln[(x-x')^2 + y^2]}{x'^2 + \xi^2} dx' \end{aligned} \quad (2-13)$$

这样，就可以得到^[4]

$$\phi = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)} y \ln[x^2 + (y+\xi)^2] \quad (2-14)$$

于是，由 (1-22) 式便可得出 Peierls 刃型位错的应力场如下：

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{x,y} &= -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{x}{x^2 + (y+\xi)^2} - \frac{2xy(y+\xi)}{[x^2 + (y+\xi)^2]^2} \right\} \\ \sigma_{x,x} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{(3y+2\xi)}{x^2 + (y+\xi)^2} - \frac{2y(y+\xi)^2}{[x^2 + (y+\xi)^2]^2} \right\} \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{yy} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{y}{x^2 + (y+\zeta)^2} - \frac{2x^2y}{[x^2 + (y+\zeta)^2]^2} \right\} \\ \sigma_{xx} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = \frac{Gb\nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y+\zeta}{x^2 + (y+\zeta)^2} \end{aligned} \right\} \quad (2-15)$$

比较(2-15)与(1-26)式可见,当 $r=(x^2+y^2)^{1/2}\gg\zeta$ 时,Peierls位错的应力场与Volterra位错的应力场相同。这样,派-纳位错模型便消除了连续介质模型在位错中心处的奇异性。

2. 螺型位错的派-纳模型

对螺型位错也可以做类似于刃型位错的处理^[3]。如图2-3(a)所示,两个半无限大的晶体的起始位移为:

$$\varphi_x^0 = \begin{cases} \frac{b}{2} & x > 0 \\ -\frac{b}{2} & x < 0 \end{cases}$$

则可由沿Z方向位移 u_z 形成右手螺型位错,如图2-3(b)所示。显然 u_z 和 x 的关系与图2-2所示的 u_s 与 x 的关系相类似。

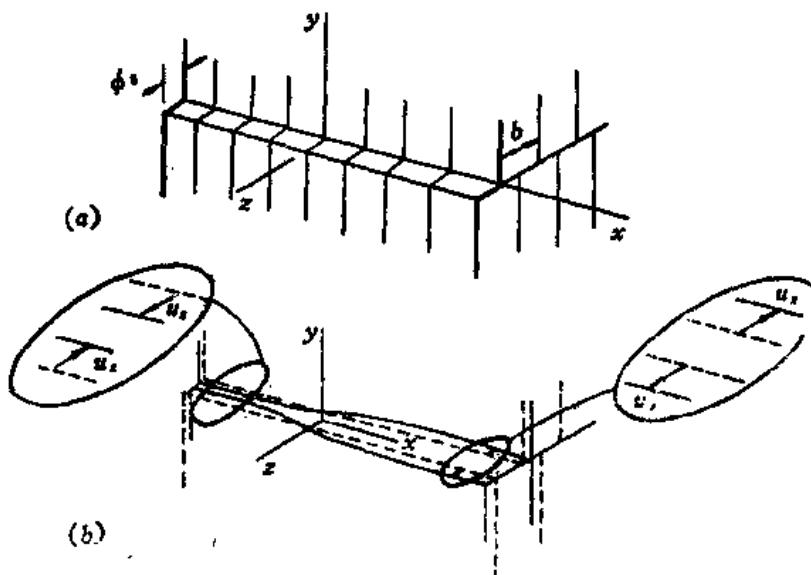


图 2-3 两块简单立方晶体凑成的螺型位错

设想由许多无穷小位错在滑移面上连续分布构成单体位错,各无穷小位错的柏氏矢量为 $b'(x')dx' = -2(\partial u_z / \partial x)_{z=z'} dx'$,式中 u_z 是与下部晶体有关的位移。由(1-13)式可得作用于滑移面上的切应力为:

$$\sigma_{yz}(x, 0) = -\frac{G}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b' dx'}{x - x'} = -\frac{G}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\partial u_z / \partial x)_{z=z'}}{x - x'} dx' \quad (2-16)$$

另外,利用与刃型位错相似的处理方法可由滑移面上下两层原子错排求出切应力

为:

$$\sigma_{xx}(x, 0) = -\frac{Gb}{2\pi d} \sin \frac{4\pi u_x}{b} \quad (2-17)$$

式中 d 为晶面间距。由 (2-16) 和 (2-17) 两式可得

$$\frac{G}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\partial u_x / \partial x)_{x=x'}}{x - x'} dx' = -\frac{Gb}{2\pi d} \sin \frac{4\pi u_x}{b} \quad (2-18)$$

于是, 对螺型位错满足边界条件的解为:

$$u_x(x, 0) = -\frac{b}{2\pi} \operatorname{tg}^{-1} \frac{x}{\eta} \quad (2-19)$$

式中, $\eta = d/2$, 为螺型位错的半宽度。同刃型位错的半宽度相比, 有如下关系:

$$\eta = (1 - \nu) \xi \quad (2-20)$$

所以, 螺型位错的宽度 2η 要比刃型位错小。

实际上, 由于上述推导中假定滑移面上切应力和位移的关系符合正弦周期函数, 不完全符合实际情况, 求出的位错宽度偏小。但不管怎样, 派-纳模型是对位错结构进行理论处理的一次很好的尝试, 为进一步推算位错运动的点阵阻力提供了基础。

二、Peierls位错的能量与派-纳力

1. Peierls位错的能量

在派-纳模型中, 位错的能量系由两部分组成。一是晶体的弹性能, 存在于两半晶体之中; 二是沿滑移面上下两层原子的相互作用能, 称为错排能。这样位错的能量就可表示为:

$$W = W_e + W_m \quad (2-21)$$

其中 W_e 为弹性能; W_m 为错排能。前者与 Volterra 位错的应变能相一致, 而后者主要同滑移两侧原子键合平衡的破坏有关, 是 Volterra 位错心部能量的反映。

对 Peierls 位错的弹性能可以采用和连续介质模型相类似的方法来计算。如图 2-1 所示的刃型位错而言, 储存在上半部晶体的弹性能等于作用在表面上的力产生的位移 u_x 所做的功。在由 δx 乘以 Z 向上单位长度的单元面积上, 切应力所作的功为:

$$\delta W_e = \int_0^{u_x} \sigma_{xx}(x, 0) \delta x du = \frac{1}{2} \sigma_{xx}(x, 0) u_x \delta x \quad (2-22)$$

于是, 经过上下两半晶体表面从 $x = -R$ 到 $x = R$ 取积分, 并将 σ_{xx} 和 u_x 分别以 (2-11) 和 (2-9) 式代入, 则得:

$$W_e = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{2\xi} \quad (2-23)$$

此式与 (1-38) 式类似。

同样, 对如图 2-3 所示的螺型位错的弹性能有:

$$W_s = -\frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{2\eta} \quad (2-24)$$

下面来计算滑移面上的错排能。对图2-1所示的刃型位错而言，在滑移面上的局部切应变可表达为：

$$\varepsilon_{ss}(x, 0) = -\frac{\varphi_s}{2d} = -\frac{2u_s + (b/2)}{2d}$$

因局部应变能包含两部分的贡献，即

$$\sigma_{ss} d\varepsilon_{ss} + \sigma_{ss} d\varepsilon_{ss} = 2\sigma_{ss} d\varepsilon_{ss},$$

故储存于单元体积（高为 d ，宽度为 δx ，在Z方向上为单位长度）中的错排能应为：

$$\begin{aligned} \delta W_s(x) &= -2 \int d\delta x \sigma_{ss} d\varepsilon_{ss} = 2 \int_{b/4}^{u_s} \delta x \sigma_{ss} du_s \\ &= -\frac{Gb \delta x}{\pi d} \int_{b/4}^{u_s} \sin \frac{4\pi u_s}{b} du_s \\ &= \frac{Gb^2 \delta x}{4\pi^2 d} \left(1 + \cos \frac{4\pi u_s}{b} \right) \end{aligned} \quad (2-25)$$

式中， σ_{ss} 由(2-5)式给出。因此，单位长度位错在滑移面上总的错排能为：

$$W_s = -\frac{Gb^2}{4\pi^2 d} \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + \cos \frac{4\pi u_s}{b} \right) dx = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \quad (2-26)$$

对于螺型位错的错排能可由下式给出：

$$W_s = \frac{Gb^2}{4\pi} \quad (2-27)$$

若将(2-23)与(2-26)两式比较，可以看出，位错中心区域的能量（即错排能）在总能中所占的比例不大。由于在通常晶体中， $\ln(\frac{R}{2\zeta}) \approx 10$ ，所以位错中心区域的能量只占总能量的1/10左右。

2. 派-纳力

上面位错错排能的计算中由于用了积分代替了求和，不能反映出位错线附近原子排列情况对错排能影响的细节。很显然，错排能的数值应与位错线和原子列的相对位置有关。

当位错线相对于原子列移动时，位错线附近的错排情况就会有所改变，因而影响错排能的数值。Nabarro计算错排能时引入了参数 a ，以 ab 表示位错中心到对称位置的距离（如图2-4所示）。由于晶体结构的影响，错排能必然是 a 的周期函数。当取位错

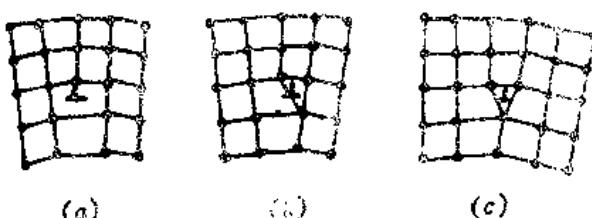


图2-4 位错在晶体中的移动

(a) $a=0$ (b) $a=\frac{1}{4}$ (c) $a=\frac{1}{2}$

中心为原点时，对滑移面两侧原子面上各原子的位置可以近似地表示为：

$$x = (\alpha + \frac{1}{2}n)b, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots)$$

由于 $\delta x = b$ 时，(2-25)式是表示滑移面上下一对原子列的错排能，所以一列原子的错排能便为：

$$\delta W_n = \frac{Gb^3}{8\pi^2 d} \left(1 + \cos \frac{4\pi u_s}{b} \right) \quad (2-28)$$

将各原子列的错排能叠加便可求出整个滑移面中的错排能，即

$$W(\alpha) = \frac{Gb^3}{8\pi^2 d} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ 1 + \cos 2 \left[\operatorname{tg}^{-1} \left(\alpha + \frac{1}{2}n \right) \left(\frac{b}{\zeta} \right) \right] \right\} \quad (2-29)$$

式中 u_s 由(2-9)式求出，并用 α 表示各原子列到位错的距离。

再应用富氏积分理论可以进一步求出刃型位错的总错排能的近似值^[23]：

$$\begin{aligned} W(\alpha) &= \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} + \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \exp \left(-\frac{4\pi\zeta}{b} \right) \cos 4\pi\alpha \\ &= \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} + \frac{W_p}{2} \cos 4\pi\alpha \end{aligned} \quad (2-30)$$

式中， W_p 通常称为派-纳位垒，用以表示位错的周期性势能。这里所求出的错排能包含两项。第一项与(2-26)式所示的一级近似结果相同，与位错线的位置无关，并在数值上构成了错排能的主要部分；第二项由于 $\exp(-4\pi\zeta/b)$ 因子的影响，在数值上要小得多，但它是 α 的周期函数，具体反映了位错线在晶体中移动时所引起的能量起伏。

这样，由于位错线的能量是 α 的周期函数，使位错线沿滑移面移动时，应通过一系列能量的峰和谷的位置。对于单位长度的刃型位错线翻越派-纳位垒所需克服的阻力可由下式求出：

$$\frac{F}{L} = -\frac{1}{b} \frac{\partial W(\alpha)}{\partial \alpha} = -\frac{2Gb}{1-\nu} e^{-\frac{4\pi\zeta}{b}} \sin 4\pi\alpha \quad (2-31)$$

当 $\sin 4\pi\alpha = -1$ 时， $\frac{F}{L}$ 达极大值，称为派-纳力。相应的最大切应力阻力称为派-纳应力，由下式给出：

$$\sigma_p = \frac{1}{b^2} \left[\frac{\partial W(\alpha)}{\partial \alpha} \right]_{\alpha=0} = \frac{2\pi W_p}{b^2} = \frac{2G}{1-\nu} \exp \left(-\frac{4\pi\zeta}{b} \right) \quad (2-32)$$

派-纳应力相当于在理想晶体中移动单一位错所需的临界切应力。这种力来源于点阵的周期结构，系由位错前方和后方的原子偏离了周期场内的等效位置所致。所以派-纳力实质上是反映晶体点阵对位错运动的最大阻力。螺型位错的派-纳应力与(2-32)式相类似。

对派-纳力进行精确的计算尚有困难，目前还没有满意的结果。主要原因在于对位

错中心的结构及原子间的相互作用力的表达式尚不清楚。派-纳模型只能给出定性的结果。如按(2-32)式估算,一般派-纳应力为 10^{-4} — $10^{-2} G$,低于理想晶体的临界切应力,所以证实了位错易动的原始设想。考虑到派-纳力在数值上仅有定性意义,也可以用经验公式加以表达^[3]。对错排能及点阵阻力的变化周期有等于点阵周期或为其一半两种可能,故相应有如下表达形式:

$$W(\alpha) = \frac{W_p}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi ab}{a} \right) = W_p \sin^2 \frac{\pi ab}{a} \quad (2-33)$$

和

$$\sigma(\alpha) = \frac{1}{b^2} \frac{\partial W(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\pi W_p}{ab} \sin \frac{2\pi ab}{a} \quad (2-34)$$

式中, $a = b/2$ 或 b , 取决于错排能变化的周期。 $W(\alpha)$ 和 $\sigma(\alpha)$ 的变化趋势如图 2-5 所示。于是, 派-纳应力的经验表达式为:

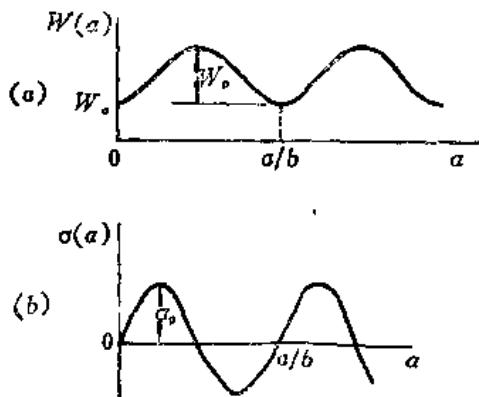


图 2-5 错排能与点阵阻力的变化周期

$$\sigma_p = \frac{\pi W_p}{ab} \quad (2-35)$$

从派-纳力的分析中,可以得出如下结论:

(1) 位错宽度的影响:由(2-32)式可见,位错宽度增加使派-纳应力降低。由此便不难理解刃型位错的易动性要比螺型位错大。其原因同刃型位错的宽度较大有关。这一点可通过比较(2-10)与(2-20)两式看出。

(2) 位错柏氏矢量的影响:位错柏氏矢量的大小实际上是反映了晶体在滑移方向上原子间距的大小。由(2-32)式可见,柏氏矢量减小时,位错的派-纳应力降低。因此位错易于沿晶体密排方向滑移。

(3) 晶面间距的影响:由(2-10)和(2-20)两式表明,晶面间距增大时,有利于位错宽度增加,导致派-纳力下降。这一方面说明,晶体的密排面易于滑移;另一方面也说明,同体心立方点阵相比,面心立方点阵具有密排面,其派-纳位垒与派-纳应力较低。

§ 2-2 位错的弯折与割阶

本节主要讨论位错线的拐折现象。在实际晶体中,位错线拐折有弯折与割阶两种形式。下面介绍其形成机制及有关特性。

一、弯折

1. 弯折的形成及种类

如果位错线的一部分发生了拐折,而拐折部分仍与原位错处在同一滑移面上时,称

此拐折为弯折。在晶体中，位错线出现弯折的重要原因是其能量随在滑移面上位置不同发生周期性变化。如图2-6所示，在0 K下沿x方向分布的位错由于线张力作用易呈直线状，躺在用实线表示的能谷的位置上。然而，当温度不等于绝对零度时，位错线却易呈弯折状，某些部分位于势能谷中，另一些部分却跨越派-纳能垒。按照弯折的形成特点不同，可将常见的弯折分成以下两种类型：

(1) 几何性弯折

如图2-7所示，晶体中位错线的形状与其取向位置有关，并主要由两方面因素所决定。一方面位错线在派-纳位垒的作用下，趋于尽可能躺在势能谷中，使弯折的宽度为零，如图中A所示；另一方面，位错又在线张力的作用下尽可能缩短自身的长度，趋于呈直线状以使弯折的宽度增加，如图中B所示。实际上，位错线的形状常介于两者之间，表现出有一定的弯折宽度，如图中C所示。因此，弯折的宽度可用下式表达：

$$m = d \left(\frac{W_0}{2W_s} \right)^{1/2} \quad (2-36)$$

式中， d 为弯折的高度； W_0 为单位长度位错线能量，在数值上等于线张力； W_s 为位错的派-纳位垒。若以一般 $W_s \approx 10^{-8} W_0$ 代入上述方程时，则 $m \approx 22d$ 。弯折的形成能也与位错线张力和派-纳位垒有关，如下式所示：

$$W_t = \frac{2d}{\pi} (2W_s W_0)^{1/2} \quad (2-37)$$

可见，同螺型位错相比，刃型位错的派-纳位垒较低，使其弯折形成能较小（约为前者的1/4至1/8）。所以，一般而言，刃型位错更易于形成弯折。

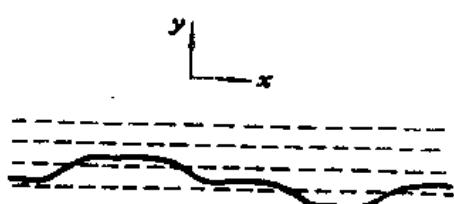


图2-6 温度与派-纳位垒对晶体中位错形状的影响。实线表示位错线；虚线表示能峰

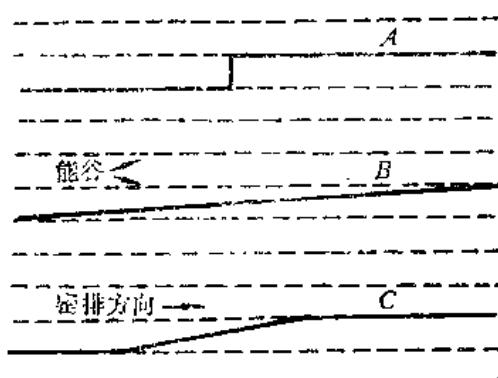


图2-7 几何性弯折的形成。虚线表示能谷；实线表示位错线

影响形成几何性弯折趋势大小的因素可用下式表达：

$$C_k \propto \frac{\theta}{d} \quad (2-38)$$

式中， C_k 为几何性弯折的浓度，可以单位位错线长度上弯折数量来表征； θ 为位错线与原子密排方向的夹角； d 为沿滑移方向上的晶面间距，即派-纳能谷的间距。由于 θ 角增大时，几何性弯折的浓度增加，会使弯折相互联结，导致各段弯折的独立性下降。其结果

易使位错线呈波浪状，如图 2-8 所示。当金属中位错密度较高 ($\geq 10^7 \text{ cm}^{-2}$) 时，位错线易呈连续曲线状；只有在位错密度较小 (10^2 — 10^3 cm^{-2}) 时，才能在透射电镜下看到位错呈直线状，主要沿低指数晶向分布。这是因为位错密度高时，位错的交互作用增大，而且与派-纳能谷呈大角度倾斜的位错数量增多，以致使派-纳位垒对位错线形状的影响降到次要地位。而只有在位错数量较少时，派-纳位垒的影响才得以表现出来。

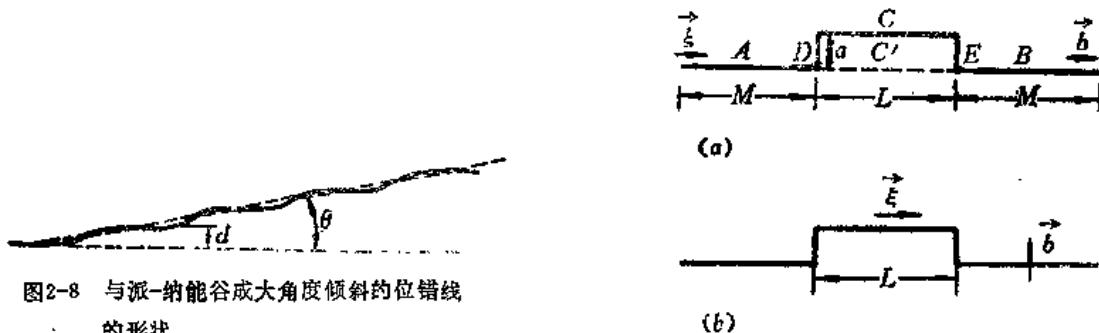


图2-8 与派-纳能谷成大角度倾斜的位错线
的形状

图2-8 热学性弯折对 (a) 在螺型位错上形成的弯
折对；(b) 在刃型位错上形成的弯折对

(2) 热学性弯折

如图 2-6 所示，在 0 K 下因派-纳位垒的影响，位错呈直线状躺在能谷中。温度升高时，由于热激活加剧，可使局部位错线翻越派-纳位垒，从一个密排原子列横渡到邻近的密排原子列上去。这样便可形成一对弯折（如图 2-9 所示），称为热学性弯折对。在弯折对中，两个弯折具有相同的柏氏矢量，而位错线方向相反，彼此相互吸引。由于形成弯折对要使位错的长度和能量增加，需要一定的激活能。故可将热学性弯折对的平衡浓度与温度关系表达如下：

$$C_k^+ C_k^- = \frac{1}{a^2} \exp\left(-\frac{2W_k}{kT}\right) \quad (2-39)$$

式中， C_k^+ 和 C_k^- 分别为正、负弯折的浓度； k 为玻尔兹曼常数； a 为同号平衡弯折在位错线方向上的间距。 $2W_k$ 为弯折对的形成能，在数值上近似等于弯折对中两个弯折的自能与交互作用能之和，即：

$$2W_k = 2W_f + W_{int} \quad (2-40)$$

式中， W_f 为单个弯折的自能， W_{int} 为两个弯折的交互作用能。可以证明，对图 2-9(a) 中所示的螺型位错而言，形成高度为 d 的刃型弯折对时，其 W_f 和 W_{int} 的表达式为：

$$W_f = \frac{Gb^2d}{4\pi(1-\nu)} \left[\ln \frac{d}{\zeta} - (1-\nu) \right] \quad (2-41)$$

和

$$W_{int} = \frac{Gb^2d^2}{8\pi L} \frac{1+\nu}{1-\nu} \quad (2-42)$$

其中， ζ 为刃型位错的半宽度； L 为弯折对中两位错弯折的间距。

由(2-42)式还可求出弯折对中两弯折之间的吸引力与其间距的二次方成反比，即：

$$F_{\text{attr}} = \frac{dW_{\text{attr}}}{dL} = \frac{Gb^2d^2}{8\pi L^2} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu} \quad (2-43)$$

可见这种吸引力的特点是随弯折之间距离增加而减小较迅速。这一点与一般平行位错之间的作用力与间距的一次方成反比有所不同。

对于图2-9(b)中所示的刃型位错，形成热学性弯折对时将具有螺型位错的性质，也有类似的 W_t 和 W_{attr} 表达式：

$$W_t = \frac{Gb^2d}{4\pi} \left(\ln \frac{d}{\eta} - \frac{1}{1-\nu} \right) \quad (2-44)$$

和

$$W_{\text{attr}} = - \frac{Gb^2d^2}{8\pi L} \cdot \frac{1-2\nu}{1-\nu} \quad (2-45)$$

式中， η 为螺型位错的半宽度。

除了上述两种类型的弯折外，还可以通过位错交截形成弯折。如图2-10所示，两个刃型位错相互垂直并具有平行的柏氏矢量时，其滑移面相互垂直。在外力作用下运动相遇并交截后，AB位错上出现拐折PP'，XY位错上出现拐折QQ'。其中PP'的方向和长度取决于XY位错的柏氏矢量 \vec{b}_1 ，QQ'的方向和长度取决于AB位错的柏氏矢量 \vec{b}_2 。又由柏氏矢量的守恒性知，这两段拐折的柏氏矢量分别与所在的位错相同，因而均属螺型位错，可以各自在所在原位错的滑移面上滑移。所以，由位错AB和XY交截所形成的两段拐折均为弯折。

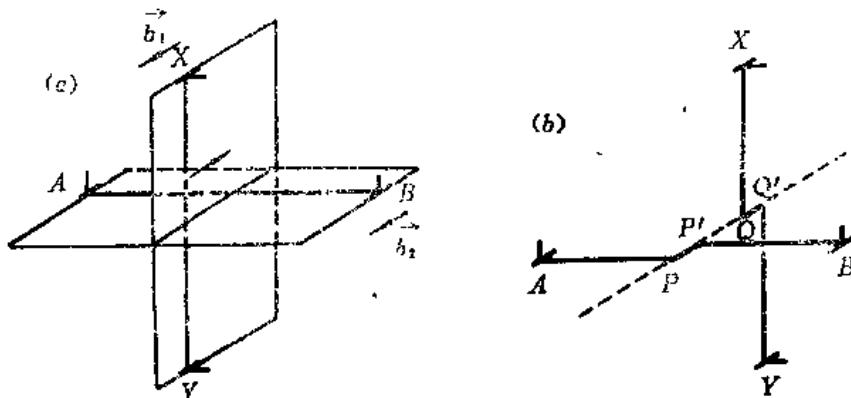


图2-10 两个相互垂直并具有平行柏氏矢量的刃型位错的交截

(a) 交截前 (b) 交截后

2. 弯折的特性

弯折的出现为位错运动时克服点阵阻力提供了有利途径。如图2-6所示，躺在派-纳能谷中的直线位错运动时，需要整体翻越派-纳位垒。然而，一旦在位错线上形成弯折或弯折对时，可以通过弯折的侧向移动使位错线局部不断连续地翻越位垒，以达到使

位错线整体从一个能谷移到下一个能谷的同样效果。同位错线的整体移动相比，弯折侧向移动所需克服的点阵阻力要小得多。这是因为弯折位于位错的严重错排区内，附近的原子离开了平衡位置，可为弯折的移动造成预位移，致使弯折的易动性明显增大。所以通常认为，弯折的形成有利于提高位错的易动性。

随着温度升高，热激活作用加剧，热学性弯折对易于形成。对于体心立方点阵金属而言，因派-纳位垒较高，在低温下位错易于躺在能谷；而温度升高时，可由热学性弯折对的形成与侧向移动，使位错线比较易于翻越派-纳位垒，所以，体心点阵金属易于表现出屈服强度随温度上升而显著下降的现象。相比之下，面心立方点阵金属的派-纳位垒较低，使屈服强度随温度变化趋势不明显。这种变化趋势的差别表现为BCC金属对冷脆的敏感性大，而FCC金属对冷脆敏感性较小。

另外，弯折还具有形成后易于消失的特性，即存在不稳定性。这一方面是因为温度升高时，热激活作用增强，相对使派-纳位垒的影响减小，导致弯折在线张力的作用下易于消失。另一方面，由于弯折与位错线处于同一滑移面上，也易于通过位错线的滑移而使弯折消失。所以，弯折一般不阻碍位错的滑移。

二、割阶

1. 割阶的形成

如果位错线的一部分发生了拐折，而拐折部分与位错的滑移面垂直时称为割阶。或者，广义而言，只要位错线的拐折部分有垂直于滑移面分量时便为割阶。可见，形成割阶的结果是使位错线的一部分从所在的滑移面抬高或降低了一个高度，移到了另一个平行的面上去了，如图2-11所示。若割阶的高度等于晶面间距 d 时，称为单位割阶，或简称为割阶。有时割阶的高度可能等于几个面间距，称为超割阶。不难看出，由于位错线张力和同号割阶间的排斥作用等，使超割阶的形成受到一定限制。

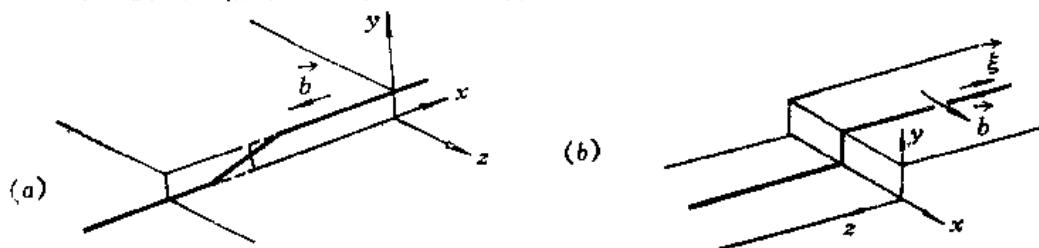


图2-11 位错线上的割阶
(a) 螺型位错上的割阶 (b) 刃型位错上的割阶

常见的割阶有以下两种形式：

(1) 位错交截性割阶

晶体中位错的分布纵横交错，使位错在外力作用下沿滑移面运动时，不可避免地要与其它穿过滑移面的位错（称为林位错）相交。由于位错交截的结果，除可能形成如图2-10所示的弯折外，还常常形成割阶。下面列举几种典型的形成割阶的位错交截情形：

(a) 两个相互垂直的刃型位错的交截

如图2-12所示，两个刃型位错的位错线、柏氏矢量以及滑移面都相互垂直时，由于

位错 XY 运动的结果，会使位错 AB 上形成拐折 PP' 。其长度和方向都与 \vec{b}_1 相同，而柏氏矢量仍为 \vec{b}_2 ，故相应的滑移面应为 P_{XY} 面。当位错 AB 在 P_{AB} 面上滑移时， PP' 同时可在 P_{XY} 面上滑移。显然，因 PP' 垂直于位错 AB 的滑移面，应为割阶；又由于 PP' 的产生不影响位错 AB 的滑移，可称为非障碍性割阶。然而，当割阶 PP' 产生时，必竟要增加位错 AB 的长度和自能，使交截成为能量增加的过程，需外力作功。

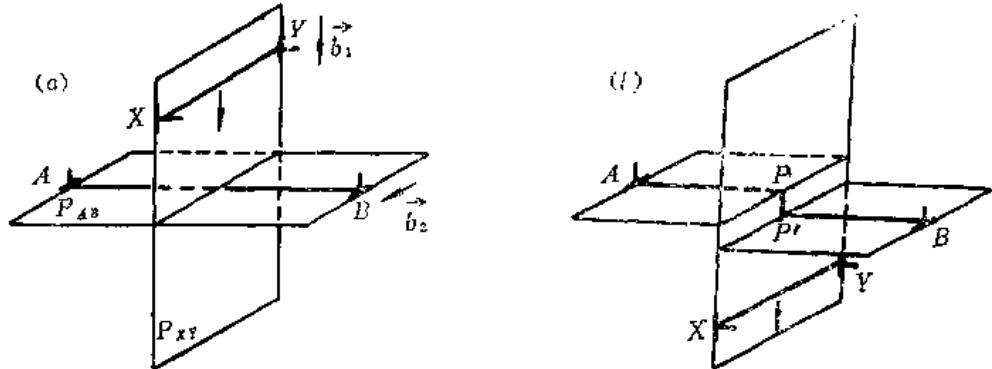


图2-12 位错线与柏氏矢量均相互垂直的两刃型位错的交截

(a) 交截前 (b) 交截后

(b) 相互垂直的刃型位错与螺型位错的交截

如图2-13(a)所示，刃型位错 AB 在螺型位错 XY 的螺旋面上滑移。在与螺型位错相交以前，位错 AB 全都处于同一层原子面上，而在相交后， AB 位错要分属于两层原子面，即 B 端在上层， A 端在下层。于是，便使位错 AB 产生拐折 PP' ，如图2-13(b)所示。显然，其性质为割阶。

对于螺型位错 XY 而言，在受到刃型位错 AB 交截后，也有拐折 QQ' 出现。由于其大小和方向与 \vec{b}_1 相同，而柏氏矢量为 \vec{b}_2 。因此，此拐折应为一小段刃型位错。若螺型位错 XY 在 QQ' 的滑移面内滑移时，此拐折的性质应为弯折。

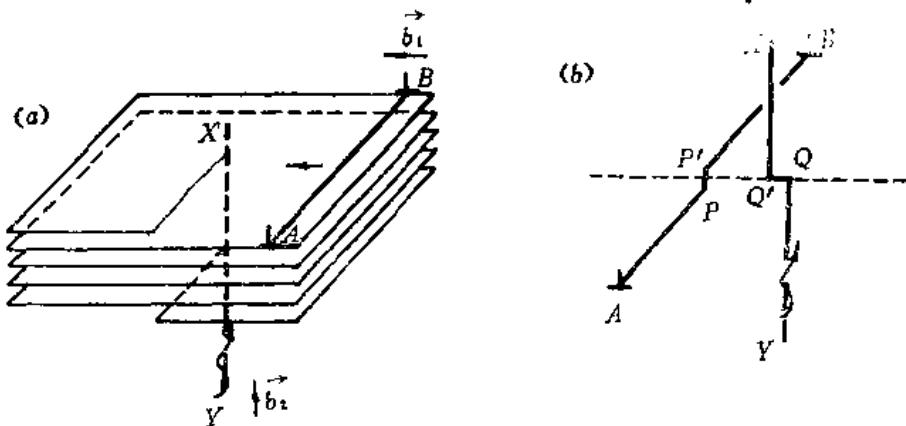


图2-13 相互垂直的刃型位错与螺型位错的交截

(a) 交截前 (b) 交截后

(c) 相互垂直的螺型位错的交截

如图2-14所示，两个相互垂直的螺型位错交截后，各自产生了一个拐折。每个拐

$$W_t = \frac{Gb^2d}{4\pi(1-\nu)} \quad (2-48)$$

和

$$W_{t+t} = -\frac{Gb^2d^2}{8\pi L(1-\nu)} \quad (2-49)$$

式中， L 为割阶对中两个割阶的间距。由（2-49）式还可以进一步求得异号割阶间的吸引力（或同号割阶间的斥力）为：

$$F_{t+t} = \frac{Gb^2d^2}{8\pi L^2(1-\nu)} \quad (2-50)$$

可见割阶间的相互作用力也与弯折间的作用力相类似，与间距 L 的平方成反比。

一般而言，同弯折对相比，割阶对的热平衡行为有许多相似之处。但热学性割阶对形成时涉及到扩散扩程，使其形成能要远大于热学性弯折对的形成能。因此，在相同条件下，热学性割阶对的浓度要低得多。

2. 割阶的特性

割阶与弯折在可动性上有很大差别。这是因为弯折仍位于原位错的滑移面上，易于滑移，有较大的易动性；而割阶垂直于滑移面，难于随其所在的位错运动。割阶只能以攀移方式运动，涉及原子扩散，故可动性较差，常常表现为位错运动的障碍。下面分析两种典型割阶的运动特性：

（1）螺型位错的割阶

如图 2-11 (a) 所示，在螺型位错上所形成的拐折具有双重性。当螺型位错在 $y=0$ 的面上滑移时，所形成的拐折位于 $z=0$ 的面上，应为割阶，阻碍位错滑移。然而，若螺型位错以 $z=0$ 而为滑移面时，此拐折又成为弯折，有很大的易动性。弯折可在螺型位错滑移过程中消失，或者螺型位错不动而弯折沿 x 方向作侧向移动。所以，一般而言，螺型位错上的拐折只有成为割阶时才能阻碍位错滑移。

（2）刃型位错的割阶

如图 2-11 (b) 所示，刃型位错上出现的拐折是一刃型割阶。其滑移面为 $z=0$ 面，可沿 x 方向滑移。但在晶体中，如刃型位错的滑移为 $y=0$ 的晶面时， $z=0$ 的晶面便不一定是易滑移面。按照连续介质模型，带有割阶的刃型位错的运动可以通过刃型位错在 $y=0$ 面上滑移，和割阶在 $z=0$ 面上滑移来进行。然而，在晶体中割阶却难于随同刃型位错一起运动。所以，一般而言，在连续介质中，刃型位错上的割阶不影响位错运动；而在晶体中，刃型位错上的割阶却阻碍所在位错的运动。

§ 2-3 全位错的能量条件与滑移系统

晶体中的位错有全位错与部分位错之分。一般将柏氏矢量等于晶体的最短点阵矢量的位错称为全位错，而将柏氏矢量小于最短点阵矢量的位错称为部分位错。当全位错从一个平衡位置移到另一个平衡位置时，不会引起晶体点阵结构的改变。相反，全位错沿

滑移面运动时，可使所扫过的区域的原子恢复到完整的点阵排列。本节讨论全位错存在的能量条件，以及全位错滑移与晶体滑移系统的关系。

一、Frank能量准则

晶体中点阵矢量有许多个，但全位错的柏氏矢量必须是点阵矢量中最短的一个，或至少是最短的几个中的一个。这是由位错的能量条件所决定的。由(1-38)式可以看出，位错的能量正比于 b^2 。Frank^[6]提出可以忽略式中 θ 角的变化对位错能量的影响，而用 b^2 作为评价位错稳定性的准则。所以若位错的柏氏矢量 \vec{b}_1 较大时，便可能发生分解，形成两个具有较小柏氏矢量 \vec{b}_2 和 \vec{b}_3 的位错。位错分解反应的判据是：

$$b_1^2 > b_2^2 + b_3^2 \quad (2-51)$$

或者相反，也可以按以下条件发生位错的合成反应（如图2-16所示）：

$$b_1^2 + b_2^2 > b_3^2 \quad (2-52)$$

因此，从能量角度考虑，全位错的柏氏矢量只能是少数几个最短的点阵矢量，以尽可能降低位错的自能。若柏氏矢量较大或为最短点阵矢量的倍数时，会发生分解反应，难于单独存在。

几种常见金属晶体的最短点阵矢量示于表2-1。在FCC点阵中，最短点阵矢量为

$$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle, \text{ 相应位错的能量仅为} \langle 100 \rangle$$

位错的一半。所以， $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 位错是FCC点阵中常见的全位错，而 $\langle 100 \rangle$ 型位错则很少被观察到。在BCC点阵中， $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 是最短的点阵矢量，使 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错的能量最低而成为常见的全位错。在HCP点阵中，最短的点阵矢量是

$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ，因而常见的全位错便是 $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 位错。

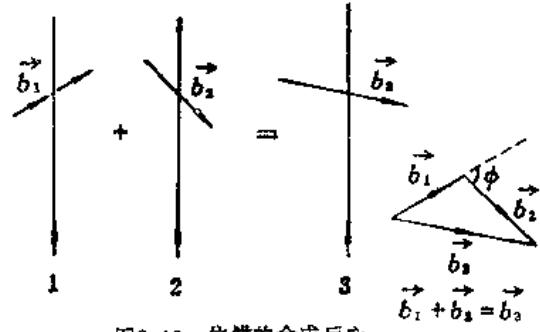


图2-16 位错的合成反应

表2-1

常见金属晶体的最短点阵矢量

点阵类型	最短点阵矢量	次短点阵矢量
FCC	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle, b = \frac{\sqrt{2}}{2}a$	$\langle 100 \rangle, b = a$
BCC	$\frac{1}{2}\langle 111 \rangle, b = \frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\langle 100 \rangle, b = a$
HCP	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle, b = a$	$\langle 0001 \rangle, b = c$

二、晶体的滑移系统

晶体的滑移系统与全位错的滑移密切相关。晶体的滑移面应与全位错的滑移面一致，而滑移方向要与全位错的柏氏矢量平行。确定晶体的滑移系统时，关键在于判定全位错的柏氏矢量及其滑移面。

1. 晶体的滑移方向

实验观察表明，晶体滑移方向通常是原子排列最密集的晶向，与最短点阵矢量的方向相一致。由Frank准则可知，只有当柏氏矢量等于最短点阵矢量时，全位错的能量最低，才能在晶体中稳定存在。而且，随着柏氏矢量的减小，派-纳力降低，有利于位错运动。因此在外力作用下，总是由具有最短柏氏矢量的全位错滑移造成塑性变形的效果。

由表2-1可知，FCC和BCC金属具有单一的滑移方向，分别为 $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 。HCP金属的滑移方向主要为 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ，但在高温下也可观察到 $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 为滑移方向。

2. 晶体的滑移面

晶体通常都以密排面为滑移面。这是由于密排面的间距较大，使位错在其上运动时阻力（派-纳应力）最小。同时，全位错也可能沿密排面扩展成层错（如§2-6所述），密排面将易于成为扩展位错固有的滑移面。

在FCC晶体中，以 $\{111\}$ 晶面的面间距最大， $d = \sqrt{3}/3a$ ； $\{100\}$ 晶面的面间距次之， $d = a/2$ ；再次为 $\{110\}$ 晶面， $d = a/\sqrt{8}$ 。所以，FCC金属的滑移面比较固定，以 $\{111\}$ 晶面为主。但在某些FCC金属高温变形时，也可以观察到 $\{100\}$ 和 $\{110\}$ 成为滑移面。

在BCC晶体中，没有最突出的密排晶面；相对而言，比较密排的晶面是 $\{110\}$ 。由于§2-10中所述的理由，除 $\{110\}$ 晶面以外， $\{112\}$ 晶面也可能成为层错面。因而， $\{110\}$ 和 $\{112\}$ 都是常见的滑移面。而且在较高温度或较低的形变速率下，还发现 $\{123\}$ 晶面也会成为滑移面。但是，BCC点阵中只有一种密排方向，可使三个 $\{110\}$ 晶面、三个 $\{112\}$ 晶面和六个 $\{123\}$ 晶面相交于同一 $\langle 111 \rangle$ 方向，故在螺型位错发生交滑移的情况下，常使滑移线呈波浪状。所以相对来说，BCC金属的滑移面较不固定，常随晶体的成分、取向、温度和形变速率等因素的变化而变化。如对纯铁而言，室温变形时，其滑移面主要取决于最大切应力分量；而在低温下变形或有硅合金化时，滑移将被局限在特定的 $\{110\}$ 晶面上。

在HCP晶体中，密排面随 c/a 值的变化而变化。当 $c/a \geq 1.633$ 时，基面 $\{0001\}$ 是最密排的晶面；而当 $c/a < 1.633$ 时，密排面改为以棱柱面 $\{10\bar{1}0\}$ 以及棱锥面 $\{10\bar{1}1\}$ 面为主。因此，对 c/a 值较大的金属如Zn和Cd等，其主要滑移面是 $\{0001\}$ 晶面，而 c/a 值较小的金属如Ti和Zr等，主滑移面是 $\{10\bar{1}0\}$ ，次滑移面是 $\{10\bar{1}1\}$ 。对于Co和Mg而言，虽然 c/a 值略小于1.633，却因 $\{0001\}$ 面的层错能较低，而仍以 $\{0001\}$ 面为主要滑移面。唯独Be的情况较为特殊，其 c/a 值较低，却仍以基面滑移为主，原因尚不清楚。

因此，影响晶体滑移面的主要因素为晶面间距和层错能两个方面。一般而言，晶面

$$F = \sigma b h \quad (2-59)$$

于是，将(2-59)式代入(2-55)式便得出弯折的侧向运动速度如下：

$$v_t = D_t \frac{\sigma b h}{kT} \quad (2-60)$$

可见，虽然弯折的侧向运动也需要克服一定的位垒，但由于是沿非密排方向运动，使所需热激活能显著减小。因而，对立方晶系金属而言，即使降低温度接近绝对零度时，弯折仍有足够大的可动性。这便使低应力和较低温度下，位错的运动主要以弯折运动方式进行。而且，若假设弯折运动的热激活能忽略不计时，弯折的可动性将主要取决于声子散射所引起的阻尼的大小。因此，对宽度为 w 和高度为 h 的弯折的滑移速度可用下式估算：

$$v_t = \frac{\sigma b w}{Bh} \quad (2-61)$$

式中， B 为位错运动的阻尼系数。

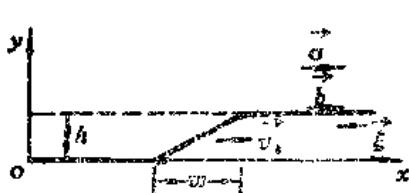


图2-17 位于滑移面(xoy)内的弯折在应力 σ_{xx} 作用下以速度 v_t 运动

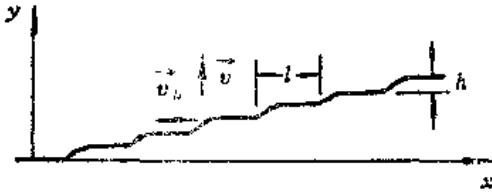


图2-18 在倾斜的螺型位错上包含有一些间距为 l 的弯折

在已知弯折侧向(x 方向)运动速度的基础上，还可以进一步求出螺型位错在垂直于其自身方向上的运动速度。如图2-18所示，位错线上各弯折的高度为 h 和间距为 l 时，则整个位错的运动速度 v 与弯折的速度 v_t 的关系如下：

$$v = \frac{h}{l} v_t \quad (2-62)$$

于是，便可由(2-60)式进而求出：

$$v = D_t \frac{\sigma b h^2}{l k T} \quad (2-63)$$

可见，位错线上弯折数量愈多(或间距 l 愈小)时，位错线的运动速度越大。



图2-19 倾斜位错AB以弯折运动和萌生机制向前弓弯到ACB组态

若含有弯折的螺型位错两端固定时，在应力作用下可由弯折运动向前弓弯，如图2-19所示。在应力作用下，各弯折开始侧向运动并在钉扎点A处塞积，使靠近另一钉扎点B附近出现较长的位于派-纳能谷的直位错线段。然后，又在此直的位错线段上形成新的弯折对(如D处)，和通过其中两弯折向相反方向侧向运动而使位错线进一步向前弓弯。这种机制可

能在低温下受切应力作用时，使螺型位错线在滑移面上不断向前弓弯的一种常见的情况。最后，在外力作用下，位错线的弯曲程度越来越大，则在线张力的作用下成为连续的曲线状。

二、位错的扩散攀移

刃型位错攀移的元过程是点缺陷（空位或填隙原子）的产生或湮没。刃型位错攀移时，除了受弹性应力外，还可受渗透力作用。这是由位错线附近点缺陷的浓度差所引起的一种攀移力。如图2-20所示，若从无应力作用的晶体表面取一排原子放于刃型位错心并沿位错线排列时，会使位错向上攀移一个原子高度 h 。在位错心受拉应力 σ_{xx} 的条件下，这会使单位长度位错线的能量发生变化，即

$$\frac{\delta W}{L} = -\sigma_{xx}bh \quad (2-64)$$

由此，单位长度位错线所受攀移力为：

$$\frac{F_y^{el}}{L} = \sigma_{xx}b \quad (2-65)$$

相类似地，若 $\sigma_{xx} = 0$ ，而将位错线附近晶格结点上的原子移到位错线上，也可使位错攀移 h 距离。但由于 $\sigma_{xx} = 0$ ，不引起弹性能变化，却伴随空位的形成，使单位长度位错线攀移引起自由能变化为：

$$\frac{\delta G}{L} = \frac{\bar{G}bh}{v_a} \quad (2-66)$$

式中， v_a 为原子体积（约为 b^3 ）， \bar{G} 为空位的化学势，由下式给出：

$$\bar{G} = kT \ln \frac{c}{c^0} \quad (2-67)$$

其中 c^0 和 c 分别为完整晶体和实际晶体中的空位浓度。于是，便由(2-66)式给出的自由能变化引起作用于单位长度位错线上的渗透力为：

$$\frac{F_y^{os}}{L} = -\frac{\bar{G}b}{v_a} = -\frac{kTb}{v_a} \ln \frac{c}{c^0} \quad (2-68)$$

而且，由作用于位错心上的正应力 σ_{xx} 和空位浓度的变化产生总的攀移力可用下式表达：

$$\frac{F_y}{L} = \frac{F_y^{el}}{L} + \frac{F_y^{os}}{L} = \sigma_{xx}b - \frac{kTb}{v_a} \ln \frac{c}{c^0} \quad (2-69)$$

在平衡时， $F_y = 0$ ，则在位错附近空位的局部平衡浓度应为：

$$c = c^0 \exp\left(\frac{\sigma_{xx}v_a}{kT}\right) \quad (2-70)$$

这样一来，若在位错附近相对于 c^0 出现空位的过饱和或非饱和时，便会出现空位的扩散

若割阶沿位错线运动的平均速率为 v_I , 则位错攀移的速率可为

$$v = bc_I v_I \quad (2-74)$$

可见, 影响位错攀移的主要因素是 c_I 和 v_I 。在热平衡时, 割阶浓度为:

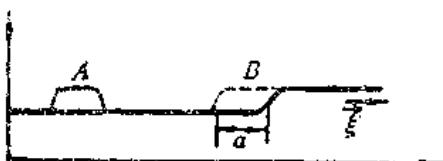


图2-22 由空位在刃型位错上形成割阶对和引起

割阶沿位错线移动, $\vec{b} = (0, 0, -bx)$



图2-23 在攀移力作用下使割阶右移, $\vec{b} = (0, 0, bx)$

割阶每移动一步都要向周围基体中发射一空位, 而且此空位尚须继续迁移一个原子间距, 以防重新被割阶所吸收。因此, 使割阶移动的激活能应为 $W_v + W'_v$, W_v 为空位的形成能, W'_v 为空位的迁移能。对割阶移动距离 a 时发射空位所需的能量也可由攀移力所作的弹性功加以计算:

$$W = \frac{Fha}{L} = \frac{F}{L} \frac{v_s}{b} \quad (2-77)$$

于是, 便可由(2-70)式求出割阶附近空位的平衡过饱和浓度 c' , 即

$$c' = c - c^0 = c^0 \left[\exp \left(\frac{Fv_s}{LbkT} \right) - 1 \right]$$

当攀移力较小时, 可近似得出:

$$c' = c^0 - \frac{Fv_s}{LbkT} \quad (2-78)$$

可以认为, 在割阶周围半径为 b 的范围内, 均达到此空位浓度; 而在此范围以外, 随距离 r 增加使空位浓度逐渐减少, 直至 c^0 故可把割阶看成是发射空位的点源, 能造成如下的稳态扩散场:

$$c - c^0 = c' \frac{b}{r} \quad (2-79)$$

又按Fick第一定律, 空位的扩散通量应为:

$$J = cv_D = -D_v \frac{\partial c}{\partial r} \quad (2-80)$$

则可得空位流量为：

$$I = -4\pi r^2 D_v \frac{\partial c}{\partial r} = 4\pi D_v c' b \quad (2-81)$$

因此，割阶沿位错线的移动速率为

$$v_t = I a = 4\pi abc^0 D_v \frac{FV_a}{LbkT} = \frac{4\pi D_v a F}{LkT} \quad (2-82)$$

式中， $D_v = v_a c^0 D_{av}$ ，称为原子的自扩散系数。可见，决定割阶移动或割阶位错攀移速率的主要因素是空位或原子的体扩散速率，因而温度升高使割阶位错的攀移加剧。

四、位错心扩散引起的攀移

上面分析刃型位错的扩散攀移时，只着眼于空位或填隙原子的体积扩散，而忽略了位错中心扩散的影响。实际上，由于位错中心的扩散通道效应，会使空位扩散的激活能降低，加速割阶沿位错的侧向运动。所以，使用(2-82)式估算割阶的可动性可能偏低。

若设空位与位错线的结合能为 ΔW_v ，则空位在位错线上的形成能应为 $W_v + \Delta W_v$ 。相应地，对空位沿位错中心的迁移能可表达为 $W'_v + \Delta W'_v$ ，并对空位沿位错心的扩散系数用下式表达：

$$D_c = a^2 v \exp\left(-\frac{W'_v + \Delta W'_v}{kT}\right) \quad (2-83)$$

当空位从位错中心逸出进入基体金属时，所需能量应为 $\Delta W_v + W'_v$ 。于是，可求出空位逸出前在位错中心平均停留时间为

$$\tau = \frac{1}{v} \exp\left(\frac{\Delta W_v + W'_v}{kT}\right) \quad (2-84)$$

并且，可由下式求出空位在位错中心的平均自由程：

$$\bar{Z} = (2D_c \tau)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{2} a \exp\left(\frac{\Delta W_v + \Delta W'_v}{2kT}\right) \quad (2-85)$$

或者令 $\Delta W_c = \Delta W_v + \Delta W'_v$ ，用以表示空位在基体金属与位错中心的体自扩散激活能之间的差别时，可写成

$$\bar{Z} = \sqrt{2} a \exp\left(\frac{\Delta W_c}{2kT}\right) \quad (2-86)$$

这一参数的物理含意是说明由于空位在位错中心有很高的扩散速率，会使位错割阶在长度为 \bar{Z} 的范围内与周围物质保持相对平衡。只有当空位沿位错中心的移动距离超过 \bar{Z} 以后，才能逸出而进入基体金属。所以，若把割阶看成是空位的点发射源时，可造成具有以下特征的稳态扩散场^[7]：

于位错中心扩散易于进行，可使作用在刃型位错线上某一点的局部应力对于在距离 Z 以内的其它各点也有效。如在图2-26中，割阶A受局部力 F_A 作用左移时，要发射空位使之达到过饱和。

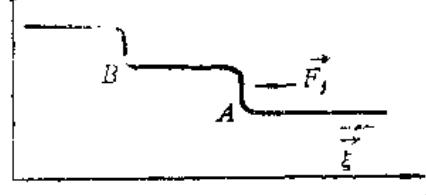


图2-26 位于刃型位错线上的两割阶，位错的柏氏矢量为 $\vec{b}=(0,0,b_z)$

在割阶B与割阶A相距小于 Z 的情况下，过饱和空位有可能沿位错中心扩散到达割阶B处。其结果便相当于由割阶A处的过饱和空位对割阶B产生“渗透力”，使之右移。在割阶B上无外力作用时，最后可由“渗透力”与两割阶间的斥力相平衡而使割阶B停止运动。据估算，当 kT 约为0.05eV时，为平衡两割阶间的斥力所需的空位过饱和高达 $c/c_0 \approx 5$ 。因此，一般认为，即使在“渗透力”较大的情况下，超割阶也不会很稳定。

§ 2-5 割阶位错的滑动

在位错线上带有割阶是金属中常见的一种位错组态。在外力作用下，这种位错组态如何运动对金属的力学行为具有重要影响。割阶位错的滑动机制比较复杂，要涉及到滑移和攀移两种不同的位错运动方式的综合作用。按照割阶位错在滑动过程中与周围基体发生物质交换的情况，又常将割阶位错的滑动分为保守性和非保守性滑动两种。下面分别加以简要介绍。

一、保守性滑动

这是割阶位错在比较低的温度下，因原子扩散难于进行而常采取的一种以滑移为主的运动形式。割阶虽然是位错线的一部分，具有与所在位错相同的柏氏矢量，但其滑移面却有所不同。一般而言，割阶的滑移面不是晶体中的易滑移面。因而，只有对短割阶而言，才有可能在应力集中的作用下强制地使其在不太合适的滑移面上滑动。如图2-27所示，在刃型位错上有间距为 l 的短割阶时，

可在外加应力的作用下由位错线拖着割阶向前滑动。因割阶的可动性较差，而使割阶间的位错线呈现了弓弯状。若外加切应力为 σ ，割阶高度为 b 时，由作用于割阶间位错线上的力 σbl 可对割阶产生单位长度上为 σl 的作用力。显然，这要比作用在单位长度位错线上的力 σb 大得多，因而有可能使割阶在其滑移面上克服其派-纳力而作保守运动。其特点是，刃型位错上的割阶的滑动方向与柏氏矢量方向相同。

螺型位错上的割阶的保守运动则有所不同，表现为割阶的滑动方向与位错线的走向相同。如图2-28(a)和(b)所示，若螺型位错上割阶间距不等时，在平行于柏氏矢量的切应力作用下会使螺型位错各段的弓弯程度出现差异。显然，在曲率半径 R 相同的情

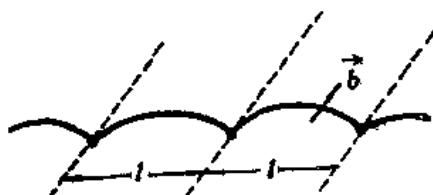


图2-27 带有短割阶的刃型位错保守性滑动机制

式中， y 为割阶高度。所以，当割阶高度太大时，位错偶极子便难于稳定存在。

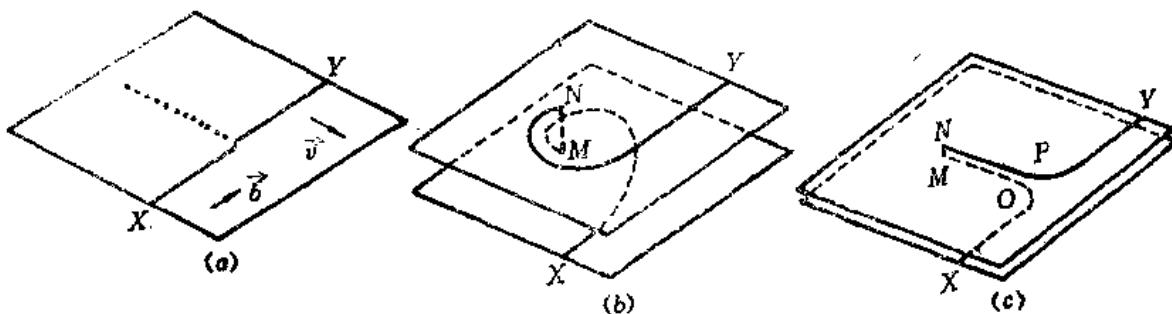


图2-30 割阶高度对螺型位错滑动行为的影响

(a) 割阶高度较小时，可发射点缺陷而攀移 (b) 割阶高度较大时， NY 和 XM 两异号刃型位错可独立在自己的滑移面上滑移 (c) 割阶高度中等时，可形成位错偶极子

二、非保守性滑动

1. 滑动速度

若在外力作用下使刃型割阶随同螺型位错运动时，割阶必须发射点缺陷。带有割阶的螺型位错的运动要由割阶间的位错线滑移和割阶攀移两种运动方式共同完成，如图2-31所示。实质上，这是一种由扩散过程所控制的位错滑动，常称为非保守性滑动。从能量上看，要形成一个填隙原子所需要的的能量约为空位形成能的2到4倍，使割阶攀移易于以发射或吸收空位方式进行。每发射一个空位，可使高度为 h 的割阶前进距离为

$$\delta x = \frac{v_a}{bh} = a \quad (2-91)$$

相应地，在长度为 l 的位错线段上引起自由能的变化为

$$\delta F = kT \ln \frac{c}{c_0} - \sigma bl a \quad (2-92)$$

在局部平衡条件下， $\delta F = 0$ ，则

$$\frac{c}{c_0} = \exp \left(\frac{\sigma bl a}{h} \right) \quad (2-93)$$

于是，可参照(2-78)和(2-82)两式求出割阶的漂移速率：

$$v_t = \frac{4\pi D_s}{kT} \left[\exp \left(\frac{\sigma bal}{kT} \right) - 1 \right] \quad (2-94)$$

又由于带割阶的螺型位错的滑动速度与割阶的速率相等，便得出

$$v = \frac{4\pi D_s}{h} \left[\exp \left(\frac{\sigma bal}{kT} \right) - 1 \right] \quad (2-95)$$

所以，割阶位错的非保守性滑动速度在低应力范围内，应为

$$v \approx \frac{4\pi D_s \sigma bal}{hkT} \quad (2-96)$$

而在高应力范围内，应为

$$v \approx \frac{4\pi D}{h} \exp\left(\frac{\sigma b l a}{kT}\right) \quad (2-97)$$

上述表达式是假设割阶附近能够保持空位过饱和局部平衡的条件下得出的。这只是在扩散过程能够充分进行的条件下才有可能。然而在高应力范围内，割阶移动速度很快，难于建立稳定的扩散条件，使热激活成为重要的控制因素。如图2-32所示，若受刃型割阶钉扎的螺型位错从A状态运动到C状态时，要在割阶处形成空位并通过位垒B。其几率正比于 $\exp[-(W^* - \sigma b l a^*)/kT]$ ，其中 W^* 为热激活能， a^* 为割阶运动到位垒 B 的顶点的距离。而且，要使形成的空位进入基体，还必须从 C 状态到 D 状态之间再越过位垒 E。否则，空位又有可能重新被割阶吸收，使位错回到原来的 A 位置。

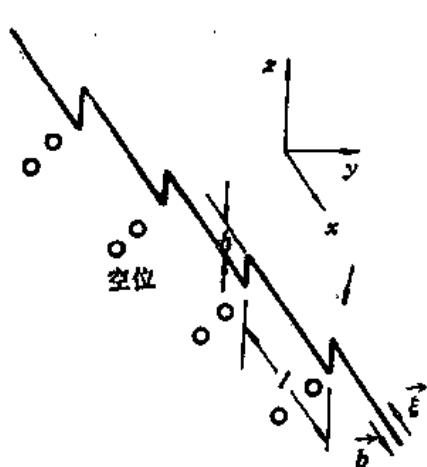


图2-31 带割阶的左螺型位错向右滑动时发射空位

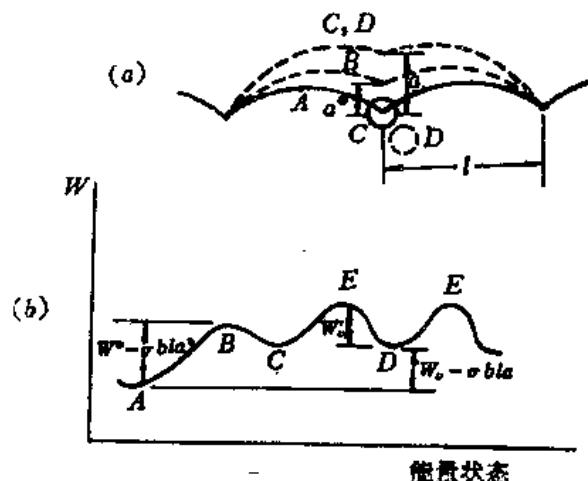


图2-32 带割阶的螺型位错的热激活滑动过程及相应的能量变化

按照图2-32所示的能量分布，可对高应力下割阶位错的热激活滑动速度作如下估算。位错在 C 状态下，单位长度位错线上的割阶数可由下式给出：

$$n_1 = \frac{1}{l} \exp\left(-\frac{W_c - \sigma b l a}{kT}\right)$$

其中，在单位时间内，能成功地进入 D 状态的割阶数应为 n_1 与空位扩散跳动频率的乘积，即 $n_1 v \exp(-W'_v/kT)$ 。其与 al 之积即为位错的速度：

$$v = a v \exp\left(-\frac{W_v + W'_v}{kT}\right) \exp\left(\frac{\sigma b l a}{kT}\right) \approx \frac{D_s}{a} \exp\left(\frac{\sigma b l a}{kT}\right) \quad (2-98)$$

可见，此式同(2-97)式相近，主要反映了高应力诱发割阶位错热激活滑动的作用。

如果割阶位错在滑动过程中所发生能量变化如图2-33所示时，将使越过热激活位

全 B 的频率成为位错速率的控制因素，从而给出以下滑动速度表达式：

$$v \approx av_s \exp\left(-\frac{W^* - \sigma bla^*}{kT}\right) \quad (2-99)$$

式中， v_s 为弯曲的位错线段的振动频率。由于 bla^* 具有体积的量纲，常称为激活体积 V^* 。但这不是具有确切物理意义的体积概念，而只是一个用于描述割阶位错热激活状态的几何参数。

2. 临界切应力

若外加切应力足够大时，也可以使割阶位错在无热激活的条件下发生非保守性滑动。由图2-32 (b) 可见，若外加切应力足够大时，有可能使 $(W_v - \sigma bla) + W'_v < 0$ ，则不需要热激活作用便可使割阶稳定地发射空位。或者，如图2-33所示，若满足

$$W^* - \sigma bla^* < 0$$

也可以使割阶位错在无热激活的条件下发生非保守性滑动。因此，所需的临界切应力将主要取决于 W^* 或 $W_v + W'_v$ ，可用下式近似表达：

$$\sigma_c = \frac{W^*}{bla^*} \sim \frac{W_v + W'_v}{bla} \quad (2-100)$$

显然，由此式和 (2-91) 式可见，割阶高度越大时，为使割阶位错作非保守性滑动所需要的临界切应力 σ_c 也越大。

§ 2-6 面心立方晶体中的层错与部分位错

实际的金属晶体结构大都是密排点阵，可以看成是由密排面按一定堆垛方式堆垛而成。若在堆垛过程中，堆垛次序发生变化，便会破坏点阵的周期性，形成一种称为层错的晶体缺陷。

如图2-34所示，理想的FCC点阵正好符合原子刚球模型。可以由密排面 (111) 按一定次序堆垛而成。在由 A 原子排成第一层后，第二层上有两个可供选择的位置，如图中的 B 和 C 所示。在排布第二层原子时，可任选其中之一。若第二层以 B 原子排布，第三层以 C 原子排布时，则恰好构成三层为一循环周期，即：

$$\cdots ABC \ A B C \ A B C \cdots$$

这便是理想的FCC点阵的周期性堆垛结构。这一点可在 $(0\bar{1}1)$ 面上的投影看得更清楚，如图2-35所示。整个晶体可以看成是由许多分别标以 a 和 b 的平行 $(0\bar{1}1)$ 面所组成， a 面和 b 面上原子排列情况完全相同，仅在 $[2\bar{1}1]$ 方向上相互错开了一个 $\frac{a}{4}$ $[\bar{2}11]$ 的距离。这些 $(0\bar{1}1)$ 面的间距是 $\frac{a}{4}[0\bar{1}1]$ 。在堆垛的层与层之间，最近邻的原子排成一条直线，使 $[0\bar{1}1]$ 与底面 (111) 成一定角度。这种堆垛层的周期性可能会因偶尔有一层原子不按照规定方式堆积而遭到破坏。于是，在这一层之间便会形成层错，作为一种面缺陷而存在。

层错的主要影响在于破坏了晶体的正常堆垛周期性。在层错区内，每一个密排面本身的原子近邻关系没有改变，受到破坏的只是密排面之间原子的相互关系。实质上，这是改变了层错区内密排面的能量状态。通常将形成单位面积层错所需增加的能量称为层错能。一般来说，层错能愈低，形成层错的几率愈大。

层错作为晶体缺陷的重要性，不仅在于改变密排面（一般为滑移面）的能量状态，从而影响全位错的宽度及运动特性，而且会影响到位错的结构形式，使全位错分解成部分位错。因此，深入研究层错和部分位错的形成机制和特性，对于加深理解金属晶体的力学行为会具有重要意义。

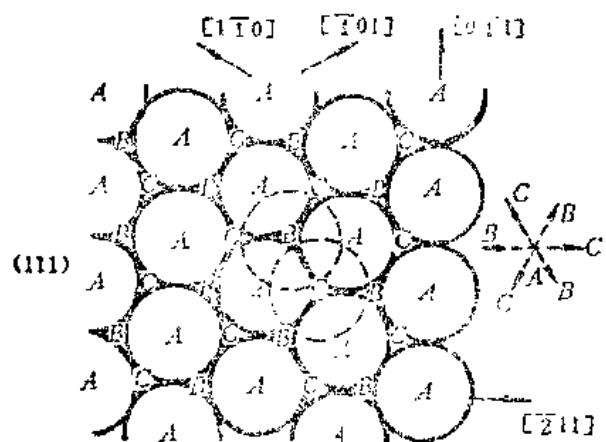


图2-34 面心立方点阵中密排面(111)上原子排列示意图

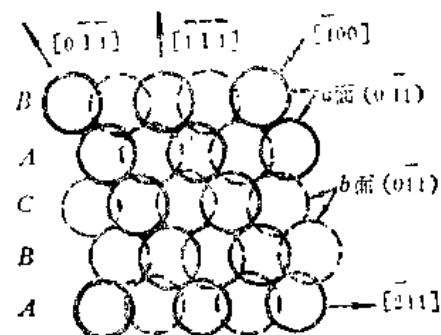


图2-35 面心立方点阵中原子在(011)面上的投影

一、FCC点阵中层错的类型

在面心立方点阵中，层错有内禀（Intrinsic）和外延（Extrinsic）两种基本类型。前者着眼于在正常的堆垛次序中去掉一层密排原子，而后者则为在正常的堆垛次序中增加一层密排原子。具体形成堆垛层错的方法可有以下几种：

1. 抽出型层错

若在正常的(111)面堆垛次序中，抽出一层原子（如C层原子），再将以上各层原子垂直落下一层原子位置，则可使堆垛次序变为：

$$\dots ABC\ AB:\ ABC\ ABC\ A\dots$$

这样变动的结果使不同层中原为一倾斜直线的最近邻原子列出现一两原子厚的曲折，如图2-36所示。相应可产生一个原子厚的孪晶层，常称为单堆垛层错。同样，若将A层或B层抽出，也可得到相同的堆垛层错。

2. 插入型层错

若在正常的(111)面堆垛次序中，插入一层密排面（如A层原子），其余一律不加更动，可使堆垛次序变为：

$$\dots ABC\ AB\ \overset{\vdots}{A}\ C\ ABC\ A\dots$$

这样变动的结果可使不同层中最近邻原子列出现一个三原子厚的曲折，相应产生一两原子厚的孪晶层如，图2-37所示。这种类型的层错也常称为双堆垛层错。同样，也可以在A、B层之间插入C层原子，或在C、A层之间插入B层原子，得到相同的结果。

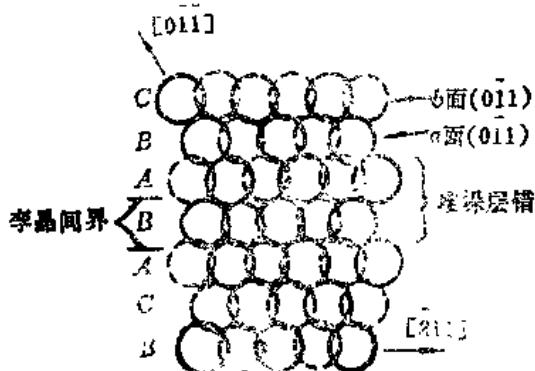


图2-36 FCC点阵中用抽出方式形成层错

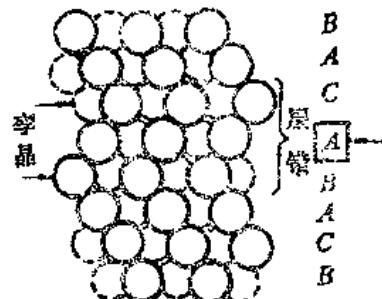


图2-37 FCC点阵中用插入方式形成层错

3. 滑移型层错

若在(111)面上把任意一层原子，例如在C位置上的第三层原子（见图2-34），沿 $[2\bar{1}1]$ 方向滑移 $\frac{1}{6}[2\bar{1}1]$ 到A位置，相应以上各层原子逐层移动一个位置，则堆垛次序变动如下：

$$\cdots ABC \ A B C \ A B C \ A \cdots \\ \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \\ A B C A \ B \cdots$$

于是可得到与抽出型层错相同的结果，属内禀型层错，即

$$\cdots ABC \ AB : ABC \ AB \cdots$$

由于其形成是通过滑移，又常称为滑移型层错。

若再将这种滑移型层错中心下方的各原子层相对于B层原子沿 $[\bar{2}11]$ 方向逐层滑移 $\frac{1}{6}[\bar{2}11]$ ，可使堆垛次序进一步作如下变动：

$$\cdots A B C \ A B : ABC \ A B \cdots \\ \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \\ C A B \ C$$

所得结果便与插入型层错相同，即

$$\cdots C \ A B C B \ A B C \ A B \cdots$$

这相当于在正常的堆垛次序中插入了一层B原子。可见，由某一层原子（如B层）两侧的晶体各作相反方向滑移，也可以形成双堆垛外延型层错。

所以，实际上，可以把堆垛层错看成是由一个完整的晶体分成上下两半作相对位移而成。为了有助于描述层错以及部分位错的特性，有时要用到以下三个矢量：

1) \vec{t} 矢量 它是晶体中点阵位移矢量的最小矢量，即距离最近、环境完全相同

(容许有弹性应变)的两原子间连线。若以点阵常数为长度单位时,可将面心立方点阵的 \vec{t} 矢量表示为 $\vec{t} = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 。全位错的柏氏矢量等于 \vec{t} 矢量,部分位错的柏氏矢量小于 \vec{t} 矢量。

2) \vec{f} 矢量 它是形成层错时两部分晶体的相对位移矢量。以 \vec{f} 矢量描述层错就好象用柏氏矢量描述位错一样。

3) \vec{n} 矢量 它是表示相邻密排面间距的矢量。在面心立方点阵中,可写成 $\vec{n} = \frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ 。

显而易见,根据以上 \vec{f} 矢量的定义,可将上述抽出型位错看成是下半部晶体不动,上半部晶体对下半部晶体作垂直向下位移一层距离,故 $\vec{f} = -\vec{n} = \frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ 。同理可知,上述插入型层错的 $\vec{f} = \frac{1}{3}\langle 1\bar{1}\bar{1} \rangle$ 。对滑移型层错而言,可能同时有几个 \vec{f} 矢量。如图2-34所示, \vec{f} 可以分别等于以下三个位移矢量:

$$\vec{a} = \frac{1}{6}\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle, \quad \vec{b} = \frac{1}{6}\langle \bar{1}2\bar{1} \rangle, \quad \vec{c} = \frac{1}{6}\langle 2\bar{1}\bar{1} \rangle$$

由这三个位移矢量都可以形成同样的层错,但 \vec{f} 矢量却不能等于 $-\vec{a}$, $-\vec{b}$ 或 $-\vec{c}$,否则将会导致AA、BB或CC式堆垛层错出现,从而能量上处于不利状态。

二、FCC点阵中的部分位错

晶体中部分位错的存在总是同层错相联系的。一般而言,层错难于在整个密排原子面上产生,而往往存在于局部区域内。于是,便可由层错区域与完整晶体区域的交界或过渡区形成部分位错。同全位错可为任意空间曲线相比,部分位错都限制在密排面内,而且其周围不全为“好”区域所围绕。在部分位错附近,原子的最近邻关系受到了破坏,不象层错部分只破坏次近邻关系而保持最近邻关系不变。部分位错的柏氏矢量恒为层错的 \vec{f} 矢量之一,只由与其联系的层错形成过程有关的 \vec{f} 矢量所决定。在面心立方晶体中,有两种重要的部分位错,一为Frank部分位错,另一为Shockley部分位错。下面分别介绍这两种部分位错的形成及特性。

1. Frank部分位错

Frank位错可由抽出或插入部分密排原子面而形成。如图2-38所示,在正常的堆垛次序中抽掉右半部B层原子,再将以上各层垂直落下一层距离时,会在密排面上形成一部分内稜型层错。在其左端与完整晶体的交界附近,原子间畸变较大,形成了一个刃型部分位错,常称为负Frank位错。其特点是位错线与单堆垛层错相连接。

类似地,还可以采用插入一部分密排面的方法形成Frank位错,如图2-39所示。所不同的只是形成⁺部分位错乃系外延型的双堆垛层错与完整晶体部分的交界,常称为正Frank位错。

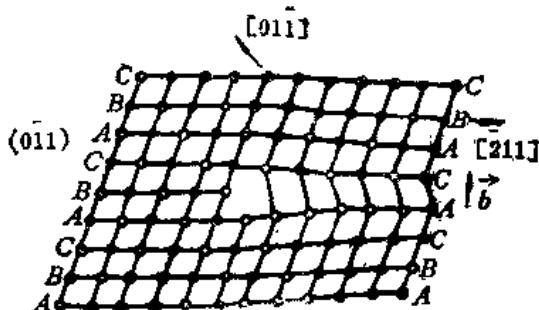


图2-38 面心立方点阵中的负Frank位错
(○表示纸面上原子位置; ●表示纸面后原子位置)

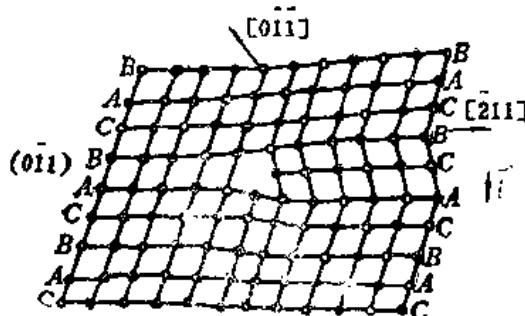


图2-39 面心立方点阵中的正Frank位错

Frank位错的柏氏矢量也可以由作柏氏回路求得,但回路的起点必须选在层错区,同时回路中所走的路线要沿 \vec{t} 矢量。可以证明, Frank位错的柏氏矢量大小等于密排面间距,而方向与层错区在位错线左侧或右侧有关。在一般规定位错线方向为从纸背走向纸面的情况下,可由柏氏回路得出两种Frank位错的柏氏矢量方向如表2-2所示。

表2-2 Frank位错的柏氏矢量

Frank位错类型	层错在位错线左侧	层错在位错线右侧
正	$+\vec{n}$	$-\vec{n}$
负	$-\vec{n}$	$+\vec{n}$

Frank位错的重要特性是只能攀移,而不能滑移。这是由于其柏氏矢量垂直于密排面所致。因而,又常称为不动位错。另外,从位错类型而言, Frank位错属于纯刃型,不会涉及螺型或混合型位错。

在面心立方晶体中,可以通过过饱和空位在(111)面上某处聚集形成空位盘,崩塌后造成抽出部分密排面的效果,形成一个负Frank位错环,如图2-40所示。或者,也可由填隙原子在(111)面上聚集,造成插入部分密排面的效果,形成一个正Frank位错环,如图2-41所示。

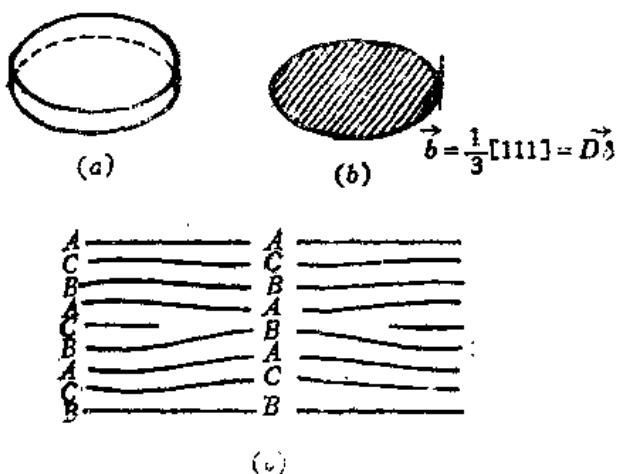


图2-40 形成负Frank位错环的空位盘崩塌机制
(a) 空位盘形成 (b) 负Frank位错环围绕着内聚型位错
(c) 负Frank位错环的横截面

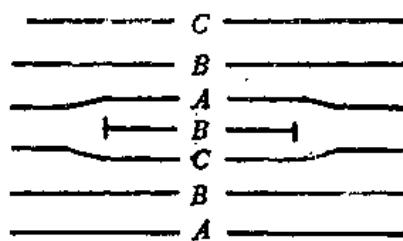


图2-41 正Frank位错环的横截面

2. Shockley部分位错

同Frank位错不同, Shockley位错是可动的部分位错。其形成同在密排面内局部区域以滑移方式形成一部分层错有关。如图2-42(a)所示,在O点左侧,令上下两部分晶体水平错动,以使上一层A原子进入B位置。同时相应地在A层以上的B层原子进入C位置, C层原子进

使上一层A原子进入B位置。同时相应地在A层以上的B层原子进入C位置, C层原子进

入A位置，余此类推。其结果便改变了左半部晶体的堆垛次序，形成了滑移型的单堆垛层错，即

$$\cdots ABC \mid BCA \cdots$$

于是，在层错与完整晶体的交界，即滑移区与未滑移区的交界，便形成了部分位错，如图2-42 (b) 所示。其柏氏矢量为 $\frac{1}{6}[1\bar{2}1]$ ，称为Shockley位错。可以看出，在这个部分位错中，它的柏氏矢量与位错线相垂直，故为纯刃型部分位错。一般而言，Shockley位错的性质可分为纯刃型、纯螺型或混合型，主要取决于位错线与柏氏矢量的相对取向关系。在这一点上，Shockley位错与全位错相似，而与Frank位错有所不同。

另外，同Frank位错相比，Shockley位错的位错线和柏氏矢量都在滑移面上，易于滑移，属可滑移型部分位错。但需要注意的是，Shockley位错作为滑移型层错的边界不能离开滑移面，难于攀移和交滑移。

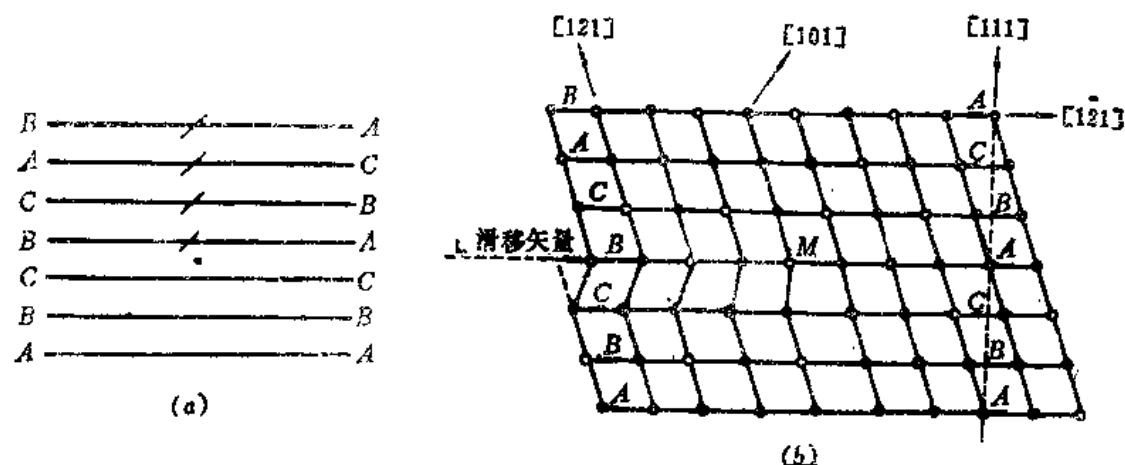


图2-42 面心立方点阵中Shockley位错的形成

(a) 晶体左半部局部滑移形成层错 (b) Shockley位错附近原子在(101)面上的投影

图中○代表纸面上的原子位置 ●代表纸面下的原子位置

三、FCC点阵中的扩展位错

1. 位错反应判据

通常部分位错在晶体的滑移变形中不会象全位错那样单独地起作用，而是通过与其它部分位错或全位错发生相互作用和转化而表现出来。位错相互转化的重要方式是发生位错反应，使具有不同柏氏矢量的位错线合并成为一条位错线，或者将一条位错线分解成两条或更多条位错线，使由一步完成的滑移分成几步来实现。

判断位错反应能否自动进行的条件应为以下两方面：

1) 几何条件

由柏氏矢量守恒的要求出发，反应前诸位错的柏氏矢量之和要与反应后柏氏矢量之和相等，即

$$\sum \vec{b} = \sum \vec{b}_i \quad (2-101)$$

这一反应方程式一方面是反应的必要条件，另一方面也表达了具体的反应方式。

2) 能量条件

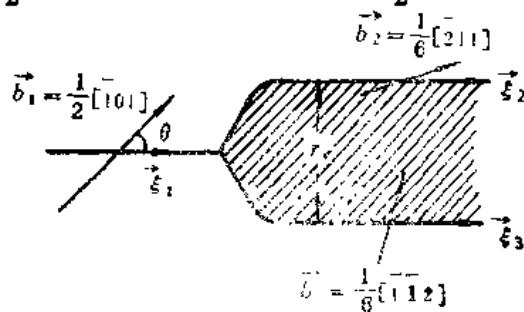
位错反应若能自动进行，则反应后的位错总能量不能大于反应前位错的总能量。按照Frank定则，可以近似地把一组位错的总能量看成是各位错能量的总和，正比于各位错柏氏矢量的平方和。因此，对位错反应能自动进行的能量判据是：

$$\sum b_i^2 > \sum b_i^2 \quad (2-102)$$

这是位错反应的充分条件。通常对于某一位错而言，按(2-101)式从几何上可以有許多可能的分解方式，但只有满足(2-102)式时，分解才能自动进行。

2. 扩展位错

早在1948年，Heidenreich和Shockley⁽³⁾就提出了在面心立方点阵中，一个处在(111)面上的 $\frac{a}{2} <110>$ 全位错分解成两个 $\frac{a}{6} <112>$ 部分位错的可能性。经这样分解后，一个全位错变成了两个Shockley部分位错，其间以一片层错相连，所构成的这样一种组态便称为扩展位错，如图2-43所示。从位错能量角度来考虑，柏氏矢量为 $\vec{b} = \frac{a}{2} [101]$ 的全位错能量正比于 $\frac{a^2}{2}$ ，而柏氏矢量为 $\frac{a}{6} [\bar{1}\bar{1}2]$ 或 $\frac{a}{6} [\bar{2}11]$ 的Shockley位错的



能量正比于 $\frac{a^2}{6}$ ，则有

$$\frac{a^2}{2} > \frac{a^2}{6} + \frac{a^2}{6}$$

这符合(2-102)式的条件，使相应的位错反应可自动进行，即

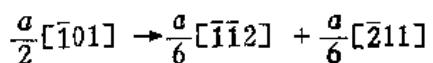


图2-43 扩展位错

所以，扩展位错总是同位错分解或者位错反应联系在一起的。

实际上，上述这种分解反应是对密排面上原子滑移途径的一种抽象。如图2-44所

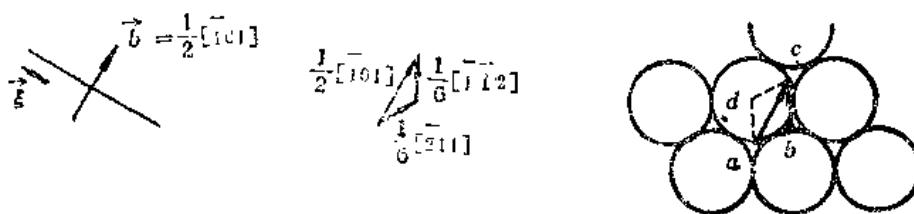


图2-44 FCC点阵中{111}面上的滑移

示，若B层原子从一个B位置移动到相邻的B位置时，点阵结构不发生任何变化，相当于一个 $\frac{1}{2} [101]$ 全位错运动的结果。但这样的滑移途径会在垂直于密排面的方向上引起很大的体积变动，使点阵的错排能较大而难于进行。若B层原子先从B位置滑移到C位置，再滑移到另一B位置时，对点阵引起的变动较小，因而易于进行。这种使原子从B位置滑移

到 C 位置的效果相当于 $\frac{1}{6}[2\bar{1}1]$ 部分位错的运动；而从 C 位置再进入另一 B 位置时，又相当于 $\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ 部分位错的运动。这样一来，从密排原子面的刚球模型也证明，由全位错运动所引起的滑移可分两步进行，即相应由两个 Shockley 位错相继运动加以完成。领先的部分位错要在所掠过的区域内产生层错，再由后续位错运动加以消除，故在两部分位错之间必然要有层错区，形成扩展位错。如图 2-45(a) 所示，在面心立方点阵中， $\frac{1}{2}<0\bar{1}1>$ 全位错的多余半原子面由两个 a 和 b 型的 (011) 面所组成。前以述及，a 面和 b 面上原子排列相同，仅在某一 $<2\bar{1}1>$ 方向上相互错开一个距离 $\frac{a}{4}<2\bar{1}1>$ ，两者间距为 $\frac{a}{4}<0\bar{1}1>$ 。但实际上，这样的位错难于在面心立方点阵中存在，而是分解成两个 Shockley 位错，中间有一个宽度为 r 的堆垛层错存在，如图 2-45(b) 所示。

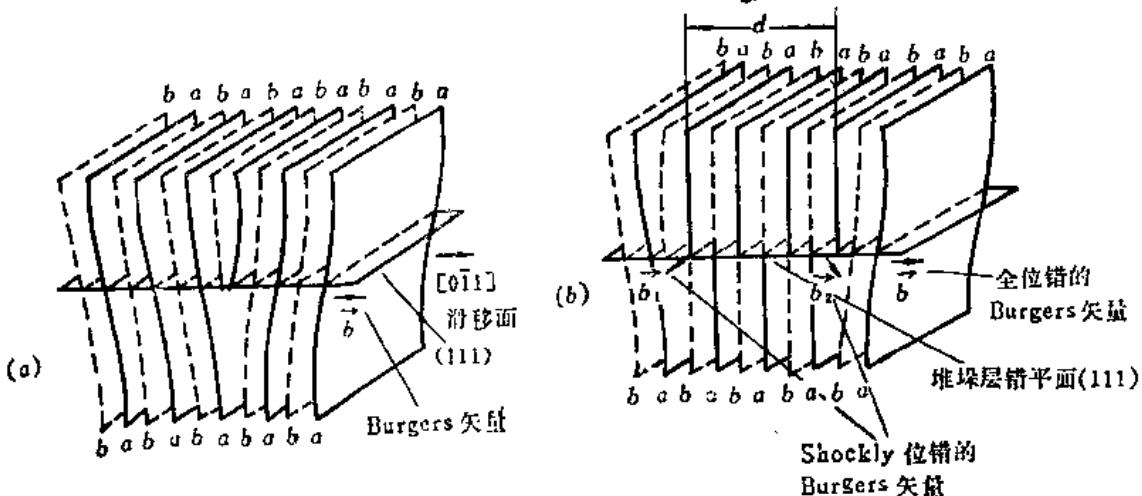


图 2-45 FCC 点阵中扩展位错附近 (011) 面排布的变化

(a) 在 FCC 点阵中存在的全位错，尚未分解 (b) 全位错分解成两个 Shockley 位错

扩展位错的宽度取决于层错能。层错能提供了将两个部分位错联系在一起、作用在单位长度位错线上的吸引力。在平衡状态下，层错能在数值上应该等于两个部分位错间的斥力。对两个 Shockley 部分位错而言，其柏氏矢量彼此间成 60° 角，故可由弹性交互作用而产生斥力。设 θ 为全位错的柏氏矢量和位错线间的夹角，则两部分位错的柏氏矢量和位错线的夹角分别等于 $\theta - \frac{\pi}{6}$ 和 $\theta + \frac{\pi}{6}$ 。若两部分位错的强度均为 b 时，相应的刃型分量分别为 $b \sin(\theta - \frac{\pi}{6})$ 和 $b \sin(\theta + \frac{\pi}{6})$ ，而相应的螺型分量分别为 $b \cos(\theta - \frac{\pi}{6})$ 和 $b \cos(\theta + \frac{\pi}{6})$ 。在两部分位错间，刃型分量同螺型分量无弹性交互作用，仅由刃型分量同刃型分量及螺型分量同螺型分量产生斥力，可写成：

$$\begin{aligned} \frac{f_1}{L} = & -\frac{Gb^2}{2\pi r} \cos(\theta + \frac{\pi}{6}) \cos(\theta - \frac{\pi}{6}) \\ & + \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)r} \sin(\theta + \frac{\pi}{6}) \sin(\theta - \frac{\pi}{6}) \end{aligned} \quad (2-104)$$

另一方面，层错的表面张力为

$$\frac{f_2}{L} = -\frac{\partial U}{\partial r} = -\frac{\partial}{\partial r} (\gamma dr) = -\gamma \quad (2-105)$$

式中 γ 为层错能。于是，根据 $f_1/L + f_2/L = 0$ 作为平衡条件，便可定出扩展位错的平衡宽度为：

$$r_e = \frac{Gb^2}{8\pi\gamma} \cdot \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{2\nu}{2-\nu} \cos 2\theta\right) \quad (2-106)$$

式中， ν 为泊松比。可见，扩展位错的宽度随层错能的降低而增大。扩展位错也有刃型与螺型之分，但同螺型位错扩展时相比，刃型位错的扩展宽度较大。如在 $\nu = \frac{1}{3}$ 的情况下，两种扩展位错的宽度比为7:3。

一般认为， $\gamma = 40 \sim 70 \text{ mJ/m}^2$ 时， $r_e > 2 \sim 3b$ ，能观察到位错扩展；而 $\gamma > 70 \text{ mJ/m}^2$ 时， $r_e < 2 \sim 3b$ ，对位错的扩展可以忽略不计。几种金属的层错能及扩展宽度如表2-3所示。

在面心立方晶体中，一个全位错不能分解成两个Frank位错。从能量角度上考虑，这种位错反应将使系统的能量增加。Frank位错是对密排面抽出或插入一部分而得到的层错区边界，不能用两个Frank部分位错表征全位错的运动。若一个全位错分解成一个Shockley位错和一个Frank位错时，反应前后能量相等，例如

$$\frac{1}{2} [01\bar{1}] = \frac{1}{6} [\bar{2}1\bar{1}] + \frac{1}{3} [11\bar{1}]$$

所以，这种反应也不是必然进行。

表2-3 常见几种FCC金属的层错能与扩展位错宽度

金 属	层错能 $\gamma, 10^{-7} \text{ J/cm}^2$	柏氏矢量 $b, \text{ \AA}$	扩展位错宽度 $r_e, \text{ \AA}$	
			螺 型	刃 型
Al	200	2.86	3	4
Ni	80	2.49	9	30
Cu	40	2.55	11	30
Co	9	2.50	98	440
黄铜	<10	—	—	—
不锈钢	<10	—	—	—

四、Thompson记号

由于形成扩展位错总是要同位错反应相联系，有必要建立一种简便的表达面心立方点阵中可能存在的位错反应的方法。其关键是要易于表达FCC点阵中的滑移面和滑移方向，这是表达位错反应的基础。N.Thompson⁽⁹⁾在1953年引入了一个基本的参考四面体和一套记号，能给出面心立方点阵中位错线及柏氏矢量所在面和方向的清晰图象。

如图2-46所示，在面心立方点阵中取出1/8个单位晶胞，将D取在单位晶胞的原点

$(0, 0, 0)$, A 取在 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, B 取在 $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, 和 C 取在 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 。

于是, 可以 A 、 B 、 C 、 D 为顶点连成四面体。这个四面体的特点是:

(1) 四个面代表FCC点阵中可能有的四个滑移面 $\{111\}$ 。若考虑晶面指数的正负号时, 则可能有八个滑移面;

(2) 六个棱代表FCC点阵中可能有的六个滑移方向 $\langle 110 \rangle$ 。若考虑晶向指数的正负号时, 则有12个滑移方向。

为了从Thompson四面体表示FCC点阵的全位错和部分位错, 规定与各顶点相对的面分别以(a)、(b)、(c)和(d)表示, 相应各面的中心以希腊字母 α 、 β 、 γ 和 δ 代表。若将四面体以三角形 ABC 为底面展开时, 可得如图2-47所示的展开图。此时, 是令

$$(a) = (11\bar{1}), \quad (b) = (\bar{1}\bar{1}1),$$

$$(c) = (\bar{1}11), \quad (d) = (111)$$

于是, 在展开图上, 与四面体的六个棱相应的各边代表全位错的柏氏矢量, 如

$$\overrightarrow{AB} = \frac{1}{2}[0\bar{1}1], \quad \overrightarrow{DC} = \frac{1}{2}[011],$$

$$\overrightarrow{AC} = \frac{1}{2}[\bar{1}01], \quad \overrightarrow{BC} = \frac{1}{2}[\bar{1}10],$$

$$\overrightarrow{DB} = \frac{1}{2}[101], \quad \overrightarrow{DA} = \frac{1}{2}[110]$$

同时, 可用四个面的中点对顶点的连线表示Shockley位错的柏氏矢量, 如

$$\overrightarrow{\delta A} = \frac{1}{6}[11\bar{2}], \quad \overrightarrow{\delta B} = \frac{1}{6}[1\bar{2}1], \quad \overrightarrow{\delta C} = \frac{1}{6}[\bar{2}11],$$

$$\overrightarrow{C\beta} = \frac{1}{6}[1\bar{1}2], \quad \overrightarrow{D\beta} = \frac{1}{6}[121], \quad \overrightarrow{A\beta} = \frac{1}{6}[\bar{2}\bar{1}1],$$

$$\overrightarrow{D\gamma} = \frac{1}{6}[211], \quad \overrightarrow{A\gamma} = \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{2}1], \quad \overrightarrow{B\gamma} = \frac{1}{6}[\bar{1}1\bar{2}]$$

$$\overrightarrow{B\alpha} = \frac{1}{6}[\bar{2}\bar{1}\bar{1}], \quad \overrightarrow{C\alpha} = \frac{1}{6}[1\bar{2}\bar{1}], \quad \overrightarrow{D\alpha} = \frac{1}{6}[112]$$

而且, 由四面体四个顶点到它所对应的三角形中点的连线可构成 $\frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ 类型的矢量,

代表着Frank位错的柏氏矢量, 如

$$\overrightarrow{A\alpha} = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}1], \quad \overrightarrow{B\beta} = \frac{1}{3}[\bar{1}1\bar{1}]$$

$$\overrightarrow{C\gamma} = \frac{1}{3}[1\bar{1}\bar{1}], \quad \overrightarrow{D\delta} = \frac{1}{3}[111]$$

可见, 在Thompson记号中是用两个字母表示位错的柏氏矢量。这两个字母(可以是罗马字母, 也可以是希腊字母)或者两者的混合。其一般规则是:

(1) \overrightarrow{PQ} 是表示从 P 到 Q 的矢量;

组合发生位错反应。假设在 (d) 面和 (a) 面上各有一个 Shockley 位错，可以证明有以下四种反应能够降低位错的总能量：

$$\frac{1}{6} [\bar{2}11] + \frac{1}{6} [1\bar{2}\bar{1}] = \frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}0] \quad (\overrightarrow{\delta C} + \overrightarrow{C\alpha} = \overrightarrow{\delta\alpha})$$

$$\frac{1}{6} [\bar{2}11] + \frac{1}{6} [2\bar{1}1] = \frac{1}{3} [001] \quad (\overrightarrow{\delta C} + \overrightarrow{\alpha B} = \frac{\overrightarrow{\alpha\delta}}{\overrightarrow{CB}})$$

$$\frac{1}{6} [11\bar{2}] + \frac{1}{6} [112] = \frac{1}{3} [110] \quad (\overrightarrow{\delta A} + \overrightarrow{D\alpha} = \frac{\overrightarrow{\delta D}}{\overrightarrow{A\alpha}})$$

$$\frac{1}{6} [\bar{2}11] + \frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}2] = \frac{1}{6} [\bar{3}0\bar{1}] \quad (\overrightarrow{\delta C} + \overrightarrow{\alpha D} = \frac{\overrightarrow{\delta\alpha}}{\overrightarrow{CD}})$$

可以看出，上述位错反应所生成的新位错不是全位错。这四种反应的特点都是由两个部分位错形成一个新的部分位错。而且新位错线要同时属于两个滑移面，必然是沿着两滑移面的交线，即应为 [110] 或 [110]。但新位错线的柏氏矢量都不在这两个滑移面上，所形成的新位错是一种不可动的部分位错，称为压杆位错。

由两个 Shockley 位错反应形成压杆位错的可能性主要有以下两种情况：

一是扩展位错发生弯折。如图 2-50 (a) 所示，处于相交滑移面 (c) 和 (d) 上的

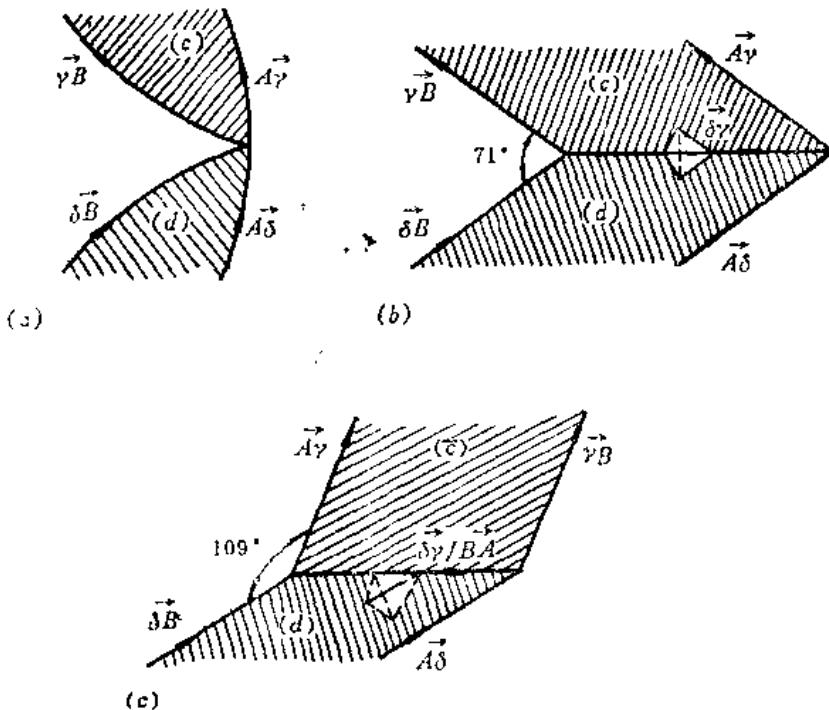


图 2-50 扩展位错弯折形成压杆位错

- (a) 全位错 \overrightarrow{BA} 在相交滑移面上弯折后扩展 (b) 扩展位错弯折成锐角时形成压杆位错
(c) 扩展位错弯折成钝角时形成压杆位错

两段全位错 \overrightarrow{AB} 均已发生扩展，但在 O 点要满足柏氏矢量守恒条件而成为位错结点。于

是，在O点附近 $\overrightarrow{\delta B}$ 和 $\overrightarrow{\gamma B}$ 两段Shockley位错彼此大体上平行，有可能发生位错反应形成压杆位错（如图2-50 (b) 所示），即

$$\overrightarrow{\delta B} + \overrightarrow{\gamma B} = \overrightarrow{\delta\gamma}$$

同样，在使扩展位错弯折成钝角的情况下，也可能形成压杆位错，如图2-50 (c)。由于压杆位错只在弯折了的层错中存在，其几何面貌与固定楼梯上地毯的压条相似，故此得名¹¹²。

二是位于相交滑移面上的两个扩展位错沿着各自的滑移面移动到交线相遇时，由领先的两个Shockley位错发生反应形成压杆位错，又常称为 Lomer-Cottrell 位错锁（如下节所述）。

另外，在不同面上的一个Frank位错和一个Shockley位错也可以在两个面的交线上合成的一个不动的压杆位错，主要位错反应如下：

$$\begin{aligned}\frac{a}{6} [\bar{1}\bar{1}2] + \frac{a}{3} [1\bar{1}\bar{1}] &= \frac{a}{6} [110] \quad (\overrightarrow{A\delta} + \overrightarrow{\alpha A} = \overrightarrow{\alpha\delta}) \\ \frac{a}{6} [1\bar{2}1] + \frac{a}{3} [1\bar{1}\bar{1}] &= \frac{a}{6} [30\bar{1}] \quad (\overrightarrow{\delta B} + \overrightarrow{\alpha A} = \frac{\overrightarrow{\delta\alpha}}{\overrightarrow{BA}})\end{aligned}$$

三、Lomer—Cottrell位错锁

如图2-51所示，在两个相交的滑移面上各有一个扩展位错，例如

(111) 面

$$\frac{1}{2} [01\bar{1}] = \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{1}{6} [11\bar{2}]$$

(11\bar{1}) 面

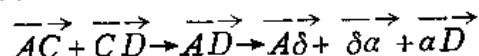
$$\frac{1}{2} [101] = \frac{1}{6} [2\bar{1}1] + \frac{1}{6} [112]$$

于是，在两个领先位错滑移到两滑移面交线处相遇时，便会发生如下位错反应：

$$\frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{1}{6} [2\bar{1}1] = \frac{1}{6} [110]$$

可见，新位错是一个压杆位错。由它分别与一片层错在两滑移面上与后续的Shockley位错相连，组成了一种特殊的不动位错组态，称为 Lomer-Cottrell 位错锁。这种位错组态又常称为面角位错，既不能滑移也不能攀移，是面心立方晶体中的一种重要的位错运动障碍。

形成 Lomer-Cottrell 位错锁有两种可能方式。一是如上述述，由全位错先分解扩展，再与领先位错发生反应形成压杆位错；二是由两个全位错先合成 Lomer 位错，然后再分解成一个压杆位错和两个 Shockley 位错，例如



可以证明，Lomer位错分解前 $\sum b_i^2 = a^2/2$ ，分解后 $\sum b_i^2 = 7a^2/18$ ，满足位错反应的充

要条件，Lomer位错分解是可能的。

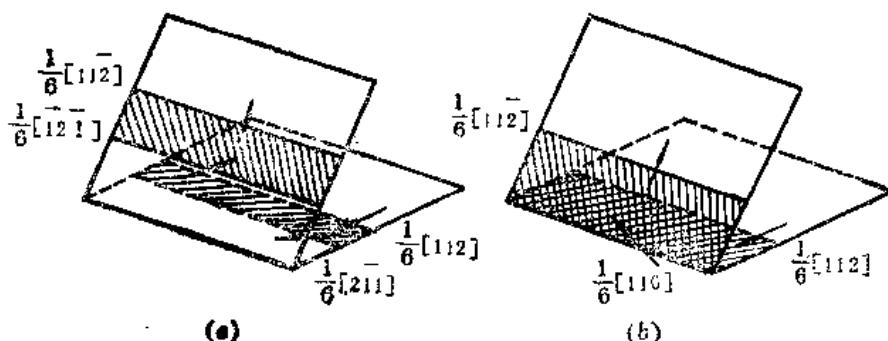


图2-51 Lomer-Cottrell位错锁的形成

四、会合位错

实际上，Lomer-Cottrell位错锁是面心立方金属中相交滑移面上位错会合发生反应的一种特殊的情况。一般而言，若相交滑移面上各有一个位错线 XY 和 $X'Y'$ ，其柏氏矢量 \vec{b}_1 和 \vec{b}_2 间的夹角大于 $\pi/2$ 时，会相互吸引并最后相交于一点，如图2-52(a)所示。因图中A点为不稳定的四重结点，要力求分解成两个三重结点B和C以及一段沿滑移面交线的新位错线BC，见图2-52(b)。新位错的柏氏矢量等于两相交位错的柏氏矢量之和，即

$$\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$$

通常，将这种新位错线BC称为会合位错。位错线 XY 和 $X'Y'$ 要继续向前滑移，只有会合位错缩合消失才有可能，所需应力较大。所以可以设想，会合位错的产生对变形阻力贡献较大。而且，在一定条件下，通过会合位错反应可形成位错网络，如图2-53所示。这是由在(a)面上的一组柏氏矢量为 \vec{CD} 的位错与(c)面上一个柏氏矢量为 \vec{DB} 的螺型位错相交截的结果，按下式产生一个会合位错 \vec{CB} ，即

$$\vec{CD} + \vec{DB} \rightarrow \vec{CB}$$

于是，在线张力的作用下使位错线尽量缩短长度，最后便达到一种平衡的网络组态。

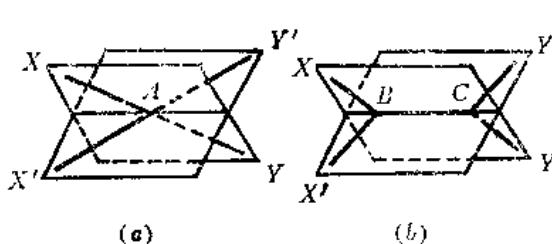


图2-52 会合位错的形成

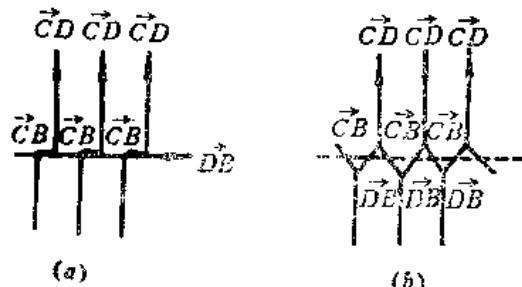


图2-53 全位错网络的形成

在面心立方金属中，会合位错也可能发生分解，形成扩展的位错组态，如图2-54所示。所涉及的位错反应为：

(1) 在 (a) 面上, \overrightarrow{CD} 位错分解, 即

$$\overrightarrow{CD} \rightarrow \overrightarrow{C\alpha} + \overrightarrow{\alpha D}$$

(2) 在 (c) 面上, \overrightarrow{DB} 位错分解, 即

$$\overrightarrow{DB} \rightarrow \overrightarrow{D\gamma} + \overrightarrow{\gamma B}$$

(3) 上述四个部分位错中, 后三个相遇形成会合位错 (见图2-54(a)), 即

$$\overrightarrow{\alpha D} + \overrightarrow{D\gamma} + \overrightarrow{\gamma B} \rightarrow \overrightarrow{\alpha B}$$

由于会合位错 $\overrightarrow{\alpha B}$ 可在 (a) 面上滑移, 在层错表面张力的作用下要沿 (a) 面拉开, 使其结点沿两滑移面交线向两侧移动, 导致位错 $\overrightarrow{D\gamma}$ 和 $\overrightarrow{\gamma B}$ 的线长度越来越短, 如图 2-54 (b) 所示; 并随后在 (c) 面上失去平衡而滑移至 (a) 面, 形成如图 2-54 (c) 所示的扩展位错网络。

若会合位错不位于面心立方点阵的滑移面上时, 便可由位于相交滑移面上两扩展位错发生反应而形成较一般形式的面角位错, 如图2-55所示。设图中 (a) 面上的柏氏矢

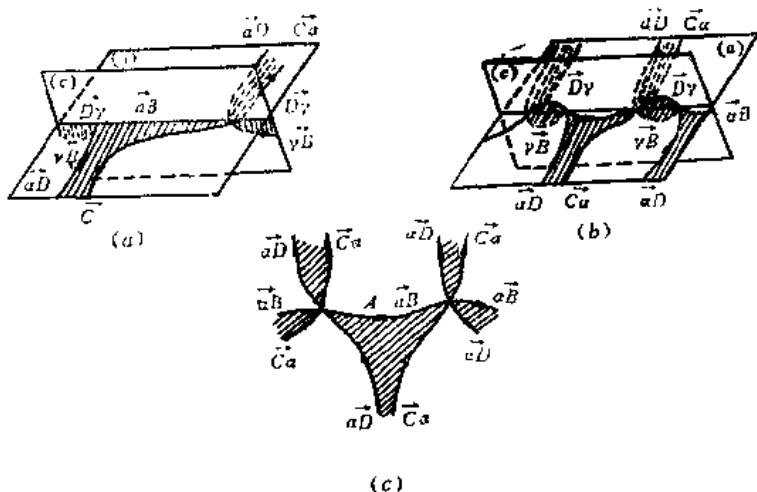


图2-54 扩展位错网络的形成

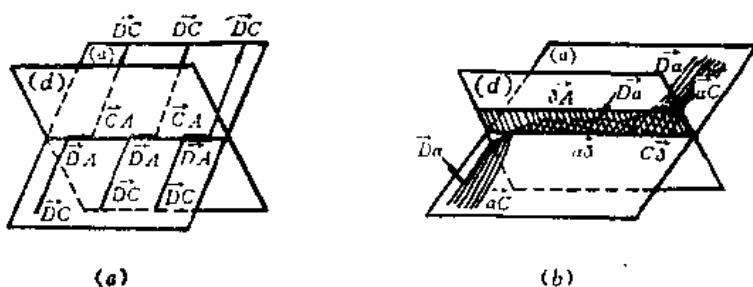


图2-55 面心立方晶体中面角位错的一般形式
(a) 不扩展的 (b) 扩展的

量为 \overrightarrow{DC} 的位错与 (d) 面上的柏氏矢量为 \overrightarrow{CA} 的位错相交截, 将按下式产生会合位错 \overrightarrow{DA} :

$$\overrightarrow{DC} + \overrightarrow{CA} \rightarrow \overrightarrow{DA}$$

可由Thompson四面体判断, \overrightarrow{DA} 在(100)面上, 是不动位错。所得结果与前述Lomer位错相同。并且, 若反应前两位错都扩展时, 可得到如下反应:

$$\overrightarrow{D\alpha} + \overrightarrow{\alpha C} + \overrightarrow{C\delta} + \overrightarrow{\delta A} \rightarrow \overrightarrow{D\alpha} + \overrightarrow{\alpha\delta} + \overrightarrow{\delta A}$$

其中, $\overrightarrow{\alpha\delta}$ 为沿滑移面交线的压杆位错。因此, 便可形成如图2-55(b)所示的面角位错。其几何特点是, 层错扩展在相交为锐角的滑移面上, 压杆位错 $\overrightarrow{\alpha\delta}$ 的右结点呈扩展状, 面左结点为收缩状。这种面角位错组态, 也可以看成是由会合位错 \overrightarrow{DA} 按上述机制扩展成三个部分位错所致。

五、扩展偶极子

如图2-56(a)所示, 在相距 h 的两滑移面(d)上, 各有一个扩展位错。在 h 较小的情况下, 两个扩展位错可能发生交互作用^[12]。两扩展位错中的部分位错 $\overrightarrow{\delta A}$ 和 $\overrightarrow{A\delta}$ 可按下式分解:

$$\begin{aligned}\overrightarrow{\delta A} &\rightarrow \overrightarrow{\delta\gamma} + \overrightarrow{\gamma A} \\ \overrightarrow{A\delta} &\rightarrow \overrightarrow{\gamma\delta} + \overrightarrow{A\gamma}\end{aligned}\quad (2-107)$$

式中, $\overrightarrow{\delta\gamma}$ 和 $\overrightarrow{\gamma\delta}$ 为压杆位错, 分别位于(d)和(c)面的两交线上; $\overrightarrow{\gamma A}$ 和 $\overrightarrow{A\gamma}$ 为Shockley位错, 可在(c)面上滑移。由于两者的柏氏矢量相等, 面符号相反, 相遇时消毁。最后, 便形成图2-56(b)所示的位错组态, 称为扩展偶极子或Z型层错偶极子。这种位错组态可在面心立方金属塑性变形过程中形成, 成为位错运动的障碍。

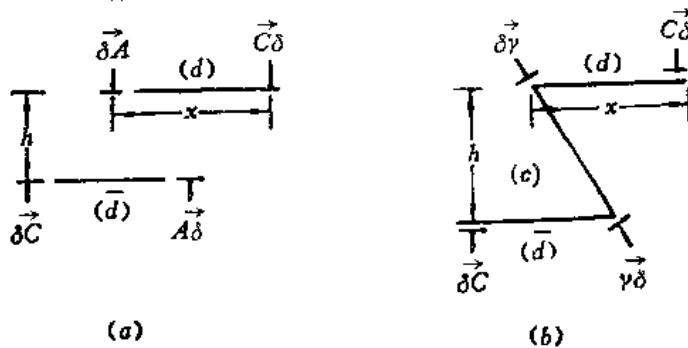


图2-56 扩展偶极子的形成

六、扩展位错结点

在面心立方晶体中, 位于同一滑移面如(d)上的全位错 \overrightarrow{AB} 、 \overrightarrow{BC} 和 \overrightarrow{CA} 相交于一点, 构成三重结点时, 在各位错分解形成内稜型层错的条件下, 可得到如图2-57所示的扩展组态, 称为扩展位错结点。如果不受自由表面和其它位错影响时, 扩展位错结点的平衡组态取决于层错能(趋于使结点收缩), 和各位错的自能及交互作用能(趋于使结点扩展)等的综合作用。这种扩展位错结点, 可在透射电镜中观察到。扩展位错结点的

半径与层错能有关，可用于实验测定层错能⁽¹³⁾。

若在图2-57(b)中，结点处部分位错的曲率半径为R，趋于使之拉直的线张力为T，则可由下式求出层错能 γ 值：

$$\gamma = \frac{T}{R} = -\frac{\alpha G b^2}{R} \quad (2-108)$$

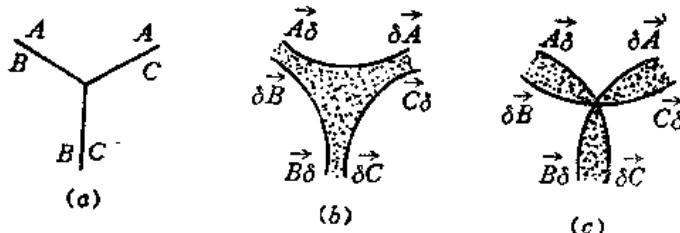


图2-57 位错结点
(a) 全位错结点 (b) 和 (c) 扩展位错结点

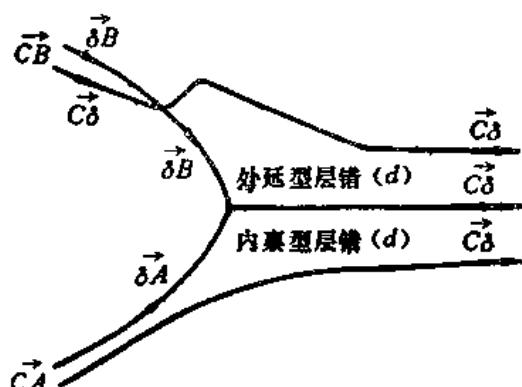


图2-58 层错对的形成

以往曾认为，外延型层错因层错能较高，一般难于形成。但后来也在具有面心立方点阵的合金中观察到外延型扩展位错结点⁽¹⁴⁾。有趣的是，在Ag-In合金中还观察到内聚型层错和外延型层错组成的层错对⁽¹⁵⁾。如图2-28所示，在层错对中，三个部分位错线相互平行并具有相同的柏氏矢量。显然，这只有在外延型层错与内聚型层错大体上有相同层错能时才有可能。

§ 2-8 面心立方晶体中扩展位错的运动

一、扩展位错运动的派-纳障碍

定性而言，同全位错相比，扩展位错的错配能较大。扩展位错得以形成的原因是由于全位错分解，使弹性能降低足以补偿层错导致错配能增加的结果。但目前，因错配能增加使扩展位错的派-纳位垒增大与否尚不十分清楚。从(2-32)式判断，部分位错的柏氏矢量较小，应使扩展位错的派-纳位垒下降。然而，层错的存在又使问题变得较为复杂化，应视层错能的高低作具体分析。

如图2-59所示，在有层错的情况下，会使错排能-位移曲线出现附加的二次最小值。图中以小球代表部分位错，用压缩弹簧表征部分位错间的排斥作用，用作用力 γ 反映层错能的影响。按照这种模型，在层错能高的条件下，两个小球可以刚性间距 r_c 一起运动。若层错宽度等于原子间距的整数倍($r_c = na$, $n = 1, 2, 3 \dots$)时，扩展位错运动所需克服的最大有效派-纳位垒应为 $2W_m$ ，而若 $r_c \neq na$ 时，则小于 $2W_m$ 。 W_m 为部分位错运动所需克服的有效派-纳位垒，相应的派-纳应力为 σ_m 。

由上述分析结果可见，运动的扩展位错可以作为一个整体沿层错面运动，具有动态的平衡宽度。扩展位错的运动实际上是由领先位错和后续位错，使层错区位置不断迁移。扩展位错的动态平衡宽度(r'_1)不一定正好等于静态平衡宽度(r_1)。在外力作用下，扩展位错的宽度可能发生变化。这主要决定于作用在两部分位错上力的相对大小。当 $B - C > 0$ 时， $r'_1 < r_1$ ，扩展位错区收缩； $B - C < 0$ 时， $r'_1 > r_1$ ，扩展位错区变宽。但是，作用在扩展位错上的总力仍与作用在全位错上的力相等($E = B + C$)。

三、扩展位错的交滑移

前已述及，交滑移是指螺型位错从一个滑移面移到另一个相交的滑移面上的运动。然而，在FCC晶体中，螺型扩展位错要整体交滑移很难进行。如图2-61(a)所示，当领先的位错遇到滑移面的交线发生交滑移后，要在交线上形成压杆位错(如图中AB所示)。这种压杆位错将强烈地吸引交叉滑移过的部分位错，使经过图2-61(a)的状态交滑移到(b)的状态所需要的激活能非常高^[162]。所以，在面心立方晶体中，层错面一般都是滑移面，使扩展位错易于整体沿层错面滑移。

螺型扩展位错交滑移时必须形成束集，如图2-62所示。根据Stroh^[17]的计算，在面

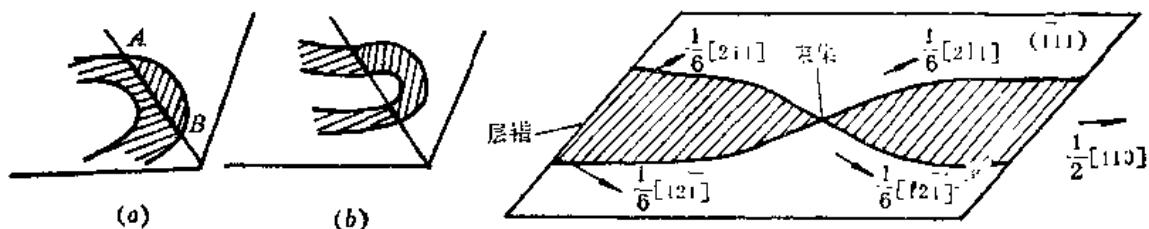


图2-61 面心立方晶体中无束集的交滑移
(a) 领先部分位错发生交滑移在滑移面交线处形成压杆位错 (b) 扩展位错发生整体交滑移

图2-62 面心立方晶体中的扩展位错
在有障碍处缩小宽度而形成
束集

心立方结构中形成单个束集所需的激活能约为 $\frac{1}{10}Gb^2d$ ， d 为扩展位错的宽度。要发生

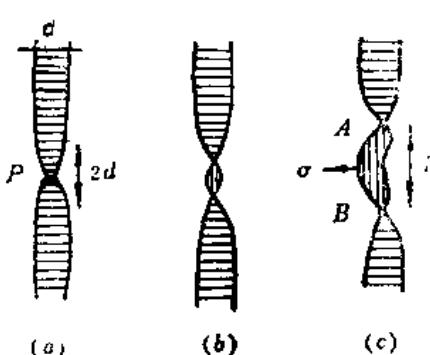


图2-63 面心立方晶体中螺型扩展位错的交滑移

交滑移时，至少要形成两个束集，以使扩展位错中的一段复合成全位错(见图2-63 a 和 b)。只有这段全位错能在新的滑移面内受切应力作用发生弓弯，复合才是稳定的，两个束集A和B不再有相互作用，故扩展位错发生交滑移的激活能为 $\frac{1}{5}Gb^2d$ 。最后，再通过全位错线段AB的交滑移并在新滑移面上重新扩展面逐渐使原来的

扩展位错过渡到新滑移面上运动，如图2-63(c)所示。

上述分析表明，扩展位错越宽，或层错能越低，则越不易发生交滑移过程。一般在

困难。这是因为刃型扩展位错存在两个半原子面（如图2-45所示）之故。目前对刃型扩展位错攀移机制比较流行的看法是割阶成核模型，如图2-65所示。设想在部分位错 $B\gamma$ 上沉淀一排空位，崩塌后形成一棱柱位错环，其柏氏矢量为 \overrightarrow{BA} 。显然此棱柱位错环能以滑移方式完成如图2-65(c)所示的扩展时，便可形成两个扩展割阶，从而使原扩展位错完成了局部攀移。对于这种攀移所需能量尚难于精确计算，涉及位错的弹性能、层错能、外加应力、温度以及空位过饱和度等诸多因素。Grilhe等人通过计算表明，随着棱柱位错环的尺寸增大，其扩展所需激活能减小，当环大到一定程度后，可以完全通过滑移来扩展而不需要热激活。因此，这种机制能否实现，主要取决于是否有足够多的空位扩散到位错线以形成尺寸足够的棱柱位错环。

五、扩展割阶的运动

当层错能较低时，FCC晶体中位错割阶也可能发生分解，形成扩展型割阶。如图2-66(a)所示，柏氏矢量为 \overrightarrow{BD} 的刃型位错在 BCD 面上发生扩展，并与柏氏矢量为 \overrightarrow{BA} 的另一位错相交截，形成沿 BA 方向的割阶。此割阶的柏氏矢量仍为 \overrightarrow{BD} ，并可在 ABD 面上分解成两个 Shockley 位错，相应的柏氏矢量分别为 $\overrightarrow{B\gamma}$ 和 $\overrightarrow{\gamma D}$ （见图2-66b）。同时，为在位错结点处保持柏氏矢量的守恒性（见图1-5），割阶 \overrightarrow{BD} 扩展时还要沿内稜型层错的交线<110>相应形成两个方向相反的压杆位错 $\overrightarrow{\gamma\alpha}$ 和 $\overrightarrow{\alpha\gamma}$ 。显然，这种扩展割阶可随同扩展的刃型位错作保守运动。其滑移方向平行于位错的滑移面与割阶的交截线。压杆位错随同位错运动时，其一端要向前延伸，而另一端则不断湮灭。

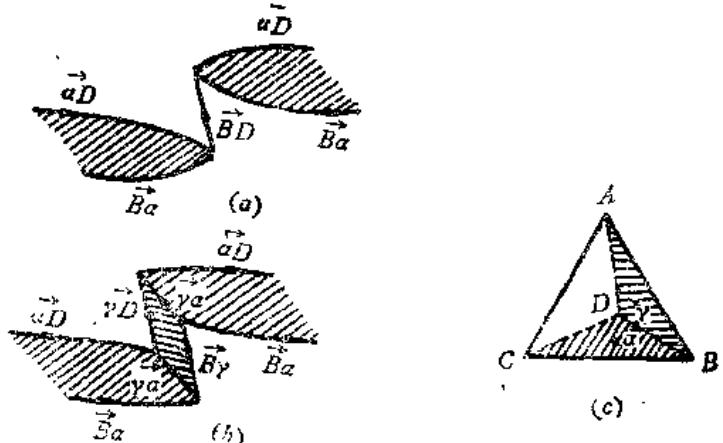


图2-66 刃型位错上的扩展型割阶的形成

(a') 割阶尚未扩展 (b) 割阶扩展 (c) Thompson四面体 (图中箭头表示位错线方向)

扩展割阶也可能进行非保守运动。如图2-67(a)所示，矢量为 \overrightarrow{BD} 的螺型位错在 BCD 面上分解。当其被另一柏氏矢量为 \overrightarrow{CA} 的位错交截时，所形成的割阶平行于 CA 方向，具有柏氏矢量 \overrightarrow{BD} 。此割阶可在 ACD 面上分解成一个 Frank 位错 $B\beta$ 和一个 Shockley 位错 $\overrightarrow{\beta D}$ ，如图2-67(b)所示。这种扩展割阶如果在运动开始时能被束缚，可复合成全位错型割阶，进行保守运动。否则，因 Frank 位错的惰性大，将迫使扩展割阶进行非保守运动。即只有在 Frank 位错产生点缺陷（空位或填隙原子）的条件下，此扩展割阶才

能在位错线弓弯的方向上运动。为降低位错线自能，Frank位错 $\overrightarrow{B\beta}$ 还可进一步分解为不动的压杆位错 $\overrightarrow{\delta\beta}$ 和在ABC面上可动的Shockley位错 $\overrightarrow{B\delta}$ ，如图2-67(c)所示。因此，扩展割阶往往成为钉锚位错的运动障碍。

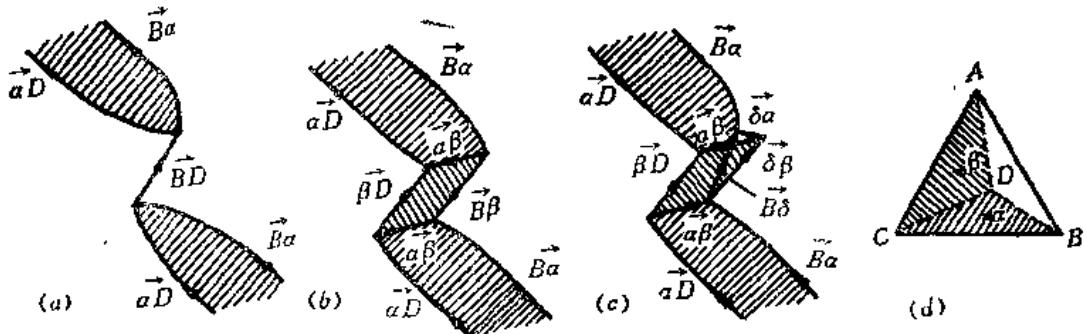


图2-67 螺型位错上不可动扩展割阶的形成
(a)割阶尚未扩展 (b)和(c)割阶扩展 (d)Thompson四面体 (图中箭头表示位错线方向)

§ 2-9 密排六方晶体中的层错与位错反应

一、密排六方晶体中的层错

密排六方晶体和面心立方晶体相似，都为密排结构。两者的区别主要在于堆垛次序不同。FCC点阵的堆垛次序为 $ABC\ A\ B\ C$ ，三层一循环；而HCP点阵的堆垛次序为 $AB\ A\ B\ A\ B$ ，二层一循环。对FCC点阵而言，密排面是 $\{111\}$ ，而对HCP点阵为 $\{0001\}$ 面。实际上这种密排面可以用同样的刚球模型加以描述，如图2-68所示。在HCP点阵中，层错也有内稟型和外延型之分，可分别由以下三种方式形成：

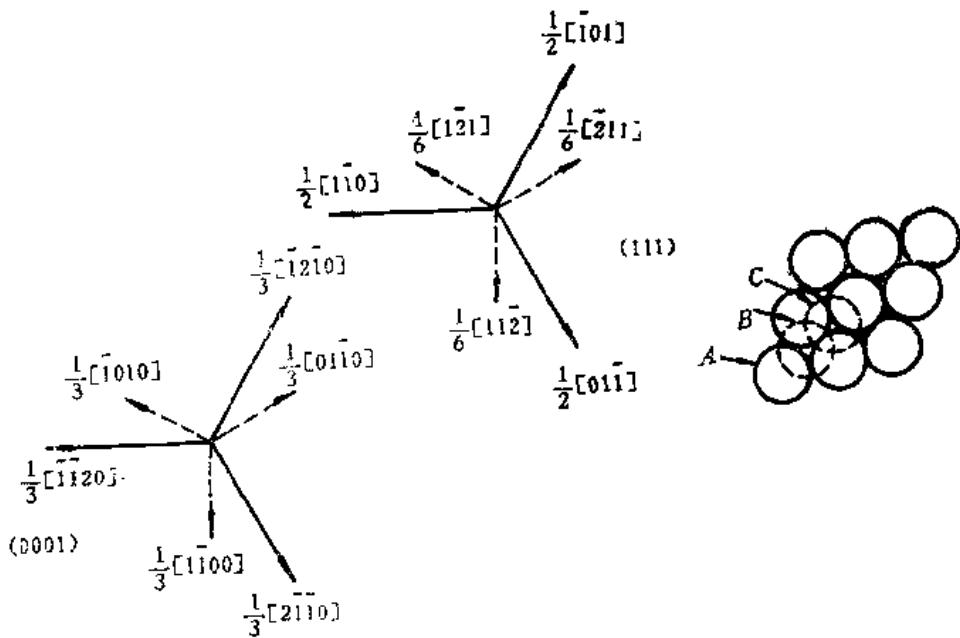


图2-68 FCC和HCP两种点阵中密排面的刚球模型及相应的平移矢量

1) 六个柏氏矢量等于双角锥体基面ABC的边长的全位错, 即 \vec{AB} , $\pm\vec{BC}$ 和 $\pm\vec{CA}$;

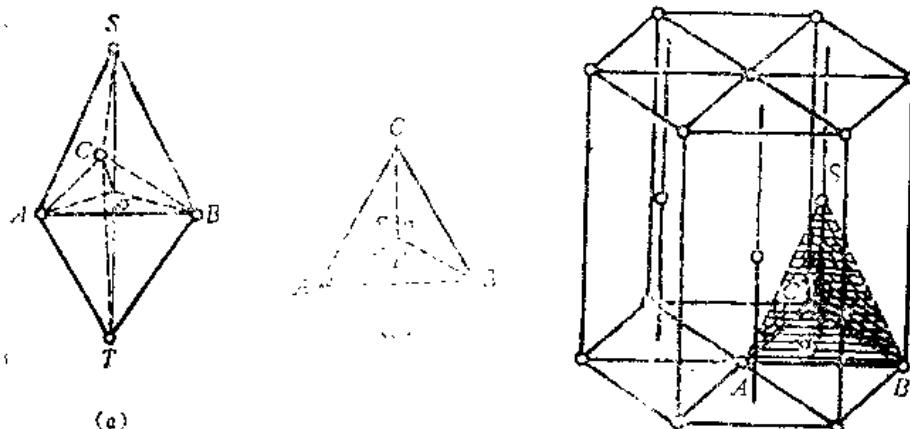


图2-69 HCP晶体矢量的Berghezan记号

- 2) 两个柏氏矢量垂直于基面的全位错, 即 \vec{ST} 和 \vec{TS} ;
- 3) 十二个 $\frac{1}{3}\langle 11, 3 \rangle$ 型的部分位错, 其柏氏矢量如可用 \vec{SA}/\vec{TB} 表示, 是代表 SA 和 TB 中点连线长度两倍的矢量;
- 4) 四个柏氏矢量垂直于底面的部分位错, 即 $\pm\vec{\sigma S}$ 和 $\pm\vec{\sigma T}$;
- 5) 六个在基面上的Shockley部分位错, 其柏氏矢量分别为 $\pm\vec{A\sigma}$, $\pm\vec{B\sigma}$ 和 $\pm\vec{C\sigma}$;
- 6) 十二个柏氏矢量为 $\pm\vec{AS}$ 、 $\pm\vec{BS}$ 、 $\pm\vec{CS}$ 、 $\pm\vec{AT}$ 、 $\pm\vec{BT}$ 和 $\pm\vec{CT}$ 的部分位错, 是由4)和5)两部分位错合成的结果。

上述各部分位错的柏氏矢量的Miller-Bravais指数及长度示于表2-4。

表2-4 HCP晶体中常见位错的Berghezan记号

柏氏矢量记号	\vec{AB}	\vec{TS}	\vec{SA}/\vec{TB}	$\vec{A\sigma}$	$\vec{\sigma S}$	\vec{AS}
\vec{b}	$\frac{1}{3}\langle 1120 \rangle$	[0001]	$\frac{1}{3}\langle 1123 \rangle$	$\frac{1}{3}\langle 1100 \rangle$	$\frac{1}{2}[0001]$	$\frac{1}{6}\langle 2203 \rangle$
b	a	c	$\sqrt{c^2+a^2}$	$a/\sqrt{3}$	$c/2$	$\sqrt{a^2/3+c^2/4}$
b^2	a^2	$8/3 a^2$	$\frac{11}{3}a^2$	$\frac{1}{3}a^2$	$\frac{2}{3}a^2$	a^2

(2) Damiano记号^[12]。用图2-70所示的基本六方单位晶胞上各符号表示HCP晶体中常见位错的柏氏矢量及滑移面, 如表2-5所示。

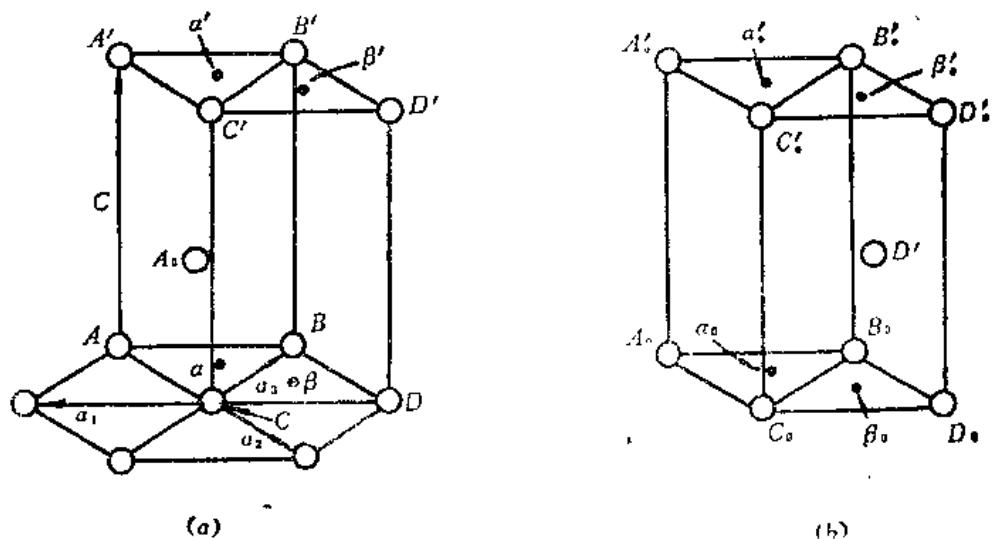


图2-70 HCP晶体中矢量的Damiano记号

表2-5 HCP晶体中常见位错及滑移面的Damiano记号

柏氏矢量或滑移面	Damiano记号	Miller-Bravais指数
(1) 全位错的柏氏矢量	\overrightarrow{AC} $\overrightarrow{AA'}$ $\overrightarrow{CB'}$	$\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0]$ [0001] $\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}2\bar{3}]$
(2) Shockley位错的柏氏矢量	$\overrightarrow{A\alpha}$ $\overrightarrow{A\beta}$	$\frac{1}{3}[\bar{1}100]$ $\frac{2}{3}[\bar{1}100]$
(3) Frank位错的柏氏矢量	$\overrightarrow{A\alpha_0}$ $\overrightarrow{A\beta'}$ $\overrightarrow{BA_0}$ $\overrightarrow{Ca'}$	$\frac{1}{2}[0001]$ $\frac{1}{3}[\bar{2}20\bar{3}]$ $\frac{1}{6}[\bar{2}0\bar{2}3]$ $\frac{1}{3}[\bar{0}11\bar{3}]$
(4) 滑移面	(ABC) (ABB'A') (AB'C') (CA ₀ B')	(0001) (0110) (1101) (1122)

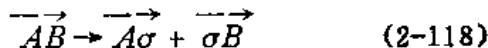
2. Shockley部分位错

在铍、镁、镉和锌等具有HCP点阵的金属中，滑移系统 $\frac{1}{3}<11\bar{2}0>$ (0001) 的临界切应力很低 ($\leq 1 \text{ MPa}$)，使基面滑移易于进行。在基面上，全位错可分解成两个 Sho-

ckley位错，中间以内稟型层错区相连，如图2-71所示。相应的位错反应如按Berghezan记号为：



图2-71 HCP晶体中全位错在基面上分解成两个Shockley位错和内稟型层错



即

$$\frac{1}{3} [11\bar{2}0] \rightarrow \frac{1}{3} [10\bar{1}0] + \frac{1}{3} [01\bar{1}0]$$

这种位错分解使位错能量减小1/3。所形成的Shockley部分位错可在基面上运动，使堆垛次序作如(2-113)和(2-115)式所表述的变动。两Shockley部分位错的柏氏矢量同全位错的柏氏矢量之间呈±30°角。Shockley位错可具有刃型、螺型或混合型等类型。

3. Frank部分位错

如同在FCC金属中一样，可由空位盘崩塌或填隙原子沉淀形成Frank位错。由图2-72可见，空位在基面上聚集和崩塌后，会导致同种类原子层成为近邻，使系统能量增高。改变这种不稳定原子组态的一种方式是将空位盘上面的一层原子由B位置改变到C位置，成为一层附加的C原子，如图2-72(c)所示。这相当于其上层和下层各有符

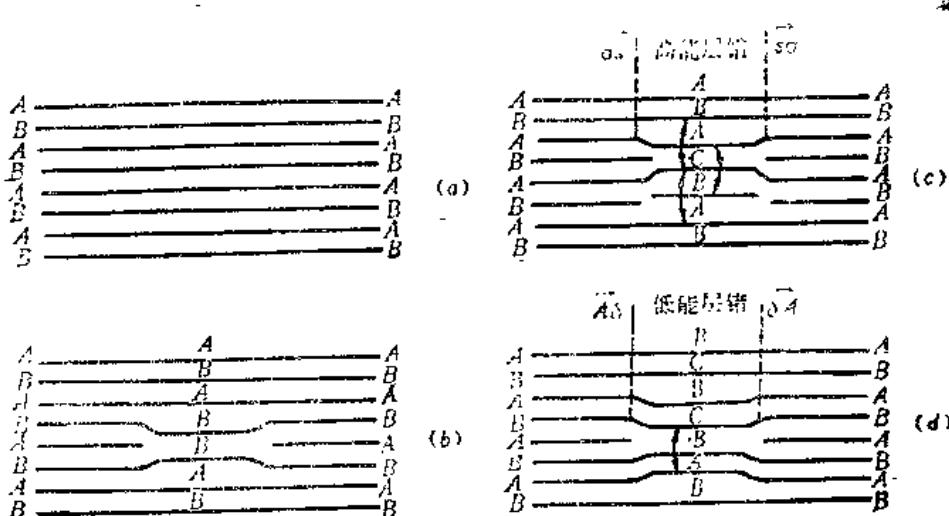


图2-72 HCP晶体中Frank位错环的空位盘崩塌形成机制

- (a) 空位在基面上聚集形成空位盘
- (b) 空位盘崩塌
- (c) 调整层错区堆垛次序，形成外延型Frank位错环
- (d) 调整层错区堆垛次序，形成内稟型Frank位错环

号相反的一个柏氏矢量为 $\frac{1}{3}<10\bar{1}0>$ 的Shockley位错运动的结果。所涉及的位错反应如按Damiano记号为：



$$\frac{1}{2} [0001] + \frac{1}{3} [1\bar{1}00] + \frac{1}{3} [\bar{1}100] \rightarrow \frac{1}{2} [0001]$$

然而，按此种方式所形成的Frank位错环包围着外延型层错，所需能量较大，故有可能在层错区萌生一个Shockley位错环，并由其扩层运动使层错变为内稟型。于是，在原Frank位错环所在的边界处，便可能发生如下反应而形成 $\overrightarrow{AA_0}$ 型的Frank位错。即

$$\overrightarrow{A\alpha} + \overrightarrow{\alpha A_0} = \overrightarrow{AA_0} \quad (2-120)$$

$$\frac{1}{3} [1100] + \frac{1}{2} [0001] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{2}\bar{2}03]$$

在所得到的Frank位错环内包围着内稟型层错，层错能较低。一般认为，外延型层错的层错能约为内稟型层错的三倍。所以，在HCP晶体中，由空位崩塌形成的Frank位错环的柏氏矢量以 $\frac{1}{6}<20\bar{2}3>$ 为主。位错环的尺寸受层错能、应力、温度和杂质含量等影响而不同。 $\overrightarrow{\alpha A_0}$ 和 $\overrightarrow{AA_0}$ 型Frank位错环不能沿基面滑移（不动位错），但两者均可攀移。

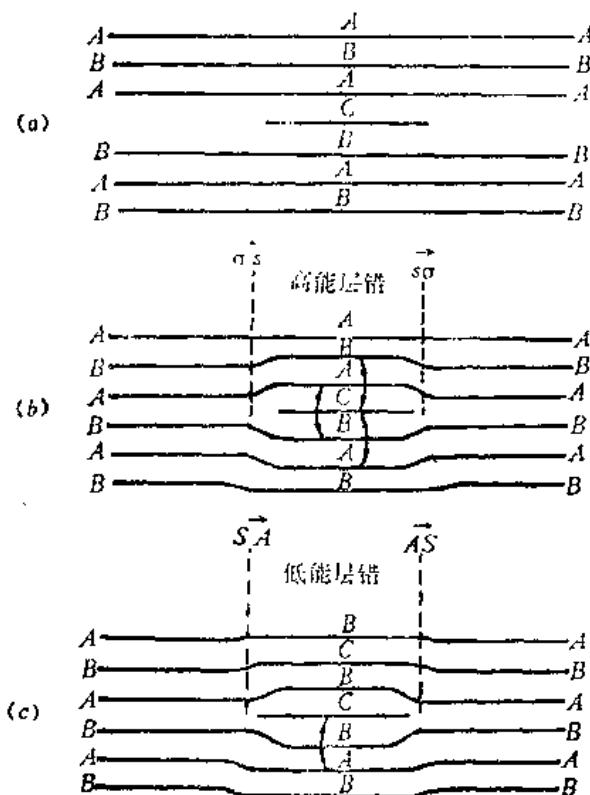


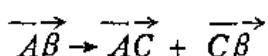
图2-73 HCP晶体中Frank位错环的填隙原子沉淀形成机制

(a)填隙原子在基面上沉淀 (b)外延型Frank位错环的形成 (c)内稟型Frank位错环的形成

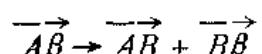
另外，也可以由填隙原子在基面上沉淀形成如图2-73(a)和(b)的围绕外延型层错的Frank位错环，其柏氏矢量为 $\frac{1}{2} [0001]$ 。由于其层错能高使位错环尺寸足够大时，会按(2-120)式通过Shockley位错环的萌生与运动而转变成内稟型Frank位错环，如图2-73(c)所示。在经辐照的Mg、Cd和Zn中，已观察到填隙原子在基面上沉淀形成的Frank位错环，其柏氏矢量为 $\frac{1}{2} [0001]$ 和 $\frac{1}{6} [20\bar{2}3]$ 两种。

4. 其它部分位错

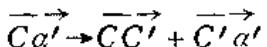
除在表2-5中已讨论过的几种部分位错外，其余位错均与位错分解或合成有关。例如，可动的部分位错 $\overrightarrow{A\beta}$ 位于基面，围绕着内稟型层错，并对以下位错分解反应具有亚稳定性；



或

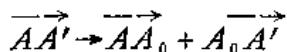


不动位错 $\overrightarrow{C\alpha'}$ 也有一定的亚稳定性，可按以下反应分解：

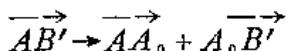


其中，分解产物 $\overrightarrow{CC'}$ 和 $\overrightarrow{C'A'}$ 两位错可分别在 $(ACC'A')$ 和 $(A'B'C')$ 面上滑移。

全位错 $\overrightarrow{AA'}$ 或 $\overrightarrow{AB'}$ 为可动位错，但在一定条件下可分解形成不动位错组态，如图2-74所示。相应的分解反应为：



或

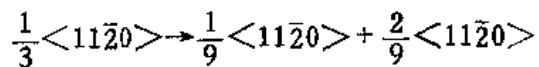
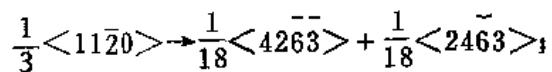


由图2-74可见，这种分解反应需要攀移条件，可通过空位或填隙原子短程扩散发生。这种分解反应对于限制非基面滑移有重要作用，可能是使全位错 $\overrightarrow{AA'}$ 或 $\overrightarrow{AB'}$ 滑移时有很高静态派-纳障碍的原因。

三、密排六方金属中位错的扩展

已有实验结果表明，HCP晶体中有四种滑移系统，即基面滑移系统 $\langle 11, 0 \rangle$ {00, 1}、棱柱滑移系统 $\langle 11, 0 \rangle$ {10, 0}、I型棱锥滑移系统 $\langle 11, 0 \rangle$ {10, 1} 和II型棱锥滑移系统 $\langle 11, 3 \rangle$ {11, 2}。其中，以基面滑移系统最常见，其它三种只在合适的条件下才能出现。而且，全位错扩展主要在基面上进行，如(2-118)式所示。扩展位错的宽度与层错能成反比，使在层错能较高的Mg中位错一般不扩展，而层错较低的Cd和Zn中位错有较明显的扩展。

在有利于棱柱滑移的HCP金属中，基面滑移虽可进行，但全位错不易发生(2-118)式所示的分解扩展。这可能是因为在HCP金属中，晶面间距同 c/a 值有关所致。在 $c/a < 1.633$ 的情况下，基面间距变小，使相邻原子层间的键合增强，从而难于改变堆垛次序而形成稳定层错。对于钛和锆中的棱柱滑移，曾提出过以下两种位错反应^[20]：



但在实际金属中尚没有找到明显的证据。经高分辨晶格象观察表明，在棱柱面上全位错没有扩展开来。

在受高应力作用下及晶体取向不利于基面滑移和棱柱滑移的条件下，在{1011}和{1122}面上以 $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 为柏氏矢量的滑移系统可以开动。其中，{1122}面也是HCP金属常见的孪晶面之一。但由于相应的柏氏矢量较大，而且此类原子而不是理想的密排

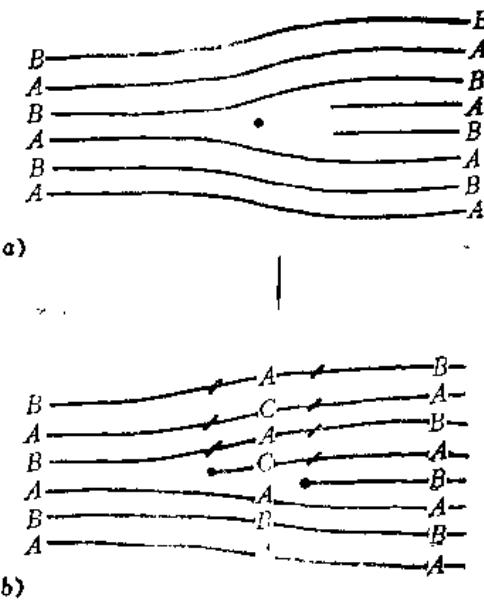


图2-74 全位错 $\overrightarrow{AA'}$ 分解

(a) $\overrightarrow{AA'}$ 全位错组态 (b) $\overrightarrow{AA_0} + \overrightarrow{A_0A'}$ 复合位错组态

面，使位错滑移的晶格阻力较大。层错的形成对 HCP 金属中的棱锥滑移可能会有一定的贡献。Rosenbaum⁽²²⁾等人在刚球点阵模型的基础上曾提出，柏氏矢量为 $\frac{1}{3} [1\bar{2}\bar{3}]$ 或 $\vec{B}'\vec{C}$ 的全位错在 $(11\bar{2}2)$ 面上可能分解成四个部分位错，其柏氏矢量均为 $\frac{1}{4} \vec{B}'\vec{C}$ 。其

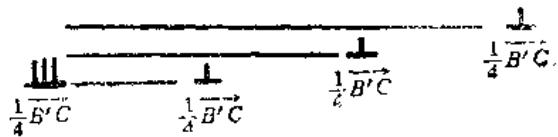


图2-75 全位错 $\vec{B}'\vec{C}$ 在 $(11\bar{2}2)$ 面上分解形成一个区域位错和三个部分位错

中，一个部分位错的中心同时占据三个相邻的 $(11\bar{2}2)$ 面，而在各面上引起的原子位移不同，称为区域位错 (Zonal Dislocation)。另外三个部分位错分别位于三个 $(11\bar{2}2)$ 面上，与区域位错和三片相邻的层错共同组成扩展位错，如图 2-75 所示。由于区域位错运动时可形成孪晶，使 $<11\bar{2}3>\{11\bar{2}2\}$ 滑移同孪晶有密切关系。

§ 2-10 体心立方晶体中的层错与位错反应

前已述及，在 BCC 金属中以密排方向 $<111>$ 为滑移方向，全位错的柏氏矢量为 $\frac{1}{2} <111>$ 。相应的滑移面有：{110}、{112} 和 {123}。由于这三种滑移面均含有相同的 $<111>$ 方向，使螺型位错易于交滑移。在低温变形的 BCC 金属中，所观察到的位错多为长而直的螺型位错。这说明，同刃型位错相比，螺型位错的可动性较差，是控制 BCC 金属滑移特性的主要位错组态。

在 BCC 金属中，尚未直接观察到层错。一般认为，这是其层错能较高所致。但是，对 BCC 晶体中的层错和部分位错，也可以作与 FCC 和 HCP 晶体中类似的处理，从而得出其相应的位错反应特性。

一、体心立方晶体中的层错

在体心立方晶体中，以 {110} 面的密排程度最大，故可以把 BCC 晶体看成是由 {110} 面堆垛而成。如图 2-76 示出了两个相邻的 $(\bar{1}10)$ 面上原子的堆垛情况。可见，堆垛次序为 $\cdots AB AB AB \cdots$ ，两层一循环。在每一层上，原子之间空隙较大，其密排程度不如 FCC 和 HCP 晶体中密排面紧凑。同时，可供第二层原子占据的 B 位置或 A 位置为马鞍型凹窝。在凹窝中心两侧 $\frac{1}{8} [110]$ 处各有两个同等稳定的位置 B_1 和 B_2 （或 A_1

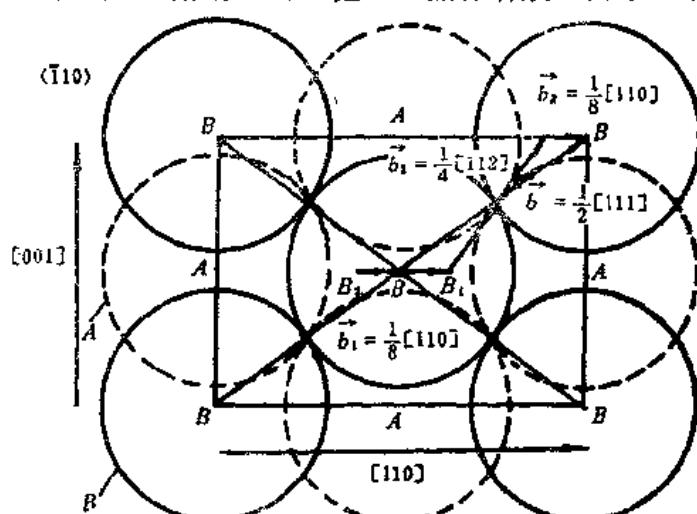


图2-76 BCC晶体中 $(\bar{1}10)$ 面上相邻两层原子的分布图

由图2-77可见， $(1\bar{1}2)$ 面与 (110) 面相垂直，其交线 $[\bar{1}11]$ 恰好为滑移方向。每相邻两层 $(1\bar{1}2)$ 面原子之间的相对滑移矢量为 $\frac{1}{6}[\bar{1}11]$ ，如图2-78所示。若将某一层 $(1\bar{1}2)$ 面原子（如A层原子）以上部分相对于以下的F层滑移 $\frac{1}{6}[\bar{1}11]$ 或 $\frac{1}{3}[1\bar{1}\bar{1}]$ ，可将BCC晶体的堆垛次序变化而形成 I_1 型内禀层错：

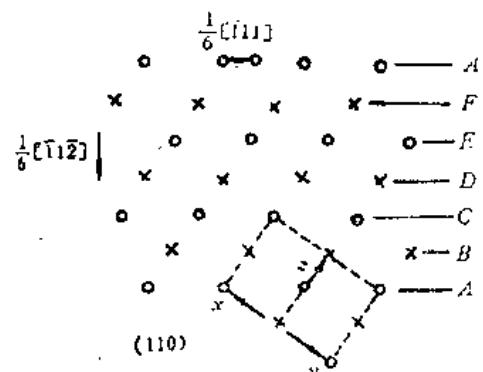


图2-78 BCC晶体中原子在 (110) 面上投影（○代表位于纸面上的原子；×代表位于纸面下的原子）

$I_1 = \cdots F E D C B A F E \stackrel{+}{:} F E D C B A \cdots$

显然，这种堆垛次序的变动相当于形成了一个原子层厚的孪晶。这也说明，在BCC晶体中，孪晶易于在 $\{112\}$ 面上形成。

2. 抽出方式

若在BCC晶体的正常堆垛周期中，抽出一对原子层（如C层和D层），可形成如下 I_2 型内禀层错：

$$I_2 = \cdots F E D C B A F E \stackrel{+}{:} B A F E D C B A \cdots$$

3. 插入方式

若在BCC晶体中的正常堆垛周期中，在某一B面处将晶体切开后，使其上各层原子向上沿 $[1\bar{1}2]$ 方向移动 $\frac{1}{3}[1\bar{1}2]$ 距离，再在该空隙中插入一对原子层（如E层和F层），则可形成E型外延层错：

$$E = \cdots C D E F A B E \stackrel{+}{:} F C D E F A B C \cdots$$

在上述改变 $\{112\}$ 面堆垛次序的过程中，要相应破坏或变动相邻原子层的键合状态。按照所涉及的原子键合破坏的程度，可以认为， I_1 型内禀层错所需能量最小，而形成其它两种层错所需能量较大。因此在BCC晶体中，层错一般以 I_1 型为主，其它两种层错的实用意义不大。

二、体心立方晶体中的部分位错

上述分析表明，在BCC晶体中可能形成的部分位错主要有：

- (1) 在 $\{110\}$ 面上形成一部分层错时，其边界为部分位错 $\frac{1}{8}<110>$ ；
- (2) 在 $\{112\}$ 面上形成一部分层错时，其边界为部分位错 $\frac{1}{6}<111>$ 或 $-\frac{1}{3}<111>$ 。

另外，在BCC晶体中，也可能在 I_1 型层错的基础上进一步形成 I_2 型层错。与其相对应的 $\{112\}$ 面的堆垛次序如：

$$I_3 = \cdots F E D C B A F E F A B A F E D C B A \cdots$$

这种 I_3 型层错相当于具有三个原子层厚的孪晶，可以看成是在如图2-79(a)所示的 I_1 型层错的基础上，经柏氏矢量为 $\frac{1}{3} [1\bar{1}\bar{1}]$ 和 $\frac{1}{6} [\bar{1}11]$ 的两部分位错在 FE 和 ED 两原子层之间相继滑移的结果。若在 $\{112\}$ 面上形成一部分 I_3 型层错时，其边界的一端为三个分布在相邻三个滑移面上的 $\frac{1}{6} <111>$ 部分位错，另一端为柏氏矢量和等于零的区域位错，如图2-79(b)所示。

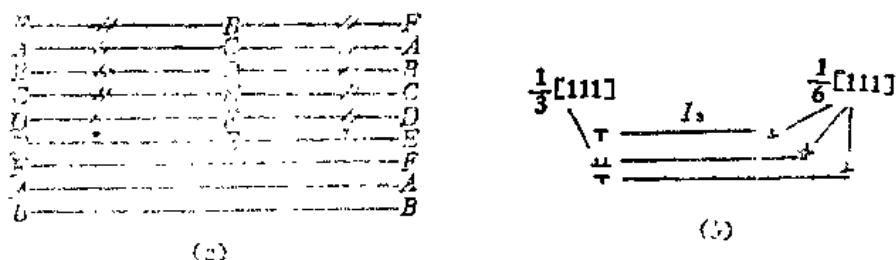


图2-79 BCC晶体中在 $\{112\}$ 面上形成的
(a)部分 I_1 型层错和(b)一部分 I_3 型层错

三、体心立方晶体中的扩展位错

1. 在 $\{110\}$ 面上的扩展位错

如图2-76所示， B 层原子要从一个平衡位置滑移到另一个平衡位置时，比较容易的途径是将全位错 b 的运动分解成三个部分位错的运动，即

$$\frac{a}{2} [111] \rightarrow \frac{1}{8} [110] + \frac{1}{4} [112] + \frac{1}{8} [110]$$

$$\vec{b} \quad \vec{b}_1 \quad \vec{b}_2 \quad \vec{b}_3$$

这种全位错分解反应的特点是，所形成的三个部分位错位于同一滑移面内。其中， \vec{b}_2 位错留在原位错 \vec{b} 所在处， \vec{b}_1 和 \vec{b}_3 两部分位错构成扩展位错的两个边界。Cohen等人曾用这种模型设想一个 $\frac{1}{2} [111]$ 螺型位错分解形成可滑移型扩展位错的可能性，如图2-80(a)所示。这种分解反应称为可滑移分解。

后来，Kroupa等人^[23]又设想 $\frac{1}{2} [111]$ 螺型位错可沿属于 $[111]$ 晶带轴的三个 $\{110\}$ 面内分解，如图2-80(b)和(c)所示。其位错反应如下：

$$\frac{1}{2} [111] \rightarrow \frac{1}{8} [110] + \frac{1}{8} [101] + \frac{1}{8} [011] + \frac{1}{4} [111]$$

$$\vec{b} \quad \vec{b}_1 \quad \vec{b}_2 \quad \vec{b}_3 \quad \vec{b}_4$$

b_4 为中心螺型位错，分别与另三个部分位错以三片层错相联，故称三叶位错。在图2-80中，(b)和(c)是等效的两个状态，可以交替地沿同一条位错线扩展。

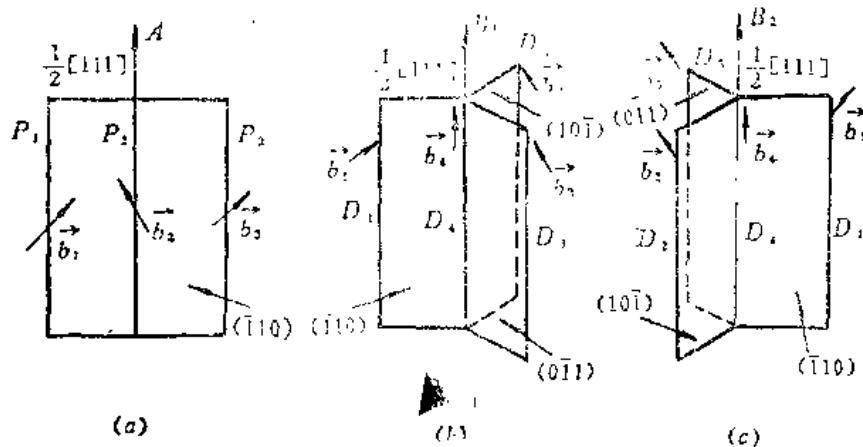


图2-80 BCC晶体中柏氏矢量为 $\frac{1}{2}[111]$ 的螺型位错在{110}面上分解

(a)可滑移分解 (b)和(c)不可滑移分解，两种状态相差 180°

2. 在{112}面上的扩展位错

开始Frank等人^[24]提出， $\frac{1}{2}[111]$ 螺型位错可在{112}面上按下列式分解扩展：

$$\frac{1}{2}[111] \rightarrow \frac{1}{6}[111] + \frac{1}{3}[111]$$

这是由一个螺型位错分解成两个螺型部分位错，均位于同一滑移面上，如图2-81(a)所示。这种位错组态在外力作用下可整体滑移，也称为可滑移分解。

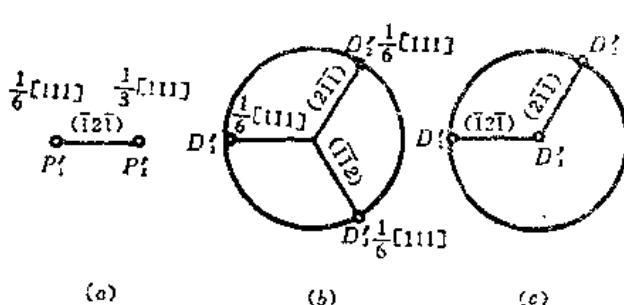


图2-81 BCC晶体中 $\frac{1}{2}[111]$ 螺型位错在{112}面上分解机制示意图

(a)可滑移分解 (b)不可滑移分解，无中心位错
(c)不可滑移分解，有中心位错

后来，Hirsch等人^[25]又提出了一种 $\frac{1}{2}[111]$ 螺型位错沿属于[111]晶带轴的三个{112}面上分解的可能性，如图2-81(b)所示，即

$$\frac{1}{2}[111] \rightarrow \frac{1}{6}[111] + \frac{1}{6}[111] + \frac{1}{6}[111]$$

其特点是形成相交的三片层错，分别以三个 $\frac{1}{6}[111]$ 螺型部分位错为边界，但却无中心部分位错。Sliesz-wyk^[26]认为这种中心无部分位错的

扩展位错不稳定，应按图2-81(c)所示的方式分解。在无应力作用时，图(c)中所示的组态可有三种等效情况（相差 120° ）。这种各部分位错分别位于不同滑移面上的分解，也称为不可滑移分解。所形成的扩展位错组态具有阻碍其它位错滑移的特性。

四、体心立方晶体中螺型位错心的结构

上述螺型位错的非平面扩展特性同在BCC晶体中螺型位错受有较大的派-纳应力有一定关系。虽然尚未从实验上直接证实这种扩展的存在，但至少在位错中心范围内有可能发生非平面扩展。

对 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 螺型位错的原子组态进行计算机模拟^[47]表明，其位错中心的结构如图2-82(a)所示。图中黑点表示原子位置在{111}面上的投影。螺型位错位于图的中心，并与投影面（纸面）相垂直。{110}和{112}面的取向如图2-82(b)所示。对沿位错线[111]方向上原子之间的位移差用相邻原子投影之间的箭头加以表征。箭头的长度与原子之间的位移差成正比，距位错中心越远则箭头越短。可见， $\frac{1}{2}[111]$ 螺型位错中心分布在三个相交的{110}面上，相当于一个 $\frac{1}{2}[111]$ 螺型位错分解成三个 $\frac{1}{6}[111]$ 分股螺型位错。但同Shockley部分位错不同，这种分股位错不是稳定层错的边界。而且，分股螺型位错中心还可能以孪晶方式进一步向{112}面上扩展。

在不受外力作用时，图2-82(a)中所示的分股螺型位错心组态具有三重旋转对称

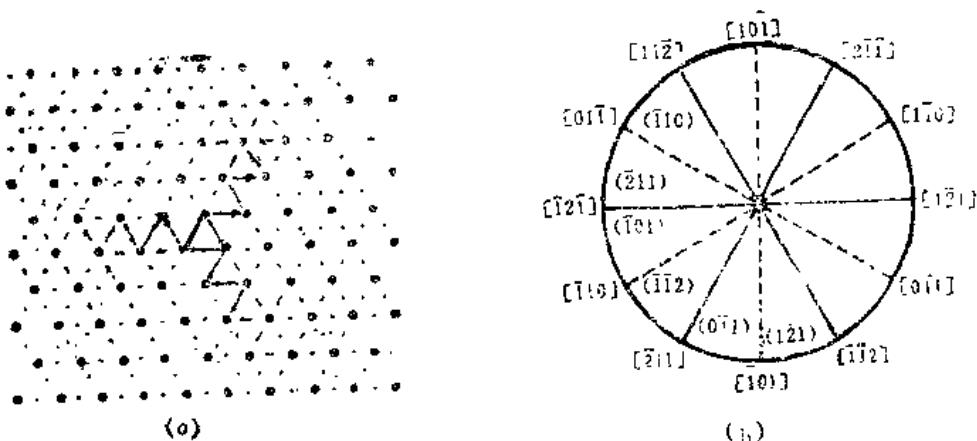


图2-82 BCC晶体中 $\frac{1}{2}[111]$ 螺型位错心的原子组态

(a)为螺型位错心的平衡组态 (b)为[111]晶带中{110}和{112}面的取向关系

性。实际上，由于分股位错心向{112}面扩展会在一定程度上破坏这种旋转对称性，易于使BCC晶体滑移出现非对称性。在切应力作用下，螺型位错心的结构会在滑移前发生变化，如图2-83所示。若随(101)面上切应力增加，使图2-82(a)中螺型位错向左运动时，位于(101)面上的分股位错心向左扩展，而其它两分股位错却向原螺型位错心处收缩，如图2-83(a)所示。在整个螺位错中心沿(101)面运动前，位于(011)面上的分股位错要被(110)面上的分股位错取代而消失，如图2-83(b)所示。所以，在切应力作用下，BCC晶体在{110}面上滑移出现非对称性。

相比之下，在BCC晶体中，刃型位错不具备非平面扩展特性，其位错心集中分布在

{110}或{112}面上，而且不包含稳定的层错。所以，刃型位错对非剪切应力不敏感，而易于在较低的切应力下滑移。

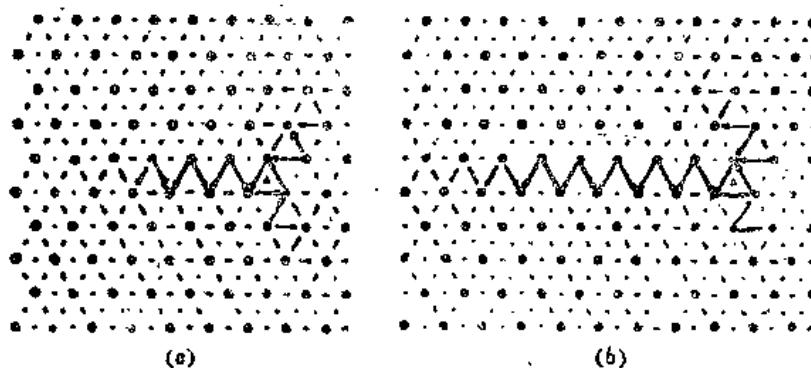
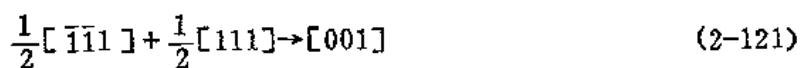


图2-83 BCC晶体中 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 螺型位错心组态随切应力增加而变化（整个位错在切应力为 $0.0275G$ 时运动，图中▲为位错心所在处）
(a)切应力为 $0.0115G$ (b)切应力为 $0.0265G$

五、体心立方晶体中的全位错合成反应

在BCC晶体中，常见的全位错除了 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错外，还有柏氏矢量为 $\langle 001 \rangle$ 的位错，有时可在位错网络中观察到。这种类型的全位错可由两个 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 全位错经合成反应而获得，即



如图2-84(a)所示，若沿(101)面上具有柏氏矢量为 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 的位错与沿($10\bar{1}$)面上

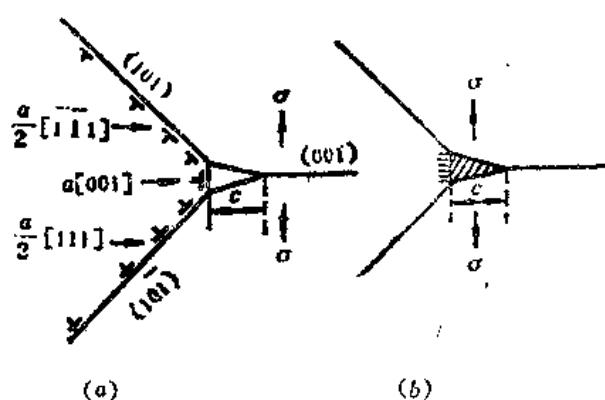


图2-84 BCC晶体中 $\langle 001 \rangle$ 全位错的形成与解理裂纹成核

的具有柏氏矢量为 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 的位错相遇时，便可按此反应合成新位错使弹性性能降低。合成的新位错线沿着两滑移面(101)和($10\bar{1}$)的交线[010]方向（垂直纸面的方向），而柏氏矢量为 $\langle 001 \rangle$ ，故应为刃型位错。显然在BCC晶体中， $\langle 001 \rangle$ 位错是一种不动位错，其相应的半原子面又恰好沿着解理面(001)，易于成为萌生解理裂纹的部位，如图2-84(b)所示。

§ 2-11 过饱和空位对位错组态的影响

在纯金属中，有三种产生点阵空位和填隙原子的来源。一是高温加热时，由热起伏

促使点阵原子脱离点阵结点而产生点缺陷，在冷却过程中部分点缺陷被冻结在晶体中；二是塑性变形时，由位错运动产生点缺陷；三是由高能粒子照射金属晶体时，使点阵原子离位，生成填隙原子和点阵空位。由于产生填隙原子要消耗很大的能量，在熔点以下热起伏只能产生点阵空位，而极难形成填隙原子。冷变形似乎应有机会同样产生空位和填隙原子，但实验上只证明空位的存在。只有对辐照后的金属才证明两种点缺陷共存，却又因填隙原子的迁移激活能很小，而难于在一般温度下存留。所以，纯金属中只有空位是比较重要的点缺陷。

晶体中空位的数量有时可达到过饱和状态，以致影响位错的运动或形成特殊的位错组态。本节主要讨论淬火（高温快冷）和冷变形时形成过饱和空位的机制，及其对位错组态的影响。

一、过饱和空位的形成机制

1. 高温淬火时过饱和空位的形成

金属晶体在高温下，空位的平衡浓度很高。若将其激冷后，会有大量空位被冻结在晶体内部，使空位达到过饱和状态。如在熔点 T_m 附近，空位的平衡浓度为：

$$c = \frac{1}{v_a} \exp\left(-\frac{W_v}{kT_m}\right)$$

式中 v_a 是原子体积； W_v 是空位形成能； k 是玻尔兹曼常数。在过冷到 $T_0 = T_m/2$ 时，空位的平衡浓度便为：

$$c^0 = \frac{1}{v_a} \exp\left(-\frac{W_v}{kT_0}\right)$$

于是，快冷后可使空位达到如下过饱和程度：

$$\frac{c}{c^0} = \exp\left(\frac{W_v}{2kT_0}\right)$$

由(2-67)式可知，这时空位的化学势为

$$\bar{G} = kT \ln \frac{c}{c^0} = \frac{1}{2} W_v$$

若取 $W_v = 0.2Gb^3$ 和 $v_a = b^3$ ，则可由(2-68)式求得空位过饱和作用到刃型位错上的“渗透力”约为：

$$\frac{F}{L} = -\frac{\bar{G}_b}{v_a} \approx \frac{Gb}{10}$$

可见，由淬火造成的过饱和空位能对刃型位错产生很大的“渗透”力，甚至可大大超过外加应力的作用。这在淬火后放置的初期，易于使割阶对在位错线上萌生，从而使直线位错可象割阶位错一样有效地吸收空位。

不同温度下淬火时，空位的过饱和程度不同，还会影响到空位的存在形式。一般来说，淬火温度低时，得到的是单空位；而淬火温度高时，得到双空位或空位团。这是因为

在较高温度下加热时，空位的浓度大，相互撞击形成空位对的几率增大所致。

2. 冷变形时过饱和空位的形成

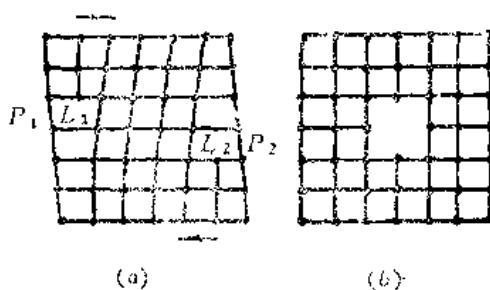


图2-85 两个异号刃型位错湮没形成一列空位

另一条位错线相消的结果。

一般而言，在邻近的滑移面 P_1 和 P_2 内两个具有相反柏氏矢量的位错圈 L_1 和 L_2 相互靠近时，会因吸引作用使一段位错线间平行排列形成位错偶极子，如图2-86(a)和(b)所示。若滑移面的距离足够小时，位错间的吸引力足以引起攀移而彼此湮灭，如图2-86(c)所示。其结果不但形成了两个割阶 C_1 和 C_2 ，使两个位错圈相联结；同时，在台阶面上留下一些空位。可以证明，只有当两位错分别座落在相邻几个原子间距的平面内时，才能发生湮灭。

另外，金属在变形时，也可以由割阶攀移发射空位。如在§2-5中所述，具有割阶的螺型位错运动时，割阶要攀移。割阶实质上是一小段刃型位错，会在攀移过程中不断放出空位。特别是，当割阶快速攀移时，这种机制产生空位的作用增大。但在一般情况下，外力对割阶的直接作用效应不大。作用在割阶上的外力所作的功往往低于空位形成能，使割阶难于在没有热激活的情况下攀移。这种机制也常被用来解释冷变形时的空位形成，但似乎不如位错偶极子湮没机制所起的作用大。

二、过饱和空位对位错组态的影响

1. FCC金属中位错环及层错四面体的形成

在FCC金属中，过饱和空位易于优先沿密排面{111}聚集，形成具有原子厚度的空位盘。当其尺寸足够大时，空位盘崩塌形成负Frank位错环，其中包围一片层错。若用 ε 表示{111}面的表面能，对产生这一过程的能量条件可以大致写成：

$$2\pi\left(\frac{D}{2}\right)^2\varepsilon > \pi\left(\frac{D}{2}\right)^2\gamma + \frac{1}{2}G\pi Db^2 \quad (2-122)$$

式中， D 为空位盘直径， γ 为层错能， $b = a/\sqrt{3}$ 为Frank位错环的强度。可以求得，

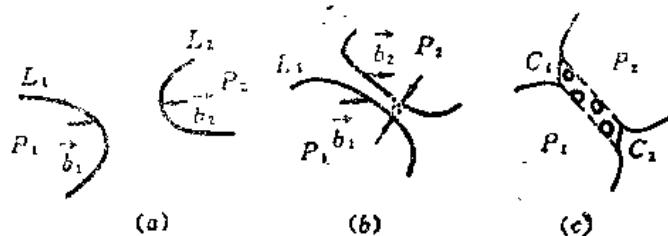


图2-86 座落在相邻滑移面上的两个任意形状的位错湮没形成空位

空位盘的临界直径为

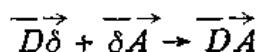
$$D_c = \frac{2Gb^2}{2\varepsilon - \gamma} \quad (2-123)$$

例如，对铝求出 $D_c = 10\text{\AA}$ 。

随着层错能高低不同，由空位盘崩塌所形成的负Frank位错环可能导致两种结果：

1) 形成棱柱位错环

在层错能较高的情况下，可由{111}面上的负Frank位错环与Shockley位错发生反应，如



其结果是将负Frank位错环转化为柏氏矢量为 $\frac{1}{2}[011]$ 的全位错环。这相当于通过一个Shockley位错穿越Frank位错环而将其中所包围的层错区消除。显然，这种位错反应只有在层错能较高时才易于发生，以便负Frank位错环及其所包围层错的能量高于全位错环的能量，诱发Shockley位错在Frank位错环内萌生。

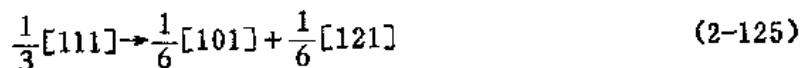
对Frank位错环向棱柱位错环转化的能量条件，可作如下近似估算：

$$\pi \left(\frac{D}{2}\right)^2 \gamma + \frac{1}{2} G\pi D b_1^2 > \frac{1}{2} G\pi D b_2^2 \quad (2-124)$$

式中， $\vec{b}_1 = \frac{1}{3}<111>$ ， $\vec{b}_2 = \frac{1}{3}<110>$ 。在电镜下观察时，负Frank位错环与棱柱位错环常呈六角形，周界沿<110>密排方向，环面平行于{111}面。这是因为{111}是密排面，<110>是密排方向的缘故。有时在负Frank位错环内可见有层错衬度条纹。据估计，促使Frank位错环向棱柱位错环转化的临界层错能约为 60mJ/m^2 。但如层错能过高时，会因所形成的棱柱位错环尺寸太小而难于观察到。

2) 形成层错四面体

这是在层错能较低的情况下，由负Frank位错环分解形成的一种特殊的位错组态。其立体形态为由{111}面上的内稜型层错组成的四面体，六个棱边均为 $\frac{1}{6}<110>$ 型的压杆位错。在FCC金属中，负Frank位错可以通过以下反应降低能量：



$$b^2: \quad \frac{a^2}{3} \rightarrow \frac{a^2}{18} \quad + \frac{a^2}{6}$$

这种反应的结果是由Frank位错分解成一个压杆位错和一个Shockley位错，中间夹有层错。所以，只有在层错能较低的情况下，负Frank位错才可能进一步分解。

对层错四面体的形成可参照Thompson四面体作如下描述：

如图2-87(a) 所示，若空位首先在BCD面上聚集时，崩塌后形成周界沿密排方向

$<110>$ 的一片层，错周界是柏氏矢量为 $\vec{\alpha}A$ 的三角形的Frank位错环。其中每一侧边上的Frank位错均可按(2-125)式分解，以降低弹性能，即

$$\begin{aligned}\vec{\alpha}A &\rightarrow \vec{\alpha}\beta + \vec{\beta}A && \text{(在 } ACD \text{ 面上)} \\ \vec{\alpha}A &\rightarrow \vec{\alpha}\gamma + \vec{\gamma}A && \text{(在 } ABD \text{ 面上)} \\ \vec{\alpha}A &\rightarrow \vec{\alpha}\delta + \vec{\delta}A && \text{(在 } ABC \text{ 面上)}\end{aligned}\quad (2-126)$$

可见，在 BCD 面的三个侧边上各形成一个压杆位错，又在四面体的另外三个面上各形成一个Shockley位错以及相应的一片层错，如图2-87(b)所示。由于层错能低，易于使Shockley位错受压杆位错排斥而滑动，从而导致层错区在四面体的三个侧面上逐渐扩展。三个Shockley位错的两端均与压杆位错相连，使其滑动时呈弓弯状。这又为相邻的Shockley位错间发生吸引和沿棱边 DA 、 BA 和 CA 形成新的压杆位错提供了有利条件，产生如下反应：

$$\begin{aligned}\vec{\beta}A + \vec{A}\gamma &\rightarrow \vec{\beta}\gamma && \text{(沿 } DA \text{ 棱边)} \\ \vec{\gamma}A + \vec{A}\delta &\rightarrow \vec{\gamma}\delta && \text{(沿 } BA \text{ 棱边)} \\ \vec{\delta}A + \vec{A}\beta &\rightarrow \vec{\delta}\beta && \text{(沿 } CA \text{ 棱边)}\end{aligned}\quad (2-127)$$

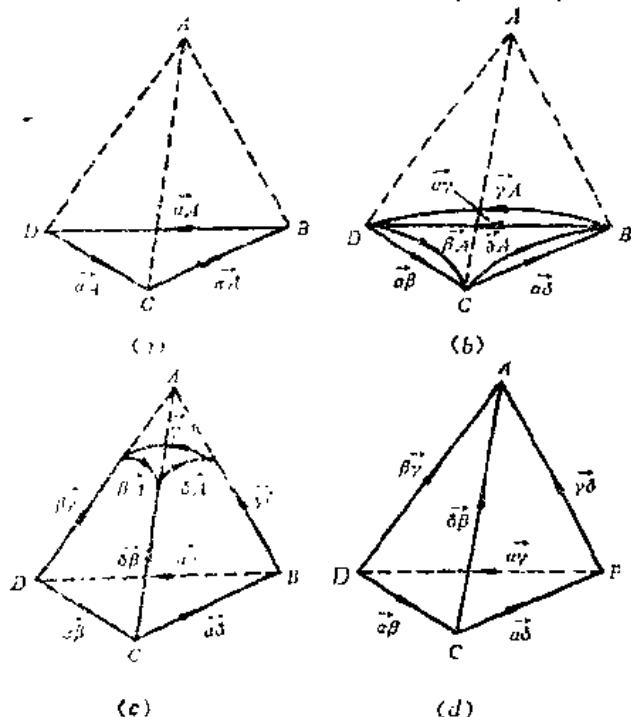


图2-87 FCC金属中层错四面体的形成(图中箭头表示位错线的方向)

(a)三角形的Frank位错环 (b)在棱边上的Frank位错分解成压杆位错和Shockley位错 (c)各侧面上的Shockley位错滑动，并在相邻棱边处形成压杆位错 (d)层错四面体

于是，随着Shockley位错在四面体的三个侧面上逐渐向上运动，便可最终形成以六个压杆位错为棱边的层错四面体，如图2-87(c)、(d)所示。

对形成层错四面体的能量条件，可由下式粗略估计：

$$\frac{\sqrt{3}}{4}l^2\gamma + \frac{3}{2}Gb_1^2l > \sqrt{3}l^2\gamma + \frac{6}{2}Gb_2^2l \quad (2-128)$$

式中， l 为棱边长， $\vec{b}_1 = \frac{1}{3}<111>$ ，
 $\vec{b}_2 = \frac{1}{6}<110>$ 。如取 $\gamma = 30 \text{ erg/cm}^2$ ，

可近似求出层错四面体的最大尺寸为 40nm。在透射电镜下观察时，层错四面体多为三角形，内部有层错衬度条纹。有时因层错四面体相对于薄膜样品表面取向不同，也可呈现正方形。

在某些FCC金属中，如银、金

及其合金、铜及其合金、镍及其合金等，也可由割阶螺型位错滑动形成层错四面体。如图2-88(a)所示为柏氏矢量为 \vec{CD} 的螺型扩展位错上带有割阶，在(b)面上作保守性滑移。若位于割阶上端的螺型位错发生交滑移而由(b)面进入(a)面滑移时，割阶可沿(c)面发生分解，形成Frank位错 $\vec{C}\gamma$ 和Shockley位错 $\vec{\gamma}D$ 。于是，在外力作用下可形成图2-88(b)所示的位错组态。随着割阶两侧的扩展螺型位错分别在(b)面和(a)面上滑移，以及Shockley位错 $\vec{\gamma}D$ 在(c)面上滑移，可使(c)面上层错区不断扩大，而割阶高度逐渐缩小。最终会导致两侧的螺型扩展位错合拢，和在(c)面上留下一个柏氏矢量为 $\vec{C}\gamma$ 的Frank位错三角形，如图2-88(c)所示。这又为按图2-87所示的方式形成层错四面体提供了基础。因此，对层错能较低的FCC金属冷变形时，便可由割阶螺型位错滑移机制形成层错四面体。

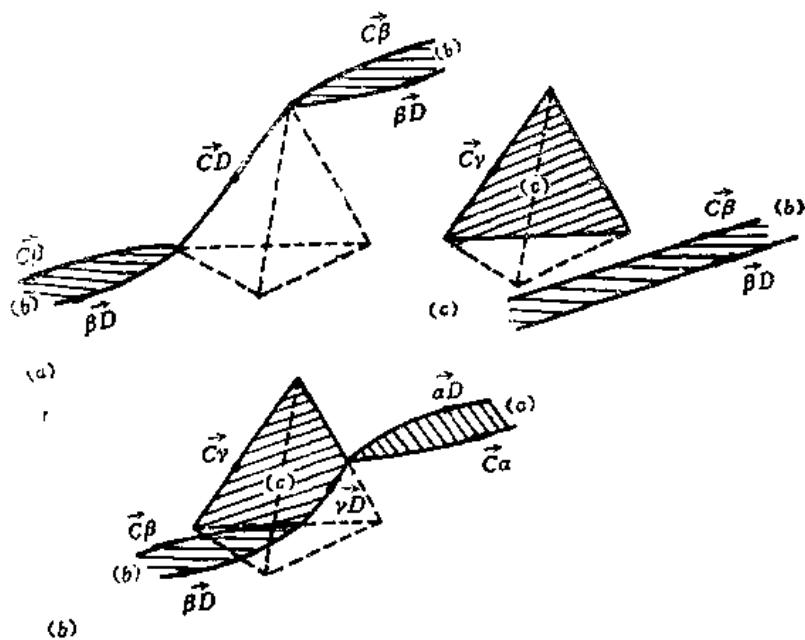


图2-88 螺形扩展位错在割阶处发生交滑移时形成Frank位错三角形

2. 蟠线位错的形成

在晶体中空位过饱和的条件下，预先存在的位错能吸引周围的空位而形成一种特有的蟠线形的组态。这种蟠线位错是沿着一个旋转圆柱体盘旋，其轴平行于位错的柏氏矢量。

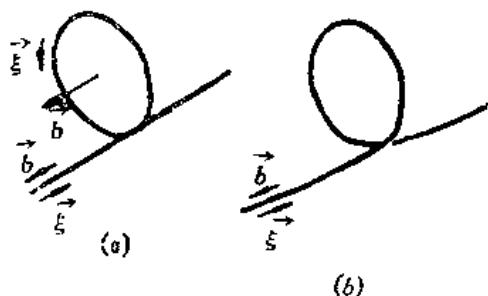


图2-89 左螺型位错与棱柱位错环相遇形

成左旋蟠线位错

常见的形成蟠线位错的机制有以下几种：

1) 如图2-89所示，一个左旋螺型位错与具有相同柏氏矢量的负棱柱位错环相遇时，会使位错环所在的平面变为螺旋面，从而相应形成了一圈左螺旋蟠线。前已述及，棱柱位错环可由空位聚集崩塌而得，所以，这种蟠线位错的形成要同空位过饱和有关。

2) 若螺型位错上带有几个符号相反的割

阶时，割阶具有刃型性质，可沿 z 方向攀移，如图2-90(a)所示。两相邻的割阶符号相反，使吸收空位时攀移方向不同。于是，在过饱和空位所产生的“渗透”力的作用下，经各割阶沿垂直于螺型位错线的方向攀移的结果使位错线弯成曲折状，如图2-90(b)所示。在各段位错线上均产生了刃型分量，但相应的刃型分量的方向不同，又会导致攀移方向（垂直于纸面）各异，从而最后形成如图2-90(c)所示的左旋螺旋线位错。

3) 如图2-91所示，在热振动或内应力作用下，使螺型位错线出现局部曲折也会引起异号刃型位错分量出现。于是，在过饱和空位作用下，便会由于异号刃型位错分量向相反方向攀移而将原来的直螺型位错线转化为蟠线位错。通常将这种机制称为Frank机制。

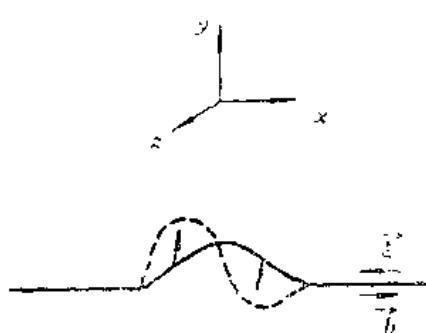


图2-91 螺形位错（实线）在 xoy 面上出现曲折和随后攀移形成蟠线位错（虚线）

4) 如图2-92所示，可由两端受钉扎的混合位错 AB 在过饱和空位的“渗透”力作用下攀移而形成蟠线位错。这是因为，在混合位错的各线段上均有符号相同的刃型分量，攀移方向相同。而且，过饱和空位产生的“渗透”力垂直于位错线。所以，在 A 和 B 两端不动的情况下，便会使位错线分别以 A 和 B 为中心按一定角速度蟠曲。当蟠曲进行到一定程度时，“渗透”力可能与各圈位错线间的斥力以及线张力引起的回复力达到平衡，便使蟠曲停止，以致在空间上形成稳定的蟠线位错组态。图中(a)为混合位错在 xoy 面上的投影；(b)和(c)分别为正在蟠曲中的位错线和稳态的蟠线位错在 yoz 面上的投影；(d)为蟠线位错的空间形貌。

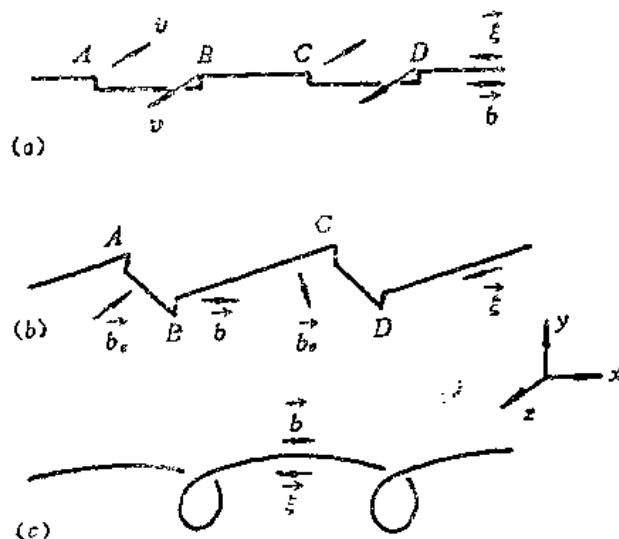


图2-90 带割阶的螺型位错攀移形成蟠线位错

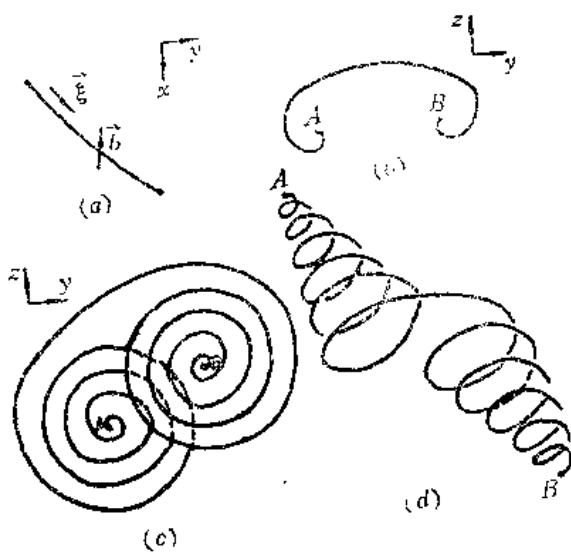


图2-92 混合位错 AB 经攀移形成蟠线位错
(a)混合位错 AB 在 xoy 面上投影 (b)蟠曲中的位错线在 yoz 面上投影 (c)蟠线位错在 yoz 面上投影 (d)蟠线位错的空间形貌

- [23] F.Kroupa and V.Vitek, Czeck, J. Phys., B14 (1964), 337.
- [24] F.C.Frank and J.F.Nicholas, Phil. Mag., 44 (1953), 1213.
- [25] P.B.Hirsch, Congress on Crystallography, Cambrige, (1960).
- [26] A.W.Sleeswyk, Phil.Mag., 8 (1963), 1467.
- [27] V.Viteck, Proc. Roy. Soc., A352 (1976), 109.

带常由滑移或孪生所诱发，如图3-4所示。孪生区域的切变会迫使附近晶体发生很大应变，特别是在晶体两端受有约束的情况下（例如，拉伸夹头的限制作用）更是如此，如图3-4(a)中虚线所示。所以，为了消除这种影响，便可能在与孪生的接壤区形成扭折带，以实现过渡，如图3-4(b)所示。

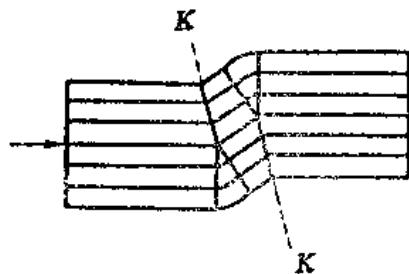


图3-3 扭折带的形成

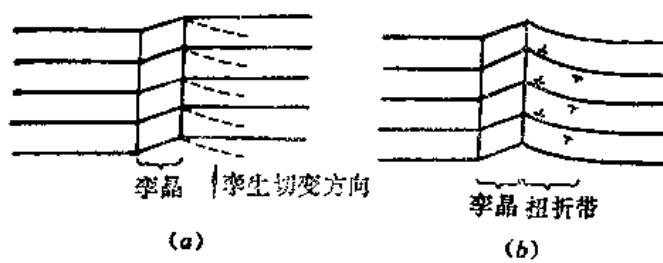


图3-4 伴随着孪晶的形成而产生扭折带

扭折带不仅易在HCP金属中形成，也可在FCC和BCC金属中出现。据分析，扭折带的形成与某一滑移系统的几何软化有关。而且，在压缩和拉伸条件下，均有可能形成扭折现象，并使应力-应变曲线产生明显的应力陡降。

二次滑移带的特点在于即不是孪生，也不是扭折，而且带内主滑移系统的痕迹较微弱。随着变形的增加，在形变带内将出现其它滑移系统的痕迹，故称为二次滑移带。其容易出现的取向正好是扭折带不易出现的取向。在形变带内，晶体取向不发生显著改变。观察表明，在铝中二次滑移带呈薄片状，其厚度约为0.05mm、间距约为1mm。这种二次滑移带能显著阻碍滑移进行，因而对应变硬化起着显著作用。

二、Schmid定律与滑移系统的开动

Schmid定律是单晶体滑移系统开动的重要判据，它能给出起始滑移与外加切应力的关系。如图3-5所示，外加切应力在滑移面内沿滑移方向的分量为：

$$RSS = \frac{F}{A} \cos\phi \cos\lambda \quad (3-1)$$

式中， F 为轴向拉力， A 为试样的横截面积， λ 为滑移方向与拉伸轴的夹角， ϕ 为滑移面法线与拉伸轴的夹角。又常令 $m = \cos\phi \cos\lambda$ ，称之为Schmid因子，或取向因子。当滑移面法线、滑移方向均与外力成45°角时（此时， $m = 0.5$ ），分切应力最大。此时外力最易导致滑移，称为软位向。所以， m 是一个很重要的参数，可判断金属单晶体中滑移系统开动的可能性大小。 m 值越大，相应的滑移系统愈易开动。因而，可将Schmid定律表达为：

$$RSS \rightarrow CRSS \rightarrow \text{晶体滑移}$$

在这里， $CRSS$ 为临界切应力，是晶体的固有性质。若金属中同时存在几个同类滑移系统时，虽其临界切应力均相同，但在外力作用下，却总是以 m 值最大的滑移系统先开动。这便是滑移的取向因子最大原则。

如以FCC金属为例，设起始拉伸轴的取向位于(001)标准极射赤面投影图的单位三角形中某一点 P （见图3-6）。按照取向因子最大原则可得出以下四种特征的滑移系统：晶体的初始滑移系统为[101](111)，其取向因子最大，称为主滑移系统；[101](111)系

统与主滑移系统具有相同的滑移方向，称之为交滑移系统； $[011](\bar{1}\bar{1}1)$ 系统在拉伸轴位于 $[001]-[\bar{1}\bar{1}1]$ 对称线上时，具有与主滑移系统相同的取向因子，称为共轭滑移系统； $[101](\bar{1}\bar{1}1)$ 系统虽可有较大的取向因子，但不能开动，称为临界滑移系统。

实际上，在拉伸过程中，晶体的取向要不断变化，从而引起各滑移系统间的相对关系逐渐改变。由于拉伸夹头的约束作用，会迫使晶体的滑移方向在变形过程中转向拉伸方向。或者为方便起见，也可把晶体在拉伸过程中的转动看成是拉伸方向趋向滑移方向，以使两者之间的夹角减小。其结果会使原来处于有利取向的主滑移系统转向不利取向，而其它滑移系统却可能变得有利起来，从而引起以下诸现象：

1. 双滑移

如图3-6所示，在拉伸过程中，拉伸轴逐渐趋向滑移方向，使P点沿极射赤面投影的大圆向 $[\bar{1}01]$ 方向转动。当P点到达单位三角形的斜边上时，会使共轭滑移系统与主滑移系统处于同样有利的取向，产生双滑移。

2. 临界滑移

在双滑移开始后，主滑移与共轭滑移均力求使拉伸轴沿大圆向各自的滑移方向转动。由于这两部分转动部分抵消的结果，使拉伸轴实际上沿 $[001]-[\bar{1}\bar{1}1]$ 连线移动，以保持两滑移系统受到相同的分切应力，直到拉伸轴到达 $[\bar{1}12]$ 极点。此时，拉伸轴与两个滑移方向 $[\bar{1}01]$ 和 $[011]$ 位于同一平面且处于两滑移方向的中间位置，故使转动作用完全抵消。继续变形时，拉伸轴就停留在此位向不再改变。故 $[101](\bar{1}\bar{1}1)$ 便难于开动，称为临界滑移系统。

3. 超越滑移

在有些金属中，当拉伸轴取向到达 $[001]-[\bar{1}\bar{1}1]$ 边界时，仍可继续沿大圆方向转动一定角度，如图3-7所示。这种使拉伸轴的转动超过交界线的行为便称为超越滑移。如

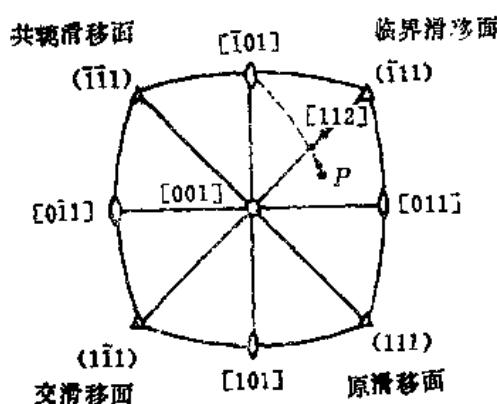


图3-6 FCC晶体滑移过程中晶轴的转动

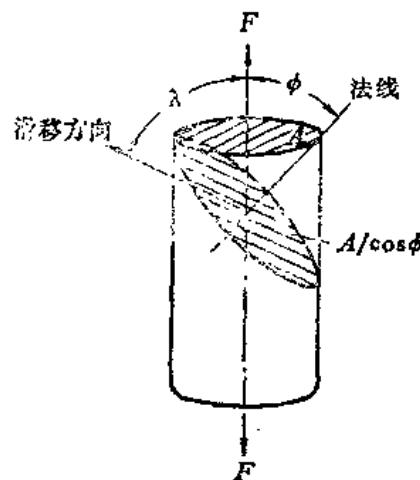


图3-5 单晶体中滑移要素的取向

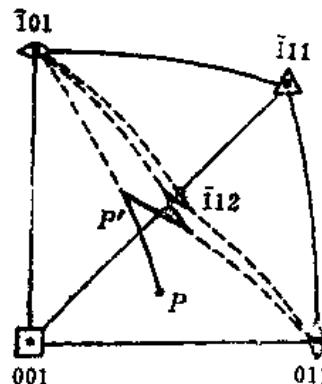


图3-7 FCC晶体的超越滑移

此超越滑移可反复进行几次，最后使拉伸轴到达 $[1\bar{1}2]$ 点。产生超越滑移的原因是由于前一滑移系统的滑移会对另一滑移系统的滑移起潜在硬化作用的结果。显然，次滑移系统受阻的前提在于产生的位错要能够与原滑移系统中的位错产生交截作用。因此，位错扩展越宽，应使次滑移系统的潜在硬化能力越强。这一设想与实验事实完全吻合，如层错能高的铝无超越滑移，而层错能低的铜和黄铜等就有超越现象。

三、金属单晶体的应力-应变曲线

研究金属变形行为时，重要的是考查有关应变硬化曲线的特点。一般而言，金属单晶体的应变硬化曲线分三个阶段，如图3-8所示。第一阶段为具有很低的应变硬化率的线性区域，称为易滑移阶段。在第二阶段中，应力与应变也呈线性关系，但有很高的应变硬化率，称为线性硬化阶段。第三阶段称为抛物线阶段，其特点是应力随应变增加按抛物线关系变化，相应使应变硬化率逐渐减小。

上述三个应变硬化阶段不一定总是同时出现，而要取决于金属的成分、点阵结构、晶体取向、试验温度和应变速率等多种因素。通常以FCC金属单晶体比较容易得到完整的应变硬化曲线。易滑移区可在单滑移系滑移、高纯度、低温，以及有利于单滑移的取向等条件下得到较充分发展。如图3-9所示，晶体取向对FCC金属单晶体的流变曲线有着重要影响。当拉伸轴平行于 $\langle011\rangle$ 方向时，只使一个滑移系统经受切应力作用，可表现出相当发达的易滑移区。但若拉伸轴取向接近 $\langle100\rangle$ 或 $\langle111\rangle$ 方向时，分切应力在几个滑移系统上差别不大，却使流变曲线有很高的应变硬化率。温度升高使第一、二阶段的范围减小，以致高温下应力-应变曲线易于表现出第三阶段的抛物线行为。对BCC和HCP金属的单晶体，在成分足够纯以及合适的取向和温度等条件下，也能得到三段型的应变硬化曲线。

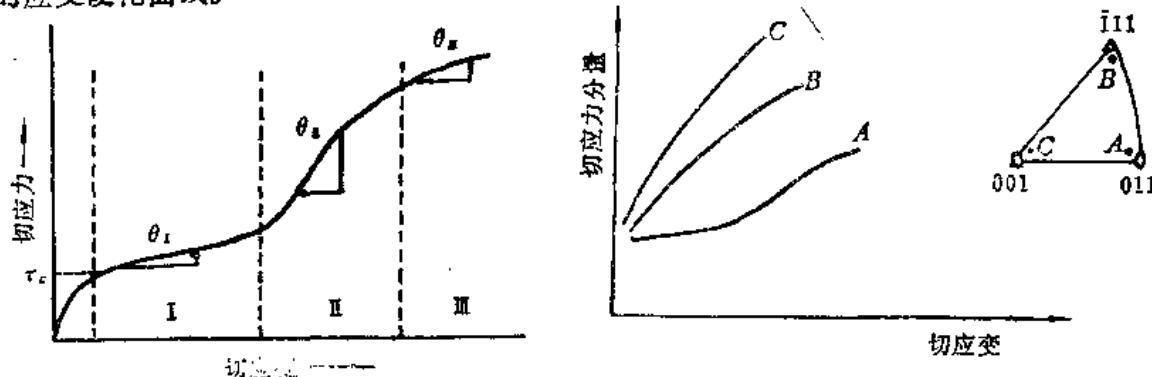


图3-8 拉伸时金属单晶体的应变硬化曲线示意图 图3-9 试样取向对FCC金属单晶体的应力-应变曲线的影响

下面分别简要介绍三类金属单晶体的应力-应变曲线特点：

1. FCC金属单晶体

在FCC金属中，层错能较低的金属（如铜、金、银和镍等）易于出现易滑移，室温下变形便可得到较完整的加工硬化曲线；而层错能较高的金属（如铝）只有在低温变形时，才能得到三阶段的加工硬化曲线。

对层错能较低的FCC金属单晶体而言，在不同温度下变形时，所得应力-应变曲线如图3-10所示。在较高温度下，曲线大体呈抛物线状，而在室温附近可呈现三阶段性。

在低温变形使第一阶段抬高，而硬化率稍有减小；同时，第二阶段变长而硬化率不变。随着形变温度的降低，第二阶段向第三阶段过渡的应力提高，并相应使第三阶段的硬化率增大。

在不同温度和取向条件下变形时，铝单晶体的应力-应变曲线如图3-11所示。拉伸轴取向距[110]极点越远，第一阶段则越短，直到[100]-[111]边界处消失。而且，易滑移区越短，相应的硬化率就越高。室温变形时，第二阶段较短，而在低温下发展较充分。第二阶段的应变硬化率随拉伸轴取向由[110]极点向[100]极点附近改变时不断增大。除拉伸轴取向在[111]和[100]点附近外，晶体取向对第三阶段硬化率影响不大。

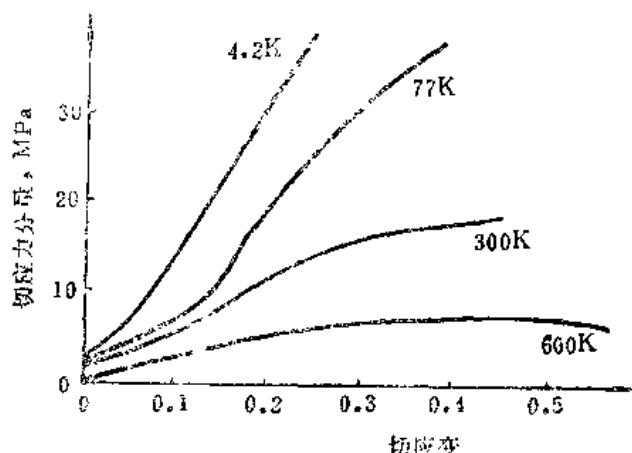


图3-10 温度对铜类金属应力应变曲线的影响

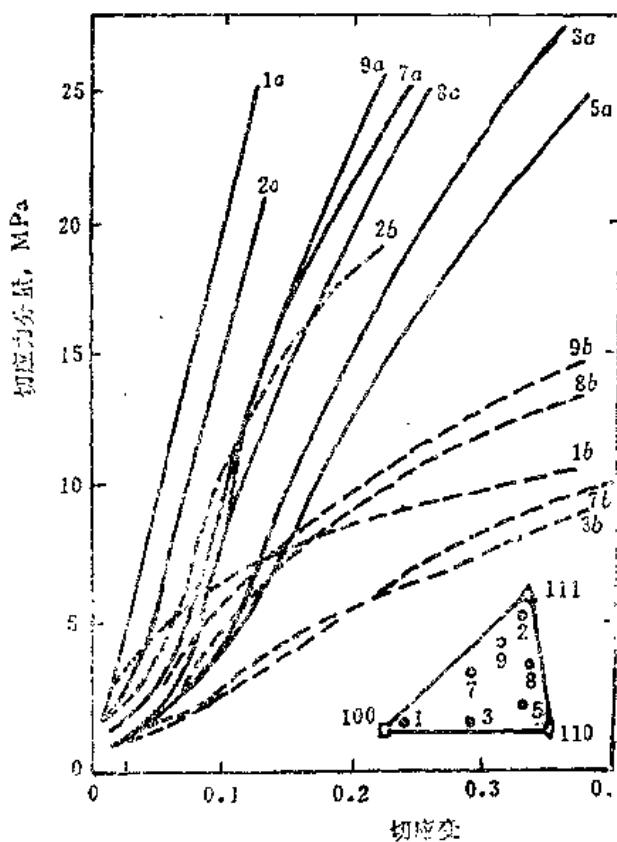


图3-11 拉伸轴取向对铝单晶体在室温(虚线)和77K(实线)变形时应力-应变曲线的影响(图中数字表示相应的拉伸轴在极射赤面投影基元三角形中所处位置)

2. BCC金属单晶体

已经观察到，铌和铁等BCC金属单晶体在一定条件下可呈现三段型应力-应变曲线，如图3-12所示。低于室温变形时，第一阶段开始所需应力随温度降低而急剧提高。第一阶段应变范围在273K时最大，并随温度升高而减小。在273K以上形变时，随温度升高，第二阶段应变范围减小，而第三阶段应变范围增大。在273K以下形变，应变硬化曲线的三段性趋于消失，但第三阶段的开始应力仍有明显的温度效应。

3. HCP金属单晶体

在HCP金属中，已有研究都集中于锌、镁和镉等金属中。其主要滑移系统均为基面滑移，故在合适的取向下有利于发展易滑移变形。如以锌单晶为例，当拉伸轴取向远离[0001]-[1010]对称线时，第一阶段的应变量较大，如图3-13所示。而当取向接近对称线时，易滑移区显著缩短，而且使相应的硬化率逐渐提高。

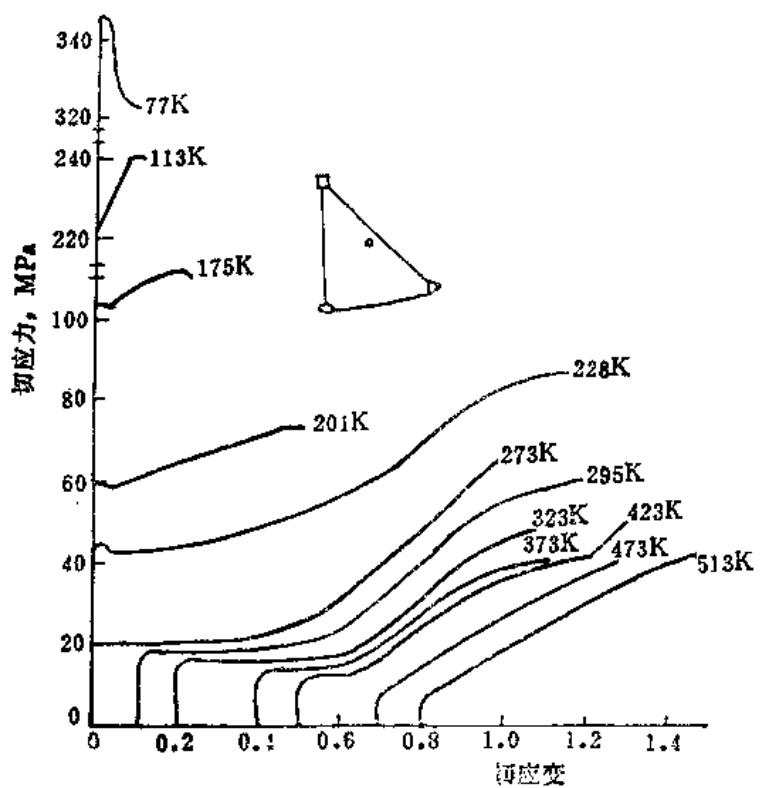


图3-12 钨单晶体在不同温度下的应力-应变曲线

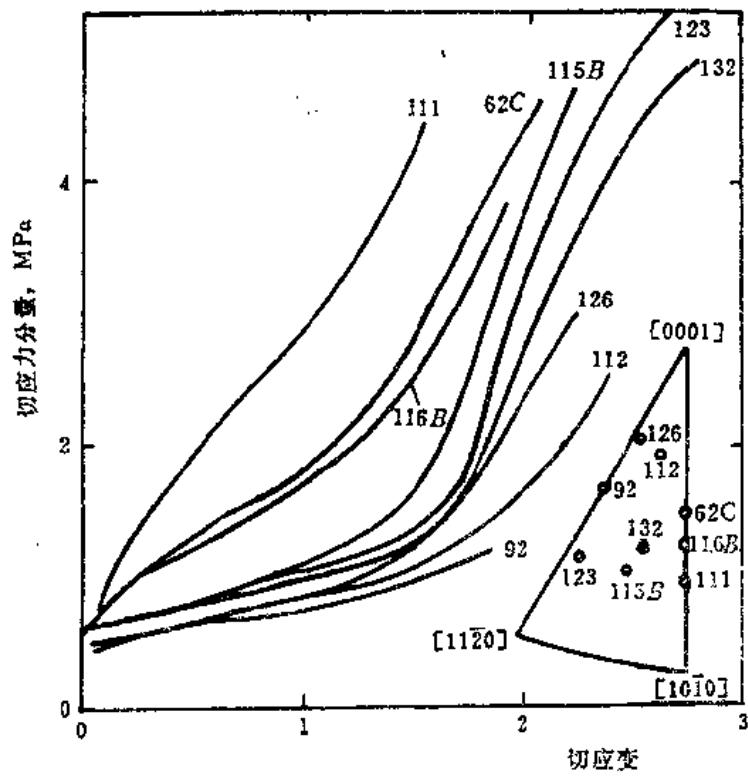


图3-13 锌单晶体在室温及不同取向下的应力-应变曲线

四、金属单晶体加工硬化行为

揭示金属单晶体的加工硬化行为三阶段的内在本质，对于深入研究金属的变形行为具有一定意义。其中尤以第三阶段的行为更加重要，将直接涉及实际金属的变形特点。在实际使用条件下，金属材料一般为多晶体，其应力-应变曲线往往处于应变硬化的第三阶段。下面主要介绍 FCC 金属单晶体的加工硬化行为的一般特点。

观察表明，FCC 金属单晶体易滑移变形时，滑移线长而少，同时位错线在主滑移面上平行成簇分布。随着应变量增加，位错密度增大，至易滑移阶段结束时可达 10^8 cm/cm^3 左右。铜类金属单晶体在取向达到两个或更多的滑移系受到相等的分切应力时，易滑移终止。铝单晶体的变形有所不同，易滑移远在达到对称取向以前便终止。这可能是由于铝变形时易于产生形变带所致。在形变带内，除原在主滑移系上形成的滑移带发生弯曲和转动外，还在相交的滑移系统上形成短滑移带。易滑移时，位错易于长程运动和逸出晶体表面，故应变硬化率低乃系单滑移的必然结果。

在加工硬化的第二阶段中，若抛去第一阶段滑移痕迹后，再给以少量应变时，产生许多短而平行的滑移线。应变量增加时，滑移线增多而变短，最后聚合成短粗的滑移带。位错密度可达到 $10^{11} \sim 10^{12} \text{ cm/cm}^3$ 。在双滑移过程中，可能形成面角位错，造成位错的平面塞积引起显著强化^[1]；或者通过位错交截形成割阶位错，从而造成很大的位错运动阻力^[2]。这两种强化机制均可使第二阶段的硬化率与温度关系不大。

加工硬化第三阶段的特征是，硬化率随应变增加而减小。而且，开始时所需应力随温度升高而降低，是一个热激活过程。处于第三阶段变形的 FCC 单晶体表面的主要特点是滑移带的出现。当应变增加时，带与带之间不出现新的滑移线，形变都集中在原来的滑移带内。带的长度也随之减短，并发生滑移带的碎化现象。这是由平行的滑移带间产生连接滑移所引起的。连接滑移发生在与原滑移面有共同滑移方向的交滑移面上。在足够大的应变下，还可能有扭折带形成，以作为一种辅助的变形方式。位错密度增加的幅度不会很大，可增加到 $10^{12} \sim 10^{13} \text{ cm/cm}^3$ 。随着应变量的增加使硬化率降低的原因主要同螺型位错的交滑移有关。主滑移面上的螺型位错通过交滑移越过障碍的过程，称为动态回复。铝单晶体中的位错易于交滑移，使硬化第三阶段开始较早；而对层错能较低的铜类金属，位错易于扩展，使动态回复推迟。所以，在室温下，铜有明显的第二阶段，而铝只有在低温下（如 78K）才使第二阶段较明显。降低形变温度的作用也在于抑制位错交滑移。一般认为，在第三阶段中主要由位错间的交截作用而引起应变硬化。

对 BCC 和 HCP 金属的单晶体也有类似加工硬化行为。不同的是，在 BCC 金属中，位错可以认为是不扩展的，螺型位错的交滑移较易进行，使得第二阶段发展很不明显而很快进入第三阶段。在 HCP 金属中，第一阶段变形往往拖得很长。这种特点显然与其中只有一组易滑移面有关。

从上面分析可见，在金属单晶体塑变过程中，位错密度不断增加，相应使强度提高。这便是位错强化的基本特点。所以，位错强化机制所涉及的基本问题，一是位错的增殖机制，二是位错间的交互作用强化机制，有必要进一步加以回答。

§ 3-2 位错增殖机制

从直观上看，位错在塑变过程中要不断地逸出晶体表面，使晶体中位错密度不断减小。例如，若在晶体表面产生高度约为 $1\mu\text{m}$ 的滑移台阶时，约需 10^4 个位错（柏氏矢量约为 $2 \sim 3 \times 10^{-8}\text{cm}$ ）滑出晶体。显然，形变前在同一滑移面上存在如此大量的同号位错的可能性不大，而要在形变过程中产生出来，更何况晶体变形后实际位错密度显著提高。所以，位错增殖机制是位错理论中的一个很重要的问题。

一、Frank-Read源位错增殖机制

Frank-Read源是一种常用的用以说明塑变过程中位错增殖的机制^[3]。其主要着眼点是一段两端固定的位错线段，在切应力作用下会不断放出位错圈，如图3-14所示。其关键在于外加切应力要大于由位错线张力引起的回复力。虽然位错线张力 T 本身是个恒量，但对一个曲率半径为 R 的位错线却会产生一个指向曲率中心、大小为 T/R 的回复力。当回复力与作用于位错线上的外力相等时，位错达到静态平衡面具有一定的曲率半径 $R = Gb/2\sigma$ （见1-51式）。若切应力 σ 增大时， R 逐渐减小。直到 $R = L/2$ ，即位错线的静态平衡成一半圆时，位错线的曲率半径最小，相应使线张力所产生的回复力达到最大值，如图3-14(b)所示。若切应力继续增大，使 $\sigma > Gb/L$ 时，位错的静态平衡被破坏而自动扩张。所以，相应的临界切应力应为：

$$\sigma_c = \frac{Gb}{L} \quad (3-2)$$

如果外加切应力不变，不论位错线弯曲到什么程度，作用在其上的力总是大小不变而方向和它垂直。这会使各点的法向速度相同，从而导致靠近两端点的位错线段部分运动超前，而远离两端点的部分运动落后，形成各以端点A和B为中心的一对螺旋线，如图3-14(c)所示。由于这两个螺旋线

位于同一平面，故分别绕A和B回转了 270° 后便有相遇的趋势，如图3-14(d)所示。虽然原位错线段AB为纯刃型，但在相遇部分C和C'却为两段符号相反的螺型位错，一经接触便会互相抵消。其结果是造成一个闭合的外环，和遗留一段连接A和B的位错线段，如图3-14(e)所示。在外加切应力的作用下，闭合的位错环会

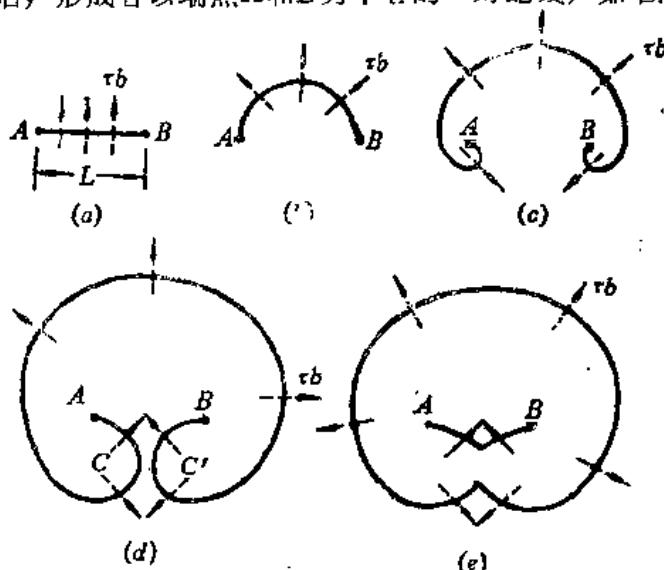


图3-14 Frank-Read源位错增殖机制

继续向外扩张，而留下来的位错线段在线张力和外加切应力的联合作用下迅速收缩，回到原来直线AB的位置上。于是，在外加切应力的作用下，便可由上述机制不断产生新的

位错环，使滑移成为一个自动维持的过程。实际上，由于所放出的位错环在运动中会受到某种阻碍而产生位错塞积，使位错源在反向力的作用下停止开动。

二、双交滑移位错增殖机制

这也是一种经常用的位错增殖机制^[4]，与Frank-Read源有着密切联系。其主要着眼点是一段螺型位错遇到障碍后，会通过两次交滑移形成Frank-Read源，从而导致位错迅速增殖。如图3-15(a)和(b)所示，在FCC晶体中，若螺型位错在(d)面上滑移遇到障碍时，其受阻部分可通过交滑移而改在(c)面上运动，同时形成两个刃型位错台阶。在(c)面上螺型位错线段滑移一段距离后，脱离了障碍的影响，又可通过交滑移回到与原滑移面平行的另一(d)面上，如图3-15(c)所示。于是，便可由(c)面上两割阶使经两次交滑移的螺型位错线段的两端固定，而成为Frank-Read源，如图3-15(d)所示。这种位错增殖机制可使Frank-Read源的数目迅速增多，从而更有效地使位错增殖，如图3-16所示。很可能，在BCC晶体中形成Lüders带时，位错的增殖的机制便如此。

按理，在图3-15(d)中原位错线上没有交滑移的两部分位错线也似乎可作为

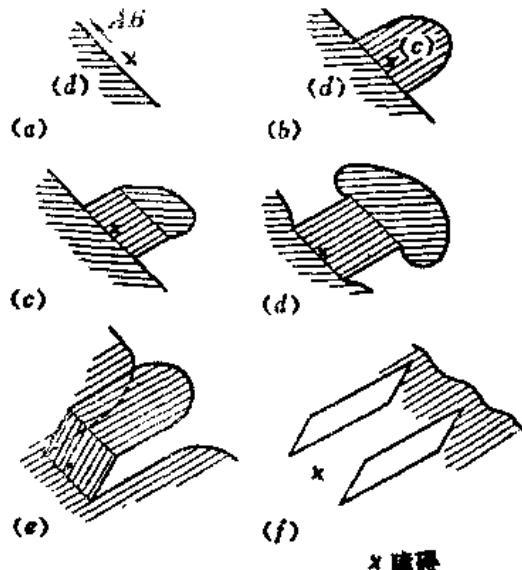


图3-15 双交滑移增殖机制

- (a) 在(d)面上滑移的螺型位错AB局部遇障碍×受阻
- (b) 螺型位错在障碍处交滑移
- (c) 两次交滑移
- (d) 交滑移位错线段成为Frank-Read源
- (e) 偶极子位错形成
- (f) 偶极子位错环形成

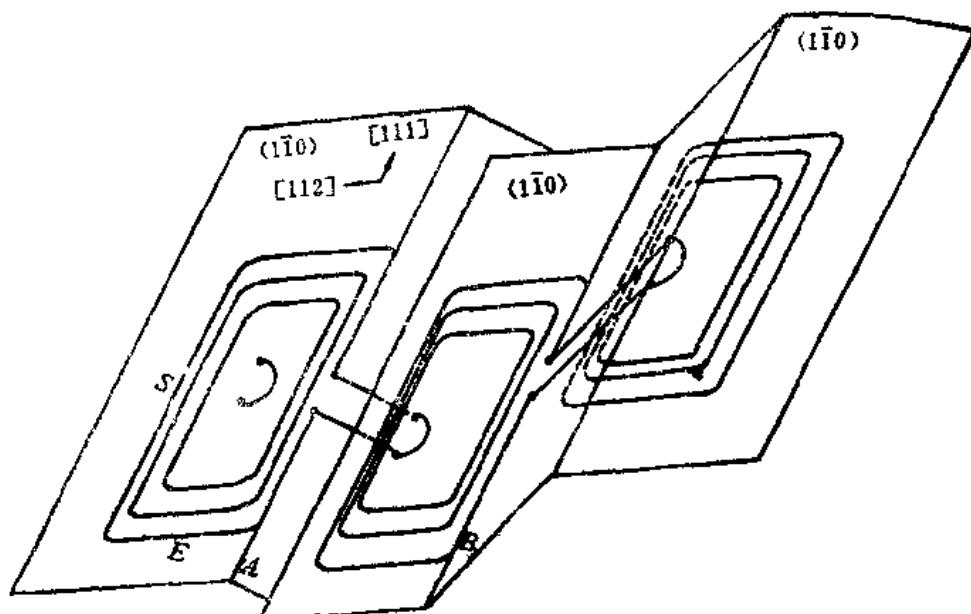


图3-16 Frank-Read源以双交滑移方式增多

$(1\bar{1}0)$ 为主滑移面；A和B为交滑移面；S为螺型位错线段；E为刃型位错线段

Frank-Read 源，但实际上却可能因受到障碍物的阻碍而未能开动。当位错交滑移的距离较小时，会因已交滑移的和未交滑移的位错线段之间相互吸引形成位错偶极子，如图3-15(e)所示。如果已经过两次交滑移的位错又进行一次交滑移，回到原来的滑移面上时，便形成二个闭合的偶极子位错环。同时，位错线又重新复合起来，并已经越过了障碍，如图3-15(f)所示。

三、空位盘位错增殖机制

如§2-11所述，在高层错能金属形变前有足够的数量过饱和空位的情况下，可由空位盘崩塌形成棱柱位错环。在变形过程中，棱柱位错环也可能成为位错源^[5]。如图3-17所示，在BCC晶体的(110)面上已有棱柱位错环时，可因(101)面上分切应力较大而(011)面上的分切应力较小，使其在(101)面上弓弯形成两个Frank-Read源。如果在(011)面上的分切应力也较大，位错环可整体滑动，不会成为位错源。在其它点阵类型的晶体中，也可形成这样的位错源。但为了在形变前形成棱柱位错环，要使晶体中空位达到高度的过饱和，因此这种位错增殖机制仅在特定的条件下才有可能性。

四、位错增殖的极轴机制

在适当的情况下，可动位错与螺型林位错相遇未能切过林位错，而是以后者为极轴旋转时，可引起位错增殖。如图3-18(a)所示，林位错是一个右螺旋位错，垂直于可动位错所在平面，称为极轴位错。在外加切应力作用下使可动位错（称为扫动位错）与林位错相遇时，可动位错便绕林位错旋转。在相交处形成固定不动的位错结点，把扫动位错分成两段。每一段在切应力作用下均可以与开动Frank-Read源相似的机制绕结点作回转运动。扫动位错上各段的运动方向如图中小箭头所示。但由于螺型位错线实际上是垂直于它的原子面的旋转轴，即垂直于螺型位错线的原子面上的原子呈螺旋排列，使扫动位错两臂不可能蜷成平面蜷线，而分别沿螺旋面绕林位错回转。由于两臂的回转方向相反，旋转的结果自然是一臂沿螺旋面向上回转，另一臂沿螺旋面向下回转。经回转几周以后，扫动位错的两臂会上下分开，如图3-18(b)所示。在这两部分扫动位错之间的极轴位错的柏氏矢量应为原极轴位错的柏氏矢量与扫动位错柏氏矢量的和，即 $\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$ 。实际上，极轴位错不一定是纯螺型位错，也可以是混合位错，其关键在于要有垂直于可动位错滑移面的螺型分量。

由上述扫动位错的回转运动能够得出描述宏观均匀切变的位错机制。为方便起见，

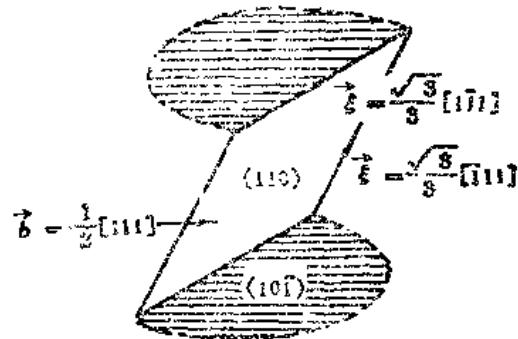


图3-17 在BCC晶体中(110)面上的棱柱位错环

$(\vec{b} = \frac{1}{2}[111])$ 因受(101)面上切应力作用
发生弯曲而形成位错源

仅考虑图3-18中扫动位错的两臂之一绕极轴位错向上回转运动。显然，每回转一周之后，晶体上半部相对于下半部的位移是 \vec{b}_2 。如果扫动位错原来处在螺旋面的第一层，回转一周之后从形变角度看是使第二层相对于第一层滑移了一个矢量 \vec{b}_2 （其它部分没有变形）。但是，回转一周所引起的效果不仅是切位移，同时还使扫动位错移至第二层。继续回转的结果是使第三层相对于第二层作一个位移矢量为 \vec{b}_2 的切位移，而扫动位错又移至第三层。这样不断运动的结果是扫动位错和结点不断上升，而切变却在螺旋面（相当于一个倾斜的面）上传播，使相距为 b_1 的一系列晶体平面均相对滑移一个矢量 \vec{b}_2 。由此可见，这样一组位错按上述方式运动的结果就会造成一定范围的宏观均匀切变，而切变量为：

$$\gamma = \operatorname{tg} \phi = -\frac{\vec{b}_2}{b_1} \quad (3-3)$$

众所周知，机械孪生、马氏体相变以及某些情况下发生的均匀滑移在形变几何上都可以描述为一个平行于一定平面、沿一定方向发生的一定大小的均匀切变。由此可以预期，在这样的一些过程中，上述的位错机制会起很重要的作用。

在上述具有一个结点的极轴机制的基础上，可由扫动位错与两个异号极轴位错相遇而形成一个能够攀移的Frank-Read源。如图3-19所示，若两个极轴位错的柏氏矢量大小相等而符号相反时，所导致的两套螺旋面的层间距一致而回转方向恰好相反，因而位于两个极轴位错之间的扫动位错AB便可成为一个Frank-Read源。在外力作用下使位错线AB弯曲，并分成两部分绕A和B作反方向的回转运动，以致在靠近两个固定点处各展出一个曲率较大的螺旋线，并在回转了一大半圈之后迟早在两套螺旋面的同一层上相遇。因此，每转一圈就可产生出一个闭合的柏氏矢量为 \vec{b}_2 的位错环。若连续回转时，可产生处在双螺旋面相继层上的闭合的位错环。这些位错环都处于以结点为顶点的一个锥面上。因此，又常将这种位错增殖机制称作“空位源”或“锥型源”^[6]。其作用结果便产生宏观的均匀切变。在图3-19所示的情况下，切应变为 $S = b_2/b_1$ 。若两极轴位错的柏氏矢

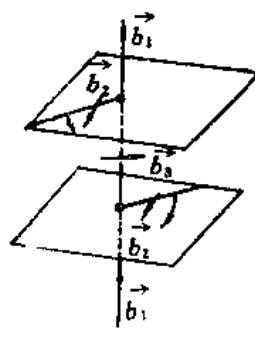
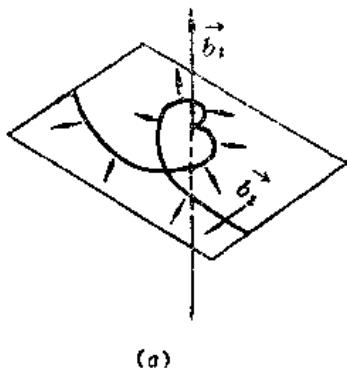


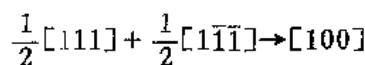
图3-18 单结点极轴机制 ($\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$)

图3-19 双结点极轴机制 ($\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$,
 $-\vec{b}_3 = -\vec{b}_1 + \vec{b}_2$)

量大小不等时，会使位错AB在回转一圈后成为两个独立分支而在同一层上，并最后

所需束集能越高，使交截困难越大。所以，层错能越低，加工硬化趋势越大。这种加工硬化机制对于螺型位错与林位错的交截尤为重要。如§2-2中所指出，刃型位错发生交截时，可能形成非障碍性割阶，而螺型位错与林位错交截后所形成的割阶只能攀移，会对位错运动造成很大阻力。这也是晶体中螺型位错运动要较刃型位错慢许多的重要原因。

在金属塑性变形过程中，通过位错反应形成位错遇锁也是加工硬化的重要机制。前已指出，在FCC点阵中，可由相交滑移面上两全位错相遇形成Lomer锁或Lomer-Cottrell锁。在位错锁的阻碍下，常在滑移面上形成位错塞积，如图3-21(a)所示。位错锁也可以林位错的方式阻碍滑移位错的运动，如图3-21(b)所示。同样，在BCC晶体中，也可由相交滑移面上的两全位错发生位错反应，形成会合位错或位错锁。如图3-22所示，可由位于(101)面上的 $\frac{1}{2}[111]$ 位错与位于(101)面上的 $\frac{1}{2}[1\bar{1}\bar{1}]$ 位错相交发生如下反应：



所生成的会合位错沿着两滑移面交线，具有刃型特性。其滑移面为(001)，故会阻碍原滑移面上位错的运动。

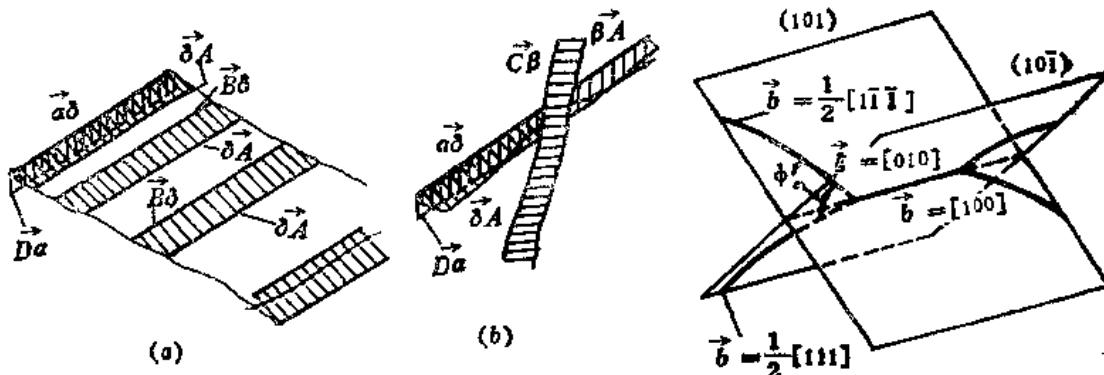


图3-21 FCC晶体中位错锁

图3-22 在BCC晶体中的会合位错反应

(a) 形成位错塞积 (b) 与位错 $C\vec{A}$ 交截

由上述分析可见，位错的交互作用所涉及的障碍机制不只一种，可能形成的障碍有割阶、蜷线位错及位错锁等。特别是，由于金属晶体中，实际的位错组态比较复杂，不一定呈简单的几何分布，常有许多位错缠结在一起。故由简单的几何组态所得到的位错交互作用模型只能是对实际晶体加工硬化行为的定性描述，尚有待于进一步深化。

§ 3-4 位错塞积

位错塞积是在同一滑移面上许多同号位错在障碍前堆积而形成的一种位错组态。形成这种位错组态的原因是由于同号位错间具有斥力，使同一Frank-Read源在滑移面上放出的许多位错圈在领先位错遇到障碍时相继受阻，而以一定次序排列起来。在靠近障碍物的前端比较密集，而后面逐渐稀疏。

形成位错塞积时，领先位错的运动取决于障碍的强弱程度。若障碍足够强时，领先

位错难于通过障碍，会使堆积的位错数目不断增加并最后导致位错源停止开动；或者，领先位错通过交叉滑移方式越过障碍。若障碍强度不够大时，领先位错可直接突破障碍，继续前进。

领先位错的运动特性还同塞积群的性质有关。一般而言，位错塞积群可具有以下三方面特性：

1. 位错塞积相当于形成一个超位错

从数学上可以证明，在外加切应力 σ_0 作用下，领先位错上所受到的作用力应为：

$$\frac{F}{L} = \sigma_0 N b \quad (3-4)$$

式中， N 为塞积群中同号位错的数目。所以，便可以把由 N 个同号位错组成的塞积群看成是一个柏氏矢量为 $N\vec{b}$ 的超位错，并位于领先位错处。由此，又可以将位错塞积群分为两种：

1) 由符号相反的两列位错堆积所组成的双重塞积群，可以看成是两个符号相反的超位错的复合，每个超位错的柏氏矢量均为 $N\vec{b}$ 。由一个位于中心的Frank-Read 源开动时，所形成的塞积群便如此，如图3-23所示。可以证明，对刃型位错塞积群中同号位错的数目 N 可由下式求得：

$$N = \frac{(1-\nu) l \sigma_0}{Gb} \quad (3-5)$$

式中， l 为双重塞积群的总长度。在计算螺型位错塞积群中同号位错数目时，可将上式中 $(1-\nu)$ 一项去掉即可。

2) 只由一列符号相同的位错组成的单位塞积群，如图3-24所示。可以把这种塞积群简化为一个柏氏矢量为 $N\vec{b}$ 的超位错。对刃型位错单塞积群中同号位错的数目 N 可由下式求得：

$$N = \frac{\pi(1-\nu) l \sigma_0}{Gb} \quad (3-6)$$

同样，在计算螺型位错单塞积群中同号位错数目时，可将式中 $(1-\nu)$ 项去掉即可。

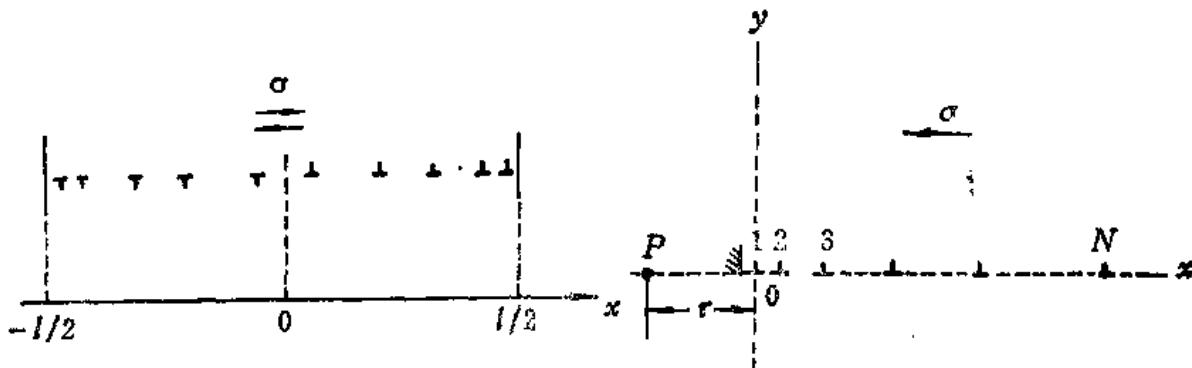


图3-23 双重刃型位错塞积

图3-24 单一刃型位错塞积群

2. 位错塞积群引起应力集中

由位错塞积引起应力集中有双重含义，一是作用在领先位错上的力要明显增大，二是对障碍产生很大的作用力。对于单塞积而言，作用在领先位错上的力为：

$$\frac{F}{L} = Nb\sigma_0 \quad (3-7)$$

对双重位错塞积而言，领先位错所受到的作用力为

$$\frac{F}{L} = \frac{\pi}{4} Nb\sigma_0 \quad (3-8)$$

可见，相比之下，双重位错塞积群中领先位错所受的作用力小些。双重塞积实际上是由符号相反的两列位错塞积所组成，相当于符号相反的两个超位错，故可由相互间的吸引力而使作用在领先位错上的力部分抵消。但通常可大体上忽略这种差别，而将作用在领先位错上的力均按(3-7)式计算。于是，随着塞积群位错数量的增加，使领先位错所受到的作用力足够大时，便可能发生交滑移。

对塞积群作用在障碍物上的切应力 σ^* 可由虚功原理求出。设在外加切应力 σ_0 的作用下使整个塞积群向前移动 δx 距离时，外力所作的功为 $Nb\sigma_0\delta x$ 。由于位错塞积群与障碍的交互作用具有短程性，可以认为，仅在领先位错与障碍间有交互作用。故在塞积群向前移动 δx 距离时，领先位错要受到障碍的作用力（在数值上应等于 σ^* ），使领先位错克服障碍的反作用力所作的功为 $\sigma^*b\delta x$ 。于是，

$$Nb\sigma_0\delta x = \sigma^*b\delta x$$

则

$$\sigma^* = N\sigma_0 \quad (3-9)$$

可见，塞积群要在障碍处产生应力集中，其应力集中系数为 N 。在这种应力集中的作用下，便有可能造成障碍失效，使领先位错通过障碍。反之，若障碍足够强或 $\sigma^* > N\sigma_0$ 时，领先位错受阻或产生交滑移。

3. 位错塞积在障碍前方产生应力场

位错塞积不仅在障碍处造成很大的应力集中，而且在障碍前也会产生一定的应力场。设有一列同号刃型位错组成一位错塞积群，各位错的平衡位置分别用1, 2, 3 … N 标记，并将坐标原点取在领先位错处，如图3-24所示。显然，可以把在 P 点的切应力大小看成是外加切应力 σ 和塞积群中各位错在该点所产生的切应力之和，则

$$\sigma(r) = \sigma + \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \sum_{i=1}^N \frac{1}{r+x_i} \quad (3-10)$$

可以证明^[7]，当 N 很大时，

$$x_i = \frac{D\pi^2}{8N\sigma} (i-1)^2 \quad (3-11)$$

式中， $D = Gb/2\pi(1-\nu)$ 。根据距离 r 大小的不同，可以作下而三种讨论：

1) 当 $r \ll x_i$ 时，可将(3-10)式中 r 忽略，从而近似得出；

移方式变形为主。但在低温下，也可出现孪生变形。这是因为全位错运动所需克服的派-纳力随温度降低提高很快，而对部分位错却提高较慢。孪生变形可由部分位错运动产生，故在低温下易于进行。而且，孪晶界是位错运动的障碍，也是造成位错塞积的场所，以致在形变孪晶处常常引起裂纹萌生或交滑移。所以，要充分利用位错强化机制，也有必要深入理解孪晶的形成机制及其有关特性。

一、孪生位错

如图3-25所示，FCC点阵中(111)面的堆垛次序为ABC循环。若在每一(111)面上各有一柏氏矢量为 $\frac{a}{6}[11\bar{2}]$ 的Shockley位错运动并终止在晶体内部时，在各Shockley位错所扫过的部分便产生了层错区，使堆垛次序变为BACBAC。这种堆垛次序恰好与原来FCC点阵中的ABC型循环呈镜面对称。故所形成的层错区便是由各Shockley位错分别扫过相继的孪晶面所形成的孪晶区，其与正常点阵区域的边界为孪晶界。能够形成形变孪晶的部分位错常称为孪生位错。孪晶区与非孪晶区的界面不一定和孪晶面相重合，其中重合的界面称为共格孪晶界面，不重合的界面称为非共格孪晶界面。显然，非共格孪晶界可以看成是一列孪生位错所构成的界面。在BCC点阵中，可由一系列 $\frac{a}{6}\langle 111 \rangle$ 部分位错在(112)面上相继运动而形成孪晶。

只有那些满足特定要求的部分位错才能成为孪生位错，而不是所有的部分位错都能成为孪生位错。孪生位错应能引起密排而堆垛次序发生镜面对称性变化。在三种常见的金属点阵中，孪生位错与孪晶面如下：

点阵类型	孪生位错	孪晶面
FCC	$\frac{a}{6}\langle 11\bar{2} \rangle$	{111}
BCC	$\frac{a}{6}\langle 111 \rangle$	(112)
HCP	$\frac{a}{12}[10\bar{1}\bar{1}]$	(1012)
	$\frac{a}{12}[11\bar{2}\bar{3}]$	(1122)

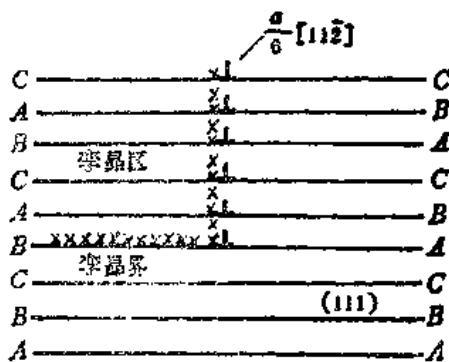


图3-25 FCC点阵中形变孪晶形成示意图

二、孪晶形成机制

用位错理论说明形变孪晶形成时，关键是要保证每一个孪晶面上都有孪生位错扫过，以产生宏观的均匀切变。或者，也可设想有一孪生位错沿某一孪晶面扫过一遍后，立即转入相邻的下一个孪晶面，并依次滑移下去。为此，通常用具有一个结点的极轴机制来描述孪晶的形成过程^[18]。

按照这种机制，要求有两个位错分别为扫动位错与极轴位错，如图3-26(a)所示。扫动位错应为孪生位错，而且扫动位错的运动不能只限于在一个孪晶面内滑动，而需要沿一螺旋面运动，否则就不会给出一定厚度的孪晶。当扫动位错扫过孪晶面时，必须产生一个正确的孪生切变。极轴位错通过结点，并与孪晶面相交。极轴位错的柏氏矢量必须有一个垂直于扫动平面的分量，而这个分量要恰好等于孪晶面的间距。在孪生形变过程中，极轴位错不得运动，而应被牢牢的钉住。这样，当扫动位错围绕着极轴位错旋转时，就会相继在一系列孪晶面上改变每一个面上的堆垛次序而形成孪晶，如图3-26(b)所示。

下面以BCC晶体为例说明孪晶的形成。如图3-27所示，AOC为位于(112)面上的全位错，其柏氏矢量为 $\frac{a}{2}[111]$ 。在合适的应力条件下，可能有某一段位错线（如OB）发生了如下反应：

$$\frac{a}{2}[111] \rightarrow \frac{a}{3}[112] + \frac{a}{6}[1\bar{1}\bar{1}] \quad (3-19)$$

其结果是使原来的全位错AOC的OB段分裂成OB与OEDB两部分位错。其中，部分位错 $\frac{a}{3}[112]$ 因位错线OB处在(112)面上，使其柏氏矢量处处与位错线垂直，为在(112)面上不能滑移的刃型位错。而另一柏氏矢量为 $\frac{a}{6}[1\bar{1}\bar{1}]$ 的部分位错的滑移面是(112)，可以O和B两点为结点由AOC线中OB段通过滑移分裂出来。并由其在(112)面上的运动产生一单原子厚的孪晶。但当这一位错滑移到(112)面和(121)面的交线[111]上时，会形成OE部分的纯螺型位错。在适当的应力条件下，OE可以交滑移到(121)面上去，成为在(121)面上运动的具有柏氏矢量为 $\frac{a}{6}[1\bar{1}\bar{1}]$ 的扫动位错，并使O

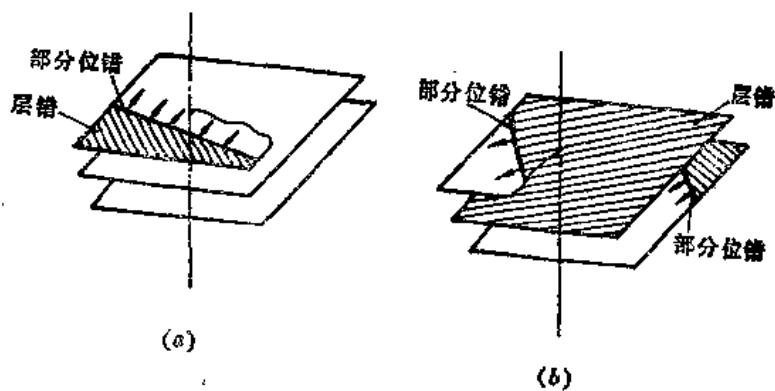


图3-26 孪晶形成的极轴机制

点成为极轴机制中的一个结点。由于柏氏矢量为 $\frac{a}{3}[112]$ 的位错可按下式分解，即

$$\frac{a}{3}[112] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}21] + \frac{a}{2}[101] \quad (3-20)$$

故极轴位错的柏氏矢量中垂直于扫动面 $(\bar{1}21)$ 的分量正好是 $\frac{a}{6}[\bar{1}21]$ ，并恰好等于 $(\bar{1}21)$ 面的面间距。因此，便可由扫动位错在扫动面 $(\bar{1}21)$ 上绕通过 O 点的极轴位错不断旋转的结果，而得到沿 OB 方向发展的多层次的孪晶。

同理，在结点 B 处亦可由扫动位错向 BO 方向形成孪晶，与在结点 O 处由扫动位错所形成的孪晶相互补充而完成在 BO 区域内的孪晶。而且在立方晶体中，三个平面 (112) 、 $(\bar{1}21)$ 和 $(2\bar{1}1)$ 共同通过 $[11\bar{1}]$ 方向。因此，上述孪晶形成过程不但在 $(\bar{1}21)$ 面上发生，也能在 $(2\bar{1}1)$ 面上发生，视哪一个面上的切应力较为合适而定。

对面心立方结构，也可按以上机制由下述位错反应描述孪晶形成：

$$\frac{a}{2}[110] \rightarrow \frac{a}{3}[111] + \frac{a}{6}[11\bar{2}] \quad (3-21)$$

其中，部分位错 $\frac{a}{3}[111]$ 为极轴位错，部分位错 $\frac{a}{6}[11\bar{2}]$ 为扫动位错。

上述分析表明，孪生同部分位错的运动密切相关。孪生位错是在一定切应力条件下，由部分滑移位错转变而成。孪生要在晶体已发生一定变形的情况下才开始，而且降低层错能有利于孪晶的形成。

三、发射位错

孪晶对晶体力学性能的影响同孪晶界密切相关。非共格孪晶界的重要特征之一是发射位错，以松弛其长程应力场^[9]。因而，发射位错是对孪晶界应力场的一种显示，而且也为孪生的位错模型提供了有力的证据。

如在 BCC 点阵中，非共格孪晶界可由刃型部分位错 $\frac{a}{6}[11\bar{1}]$ 组成，见图 3-28(a)。若这种孪晶界按图 3-28(b) 所示的方

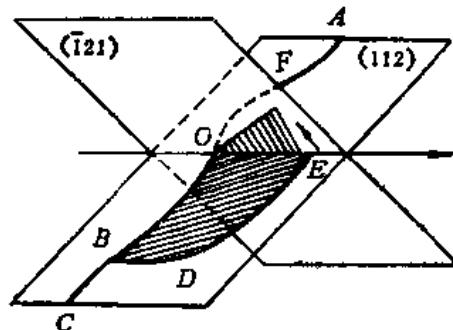


图 3-27 体心立方结构中孪生的位错机制

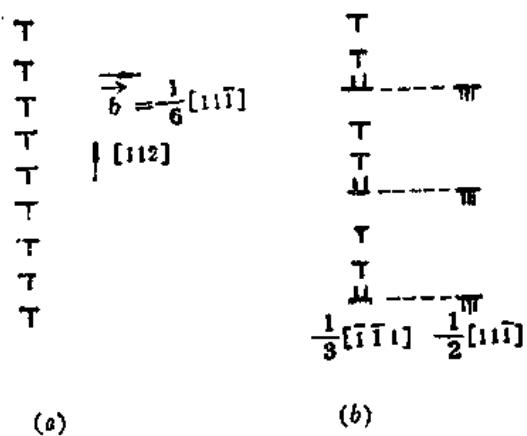


图 3-28 非共格孪晶界发射位错机制

全位错 $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 滑入基体，同时在孪晶界上又留下两个可动孪生位错 $\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 。可见，在切应力 σ 的作用下，通过上述反应使孪晶层增加了四个原子层厚度。

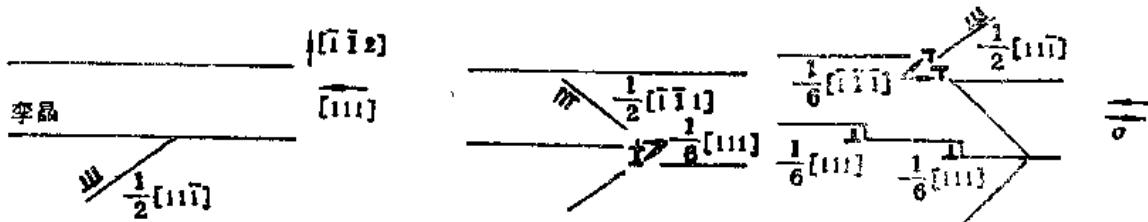
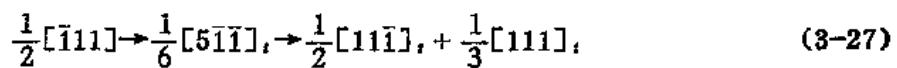
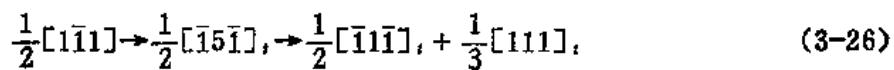


图3-29 全位错 $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 与孪晶界交互作用的可能机制

类似地，滑移位错 $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 和 $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 与孪晶相遇时，可发生如下反应：



然而(3-23)、(3-26)和(3-27)式所示的位错反应不能自动进行，必须在很大的应力作用下才有可能。而且 $\frac{1}{3}<111>$ 型部分位错运动所需的派-纳应力要相当大。因此，一般认为，孪晶界可成为位错运动的障碍，以致在孪晶界处常形成位错塞积，引起加工硬化或形成微裂纹。应该指出，上述孪晶界与滑移位错的作用机制也适用于其它点阵结构的金属。

§ 3-6 位错强化的数学表达

对位错强化加以数学表达的核心是从理论上估算流变应力。位错强化的基本特点是在塑变过程中位错不断增殖，从而使位错密度提高，导致位错间的交互作用增强。所以，位错强化将使流变应力提高，其宏观表现便是加工硬化。

流变应力是指金属晶体产生一定量的塑性变形所需要的应力。从位错机制来说，流变应力是滑移面上有足够数量的位错在单位时间内扫过相当大的面积（其线度比位错间距离大得多）时所需要的应力，在数值上应等于大量位错在滑移面上运动所要克服的阻力的大小。或者，也可以把流变应力看成是在一定位错结构下，使晶体中滑移开始所需的应力。

一、位错运动阻力的估算

1. 派-纳力

位错运动首先要克服派-纳力或晶格阻力，故在估算流变应力时应包含派-纳力的影

响。但是，目前计算派-纳力尚有一定困难。这要涉及对位错心部的原子结构模型的深入了解。通常只能定性地估算派-纳力的影响。一般认为，对软金属（包括FCC金属和基面滑移的HCP金属）而言，派-纳力的影响不大，不是位错运动所要克服的主要阻力；而对硬金属（包括BCC金属和非基面滑移的HCP金属）而言，派-纳力的影响较大，可能是位错运动所需克服阻力的重要组成部分，应在流变应力的计算公式中加以考虑。

2. 位错线张力引起的阻力

大量位错运动时，要涉及位错增殖。如以Frank-Read源机制增殖时，在位错线弯曲过程中需克服线张力所引起的阻力，即位错增殖的临界切应力为：

$$\sigma = \frac{Gb}{l}$$

式中， l 为位错源的线长度。故曾有人认为^[10]，晶体的临界切应力就是开动线长度最长的位错源的最小切应力。看来，这种说法有一定道理。

3. 位错的长程弹性交互作用

关于这种相互作用对流变应力的贡献，可用图3-30所示的位错组态作量级的估计。若有一刃型位错欲从位于两相邻滑移面上的同号刃型位错之间滑过时，必受到由弹性交互作用所引起的阻力。参考图1-33，并用(1-66)及(1-73)式，可将所需克服的切应力阻力写成：

$$\sigma_t = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)l} \approx \frac{Gb}{4l} \quad (3-28)$$

式中， l 为上下两滑移面的间距。若再作进一步简化，也可将 l 视为位错的平均距离。类似地，可对螺型位错直接由(1-66)及(1-70)式得出：

$$\sigma_t = \frac{Gb}{2\pi l} \approx \frac{Gb}{6l} \quad (3-29)$$

将(3-28)和(3-29)两式可统一表达为：

$$\sigma_t = \alpha \frac{Gb}{l} \quad (3-30)$$

式中， α 为一常数，其值取决于泊松比及位错的性质、取向等。这种弹性交互作用的特点是对运动位错造成一种长程阻力，与温度的关系不大。温度仅通过 G 随温度的变化而对 τ_t 产生一定的间接影响。

4. 与林位错交截产生的割阶的作用

由于林位错与滑动位错接近正交，故弹性交互作用一般很小。通过交截形成割阶所产生的阻力具有短程性质，其作用区间与林位错的宽度 d 相当。如林位错为非扩展位错时， $d=b$ ；如系扩展位错时， $d=b+r$ 。 $(r$ 为扩展宽度)。

对这一作用产生的阻力可作如下估算。如图3-31所示，当运动位错与林位错（其平均间距为 l ）相遇时，形成割阶的长度大体上为 d ，故割阶形成能约为 $\alpha G b^2 d$ 。由于割阶无长程应力场，其能量主要由心部决定，故取 $\alpha \approx 0.2$ 。同时，外力所作的功如图3-31中画斜线部分所示，其值为 $\sigma b l d$ 。如令其等于割阶的形成能，遂有：

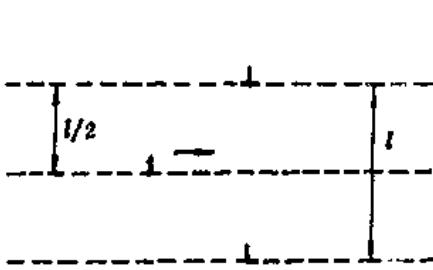


图3-30 位错间长程弹性相互作用示意图

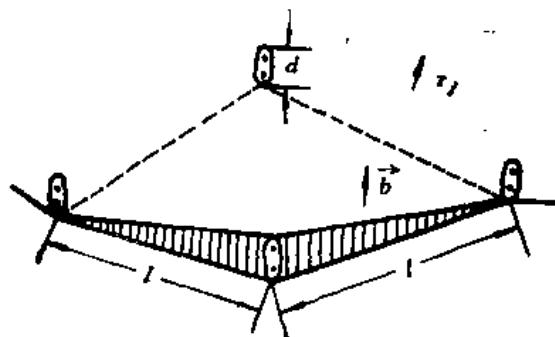


图3-31 运动位错与格位错交截时外力作功示意图

$$\sigma b l d = \alpha G b^2 d$$

故得

$$\sigma = \alpha \frac{G b}{l} \quad (3-31)$$

在此式中，由形成割阶产生的切应力阻力 σ 与温度的关系仅来自 G 的间接影响。温度不高时，带割阶位错线的运动主要靠外应力的帮助完成，可忽略热激活的影响。但当温度较高时，热激活能使产生的空位立即驱散，从而会对割阶位错的运动产生影响，使流变应力随温度上升而下降。

5. 会合位错的阻碍作用

在 § 2-7 中已指出，相交位错若产生会合位错后，要继续滑移时，只有将此会合位错拆散才有可能。可用虚功原理估算拆散会合位错所需外加切应力。如图3-32所示，虚点线为两相交位错， BE 为这两个位错相交后产生的会合位错，长为 $2x$ 。为了方便起见，设所有位错线段长均为 l ，并 $\phi_1 = \phi_2 = \phi$ 。在外加切应力 σ 作用下，会合位错 BE 缩短 $2dx$ 。同时，相应的四个位错线段的移动距离为 kdx 。 W_1 和 W_2 分别为原位错和会合位错单位长度的能量。于是，可以得出，在会合位错缩短 dx 时使位错的能量变化为：

$$dE = (4W_1 \cos\phi - 2W_2) dx \quad (3-32)$$

相应地，外力作功为：

$$dW = 4\sigma b l k dx \quad (3-33)$$

令 $dE \approx dW$ ，并取 $W_1 = W_2 = Gb^2/2$ ，则得

$$\sigma = \alpha \frac{G b}{l} \quad (3-34)$$

其中， $\alpha = 0.2 \sim 0.3$ 。显然，温度与会合位错对位错阻力的关系亦来自 G 的间接影响。若考虑晶体结构的影响时，由于在体心立方结构中， W_2 代表 $\langle 100 \rangle$ 位错的能量， W_1 代表 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错的能量，故 $W_2 > W_1$ ；而在面心立方结构中， $W_2 = W_1 = W$ （均为 $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 位错的能量），所以，从 (3-32) 式可以看出，会合位错反对外晶体流变应力的贡献在面心立方结构中比在体心立方结构中为更大。

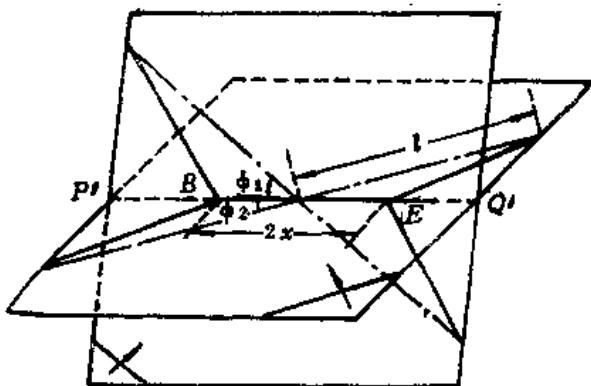


图3-32 会合位错的形成

二、流变应力的表达式

上述分析表明，位错运动的阻力来自多方面。实际上，金属晶体的流变应力可能是以上几方面阻力，甚至更多阻力来源共同作用的结果，如螺旋位错及孪晶界等也都是位错运动的有效障碍。所以，目前对流变应力的估算还只能是粗略的，尚有待于进一步发展。但是，通过上面对位错运动阻力的推导可见，流变应力的一般表达式应为：

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha \frac{Gb}{l} \quad (3-35)$$

式中， σ_0 为派-纳应力。 l 的含义尽管对不同的阻力来源有所不同，但大体上都与晶体中位错的数量有关。位错密度 ρ 愈高， l 值愈小。对 ρ 与 l 的关系可近似表达为：

$$l \propto \rho^{-\frac{1}{2}} \quad (3-36)$$

将(3-36)式代入(3-35)式便得

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha G b \rho^{\frac{1}{2}} \quad (3-37)$$

此式已为大量试验所证实。式中， α 为视材料而不同的常数，常在0.2~0.5范围内。

§ 3-7 应变速率与位错运动速率关系的推导

在讨论金属材料加工硬化行为时，有时会涉及应变速率、位错运动速率及位错密度三者之间的关系。其表达式为：

$$\dot{\epsilon} = m \rho b v \quad (3-38)$$

式中， $\dot{\epsilon}$ 为应变速率， m 为常数（通常为平均的Schmid因子）， ρ 为可动位错密度， b 为柏氏矢量， v 为位错运动的平均速率。实际上，在拉伸变形时， $\dot{\epsilon}$ 由拉伸机给定，故可由此式判定位错密度与位错运动速率之间的关系。这对于了解变形过程中位错的运动特性具有一定意义，常用来说明BCC金属屈服现象的产生机制。

对(3-38)式可作如下推导。如图3-33(a)所示，当单个位错沿滑移面运动通过厚度为单位长度的单元体时，产生的切应变为：

$$\gamma = \frac{b}{h} \quad (3-39)$$

显然，若此位错的滑动距离为 x_i （见图3-33b）时，可使单元体的顶部相对于底部产生的位移为

$$\delta_i = \frac{x_i b}{L} \quad (3-40)$$

由 N 个位错在许多平行滑移面上滑移所产生的总位移为

$$\Delta = \sum_{i=1}^N \delta_i = \frac{b}{L} \sum_{i=1}^N x_i \quad (3-41)$$

相应的切应变为

$$\gamma = \frac{\Delta}{h} = \frac{b}{hL} \sum_{i=1}^N x_i \quad (3-42)$$

若位错的平均移动距离为 \bar{x} ，即

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N}$$

则

$$\gamma = \frac{bN\bar{x}}{hL} = b\rho\bar{x} \quad (3-43)$$

式中， $\rho = N/hL$ 为位错密度。这便是晶体的宏观塑性变形与微观位错滑移间的基本关系。需要注意的是，在上述讨论中是假设各滑移面均平行于单元体的底面。实际上，晶体中滑移面及位错线的取向可能是变化的，为计算切应变应引入平均取向因子 $\langle m \rangle$ 。故对 (3-43) 式的更一般的表达式应为

$$\gamma = \langle m \rangle \rho b \bar{x} \quad (3-44)$$

而且，应变速率为

$$\dot{\gamma} = \frac{d\gamma}{dt} = \langle m \rangle \rho b \frac{d\bar{x}}{dt} = \langle m \rangle \rho b \bar{v} \quad (3-45)$$

式中， \bar{v} 为位错的平均速率。可见，着眼于位错的行为描述宏观塑性变形，需要知道晶体

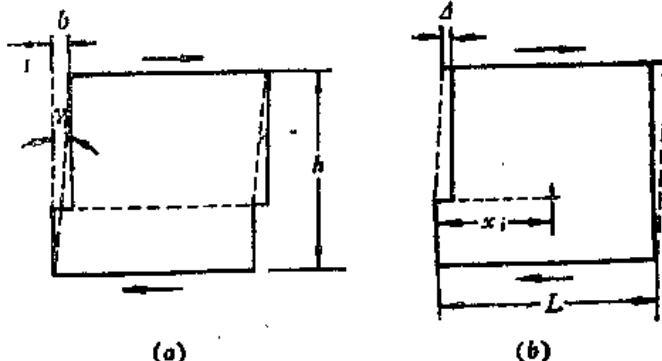


图3-33 位错运动与切应变的关系示意图

(a) 单个位错通过单元体 (b) 单个位错在单元体内滑动

结构(以确定柏氏矢量)、可动位错密度以及位错的平均速率。反之,若已知晶体的应变速率,又可进而讨论可动位错密度与位错平均速率的关系。

§ 3-8 温度及应变速率对流变应力的影响

在§3-6中推导流变应力的表达式时,没有考虑热激活效应,使温度对流变应力的影响仅表现在弹性模量G的变化上。实际上,流变应力对温度及应变速率均有一定的依赖关系,故又常将流变应力表达为:

$$\sigma = \sigma^* + \sigma_c \quad (3-46)$$

式中, σ^* 表示与温度或应变速率有关的部分, σ_c 表示与温度或应变速率无关的部分。为说明这种现象, Seeger^[1]曾设想 σ^* 来自于滑动位错与林位错的交截所产生的阻力(短程阻力),而 σ_c 主要来自于晶体中相邻平行滑移面的位错对滑动位错所产生的弹性内应力(长程阻力)。所以,在滑动位错与林位错的交截过程中,实际作用在滑动位错上的力应为 $\sigma^* = \sigma - \sigma_c$ 。如图3-31所示,此力所作的功为 $lbd\sigma^*$,其中 l 为林位错的间距, d 为其扩展宽度。再设 U_0 为没有外力时交截过程所需的激活能,则在不大的外加切应力 σ 作用下,交截激活能 U 可写成

$$U = U_0 - lbd\sigma^* = U_0 - V(\sigma - \sigma_c) \quad (3-47)$$

式中, $V = lbd$ 称为激活体积。当 $U \gg kT$ 时,则在温度 T 下,由热激活产生能量 U 的几率应由 Boltzmann 因子 $\exp(-U/kT)$ 决定。对于位错的交截而言,每秒钟内能够进行热激活(克服障碍)的次数为 $v_0 \exp\{-[U_0 - V(\sigma - \sigma_c)]/kT\}$,其中 v_0 为位错线振动的固有频率(\ll 原子振动频率)。所以,位错的运动速率为:

$$\bar{v} = dv_0 \exp\left[-\frac{U_0 - V(\sigma - \sigma_c)}{kT}\right] \quad (3-48)$$

把(3-48)式代入(3-38)式,得到宏观的应变速率如下:

$$\dot{\epsilon} = \rho A \exp\left[-\frac{U_0 - V(\sigma - \sigma_c)}{kT}\right] = \dot{\epsilon}_0 \exp\left[-\frac{U_0 - V(\sigma - \sigma_c)}{kT}\right] \quad (3-49)$$

式中, ρ 为可动位错密度; $A = bdv_0$; $\dot{\epsilon}_0 = \rho A$ 。若应变速率是预先给定的,则可由上式得到:

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_c + \frac{U_0 - kT \ln \dot{\epsilon}_0 / \dot{\epsilon}}{V} & \text{当 } T \leq T_i \\ \sigma_c & \text{当 } T > T_i \end{cases} \quad (3-50)$$

而

$$T_i = - \frac{U_0}{k \ln \dot{\epsilon} / \dot{\epsilon}_0} \quad (3-51)$$

由(3-50)和(3-51)式可见,当应变速率 $\dot{\epsilon}$ 一定时,流变应力 σ 与温度 T 的关系如图3-34所示(忽略切变模量随温度的变化)。在绝对零度时,流变应力与 $\dot{\epsilon}$ 无关,遂可将

流变应力写成“激活应力”

$$\sigma_a = \frac{U_0}{V} \quad (3-52)$$

与 σ_G 之和。所以，一般当 $T < T_c$ 时，(3-50) 式可写为 (3-46) 式的表达式。在 T_c 以上，因热激活使交截过程易于进行，不再对流变起阻碍作用，故流变应力主要由位错的长程阻力 σ_G 决定，即 $\sigma = \sigma_G$ 。显然， σ_G 与形变速率无关，而 σ^* 取决于位错交截过程，故与形变速率有关，但此关系用对数来表示，其敏感性较小。临界温度 T_c 随着应变速率的增加向高温移动。

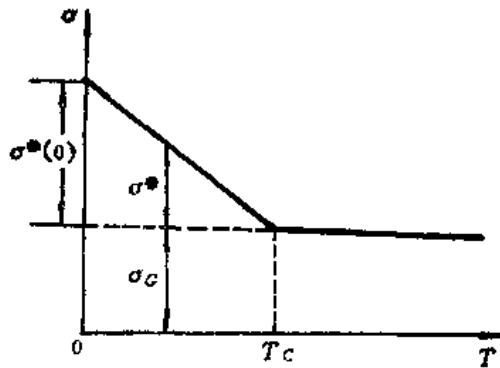


图3-34 流变应力与温度的对应关系

参 考 文 献

- [1] A.Seeger, in Dislocations and Mechanical Properties of Crystals, J.C.Fisher, ed., John Wiley, New York, (1957), 243.
- [2] N.F.Mott, Trans. Met.Soc., AIME, 218, (1960), 962.
- [3] F.C.Frank and W.T.Read, in Symposium on plastic Deformation of Crystalline Solids, Carnegie Institute of Technology, pittsburgh, (1950), 44.
- [4] J.S.Koehler, Phys. Rev., 86(1952), 52.
- [5] F.R.N.Nabarro, in Report of the Conference on strength of solid, Physical Society, London, (1949), 75.
- [6] B.A.Bilby, in Report Conf. Defects Crystalline Solids, (1954), 124.
- [7] J.D.Eshelby, F.C.Frank, F.R.N.Nabarro, Phil. Mag., 42(1951), 351.
- [8] A.H.Cottrell and B.A.Bilby, Phil. Mag., 42(1951), 573.
- [9] A.W.Sleeswyk, Acta Met., 10(1962), 705.
- [10] N.F.Mott, Phil. Mag., 43(1952), 1151.
- [11] A.Seeger, Phil. Mag., 46(1955), 1194.

第四章 晶界强化机制

§ 4-1 金属多晶体塑性变形条件

金属材料一般均呈多晶体状态，各晶粒的取向不同。在外力作用下，多晶体的变形行为与单晶体有很大不同。多晶体塑性变形时，其典型的应力-应变曲线及应变硬化曲线如图4-1所示。可见，多晶体不呈现易滑移阶段。从塑性变形一开始，便很快进入抛物线阶段，其应变硬化率不断降低。这表明，晶界的存 在使易滑移乃至双滑移受到抑制，而易于进行多滑移。

可以证明，金属多晶体变形时，必须有五个独立的滑移系统同时开动。这是多晶体进行塑性变形时必须满足的基本要求，称为Von Mises条件。在多晶体中，一个晶粒变形时要受到周围晶粒的约束，故变形必须有协调性，以防破坏晶界的连续性而形成空隙或微裂纹。为此，多晶体变形时必须有几个滑移系统同时开动。

由弹性力学知，受力物体中任意点的应变状态可由九个应变分量给定：

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \quad (4-1)$$

考虑到切应变分量的对称性，在六个切应变分量中仅有三个是独立的。而且，根据单元体体积不变原则，体积应变为零，即

$$e = \frac{\delta V}{V} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = 0 \quad (4-2)$$

可见，仅有两个独立的正应变分量。因此，实际上在九个应变分量中，可由五个独立的应变分量给出任意点的应变状态。每个独立的应变分量可由一个滑移系统开动给定，故相应地便要求五个独立滑移系统同时开动。

对于有自由表面的单晶体而言，变形条件可以放宽，可通过一个滑移系统的开动产生易滑移变形。实际上，这是Von Mises条件的特例。

Von Mises条件具有重要的实际意义。可根据这一变形条件判断多晶体材料的塑性好坏。一般而言，面心立方金属和体心立方金属的滑移系统较多，易于满足Von Mises条件，具有较好的塑性。例如，FCC金属的滑移系统为 $\langle 110 \rangle \{111\}$ ，其满足Von Mises条件的可能性为

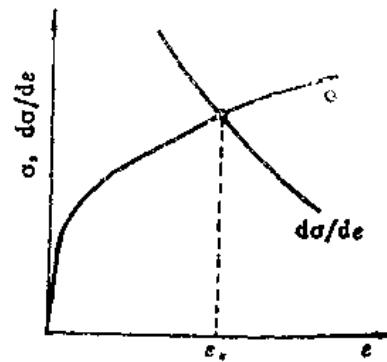


图4-1 金属多晶体真实应力-应变曲线的常见形式

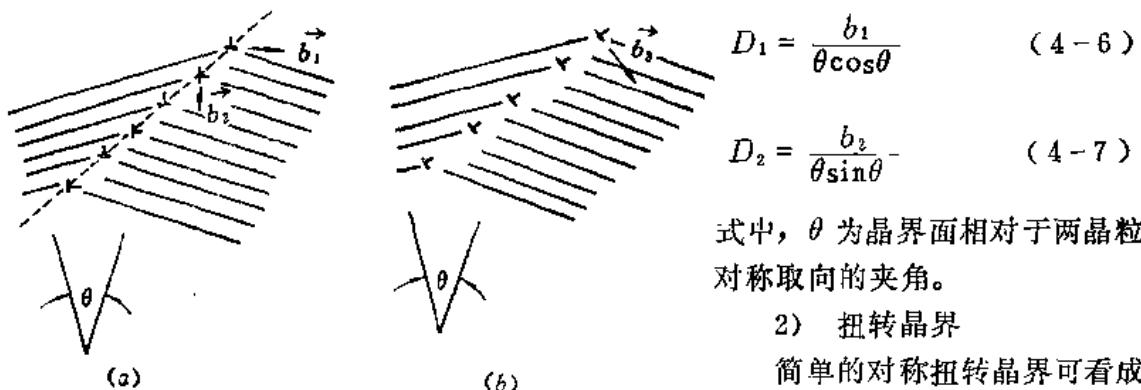


图4-6 非对称的倾侧晶界

一个系列的螺型位错在晶界面处等间距平行排列时，会使晶体上下两部分间产生切应变（或相对扭动一个角度）。这种位错组态会引起长程应力场，尚不能表征晶界。若再附加一组正交分布的螺型位错系列（如图4-7b）时，该组螺型位错也会相应引起一个切应变。由两列螺型位错给出的切应变合成的结果便有可能产生没有畸变的扭动，如图4-7(c)所示。在这里，柏氏矢量要选择合适，否则还会有畸变产生。很容易证明，各位错的间距仍是 $D = b/\theta$ ；或 $\theta = n^*b$ ， n^* 为单位晶界面积上每组螺型位错所含有的位错数目。

扭转晶界也可以是非对称的。这种晶界不在晶体学平面上，至少需要三个系列的具有不同柏氏矢量的螺型位错才能形成。

在一般情况下，任意取向的小角晶界可以由倾侧晶界和扭转晶界混合组成。因此，可以由几个系列的混合位错加以描述，各系列的柏氏矢量应有所不同。

2. 大角晶界模型

大角晶界的结构比较复杂，难于简单地用与小角晶界类似的办法建立位错模型。由(4-4)式可知，当晶界的旋转角 θ 大于30°左右以后，位错间距 D 要小于原子间距，以致失掉了位错模型的意义。为此，需要引入参考点阵，在对大角晶界的结构进行几何简化或抽象的基础上建立位错模型。早在1958年，Frank曾提出相符点阵(Coincidence Site Lattice，简称为CSL)的设想，即在一些特殊的位向晶界中，有些原子同时属于两边晶粒的阵点，并自身形成一超点阵。后来Branden等人⁽¹⁾根据场离子显微镜的观察结果，提出了大角晶界的相符点阵模型。他们认为，大角晶界系由约两原子直径厚的对排

$$D_1 = \frac{b_1}{\theta \cos \theta} \quad (4-6)$$

$$D_2 = \frac{b_2}{\theta \sin \theta} \quad (4-7)$$

式中， θ 为晶界面相对于两晶粒对称取向的夹角。

2) 扭转晶界

简单的对称扭转晶界可看成由两相交叉的螺型位错阵列组成。如图4-7(a)所示，只有

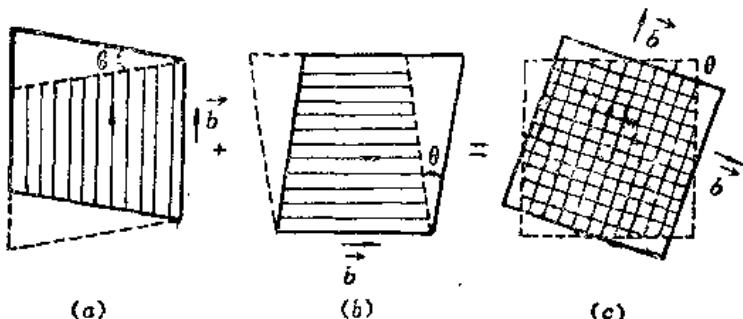


图4-7 对称扭转晶界形成示意图

(a)由纵向排列的螺型位错引起的切应变 (b)由横向排列的螺型位错引起的切应变 (c)由两个正交螺位错网络引起的扭转(实线表示晶界上方的晶体；虚线表示晶界下方晶体)

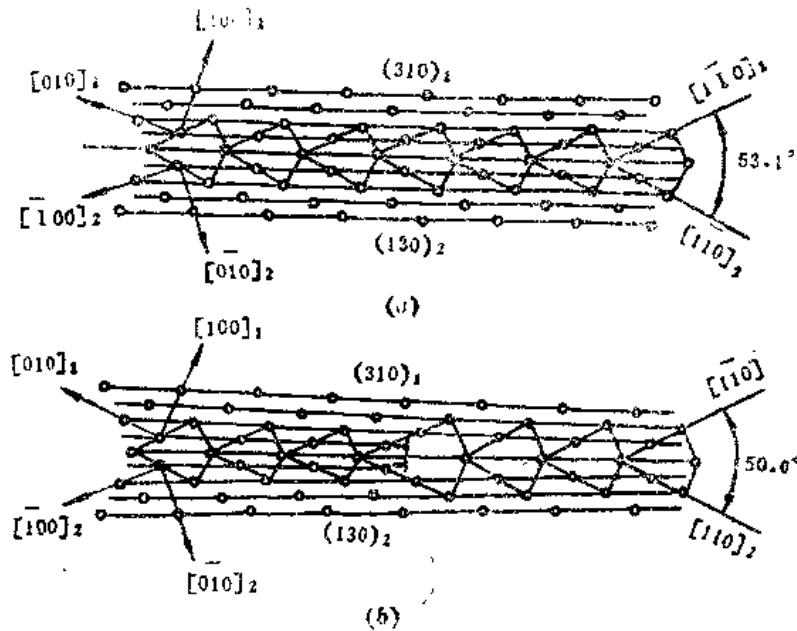


图4-10 (a) $\theta=53.1^\circ$ 时的对称稍符倾侧晶界; (b) $\Delta\theta=3.1^\circ$ 时, 次位错结构的示意图

二、晶界与位错的交互作用

晶界的重要特性之一是同晶内位错发生交互作用。显然, 这种交互作用将取决于晶界应力场的特点。下面先以小角对称倾侧晶界为例讨论晶界应力场的特点。

如上所述, 对称倾侧小角晶界可看成是由同号刃型位错堆砌而成的位错墙, 如图4-11所示。其应力场可由下式表达:

$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{x[x^2 - (y-nd)^2]}{[x^2 + (y-nd)^2]^2} \quad (4-8)$$

若 $x \gg d/2\pi$, 则可近似得到

$$\sigma_{xy} = \frac{2\pi Gbx}{(1-\nu)d^2} \cos \frac{2\pi y}{d} \exp \left(-\frac{2\pi x}{d} \right) \quad (4-9)$$

可见, x 增大时, σ_{xy} 呈指数规律下降。这说明, 对称倾侧小角晶界无长程应力场。如 $x=2d$ 时, σ_{xy} 大体上为单个位错应力场的 10^{-2} 倍。但若在晶界附近, 如 $|x| \ll d/2\pi$ 时, σ_{xy} 在数量上随 y 值不同将大体上由最近的 1 到 3 个位错的应力场决定, 因而仅有短程应力场。

可以证明, 此晶界应力场的其它分量 (如 σ_{xx} , σ_{yy} 和 σ_{zz}) 也有类似的特点。

因此, 对一个无限长的对称倾侧小角晶界而言, 由于各位错的应力场彼此抵消的结果, 将会表现出具有短程应力场的特点。但对以下情况尚须加以注意:

1) 晶界较短时, 可看成由 N 个位错组成的超位错, 给出长程应力场, 如图4-12所示。在回复过程中, 可由这种长程应力场对晶内位错产生作用而形成位错墙。如在 P 点有一刃型位错时, 应受斥力作用。但在有空位扩散的条件下, 却可通过攀移进入晶界的引力区 (到达 Q 点), 并进而再在已有位错墙的上部排列起来。

2) 若在变形过程中使由同号刃型位错组成的晶界从竖直位置倾斜时, 相当于变为非对称倾侧晶界, 给出长程应力场。如图 4-13 所示, 可由另一列柏氏矢量与之相垂直的位错墙将这种长程应力场加以抵消。这一方面说明晶界对晶体变形有一定阻碍作用, 另一方面也说明易在晶界附近产生附加变形, 使位错密度增高。

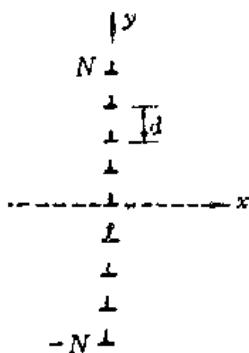


图4-11 对称倾侧小角晶界

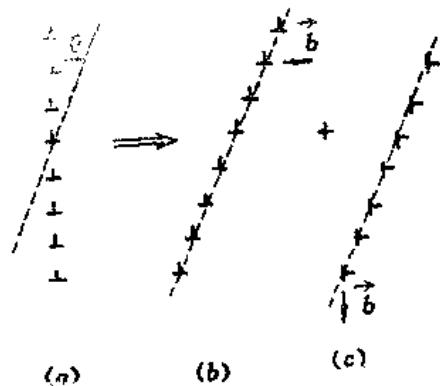


图4-13 塑性变形时小角晶界附近产生位错示意图
(a) 塑性变形引起小角晶界倾斜 (b) 倾斜后的小角晶界 (c) 附加的位错列

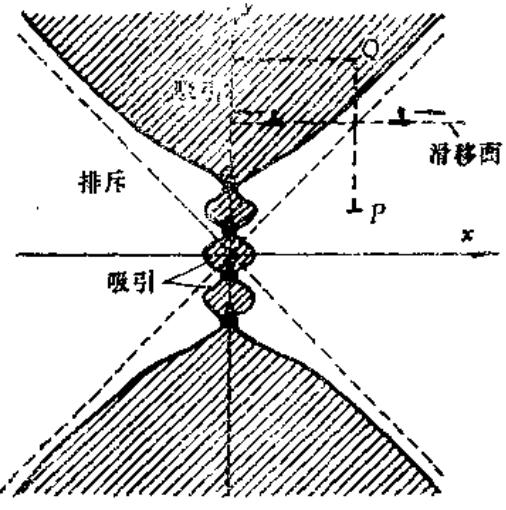


图4-12 由四个同号刃型位错组成的短晶界的应力场

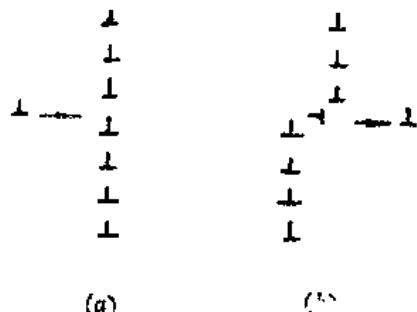


图4-14 滑移位错与对称倾侧晶界的交互作用

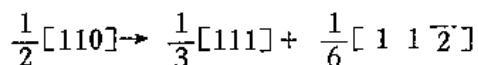
上述分析结果可用于讨论晶格位错与倾侧晶界的交互作用。显然, 倾侧晶界的短程应力场会对靠近的晶格位错作功, 以阻止其滑移穿过。故当晶格位错进入晶界的短程应力场时, 便会受到一定的阻碍作用。但若应力较大时, 晶格位错可切过位错墙, 而在晶界上形成台阶或晶界位错, 如图 4-14 (a) 和 (b) 所示。在切过后晶格位错的柏氏矢量要有所改变, 其变化量便为晶界位错的柏氏矢量。由于此过程涉及系统能量增加, 故也表现为对运动位错的阻碍作用。晶格位错也可与晶界位错相交发生位错反应。如在 BCC 晶体中有 $\frac{1}{2}[111]$ 位错进入由 $\frac{1}{2}[1\bar{1}\bar{1}]$ 位错组成的位错墙时, 会发生如下反应:

$$\frac{1}{2}[111] + \frac{1}{2}[1\bar{1}\bar{1}] \rightarrow [100]$$

其结果也使位错运动受阻。此外, 当晶格位错切过晶界时, 也可与晶界位错相交截而形成割阶或弯折。所需附加的能量也会引起硬化效应。若将此效应扩展到大角晶界时, 可使晶界形成台阶而引起晶界面积增加。

滑移位错与大角晶界也会发生交互作用。如在 FCC 晶体中, 由外加切应力作用而

使晶格位错进入晶界时，可发生如下分解反应而形成两个晶界位错：



有时，在更复杂的情况下，一个晶格位错进入晶界后可能形成三个或更多的晶界位错。这样，便会使滑移位错进入晶界后而难于离开或继续前进。

三、晶界的运动

晶界的运动有滑动和移动两种基本方式。滑动是两个晶粒沿晶界滑移；移动是晶界迁移位置。这两种运动方式都与晶界位错的运动有一定关系。

1. 晶界的滑动

晶界位错的运动方式同晶格位错相类似。当其具有位于晶界面的柏氏矢量时，可沿晶界滑移，见图 4-15 (a)；而当其柏氏矢量具有垂直于晶界面的分量时，可沿晶界攀移，见图 4-15 (b)。在晶界位错攀移时，要产生或吸收晶格空位。

可以认为，晶界的滑动是通过晶界位错的运动实现的。而且晶界中的台阶或“坎”会对晶界的滑动产生很大影响。当晶界位错与“坎”相遇时，需通过交滑移（螺型位错）或攀移（刃型位错或具有刃型分量的混合位错）方式才能继续向前运动，如图 4-16 所示。因而，晶界滑动过程涉及到原子扩散过程，需在较高温度下进行。Gifkins 和 Snowden^[63] 还提出，当温度较高时，晶界滑动应取决于物质由受压应力的“坎”沿晶界扩散到受张应力的“坎”上去这一过程的控制，并给出晶界的滑动速度为：

$$\dot{S} = \frac{\delta\sigma D_{gb} \Omega}{L k T} \quad (4-10)$$

式中， δ 为约等于 2 的常数， σ 为外加切应力， Ω 为原子体积， D_{gb} 为晶界扩散系数， L 为受压应力的“坎”与受拉应力“坎”的间距。

2. 晶界的移动

对称倾侧小角晶界中各位错的滑移面相平行，其可动性大体相同。故在外加切应力作用下，有可能使对称倾侧晶界整体移动，成为可动性晶界。如图 4-17 (a) 所示，可通过在晶体一端加载荷而对晶界施加切应力。如果沿柏氏矢量方向所加分切应力为 τ ，则每一位错单位长度上所受作用力为 τb ；而晶界单位长度上有 θ/b 根位错线，故单位面积晶界上所受的作用力为：

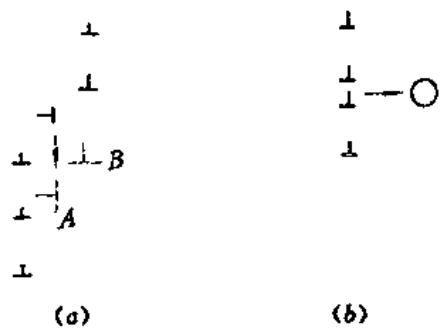


图 4-15 晶界位错运动的基本方式

- (a) 晶界位错 A 滑移并引起位错 B 的运动及凸台平移
- (b) 晶界位错攀移并产生晶格空位



图 4-16 晶界位错交滑移（螺型位错）或攀移

- (a) 晶界位错 A 滑移并引起位错 B 的运动及凸台平移
- (b) 晶界位错攀移并产生晶格空位

$$F = \theta \tau \quad (4-11)$$

若 F 大于各位错在滑移时所受阻力之和，便可使晶界向图 4-17 (b) 中的左方移动。在移动过程中，晶界上各位错间的相对位置不变。这种晶界运动形式已在锌中通过垂直于基面的倾侧晶界运动加以证实^[7]，为小角晶界的位错模型提供了有效的证据。类似地，也不难理解半共格孪晶界（如图 3-25 所示）有较大的可动性。在一般情况下，若对称倾侧晶界上的位错已发生扩展或垂直于晶界面滑移所需派-纳力较高时，会使其可动性明显下降。

对非对称倾侧晶界（见图 4-6），因两组位错的滑移面不同，难以使晶界位错以纯滑移的方式引起晶界移动。只有在一组位错滑移而另一组位错攀移的条件下，才有可能使整个晶界向前移动。在这种情况下，由于涉及位错的攀移，晶界的移动要受扩散过程所控制，故需在较高温度下才能实现。而在较低温度下，这种小角晶界的可动性较差，有可能成为晶格位错滑移的障碍。

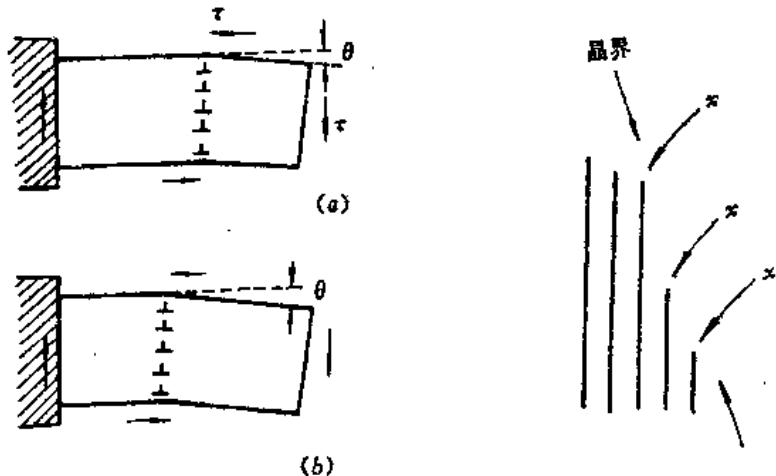


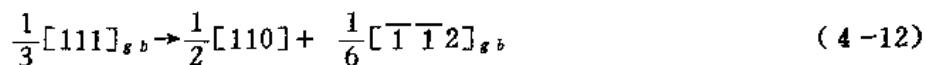
图4-17 切应力诱发对称倾侧晶界的移动

图4-18 晶界移动机制示意图

一般情况下，大角晶界移动时，沿晶界扩散是必不可少的过程之一。实验结果证明，晶界移动激活能和沿晶界扩散激活能很相近。关于大角晶界移动的机制可由图 4-18 示意表示。设晶界一边晶粒中原子平而为图中直线所示，显然“x”处为原子最易脱开原晶粒的地方，也是晶粒长大时最易附着原子之处。但这两个地方一般不可能正好相邻，故如果晶界要移动就必须借助原子沿晶界扩散。此外，晶界两边晶粒中平行于晶界的原子面密度也不会一样大，若完成晶界移动时，必定有多余的原子或空位产生。所以，不论晶界移动的机制如何，必然涉及扩散过程。

四、晶界发射位错的机制

前已指出，晶界可以作为位错源，向晶内发射位错。若晶界中的“坎”或台阶本身是晶界位错的话，在外力作用下可发生分解反应而生成晶格位错。如对 FCC 晶体而言，其分解反应为：



对以上双晶体变形条件，可通过位错蚀坑及滑移迹线观察加以验证^[9]。按照Schmid定律，当应力刚刚超过单晶体的临界切应力时，应只有一组取向最有利的主滑移系统先开动。但在双晶体变形时，却必须有附加的滑移系统同时开动。实际上，造成这种附加滑移或协调滑移的原因乃系双晶体变形时，两晶体的弹性变形及塑性变形具有不匹配性所致。

二、双晶体弹性变形的不匹配性

产生这种变形不匹配的原因主要同晶体具有弹性各向异性有关。如果两晶体均为各向同性时，双晶体应协调变形。然而，实际金属晶体多为各向异性物质，构成双晶体时，便会引起以下两种弹性变形不匹配现象：

1. 弹性切应变不匹配

由弹性力学可知，在各向异性条件下，由轴向应力 σ_{zz} 在晶体中引起应变的表达式为：

$$\varepsilon_{ij} = S_{iijj} \sigma_{zz} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (4-14)$$

式中， S_{iijj} 为弹性柔度系数的四阶张量。可见，轴向应力在各向同性的晶体中仅引起正应变，而在各向异性晶体中还会引起切应变。于是，便可由双晶体中两晶体的切变方向不同，而引起弹性变形的不匹配现象，如图4-22(a)至(d)所示。显然，若双晶体变形时，两晶体可自由转动，不会在两晶体间引起应力，如图4-22(c)。但在试验机夹头的约束下，两晶体难于转动，便导致两晶体间有附加的切应力 σ_{23} 产生，如图4-22(d)。于是，便可由这种附加的切应力引起协调滑移出现。

2. 弹性正应变不匹配

引起双晶体变形时出现附加滑移的另一种可能性如图4-23所示。这是两晶体的取向不同时，可使轴向上的弹性柔度系数不同所致。在两晶体未焊合的情况下，会导致彼此的轴向应变 ε_{zz} 不同。于是，在焊合的情况下，便要引起在双晶体的晶界面上出现附加的切应力 σ_{23} ，同时还要引起附加的正应力 σ_{zz} 。已有工作^[10]表明，由弹性不匹配引起的附加应力在两晶体界面上最大，并随离开晶界面的距离增大呈指数关系下降，如图4-24和图4-25所示。图4-24为在均匀轴向压缩条件下，沿图4-23(b)所示双晶界面上所引起弹性不匹配应力在试样高度上的分布。图4-25表明，在图4-22(a)所示的双晶体受均匀剪切载荷条件下，附加的不匹配切应力 σ_{23} 随距双晶界面距离 x 增加呈指数递减。附加应力在数量上与外加应力有大体相同的数量级，故其影响较大，可在晶界附近引起滑移。显然，晶体的各向异性越大，双晶体的这种不匹配效应将越明显。

已有工作表明^[11]，Fe-3%Si双晶体（两晶体的主滑移系取向一致）在轴向压应变 <0.001 时，显示出两种不同的滑移线组态。一种是与应力轴呈45°角的比较粗大的干涉

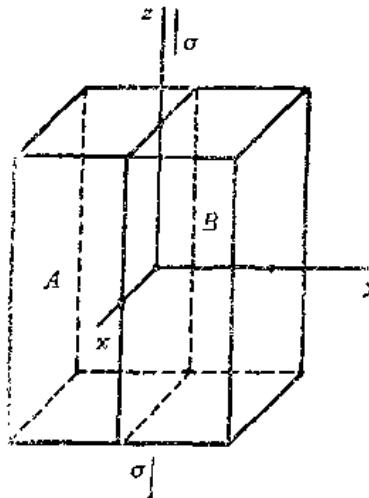


图4-21 双晶体示意图

滑移线，穿过双晶界面，相应的Schmid因子为0.5；另一种是在晶界附近出现的较细密

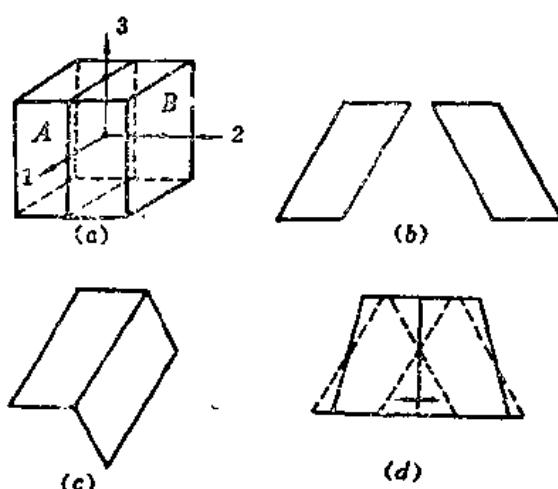


图4-22 轴向加载双晶体弹性切变不匹配示意图
(a) 双晶体 (b) 双晶体未焊合时两晶体独立剪切变形
(c) 双晶体无端部约束变形 (d) 双晶体受端部约束变形

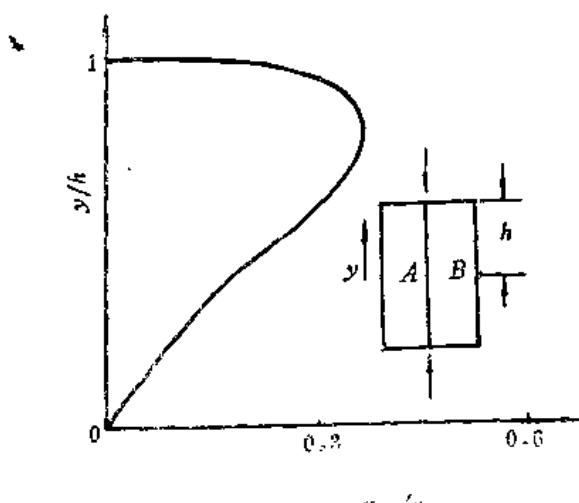


图4-24 在轴向应力 σ_a 的作用下，沿双晶体界面出现的弹性不匹配切应力 σ_{23} 在试样高度上分布（两晶体的杨氏模量比 E_A/E_B 为2；泊松系数 $\nu_A=\nu_B=0.33$ ）

力分量最大。并且为适应附加应力随离开双晶界面的距离呈指数下降的变化趋势，次滑移系统的取向需逐渐作适当调整，其结果便使次滑移线呈曲线状。

三、双晶体塑性变形的不匹配性

按照上述分析，只要双晶体中有四个独立的滑移系统开动时，晶界便可保持其连续性。这是从宏观上假设滑移是均匀切变的条件下所得出的结论。而实际上，从微观角度而言，滑移具有高度的不均匀性。滑移过程总是从某一晶粒先开始，并集中在滑移带中进行。当滑移带与晶界相遇时，形成位错塞积，产生应力集中。这是一种塑性变形的微观不匹配现象，使相邻两晶粒变形不一致。于是，在应力集中的作用下，便可能引起相邻晶粒中有滑移系统开动。如图4-26所示，具有对称取向的双晶体变形时，在A晶粒主滑

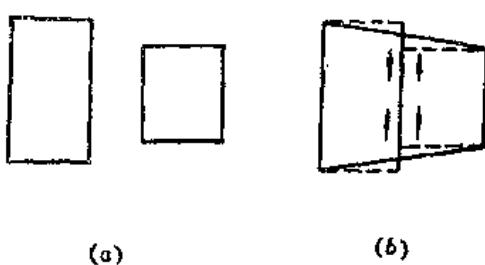


图4-23 轴向加载双晶体(同图4-22(a))的弹性正应变不匹配示意图

(a) 双晶体未焊合，两晶体独立产生轴向正应变
(b) 双晶体焊合后约束变形

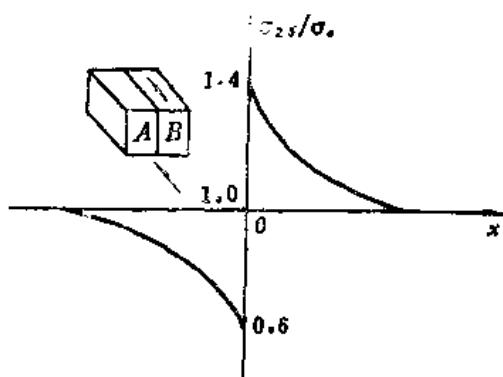


图4-25 在初应力 σ_a 作用下，双晶体变形时引起的附加切应力 σ_{23} 与距双晶界面距离 x 的关系(两晶体的切模量比为 $G_A/G_B=2.33$)

的滑移线，相应的Schmid因子为0.182。有趣的是，后一种次滑移线出现在主滑移线之前，而且呈曲线状。显然，这是由于双晶体弹性变形不匹配所致。若将由弹性不匹配所引起的附加应力分量与外加应力分量相加时，要以次滑移系统中的总切应

移带前缘应力集中的作用下，除可使B晶粒中的主滑移系统激活外，并有可能使晶界附近B晶粒中的次滑移系统开动，以致在晶界附近产生多滑移。一般而言，形成刃型位错塞积群时，易于有效地激活相邻晶粒中的次滑移；而形成螺型位错塞积群时，因领先位错易于交滑移，常使塞积群前端钝化，导致了对激活次滑移的有效程度降低。

§ 4-4 晶界强化作用

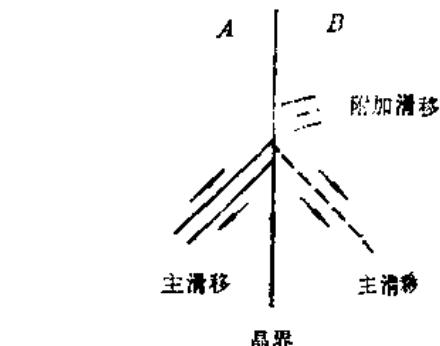


图4-28 对称性双晶体塑性变形引起附加滑移机制示意图

在上述晶界的位错模型与双晶体变形模型的基础上，可将晶界的强化作用归纳为以下直接作用和间接作用两个方面。

一、直接强化作用

这是着眼于晶界本身对晶内滑移所起的阻碍作用。如上所述，无论是小角晶界还是大角晶界都可以看成是位错的集合体，从而成为直接阻碍晶内位错运动的障碍。这种直接强化作用涉及到晶界与晶格滑移位错的交互作用，包括以下几个方面：

1. 晶界具有短程应力场，可阻碍晶格滑移位错进入或通过晶界，如图4-14(a)所示。这是一种由位错与晶界的应力场的交互作用所引起的一种局部强化作用。
2. 若晶格滑移位错穿过晶界时，其柏氏矢量发生变化，并形成晶界位错如图4-14(b)。除非所形成的晶界位错从滑移带与晶界相交处移开，否则会引起反向应力阻碍进一步滑移。很可能，在部分滑移传递时，会形成如图4-20(b)所示的沿晶界位错塞积组态。这时晶界是否流变便成为决定强化程度的重要因素。
3. 若晶格滑移位错进入晶界，可发生分解，形成晶界位错，或者与晶界位错产生位错反应。

二、间接强化作用

这是着眼于晶界的存在所引起的潜在强化效应，主要有以下两种：

1. 次滑移引起强化

由双晶体模型可见，晶界的存在可引起弹性应变不匹配和塑性应变不匹配两种效应，在晶界附近引起多滑移。由弹性应变不匹配效应在主滑移前引起次滑移时，可对随后主滑移构成位错加工硬化机制。这种先次滑移后主滑移的机制在晶界潜在强化中起着重要作用。塑性应变不匹配应力易于激发晶界位错源，使之放出位错而导致晶界附近区域快速加工硬化。

2. 晶粒间取向差引起强化

由于相邻晶粒取向不同，会引起两者主滑移系统取向因子出现差异。若在外力作用下，某一晶粒先开始滑移时，相邻晶粒内的主滑移系统难于同时开动。这说明晶界的存

在能使运动位错的晶体学特性受到破坏，从而引起强化效应。

上述分析表明，晶界可引起多种强化因素，涉及晶界本身及其附近区域位错结构的复杂变化，从而使晶界对金属力学性能的影响十分复杂，需作具体分析。譬如，已有工作⁽¹²⁾表明，当晶格位错穿过晶界时，其柏氏矢量的变化应正好等于产生的晶界位错的柏氏矢量。但根据最近 Mirura 和 Saeki⁽¹³⁾用不同夹角的对称倾侧晶界的〈100〉取向共轴双晶体所做试验表明，此晶界的形成能很小。所以，他们认为，一般多晶体流变应力的增加，主要来自晶界区产生的多滑移。按照这种说法，晶界对多晶体流变应力的贡献不是来自晶界本身，而是其存在的影响。图4-27给出不同晶粒大小的纯铝多晶拉伸曲线与三个特殊取向单晶拉伸曲线的比较。可以清楚看出，在面心立方结构金属中，晶界对形变的影响主要是促进多滑移的产生。

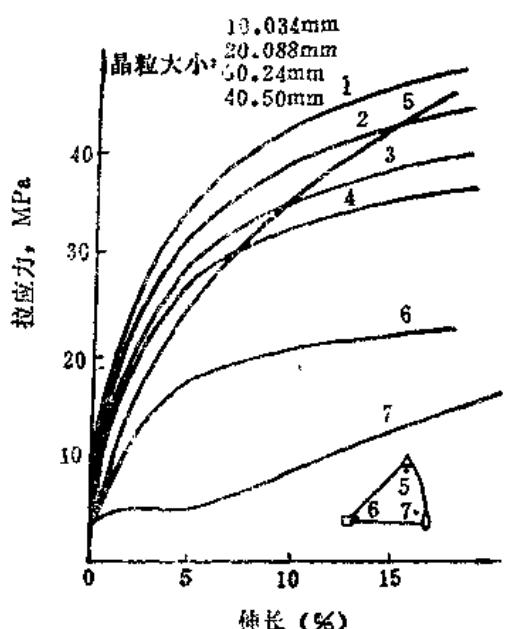


图4-27 纯铝多晶(曲线1-4)与单晶(5-7)
拉伸曲线比较

§ 4-5 晶界强化的数学表达

晶界强化对多晶体而言，主要表现为晶粒大小与流变应力的关系。多晶体中的任

一晶粒，按其取向和环境不同而必然有软硬差异。即使在同一晶粒内，由于离晶界远近不同也会在形变阻力上有所反应，如图4-28所示。一般而言，细晶试样不但强度高，而且韧性也好。所以细晶强化成为金属材料的一种重要强化方式，获得了广泛的应用。

在大量试验基础上，建立了晶粒大小与金属强度的定量关系的一般表达式为

$$\sigma_f = \sigma_0 + kd^{-n} \quad (4-15)$$

式中， σ_f 为流变应力， σ_0 为晶格摩擦力， d 为晶粒直径， k 为常数，指数 n 常取 $\frac{1}{2}$ 。这就是有名的 Hall-Petch 公式，是由 Hall⁽¹⁴⁾ 和 Petch⁽¹⁵⁾ 两人最先在软钢中针对屈服强度建立起来的，并且后来被证明可广泛应用于各种体心立方、面心立方及六方结构金属和合金。大量试验结果⁽¹⁶⁾⁻⁽¹⁸⁾已证明，此关系式还可适用于整个流变范围直至断裂，仅常数 σ_0 和 k 有所不同而已。

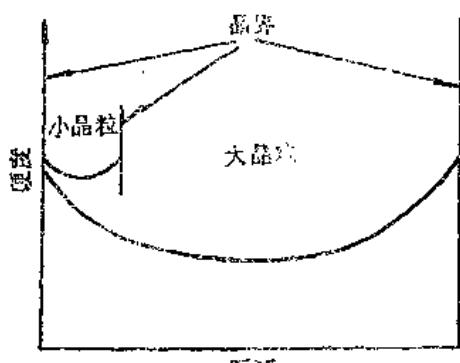


图4-28 晶内硬度分布示意图

Hall-Petch公式是一个很好的经验公式，可以从不同的物理模型出发加以推导。常见的模型有以下几种：

1. 位错塞积模型^[1,2]

如图4-29所示，外加切应力 τ 较小时，由于晶界的阻碍作用，会使晶粒1内由位错源 S_1 放出的位错形成位错塞积。由(3-16)式可知，位错塞积可在晶粒2内距其 r 远处产生较大的切应力，其值在 $r \ll d/2$ 时可写为 $(\tau - \tau_0)\sqrt{d/2r}$ 。此处 τ_0 为位错在晶内运动所受阻力， d 为晶粒直径。若设 τ^* 为激活位于晶粒2中 r 处的位错源所需的临界切应力，则晶粒2的屈服条件可写为：

$$(\tau_y - \tau_0)\sqrt{\frac{d}{2r}} + \tau_y = \tau^* \quad (4-16)$$

即

$$\tau_y = \frac{\tau^* + \tau_0 \sqrt{\frac{d}{2r}}}{1 + \sqrt{\frac{d}{2r}}} \quad (4-17)$$

当 $d \gg r$ 时，可将上式简化为

$$\tau_y = \tau_0 + \tau^* \sqrt{\frac{2r}{d}} \quad (4-18)$$

由此可得

$$\tau_y = \tau_0 + k' d^{-\frac{1}{2}} \quad (4-19)$$

若将拉伸屈服强度 σ_y 以 $m\tau_y$ 表达，则

$$\sigma_y = m(\tau_0 + k' d^{-\frac{1}{2}}) \quad (4-20)$$

即

$$\sigma_y = \sigma_0 + kd^{-\frac{1}{2}} \quad (4-21)$$

在(4-20)式中， m 为一同有效滑移系数量有关的取向因子。有效滑移系越多， m 值越小。在滑移系数量任意多时，取 $m=2$ ；对有12个滑移系的立方晶体取 $m=3.1$ 。

2. 晶界“坎”模型^[2,3]

采用上述模型推导Hall-Petch公式的前提是承认在晶体中存在位错塞积。然而，这一点至少对 α -Fe来说尚有争议。至今在 α -Fe中，只在少数情况下才观察到晶界前的不规则的位错塞积群^[2,3]，而多

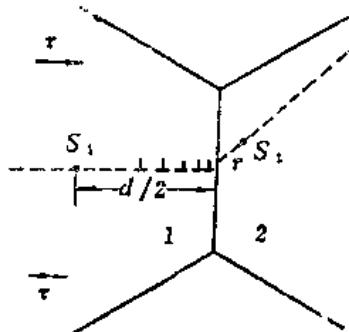


图4-29 位错塞积引起相邻晶粒中位错源开动示意图

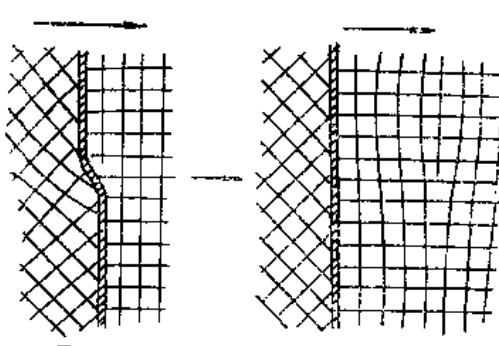


图4-30 晶界中的“坎”发射位错示意图

数情况为不规则的位错缠结^[22]。

为了克服这一困难, James Li^[20]提出一种不需要位错塞积的模型。他认为晶界上的“坎”可以当作位错的“施主”(Donor)而放出位错, 其机制示于图4-30。由此可将流变应力视为位错运动克服林位错的阻力, 并进而求得如下的Hall-Petch公式:

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha G b \left(\frac{8S}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} d^{-\frac{1}{2}} \quad (4-22)$$

式中, S 为“坎”的密度(单位长度晶界上的“坎”的个数), α 为与位错分布有关的实验待定常数(约为0.4)。

3. 晶界区硬化模型^[23]

实际上, 晶界“坎”模型是着眼于晶界发射位错而构成林位错加工硬化机制, 故可在(3-31)式的基础上来推导(4-15)式。若仅考虑晶界附近区域的次滑移和加工硬化效应, 还可以对Hall-Petch公式作如下推导:

设想在流变条件下, 晶界的影响是在晶粒内造成一定宽度($b/2$)的硬化区, 如图4-31所示。晶粒的强度 σ 要由晶界附近硬区强度 σ_H 和心部软区强度 σ_S 综合决定, 即

$$d^2 \sigma = a^2 \sigma_S + (d^2 - a^2) \sigma_H \quad (4-23)$$

又因

$$a^2 = (d - b)^2 = d^2 - 2db + b^2$$

若略去 b^2 , 则将上式代入(4-23)式整理后得:

$$\sigma = \sigma_S + 2(\sigma_H - \sigma_S) \cdot \frac{b}{d} \quad (4-24)$$

因式中 σ_S 和 σ_H 均为与材料有关的常数, 故可改用下式表达

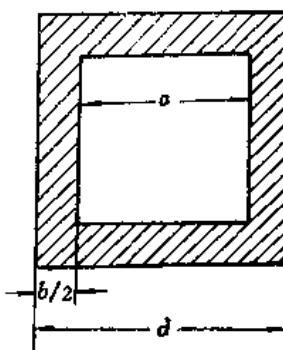


图4-31 晶界区硬化模型示意图

$$\sigma = A + Bd^{-1} \quad (4-25)$$

因(4-25)式和(4-21)式的主要差别是指数不同, 故对Hall-Petch公式的一般表达式为(4-15)。指数 n 可介于0.45与1.1之间, 即 $0.45 < n < 1.1$ 。

可见Hall-Petch公式虽是一个可靠的经验公式, 可从不同的物理模型加以推导, 但确切的物理模型尚难于最后确定。欲利用Hall-Petch公式得出屈服、流变或断裂的微观结论时, 需要谨慎对待。

§ 4-6 亚晶界及相界的强化效应

一、亚晶界强化

亚晶界一般均为小角晶界, 其对流变应力的影响也可用Hall-Petch公式加以描述, 即

$$\sigma_f = \sigma_0 + k' d_s^{-n'} \quad (4-26)$$

- [2] P.H.Pumphrey, Scripta Met., 6(1972),107; 7(1963),893.
- [3] J.C.M. Li, Surface Sci., 31(1972),12.
- [4] M.J.Marcinkowski, Acta Cryst., A33(1977),865.
- [5] M.F.Ashby. and F.Spaepen, Scripta Met., 12(1978),193.
- [6] R.C. Gifkins and K.U.Snowden, Trans.AIME,239(1967),910.
- [7] J.Washburn and E.R. Parker, Trans. AIME, 194(1952),1076.
- [8] J.P.Hirth, Metall.Trans., 3(1972),12,3047.
- [9] R.E.Hook and J.P.Hirth, Trans.JIM,9(1968),Supplement,778.
- [10] T.W.Chou and J.P.Hirth, J.Comp.Mater.,4(1970),102.
- [11] R.E.Hook and J.P.Hirth, Acta Met.,15(1967),535.
- [12] J.T.Evans,Scripta Met.,8(1974),1099.
- [13] S.Mirura and Y.Saeki, Acta Met., 26(1978),93.
- [14] E.O.Hall, Proc.Phys.Soc.,64B(1951),747.
- [15] N.J.Petch, J.Iron Steel Inst., 174(1953),25.
- [16] N.J.Petch,Phil.Mag.,1(1956),186.
- [17] J.Heslop and N.J.Petch,Phil.Mag.,3(1958).1128
- [18] J.R.Low Jr.,in Relation of properties to Microstructure, (1954), 163.
- [19] A.H.Cottrell,Trans.AIME,212(1958),192.
- [20] J.C.M.Li,Trans.AIME,227(1963),239.
- [21] D.G.Brandon and J.Nutting,J.Iron Steel Inst.,196(1960),160.
- [22] D.G.Brandon and J.Nutting,Acta Met.,7(1959),101.
- [23] 同[8],3059.
- [24] C.M.Young and O.D.Sherby,J.Iron Steel Inst.,211(1973),640.
- [25] T.Gladman,I.D.Mclvor, and F.B.Pickering, J. Iron Steel Inst., 210(1972),916.

第五章 固溶强化机制

固溶强化是金属材料的重要强化方式之一，金属常通过合金化（其中一个重要原因是实现固溶强化）来获得足够高的强度。本章内容旨在建立固溶强化模型，其关键在于描述溶质原子的行为。这涉及溶质原子与位错的多种交互作用，其中常涉及到的是溶质原子与位错的弹性交互作用，故本章以讨论错配球模型为主，然后适当介绍其它有关的固溶强化模型。

§ 5-1 错配球模型

若将晶体中的原子视为刚球，当置换式溶质原子置换溶剂原子，或当间隙原子挤入点阵间隙时，便会因与“孔洞”的大小或形状不合适而构成错配球模型，如图5-1所示。在此我们假设“球”与基体均为弹性连续介质。可见，因球大孔小 ($r_s < r_b$)，欲组成错配球时，需使孔体积膨胀，体积变化量为 Δv ；而球的体积缩小，体积变化量为 δv 。经协调变形的结果，将分别在基体及球内引起弹性的应力-应变场，下面分别加以讨论。

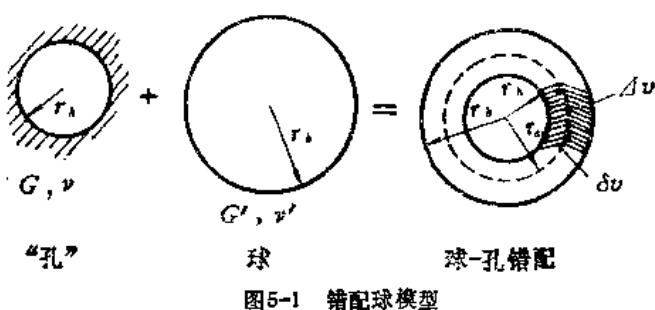


图5-1 错配球模型

一、无限大基体中的应力-应变场

1. 位移场

如图5-2所示，球-孔组合后，孔要膨胀，会使孔的错配应变具有球对称性。取极坐标时，仅有径向位移 ($u_r \neq 0$)，而无切向位移 ($u_\theta = u_\phi = 0$)。在弹性条件下，基体中各点的径向位移都与相应的体积变化 δv 有关，即 $u_r \propto \delta v$ 。因 $\delta v = 4\pi r^2 \delta r$ ，则

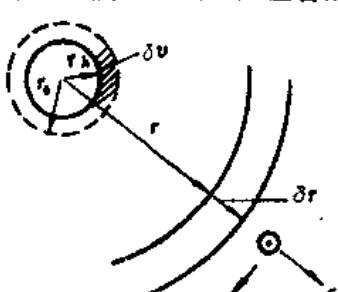


图5-2 无限大基体中因错配球效应引起的径向位移

$$u_r = \delta r = \frac{\delta v}{4\pi r^2} \quad (5-1)$$

2. 应变场

根据弹性力学分析，可由球对称的位移场求出相应的应变场如下：

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{rr} &= \frac{\partial u_r}{\partial r} = -\frac{\delta v}{2\pi r^3} \\ \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} &= \frac{u_r}{r} = -\frac{\delta v}{4\pi r^3} \\ \varepsilon_{r\theta} = \varepsilon_{r\varphi} = \varepsilon_{\theta\varphi} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (5-2)$$

由上式可见，错配球在无限大基体中引起的应变场的特点是，只有正应变而无切应变，而且径向正应变与切向正应变有如下关系：

$$\varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = -\frac{1}{2}\varepsilon_{rr} \quad (5-3)$$

于是，相应的体积应变也等于零，即

$$\varepsilon = \frac{\delta v}{v_0} = \varepsilon_{rr} + \varepsilon_{\theta\theta} + \varepsilon_{\varphi\varphi} = 0 \quad (5-4)$$

式中， v_0 为晶体的体积。

3. 应力场

在已知三个主应变的条件下，可由以下虎克定律求出因错配球效应而在基体中引起的应力场：

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= (2G + \lambda)\varepsilon_{rr} + \lambda\varepsilon_{\theta\theta} + \lambda\varepsilon_{\varphi\varphi} \\ &= 2G\varepsilon_{rr} + \lambda(\varepsilon_{rr} + \varepsilon_{\theta\theta} + \varepsilon_{\varphi\varphi}) \\ &= 2G\varepsilon_{rr} \end{aligned} \quad (5-5)$$

式中， $\lambda = 2\nu G / (1 - 2\nu)$ ，为拉梅系数。将(5-2)式中 ε_{rr} 的表达式代入(5-5)式，得

$$\sigma_{rr} = -\frac{G\delta v}{\pi r^3} \quad (5-6)$$

又按(5-3)式可知， $\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = -\frac{1}{2}\sigma_{rr}$ ，故

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = \frac{G\delta v}{2\pi r^3} \quad (5-7)$$

于是，又可进而求出平均正应力或水静压力 p ：

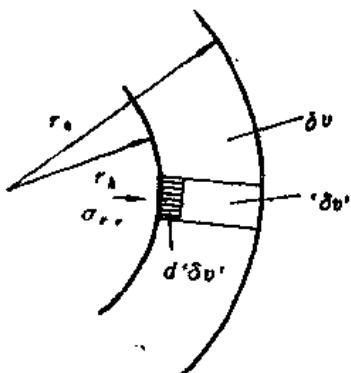


图5-3 计算错配球在无限大基体中引起的应变能时单元体的取法

$$-p = \frac{\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta} + \sigma_{\varphi\varphi}}{3} = 0$$

可见，由错配球在无限大基体中不引起内压力场。

4. 应变能

由错配球在无限大基体中所引起的应变能在数值上应等于径向错配力在孔表面上所作的功。如图5-3所示，在孔表面取一个小单元体，其底面积为单位面积，体积为 $d'\delta v'$ 。故作用在孔表面上的径向错配力 $\sigma'_{rr(r=r_0)}$ ，应为

$$\sigma'_{rr(r=r_0)} = \frac{G\delta v'}{\pi r_0^3} \quad (5-8)$$

而在此错配力的作用下使孔表面移动距离为 $d\delta v$ ，则由错配球在无限大基体中所引起的总应变能为

$$W_u = \int_0^{d\delta v} \left(\frac{G(\delta v)}{\pi r_0^3} \right) d(\delta v) = \frac{G(\delta v)^2}{2\pi r_0^3}$$

若同 (5-6) 式相比较，可得

$$W_u = -\frac{\sigma_{rr}(r=r_0)\delta v}{2} \quad (5-9)$$

二、球内的应力-应变场

形成错配球时，球受水静压力作用产生均匀体积收缩。其径向位移与半径成正比，即

$$u_r = \alpha r \quad (5-10)$$

式中， α 为一系数。又因

$$\epsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r} = \alpha$$

及

$$\epsilon_{\theta\theta} = \epsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u_r}{r} = \alpha$$

所以，球内应变场的特点是三个主应变分量相等，即

$$\epsilon_{rr} = \epsilon_{\theta\theta} = \epsilon_{\varphi\varphi} = \frac{e}{3} = \frac{1}{3} \frac{\Delta v}{v_0} \quad (5-11)$$

式中， e 为球的体积应变， v_0 为原球的体积， Δv 为球的体积收缩量。

由 (5-11) 式可知，球内应力场的特点也是三个主应力分量相等，即

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} \quad (5-12)$$

而且，由于这三个主应力均为压应力，故在数值上等于球内水静压力 p_i ，即

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = p_i = B'e = B' \frac{\Delta v}{v_0} \quad (5-13)$$

式中， B' 为球的体弹性模量，可由球的切变模量 G' 和泊松系数 ν' 给出：

$$B' = \frac{2G'(1+\nu')}{3(1-2\nu')} \quad (5-14)$$

显然，在球-孔界面上球对孔表面的压应力 σ_{rr}^* ，与孔表面对球的压应力 σ_{rr}^b ，数值上相等，而方向相反，即

$$\sigma_{rr}^b(r=r_0) = -\sigma_{rr}^*(r=r_0) \quad (5-15)$$

所以，由 (5-13) 及 (5-6) 式得

$$p_i = \sigma_{rr}^b(r=r_0) = -\sigma_{rr}^*(r=r_0) = \frac{G\delta v}{\pi r_0^3} \quad (5-16)$$

由于错配效应使球体积收缩 Δv 时，所需的应变能等于内应力场所作的功，即

$$W_b = p_b \Delta v \quad (5-17)$$

将(5-16)式代入(5-17)式便得

$$W_b = \frac{G \delta v}{\pi r_0^3} \Delta v = -\sigma_{rr, (r=r_0)}^* \Delta v \quad (5-18)$$

总体而言，由错配球所涉及的应变能 W_T 应由(5-9)和(5-18)式相加而得

$$W_T = -\frac{1}{2} \sigma_{rr, (r=r_0)}^* (\delta v + 2\Delta v) \quad (5-19)$$

上述理论分析结果除可用于分析溶质原子与基体金属的弹性交互作用外，还可描述异相质点的行为，即可把异相质点的影响视为错配球加以分析。在异相质点内形成均匀的应力-应变场，而在周围基体中应力和应变场都具有短程性质，即 $\sigma \propto 1/r^3$ 。故只需考虑异相质点与周围附近基体的弹性交互作用，可忽略其对远处基体的影响。

三、在有限大基体中的错配球

实际金属材料中各晶粒尺寸有限，可把每个晶粒看成是有限大的错配球基体。同上述无限大基体的情况相比，有限大基体的特点是有自由表面。相应的边界条件为在自由表面上无应力作用。若设晶粒半径为 R 时，应在 $r=R$ 处，满足 $\sigma_{rr}=\sigma_{r\theta}=\sigma_{r\phi}=0$ 。

如前所述，错配球不会引起切应力场，故对 $\sigma_{r\theta}=\sigma_{r\phi}=0$ 自然满足。但是，如图

5-4所示，在有错配球存在时，会在 $r=R$ 处引起正应力，即 $\sigma_{rr, (r=R)}^* \neq 0$ ，并由(5-6)式求得

$$\sigma_{rr, (r=R)}^* = -\frac{G \delta v}{\pi R^3} \quad (5-20)$$

可见，在这种有限大基体中存在水静压力场，其特点与前述球内的应力场相类似。故为了满足自由表面上的边界条件，应在表面处施加反向的水静拉应力 σ_{rr}^* 。相应地，还会在基体内引起附加的位移、应变及应力等，统称为像场。由于所附加的像张应力场是水静型的，要引起径向的像位移 u_r^* ，并正比于半径 r ，即

$$u_r^* = \alpha r \quad (5-21)$$

相应地存在三个像正应变为

$$\varepsilon_{rr}^* = \frac{\partial u_r^*}{\partial r} = \alpha$$

$$\varepsilon_{\theta\theta}^* = \varepsilon_{\phi\phi}^* = \frac{u_r^*}{r} = \alpha \quad (5-22)$$

故在有限大的基体中，由边界条件制约而导致的像应变场的特点是三个正应变分量相等，即

$$\varepsilon_{rr}'' = \varepsilon_{\theta\theta}'' = \varepsilon_{\varphi\varphi}'' \quad (5-23)$$

于是，像应变场的体积应变为：

$$e'' = \varepsilon_{rr}'' + \varepsilon_{\theta\theta}'' + \varepsilon_{\varphi\varphi}'' = 3\alpha \quad (5-24)$$

或者，

$$\varepsilon_{rr}'' = \varepsilon_{\theta\theta}'' = \varepsilon_{\varphi\varphi}'' = \frac{e''}{3} \quad (5-25)$$

相应地，在有限大基体中，错配球的像应力场为：

$$\sigma_{rr}'' = \sigma_{\theta\theta}'' = \sigma_{\varphi\varphi}'' = (2G + \lambda)\varepsilon_{rr}'' + \lambda(\varepsilon_{\theta\theta}'' + \varepsilon_{\varphi\varphi}'') \quad (5-26)$$

将 (5-25) 式代入上式遂得

$$\sigma_{rr}'' = \sigma_{\theta\theta}'' = \sigma_{\varphi\varphi}'' = \left(\frac{2G + 3\lambda}{3} \right) e'' \quad (5-26)$$

再将 (5-24) 式代入，可得

$$\sigma_{rr}'' = \sigma_{\theta\theta}'' = \sigma_{\varphi\varphi}'' = (2G + 3\lambda)\alpha \quad (5-27)$$

又因在 $r = R$ 处， $\sigma_{rr}'' = -\sigma_{rr}$ ，联立 (5-20) 和 (5-27) 两式，遂得

$$\alpha = \frac{G \delta v}{\pi R^3} \cdot \frac{1}{2G + 3\lambda} \quad (5-28)$$

把 (5-28) 式代入 (5-27) 式，便可求出

$$\sigma_{rr}'' = \sigma_{\theta\theta}'' = \sigma_{\varphi\varphi}'' = \frac{G \delta v}{\pi R^3} \quad (5-29)$$

可见，在有限大基体中存在错配球时，会引起均匀分布的像应力场。这样一来，由错配珠在有限大基体中所引起的总应力场为两部分之和。一为由球-孔错配引起的应力场，如 (5-6) 及 (5-7) 式所示；二为由边界条件引起的像应力场，如 (5-29) 式所示，即

$$\sigma_{rr} = -\frac{G \delta v}{\pi r^3} + \frac{G \delta v}{\pi R^3} \quad (5-30)$$

及

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = \frac{G \delta v}{2\pi r^3} + \frac{G \delta v}{\pi R^3} \quad (5-31)$$

由此两式可见，与无限大基体中的情况不同，在有限大基体中，由错配效应及自由表面条件约束的共同作用，使平均正应力不等于零。因而，存在附加的水静压力场，即

$$p_{ext} = -\frac{\sum_{i=1}^3 \sigma_{ii}}{3} = -\frac{G \delta v}{\pi R^3} \quad (5-32)$$

对有限大基体中总的径向位移 u_r ，也应为由错配效应与边界条件两部分共同作用决定，即 $u_r = u'_r + u''_r$ 。其中 u'_r 可由 (5-1) 式求得， u''_r 由 (5-21) 和 (5-28) 两式求得，则

$$u_r = \frac{\delta v}{4\pi r^2} + \frac{G \delta v}{\pi R^3} \cdot \frac{r}{2G + 3\lambda} \quad (5-33)$$

$$\Delta v' = \delta v \left(1 + \frac{4G}{3B'} \right) \quad (5-43)$$

或者

$$\Delta v' = \Delta v \left(1 + \frac{3B'}{4G} \right) \quad (5-44)$$

所以，在错配体积 $\Delta v'$ 已知时，便可由(5-43)式求出球孔错配时，孔的体积变化为：

$$\delta v = \frac{\Delta v'}{1 + \frac{4G}{3B'}} \quad (5-45)$$

同时，可由(5-44)式求得球的体积变化为：

$$\Delta v = \frac{\Delta v'}{1 + \frac{3B'}{4G}} \quad (5-46)$$

进而，又可将(5-45)式代入(5-35)式，就可求得在有限大介质中，由球孔错配引起的内场和像场造成的外部体积变化为：

$$\delta V = \Delta v' \frac{\frac{1}{1 + \frac{4G}{3B'}}}{\frac{1}{1 + \frac{4G}{3B'}}} \quad (5-47)$$

五、错配球模型的适用性

上述分析表明，在已知球和基体的弹性常数，以及求出球和孔的错配体积 $\Delta v'$ 的条件下，便可分别求出 δv 、 Δv 以及 δV ，并进而求出球孔错配引起的位移场、应变场、应力场以及弹性交互作用能等。这便是错配球模型所要回答的理论问题，可用于讨论固溶强化机制。

由上述(5-45)和(5-46)两式可以推断以下三种情况：

1. 当 $B' = \infty$ 时， $\delta v = \Delta v'$ ，而 $\Delta v = 0$ 。这说明，对于刚性球而言，球孔错配后，球不变形，变形只集中在基体内。
2. 当 $B' = 0$ 时， $\delta v = 0$ ，而 $\Delta v = \Delta v'$ 。这是对于“软”球而言，基体不变形，体积变化主要集中在球内。
3. 当 $G = G'$ 及 $\nu = \frac{1}{3}$ 时，由(5-14)式可得

$$\frac{4G}{3B'} = \frac{1}{2} \quad (5-48)$$

遂得 $\delta v = 2\Delta v'/3$ 和 $\Delta v = \Delta v'/3$ 。这种情况下，较多的体积变化集中在基体中。

应该指出，上述错配球模型只是一种简化。实际上，基体（如晶粒）的形状不一定呈球形，而且，固溶体中溶质原子数量很多。故为简化起见，需将晶体视为球体，并将每个溶质原子看作错配球引起线弹性范围内的应力-应变场，则由 N 个溶质原子引起的

总体积变化便为 N 个错配球效应的叠加。

另外，在上述模型中假定溶质原子也呈球状，在基体中引起球形的对称性畸变。但实际上，溶质原子有置换式与间隙式原子之分。置换式溶质原子占据固溶体中点阵点，可给出球形的对称性畸变场；间隙式溶质原子占据着点阵间隙位置，有可能引起非球对称性畸变场。例如，碳原子在 α -Fe 中固溶时，会引起非球对称性畸变。为简化起见，可用三对相等并呈正交分布的点力组来表征球形对称畸变的错配球所引起的应力场，而用三对不相等的正交点力组来表征由非球对称性畸变的错配球所引起的应力场，如图5-6所示。下面将会看到，对错配球效应的这种抽象对讨论问题会带来很大的方便之处。

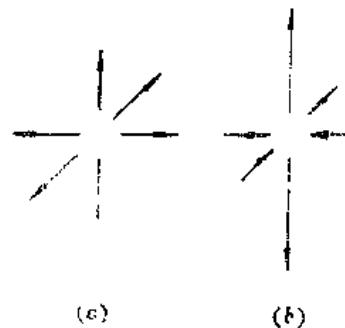


图5-6 用点力组表征错配球应力场示意图
(a)球形对称 (b)非球形对称

§ 5-2 置换式溶质原子与位错的弹性交互作用

一、置换式溶质原子的错配球效应

置换式溶质原子取代溶剂原子而占据点阵的结点时，可由其与溶剂原子在尺寸上的差异而引起错配效应。显然，这种错配效应的特点是使应力-应变场具有球形对称性，可由三对对称的正交点力组加以表征，如图5-6(a)所示。因此，可以借助于错配球模型来表达置换式溶质原子与位错的弹性交互作用。

在描述置换式溶质原子的错配效应时，常涉及以下两个参数：

1) 错配体积，即

$$\Delta v' = v_{\text{溶质}} - v_{\text{溶剂}} \quad (5-49)$$

2) 错配度，即

$$\beta = \frac{1}{a_0} \cdot \frac{da_0}{dc} \quad (5-50)$$

式中， a_0 为溶剂的点阵常数； c 为溶质原子浓度。若令 N 为溶质原子数， V 为固溶体的体积，可有

$$c = \frac{N}{V} \quad (5-51)$$

则

$$dc = \frac{dN}{V}$$

将上式代入(5-50)式中得到：

$$\beta = \frac{V}{a_0} \cdot \frac{da_0}{dN} \quad (5-52)$$

又 $da_0/a_0 = de$, 即表示由溶质原子引起的点阵畸变的大小, 所以,

$$\beta = V \cdot \frac{de}{dN} \quad (5-53)$$

因在球形对称畸变条件下, 可由三对相等的呈正交分布的点力组表征置换式溶质原子的错配效应, 便有

$$e_{11} = e_{22} = e_{33} = \frac{e}{3} \quad (5-54)$$

式中, e 为体积应变。将 (5-54) 式微分得

$$de = \frac{d\epsilon}{3} \quad (5-55)$$

由 (5-55) 和 (5-53) 两式可得:

$$\beta = \frac{V}{3} \frac{de}{dN} \quad (5-56)$$

式中, $de = dV/V$ 。取 $dN = 1$ 及 $dV = \delta V$, 故又可将 (5-56) 式写成

$$\beta = \frac{1}{3} \delta V \quad (5-57)$$

由 (5-47) 式又可把上式表达为

$$\beta = \frac{\Delta v'}{3} \frac{\left(1 + \frac{4G}{3B}\right)}{\left(1 + \frac{4G}{3B'}\right)} \quad (5-58)$$

这是将溶质原子看成为一个错配球所得出的结果。虽然对于一个溶质原子而言, B' 已失去确切的物理意义, 但错配球模型仍不失为用以描述溶质原子的弹性性质的有效方式, 是一种很方便的唯象模型。

二、溶质原子间的弹性交互作用

从错配球模型出发, 可以把一个置换式溶质原子看成一个错配球, 再把另一个溶质原子也看成一个错配球, 然后来讨论两者之间的弹性交互作用。如图 5-7 所示, 由 A 原子与基体的错配球效应, 可给出一个外部体积变化, 即

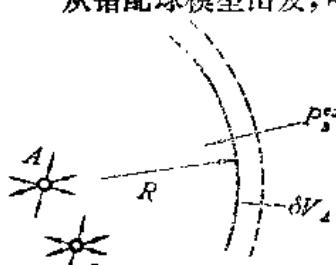


图 5-7 固溶体中置换式溶质原
子间弹性交互作用示意图

$$\delta V_A = \delta v_A \left(1 + \frac{4G}{3B}\right) \quad (5-59)$$

式中, δv_A 为由 A 原子在周围基体中引起的体积变化, G 和 B 分别为基体的切变模量与体弹性模量。然后, 将原子 B 也视为一个错配球, 其应力场在固溶体晶体表面引起一个外压力, 即

$$p_B^{ext} = -\frac{G \delta v_B}{\pi R^3} \quad (5-60)$$

式中， R 为固溶体晶体的半径。

于是， A 、 B 原子之间便产生弹性交互作用，其交互作用能为：

$$W_{int} = p_B^{ext} \cdot \delta V_A = -\frac{G \delta v_B}{\pi R^3} \cdot \delta V_A \quad (5-61)$$

由上式可见，置换式溶质原子之间的弹性交互作用能与两原子间的距离 r 无关。因而，置换式溶质原子之间无阻态作用力，即

$$F_{int} = -\frac{\partial W_{int}}{\partial r} = 0 \quad (5-62)$$

所以，置换式溶质原子之间交互作用的特点是有交互作用能而无交互作用力。其结果是使在固溶体中，置换式溶质原子在分布上有偏聚和混乱分布两种趋势，即不会充分偏聚也不会完全均匀分布。

三、溶质原子与刃型位错间的弹性交互作用

对这种弹性交互作用也可用错配球模型加以分析。如图5-8所示，可先将置换式溶质原子 A 看成一个错配球，在固溶体晶体表面上给出一个外部体积变化 δV_A ，再将附近的刃型位错 B 视为应力源，给出下面的内压力场：

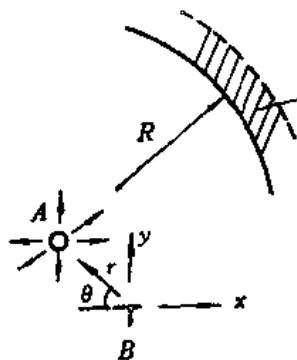


图5-8 固溶体中置换式溶质原子与刃型位错的弹性交
互作用

根据(1-26)式，又可把(5-64)式表达为：

$$p_B = \frac{2(1+\nu)}{3(x^2+y^2)^2} D y (x^2+y^2) \quad (5-65)$$

式中， $D = G b / 2\pi(1-\nu)$ 。如图5-8所示，若采用圆柱坐标系时，(5-65)式可写作

$$p_B = \frac{Gb(1+\nu)}{3\pi(1-\nu)} \frac{\sin\theta}{r} \quad (5-66)$$

于是，由置换式溶质原子 A 与刃型位错 B 的弹性交互作用能为

$$W_{int} = p_B \delta V_A = A \frac{\sin\theta}{r} \quad (5-67)$$

式中， $A = Gb(1+\nu) \cdot \delta V_A / [3\pi(1-\nu)]$ 。可见，置换式溶质原子与刃型位错间的弹性交互作用能在数值上与间距 r 成反比。而且，随着置换式溶质原子在刃型位错周围位置不同，会引起弹性交互作用能的符号发生变化。当 W_{int} 为负值时，溶质原子与刃型位

错相互吸引，溶质原子就要向其与刃型位错相吸的区域偏聚，从而形成Cottrell气氛。

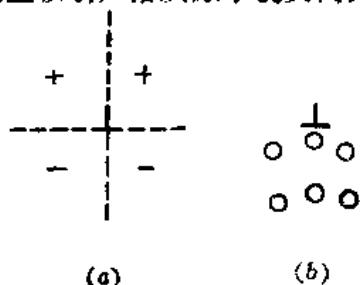


图5-9 (a) 较大的置换式溶质原子与刃型位错的弹性交互作用能符号的改变及(b) Cottrell 气氛的形成

如图5-9所示，当溶质原子尺寸大于溶剂原子尺寸时， δV_A 及 A 为正值，易从(5-67)式中得出 W_{ext} 在 $\pi < \theta < 2\pi$ 范围内取负值。这说明，尺寸较大的置换式溶质原子趋于分布在刃型位错的受拉区并使体系能量降低，形成Cottrell气氛。

关于溶质原子在位错周围的浓度分布，通常可用Maxwell-Boltzmann分布加以讨论。如果溶质原子的平均浓度为 c_0 ，则刃型位错周围溶质原子的浓度 c 可由下式表达：

$$c = c_0 \exp\left(-\frac{W_{ext}}{kT}\right) \quad (5-68)$$

式中， k 为Boltzmann常数， W_{ext} 为溶质原子与刃型位错的交互作用能。据此可知，Cottrell气氛具有如下特点：

1) 只有当 W_{ext} 为负值时，才能使位错周围溶质原子的浓度大于 c_0 而形成Cottrell气氛。所以，同溶剂原子尺寸相比，较大的置换式溶质原子趋于分布在刃型位错的受拉区域；而较小的置换式溶质原子趋于分布在刃型位错的受压区域。如对正刃型位错而言，当 $\theta = 3\pi/2$ 时，较大的置换式溶质原子的 W_{ext} 在绝对值上达到最大，即优先集中在位错线下方；而当 $\theta = \pi/2$ 时，较小的置换式溶质原子的 W_{ext} 在绝对值上达到最大，即优先集中在位错线上方。

2) 因 W_{ext} 在数值上与距离 r 成反比，使形成Cottrell气氛的置换式溶质原子距位错线越近，其浓度就越高。极限情况是由溶质原子平行于位错线形成原子列，使Cottrell气氛达到饱和状态(即 $c = 1$)。所以，可把Cottrell气氛看成是由处于饱和状态的浓气氛与外围呈Maxwell-Boltzmann分布的淡气氛两部分所组成。

3) Cottrell浓气氛存在临界温度，称为露点，可由下式求得：

$$T_c = \frac{|W_{ext}|}{k \ln \frac{1}{c_0}} \quad (5-69)$$

此式是令 $c = 1$ ，由(5-68)式所得。只有当 $T < T_c$ 时，才能形成浓气氛。否则，温度太高时，会由于热起伏使溶质原子的浓气氛驱散，而使溶质原子呈Maxwell-Boltzmann分布。

Cottrell气氛能够阻碍位错运动。这是因为通过溶质原子与刃型位错的弹性交互作用，能够松弛刃型位错的水静压力场而降低系统的弹性畸变能，使溶质原子在位错附近偏聚。一旦在外力作用下使位错运动时，必然改变溶质原子的平衡位置，导致系统的弹性畸变能升高。这种系统能量改变的结果便表现为溶质原子对位错的滑移产生了阻力或钉扎。计算表明，使位错从Cottrell气氛中脱钉所需最小的切应力为

$$\sigma_c = \frac{A}{b^2 r_0^2} \quad (5-70)$$

式中， A 为常数， b 为刃型位错的柏氏矢量， r_0 为刃位错的切断半径。在一定条件下，位错

也可能拖着Cottrell气氛运动，以致使Cottrell气氛表现一定的拖曳作用。显然，当温度较高，以至于溶质原子的扩散速率与位错运动速率相接近时，才有这种可能性。

四、溶质原子与螺型位错间的弹性交互作用

可用上述类似的方法分析置换式溶质原子与螺型位错的弹性交互作用。但对螺型位错而言，只有两个切应力分量而无正应力分量，不产生水静压力场，即 $p_s = -(\sigma_{rr} + \sigma_{zz} + \sigma_{yy})/3 = 0$ 。故虽然可由置换式溶质原子给出错配球效应，产生外部体积变化 δV_A ，但

$$W_{ext} = p_s \cdot \delta V_A = 0 \quad (5-71)$$

因此，一般认为，置换式溶质原子与螺型位错之间没有弹性交互作用。

然而，在一定条件下，置换式溶质原子与螺型位错间也可能产生次级的弹性交互作用。例如：

1) 若螺型位错扩展时，如§2-6所述，两个部分位错的柏氏矢量均与位错线成30°角，故其垂直分量便构成刃型的部分位错，而与置换式溶质原子产生弹性交互作用。这种弹性交互作用具有短程性。

2) 若螺型位错线局部弯折时，也会形成刃型位错分量，从而与置换式溶质原子产生局部的弹性交互作用。这也是一种短程交互作用。

因此，如不考虑次级效应时，可以认为，螺型位错与置换式溶质原子之间无弹性交互作用，故不形成Cottrell气氛。但是，实际上，由于种种原因也可能使置换式溶质原子与螺型位错间出现某种局部的短程交互作用，只是作用较小，有时往往被忽略。

§ 5-3 间隙式溶质原子与位错的弹性交互作用

常见的间隙式溶质原子有氢、碳、氮、氧和硼等。其中氧和硼往往具有置换式与间隙式双重特性。同置换式溶质原子不同，对间隙式溶质原子与位错的弹性交互作用不能笼统而论，而与固溶体的点阵类型有关。

一、FCC结构中间隙原子的错配球效应

在FCC结构中，有两种间隙位置。一是八面体间隙，如图5-10(a)所示。从八面体心到周围六个近邻原子间距均为 $a/2$ 。

另一个是四面体间隙，如图5-10(b)所示。从四面体心到周围四个近邻原子间距均为 $\sqrt{3}a/4$ 。

在这两种间隙中，以八面体间隙较大，可容纳较大的间隙原子；

而四面体间隙只能容纳较小的间隙原子。根据几何关系可求出两种间隙能够容纳的最大

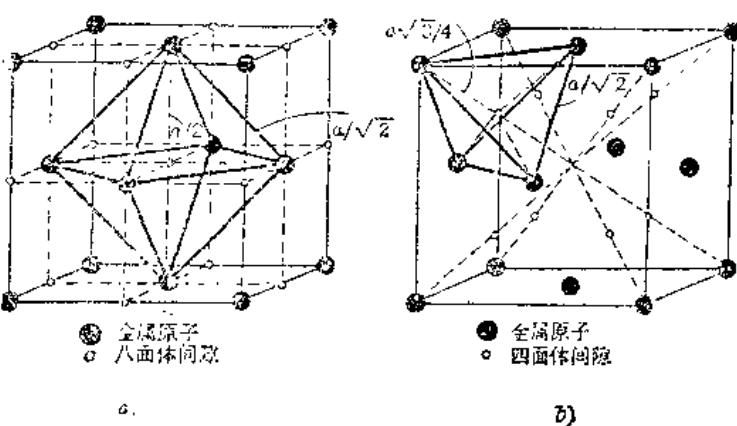


图5-10 FCC结构中的间隙（●金属原子；○间隙中心）
(a)八面体间隙 (b)四面体间隙

刚球半径。设溶质原子的半径为 r_A , 间隙中能容纳的最大刚球半径为 r_B , 则对 FCC 结构而言, 有如下关系

$$r_B = \begin{cases} 0.414r_A & (\text{八面体间隙}) \\ 0.225r_A & (\text{四面体间隙}) \end{cases}$$

在上述两种间隙中, 近邻原子都位于同一球面上 (见图5-10), 因而具有球对称性。在有间隙原子占据时, 便会造成球对称性的应力-应变场。其效果与置换式溶质原子的错配球效应相同, 故可与刃型位错产生弹性交互作用而形成Cottrell气氛。

而且, 同置换式溶质原子的错配球模型相比, 由间隙式原子填充间隙时, 会因间隙尺寸较小而引起较大的错配体积, 使基体产生较大的体积改变。这是间隙式溶质原子在 FCC 结构中所形成错配球的重要特点。

二、BCC结构中间隙原子的错配球效应

在BCC结构中, 也有八面体和四面体两种间隙位置, 如图5-11所示。但同 FCC 结构中的间隙不同, 在 BCC 结构中的间隙呈非球对称性, 即从间隙中心到周围近邻原子的距离不完全相等。根据几何关系可以求出在BCC结构中, 有如下关系:

$$r_B = \begin{cases} 0.15r_A & (\text{八面体间隙}) \\ 0.29r_A & (\text{四面体间隙}) \end{cases}$$

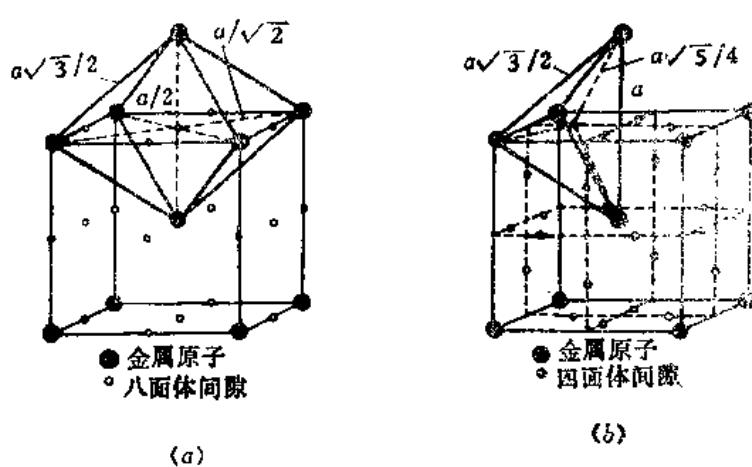


图5-11 BCC结构中的间隙示意图
(a)八面体间隙 (b)四面体间隙

可见, 与 FCC 结构中的情况相反, BCC 点阵中的四面体间隙比八面体间隙大。但是, 一般间隙原子在BCC 结构中还是倾向于首先占据八面体间隙。这不能用刚球模型加以说明, 而可能与局部电子的交互作用有关。

通过上述分析, 表明 BCC结构中的间隙有两个特点:一是间隙尺寸小;二是间隙具有非球对称性。由此会对间隙原子在BCC结构中

引起的错配球效应带来以下两个方面的影响:

- 1) 由于间隙尺寸小, 使间隙原子形成错配球时产生较大的 δv , 从而在基体中造成较大的应力-应变场。
- 2) 由于间隙具有非球对称性, 使间隙原子形成错配球时引起四方畸变。虽然有间隙原子占据间隙时, 应使间隙在各方向上均有拉长, 但由于短轴方向剧烈拉长的结果反而会使其它两轴向上有所缩短。故对间隙原子在BCC结构中引起的错配球可用图5-6 (b)所示的点力组加以表征, 并常称为弹性偶极子。

由非球对称性的弹性偶极子在基体中除引起正应力-应变场外，还引起切应力-应变场，即有六个独立的应力或应变分量不等于零 ($\epsilon_{ij} \neq 0$ ，或 $\sigma_{ij} \neq 0$)。而且，与球对称性错配球只引起均匀分布的平均正应力场或内压力场不同，在BCC结构中的间隙原子引起的平均正应力与距离 r 的立方成反比，即产生非均匀分布的内压力场：

$$-P \propto \frac{1}{r^3} \quad (5-72)$$

显然，上述错配球效应的特点，必然影响到间隙原子在BCC结构中的行为。下面以碳在 α -Fe中为例讨论BCC结构中间隙原子的行为。

三、 α -Fe中碳原子之间的弹性交互作用

可用前述讨论置换式固溶体中溶质原子间弹性交互作用相类似的方法，讨论 α -Fe中间隙碳原子之间的弹性交互作用。设在 α -Fe中两固溶碳原子间距为 r ，并将两碳原子分别视为 A 和 B 两个错配球，则两者之间的弹性交互作用能可由下式表述：

$$W_{int} = p_s \cdot \delta V_A \propto p_s \cdot \delta v_A \propto \frac{1}{r^3} \quad (5-73)$$

由此可见，由于碳原子在 α -Fe中能引起很大的体积效应，便使碳原子间产生很强的弹性交互作用。而且，随着 α -Fe中碳浓度增加，使间距 r 减小，因而碳原子间的交互作用增强。

由于 α -Fe中碳原子间存在强烈的弹性交互作用，会使碳原子在分布上产生应变诱发有序化现象。如图5-12(a)所示，若在C处有一碳原子时，会引起点阵出现正方性。于是，相邻的碳原子便易于分布在间隙A处而不是间隙B。这是一种由碳原子的错配效应所引起的有序分布。

本来，在无外加应力作用时，碳原子填充图5-12(b)所示的A、B和C三个间隙的几率相等，故碳原子可随机分布。但在有外加应力作用时，如拉应力方向平行于 y 轴，则碳原子会优先进入C间隙，以降低系统的能量。这是一种应力诱发有序化现象，常称为Snoek效应^[1]。所以，BCC金属受外力作用时，其中间隙原子易于出现有序化分布。

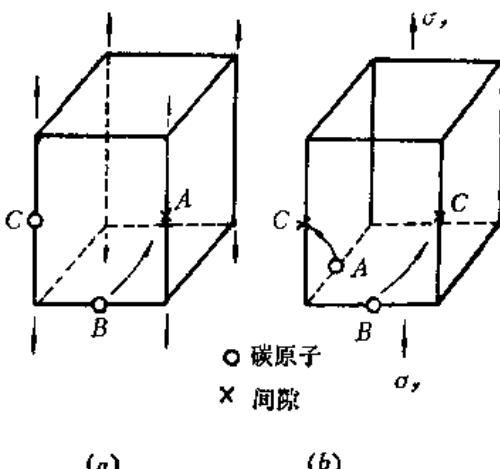


图5-12 α -Fe中碳原子分布有序化示意图
(a)应变诱发有序化 (b)应力诱发有序化

四、 α -Fe中碳原子与螺型位错的弹性交互作用

前已述及，在置换式固溶体中，溶质原子与螺型位错几乎没有弹性交互作用。而且，FCC结构中的间隙原子也有类似的行为，其原因可归结为错配效应的球对称性。

如前所述，层错区原子的堆垛方式不同于基体。例如，在FCC结构中形成层错时，相当于形成了一层HCP结构。故可把层错区与非层错区视为两相，而具有不同自由能。显然，

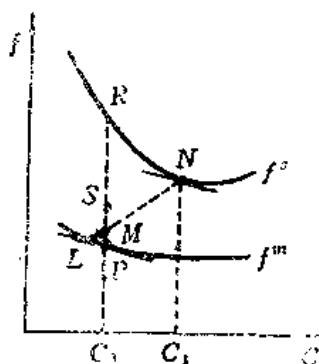


图5-13 固溶体基体与层错区的自由能-成分曲线 (f'' —基体自由能; f' —层错的自由能)

层错区的自由能能 (f') 要高于非层错区的自由能 (f'')，可得如图5-13所示的固溶体自由能-成分曲线。可见，若层错区与基体的浓度均为 c_0 时，层错区与基体的自由能分别如图5-13中R点和P点所示。接着杠杆定律，系统(或合金)的自由能为S所示， PS/PR 为层错的体积分数。但两相平衡时，必须使二者化学势相等，或者自由能曲线的斜率相等。而在R点和P点，两相自由能曲线的斜率不等，系统不能处于平衡状态。只有当溶质原子在层错区与基体间发生重新分布，使层错的自由能从R点变到N点，基体的自由能由P点变为L点时，才满足化学势相等的平衡条件，即

$$\left(\frac{\partial f''}{\partial c}\right)_{c_0} = \left(\frac{\partial f'}{\partial c}\right)_{c_1} \quad (5-76)$$

由于层错所占体积较小，可近似认为此时基体的成分等于 c_0 。所以，当有层错存在时，层错与基体中溶质的浓度必然有所不同。这便是形成Suzuki气团的原因所在。

Suzuki气团对位错运动也有阻碍作用，对这种阻碍作用可作如下分析：

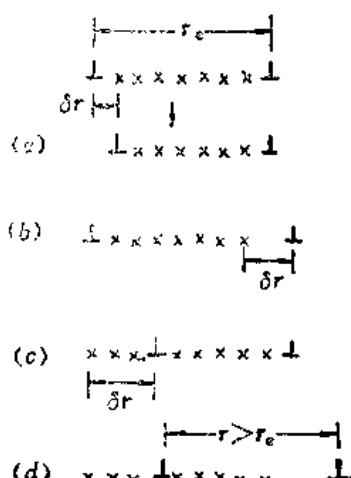


图5-14 具有Suzuki气团的扩展位错运动的可能组态(偏聚的溶质原子以×号表示)

1. 如图5-14(a)所示，若在外力作用下使层错宽度减小 δr 时，需有一部分溶质原子由层错区进入基体。但由于从层错区移开的溶质原子数目等于进入基体的原子数目，对整个系统而言不会引起势能改变，即

$$\sum_i \mu_i dn_i = 0 \quad (5-77)$$

式中， μ_i 为溶质原子的化学势； n_i 为具有化学势为 μ_i 的原子数目。层错宽度减小对系统能量的变化主要表现为克服两个部分位错间的斥力作功。这在数值上应等于层错表面能量的减少值，故

$$F_s \cdot dr = \gamma_1 \cdot dr \quad (5-78)$$

式中， F_s 为单位长度上两部分位错间的斥力， γ_1 为层错能。所以，

$$F_s = \gamma_1 \quad (5-79)$$

这说明，层错中单位长度两部分位错间的斥力在数值上等于层错能。

2. 如图5-14(b)所示，若在切应力 σ 作用下使领先的部分位错向前运动 dr 时，系统能量的变化应为

$$\begin{aligned} dG &= -F_s dr + \gamma_2 dr - \sigma b dr \\ &= (-\gamma_1 + \gamma_2 - \sigma b) dr \end{aligned} \quad (5-80)$$

式中, γ_2 为在无溶质原子偏聚区的层错能, b 为部分位错的柏氏矢量。故欲使这种位错组态稳定, 应有

$$\sigma b = \gamma_2 - \gamma_1 \quad (5-81)$$

若后续的部分位错受到钉扎, 而外加应力继续增大时, 会使领先位错继续向前运动, 直到不再受后续位错的影响。为使领先位错独立运动, 以将两个部分位错分开, 所需的外加切应力如下式所示:

$$\sigma b = \gamma_2 \quad (5-82)$$

3. 如图5-14 (c) 所示, 若在切应力 σ 作用下使后续位错向前运动时, 在其后面要留下一段溶质原子的富集区。在富集区内层错已经消失, 相应的表面能为 γ_{ch} 。系统的能量变化应为

$$\begin{aligned} dG &= F_s dr - \gamma_1 dr + \gamma_{ch} dr - \sigma b dr \\ &= (\gamma_{ch} - \sigma b) dr \end{aligned} \quad (5-83)$$

故在领先位错受到钉扎的条件下, 为使后续位错向前运动所需外加切应力应符合以下条件:

$$\sigma b = \gamma_{ch} \quad (5-84)$$

若 γ_{ch} 大于 $\gamma_2 - \gamma_1$ 时, 会使后续位错在领先位错前进的过程中仍然受到钉扎, 则 F_s 减小并最终使后续位错运动所需切应力达到临界值, 并可由下式表达:

$$\sigma b = \gamma_{ch} - \gamma_1 \quad (5-85)$$

由上述分析可见, 要使扩展位错的领先位错和后续位错运动时, 所需施加切应力的大小均与溶质原子在层错区的富集有关。溶质原子的富集要引起层错能变化, 故使 $\gamma_2 - \gamma_1 \neq 0$ 及 $\gamma_{ch} \neq 0$ 。这便是 Suzuki 气团能够阻碍扩展位错运动的原因所在。

4. 如图5-14 (d) 所示, 若在外力作用下使扩展位错的两个部分位错同时向前运动时, 应满足以下条件:

$$\sigma b = \gamma_2 - \gamma_1 + \gamma_{ch} \quad (5-86)$$

式中, b 为全位错的柏氏矢量。显然, 若扩展位错能整体逃逸气团时, 便可快速前进, 产生物理屈服。然而, 若 $\gamma_1 - \gamma_{ch}$ 为负值时, 也可能使领先位错逃逸气团的束缚, 导致层错区不断扩大。所以, 在具有较小溶解度的置换式固溶体合金中, 当溶质原子 B 的活度较大时, 便易于经深度冷加工形成大量层错。这是因为在层错区易于发生 B 原子偏聚, 使层错面两侧形成 $A-B$ 型键合 (A 为溶剂原子)。则后续位错的运动会破坏这有利的 $A-B$ 键合, 而产生不利的 $A-A$ 或 $B-B$ 键合, 导致 $\gamma_{ch} > \gamma_1$ 。在这种情况下, 由于后续位错受到气团的钉扎便导致领先位错的逃逸。相反, 在具有较大溶质原子溶解度的合金中, 扩展位错易于整体逃逸 Suzuki 气团, 导致屈服出现^[3]。

Suzuki 气团除以钉扎方式阻碍扩展位错运动外, 还可能有拖曳作用。这是由于溶质原子的偏聚至少涉及短程扩散, 在一定条件下可与位错运动同时进行。但通常很难与 Cottrell 气团及 Snoek 气团的拖曳作用区分开。溶质原子也可以上述后两种机制对部分

可通过与其成对的后续位错追踪运动所消毁，故综合的结果是系统能量不变。但若晶界中已存在反相畴界时，也可成为超点阵位错运动的有效障碍。如图5-18(a)所示，当超点阵位错穿越反相畴界时，会使反相畴界产生两原子长的台阶，导致系统能量升高。这不但会在主滑移面上形成反相畴界，造成次滑移中位错运动的困难；而且，在主滑移面上有超点阵位错继续滑移时，还会形成如图5-18(b)所示的组态，使主滑移受阻。领先位错通过滑移面上的反相畴界时，可使之消除而引起超点阵位错解体。于是，领先位错与尾随位错便分别在断开的两反相畴界处受阻。

由于上述超点阵位错运动机制，将使有序合金的起始流变应力较低，而加工硬化率很高，易于通过快速加工硬化而获得高强度。有序合金的单晶体变形时，只有线性硬化阶段，如图5-19所示，这表明，超点阵位错易在主滑移面上产生平面滑移，而难于发生交滑移。超点阵位错平面滑移的结果，易在晶界处形成塞积并引起应力集中。所以，有序合金可由冷变形得到显著硬化，却使塑性损失较大。



图5-18 超点阵位错与反相畴界的交互作用
(a)超点阵位错切过反相畴界引起两原子长台阶
(b)领先位错扫过反相畴界时引起超点阵位错解体

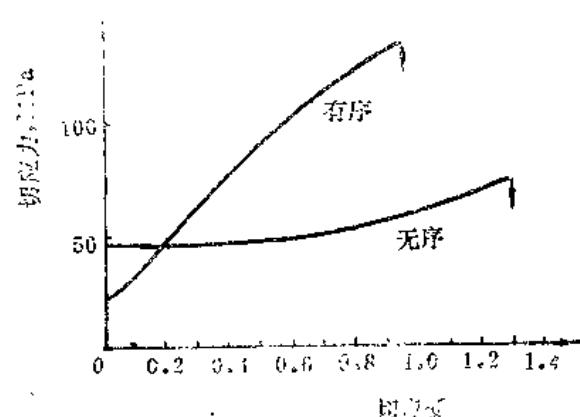


图5-19 有序与无序Cu₃Au单晶体的
应力-应变曲线的比较

在反相畴界能较高的情况下，也可能发生超点阵位错的部分交滑移，导致快速加工硬化。反相畴界能随晶体取向而变化，如在L₁₂型超点阵中以{100}面上反相畴界能最低，而在主滑移面{111}上反相畴界能较高。于是，在具有L₁₂型超点阵的Cu₃Au中，位于主滑移面(111)上的螺型超点阵位错便可能发生部分交滑移，如图5-20^[13]所示。在热激活的作用下，扩展的领先位错可能发生束集并交滑移到(100)面上，以降低反相畴界能。然后，领先位错又可能沿(111)面扩展。若后续位错不能紧随发生同样的交滑移时，便会造成一种难动的位错组态，使两位错在主滑移面上的运动均受阻。这相当于原来的超点阵位错已解体，两个扩展位错沿各自的(111)面滑移均需形成新的反相畴界。由于这种超点阵位错的部分交滑移是一种热激活过程，会使所形成的障碍数量随温度升高而增多。只有在温度接近或达到0.4T_m（T_m为熔点）时，才会因回复过程的快速进行而使上述障碍机制失效。有序金属间化合物Ni₃Al的应变硬化率(θ_0/G)

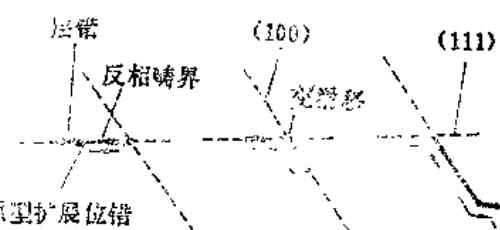


图5-20 有序Cu₃Au晶体中超点阵位错
的部分交滑移硬化模型

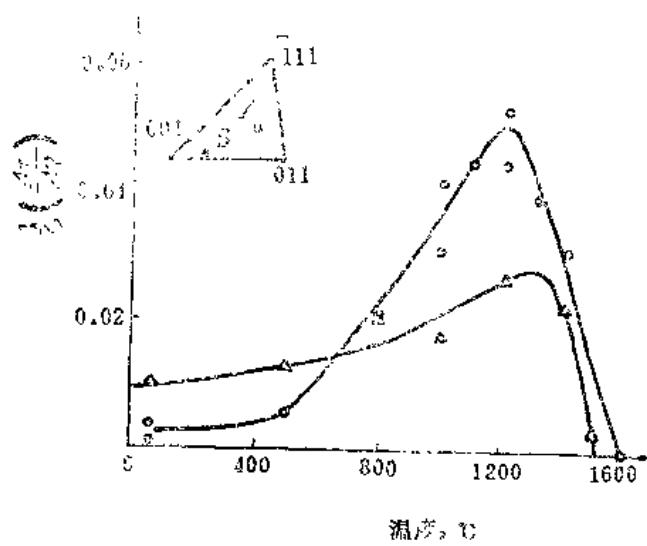


图5-21 Ni₃Al的应变硬化率(θ_{II}/G)与温度的关系

下降。同样，也可以通过改变淬火温度来控制合金的有序度，使室温流变应力在 T_c 附近淬火后出现峰值，如图5-23所示。淬火温度升高时，长程有序度降低，将有利于室温流变应力的提高。但当淬火温度达到 T_c 以上时，合金呈短程有序，故淬火温度增加将引起室温流变应力逐渐减小。不同长程有序合金出现室温流变应力峰值的淬火温度不同。

上述情况表明，适当降低合金的长程有序度，引入适量的反相畴界，将有利于提高长程有序合金的强度。在长程有序合金中，反相畴尺寸对合金强度有很大影

与温度的关系示于图5-21。

长程有序合金的强度或流变应力与温度的关系如图5-22所示。在有序-无序转变临界温度 T_c 附近，流变应力 $\sigma_{0.1}$ 出现峰值。这种现象在 T_c 温度低于熔点的有序合金中具有普遍性，如 Cu₃Au、Mg₃Cd、Ni₃Mn、Fe₃Al等均如此。如前所述，随着温度的升高，热激活作用增强，易使超点阵位错中领先位错产生交滑移，从而引起流变应力增加。若温度接近或高于 T_c 以后，因长程有序度急剧降低而使变形机制过渡为由单个位错运动所控制，故流变应力随温度升高而

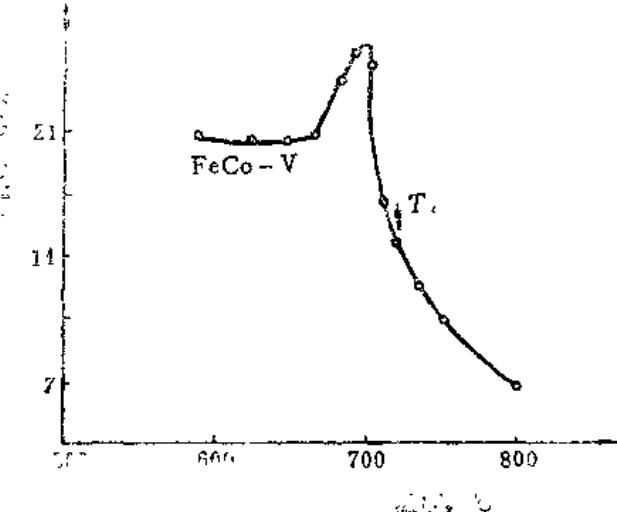


图5-22 温度与长程有序 FeCo-2%V 合金中流变应力 $\sigma_{0.1}$ 的关系

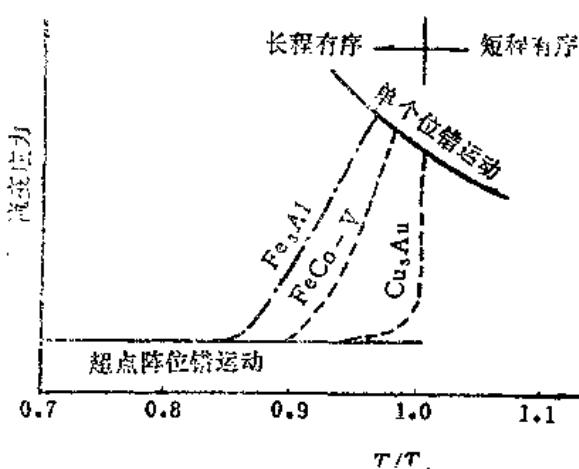


图5-23 几种有序合金中的室温流变应力与淬火温度的关系

响，这可由下面两方面因素加以考虑：适当减小反相畴尺寸，可使反相畴数量增多，有利于强化；但同时，由于反相畴尺寸过小，又使长程有序度显著减小，降低有序强化效应。最佳反相畴尺寸为 $30\sim100\text{ \AA}$ 。如对 Mg_3Cd 合金经 180°C 淬火和随后 68°C 等温退火时，退火时间对长程有序度、反相畴尺寸及硬度的影响示于图5-24。可见，在反相畴尺寸为 60 \AA 时，出现硬化峰。

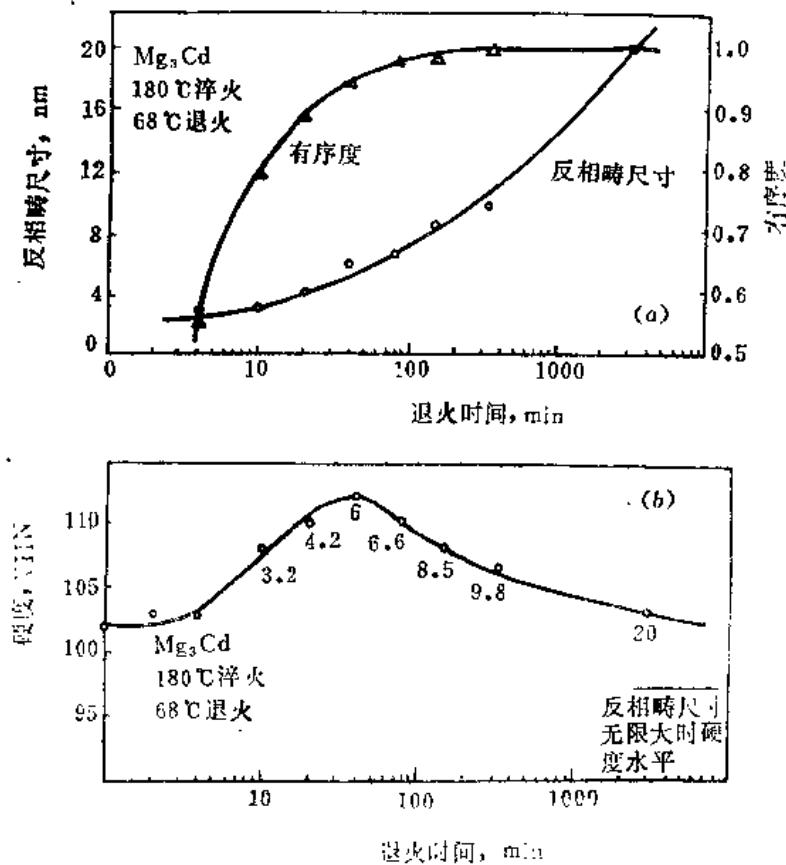


图5-24 Mg_3Cd 合金中硬度与长程有序度和反相畴尺寸的关系
(a)有序度参数与反相畴尺寸的变化 (b)硬度的变化 (图中数字表示反相畴尺寸, nm)

§ 5-6 均匀固溶强化

通常，可按溶质原子在基体中的分布状态而将固溶强化分为均匀强化和非均匀强化两种。前者指溶质原子混乱分布于基体中所引起的强化作用；后者则着眼于溶质原子优先分布于晶体的缺陷附近，或呈有序分布时的强化。本章前面所涉及的Cottrell气团强化、Snoek气团强化、Suzuki气团强化及有序强化等均属于非均匀固溶强化机制。本节主要讨论均匀固溶强化机制，并建立相应的数学表达式。

在假定溶质原子均匀分布的情况下，建立固溶强化的数学表达式主要涉及强度与溶质原子浓度间的关系，可从位错与溶质原子的弹性交互作用的角度加以考虑。前已述及，溶质原子与位错的弹性交互作用能如下式表示：

$$W_{\text{int}} = p_{\perp}(\delta V), \quad (5-91)$$

式中, p_s 为位错应力场引起的内水静压力场, $(\delta V)_s$ 为溶质原子引起的外部体积变化。由于位错的应力场与距离 r 成反比, 便使这种交互作用具有长程性质, 即

$$W_{int} \propto \frac{1}{r} \quad (5-92)$$

式中, r 为溶质原子与位错线的距离。显然, 在溶质原子可动的情况下, 可由这种长程交互作用驱动溶质原子跑向位错线附近, 形成气团, 引起非均匀强化。



图 5-25 位错遇不动溶质原子受阻弓弯示意
图 (a* 为热激活距离)

当溶质原子不动, 而在外力作用下运动的位错遇到溶质原子时便会受到一定的阻碍。在低的温度下, 可将溶质原子(尤其是尺寸较大的置换式溶质原子)视为不动原子。位错线仅在与溶质原子相遇时, 才能“感到”溶质原子

并被分段弓弯, 如图 5-25 所示。由 (5-6) 和 (5-7) 式可知, 溶质原子作用到单位位错线上的力具有短程性质, 并有:

$$F/L \propto \frac{1}{r^3} \quad (5-93)$$

式中, r 为溶质原子到位错线的距离。因而, 便使不动溶质原子与位错呈短程弹性交互作用。这表明, 只有位于滑移面附近的溶质原子才会成为位错运动的障碍。

弄清了上述溶质原子与位错的弹性交互作用特点后, 便可进一步建立均匀固溶强化的数学表达式。视溶质原子数量不同, 可有以下两种类型的表达式。

一、稀固溶体的均匀固溶强化

对于稀固溶体而言, 临界切应力与溶质原子浓度呈抛物线关系(见图 5-26)。考虑到溶质原子与位错的弹性交互作用具有短程性质, 可将滑移面的厚度视为 $2d$ (d 为原子面间距), 如图 5-27 所示。在假定溶质原子分布均匀的情况下, 滑移面上每个溶质原子的平均自由区域为 l^2 (l 为滑移面内溶质原子间距)。溶质原子的浓度可由下式表达:

$$c = \frac{1}{l^2 \cdot 2d} \quad (5-94)$$

故

$$l = \left(\frac{1}{2d \cdot c} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5-95)$$

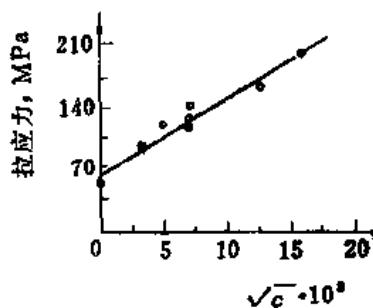


图 5-26 铁的屈服应力与碳含量的关系

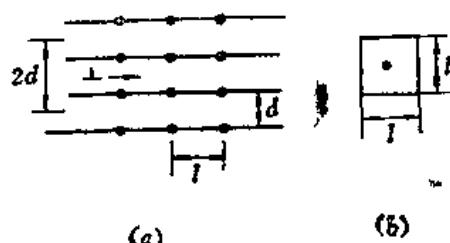


图 5-27 (a) 滑移面厚度示意图; (b) 滑移面上原子的平均自由区域

若设 a^* 为使位错脱锚的热激活距离, W^* 为相应的热激活能, 则使位错脱锚所需的临界切应力为

$$\sigma_c = \frac{W^*}{bla^*} \quad (5-96)$$

于是, 将 (5-95) 式代入 (5-96) 式可得

$$\sigma_c = \frac{W^*}{a^*b} (2bc)^{\frac{1}{2}} \quad (5-97)$$

式中, W^* 和 a^* 的数值尚难于精确计算。但考虑到溶质原子对位错的钉扎能力较弱, 位错线弓弯程度不大便可脱锚, 故可以认为, $W^*/a^* \ll Gb^2$, 并与 l 和 c 无关。于是, 便可得出临界切应力与溶质原子浓度的平方根成正比, 即

$$\sigma_c \propto c^{\frac{1}{2}} \quad (5-98)$$

应该指出, 上述推导只是一种简化处理。实际上, 溶质原子的分布是随机的, 各溶质原子对位错钉扎的强弱程度不同。位错易在钉扎薄弱处先脱锚(如图 5-28B 处), 并在图 5-28 中 A 和 C 之间使位错线弓弯程度增大, 导致脱锚相继发生。因而精确推导临界切应力与溶质原子浓度之间的关系变得更加困难。而且, 在溶质原子与基体原子的相互作用中, 除了要考虑由于二者尺寸不同引起的畸变能外, 还需考虑弹性模量不同而产生的影响, 以及位错类型的影响等。有关均匀固溶强化的各种理论可参阅文献^[4~6]。

二、浓固溶体的均匀固溶强化

对于浓固溶体而言, 临界切应力与溶质原子浓度呈直线关系(见图 5-29)。这是由于滑移面上原子分布十分密集, 以致使溶质原子的应力场相互重叠并抵消, 如图 5-30 所示。位错线附近的溶质原子对其作用力有正有负, 故平均的结果会使强化作用为零。位

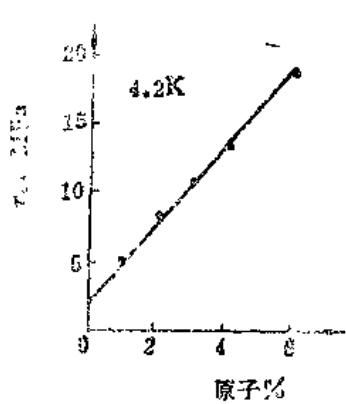


图 5-29 银的临界切应力与铝含量的关系

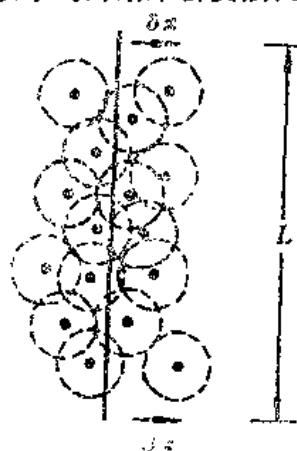


图 5-30 浓固溶体中位错线两侧溶质原子的应力重叠与抵消示意图

错线保持直线状，并在外力作用下运动时，切割滑移面两侧的异类原子键合。这是因为，在溶质原子浓度较高的情况下，很难保持完全无序分布状态。由于溶质原子和溶剂原子间尺寸的差异或化学性质的差异等因素，往往会引起滑移面两侧原子出现局部短程有序。所以位错运动的阻力不再是弹性交互作用，而要取决于切割异类原子键合所消耗的能量。

由图5-30可见，在切应力 σ 作用下，位错运动 δx 距离所作的功为 $\sigma b L \delta x$ 。相应破坏异类原子键合所需能量为

$$\psi \cdot n_b = \psi \cdot c \cdot L \cdot \delta x \cdot 2d \quad (5-99)$$

式中， ψ 为滑移面两侧异类原子的键合强度， c 为溶质浓度， $2d$ 为滑移面厚度， n_b 为在体积 $L \cdot \delta x \cdot 2d$ 中异类原子的键合数目。故使位错(柏氏矢量为 b)运动的临界切应力应为：

$$\sigma_c = \frac{2\psi d}{b} c \quad (5-100)$$

也就是说，对于浓固溶体而言，临界切应力与溶质浓度成线性关系，即

$$\sigma_c \propto c \quad (5-101)$$

实际上，式(5-98)和(5-101)分别代表稀固溶体和浓固溶体两种极端情况。对于介于中间态的固溶体而言，其均匀强化可用下式表达：

$$\sigma_c \propto c^{\frac{2}{3}} \quad (5-102)$$

或者，固溶体均匀强化可用下式统一表达：

$$\sigma_c \propto c^n \quad (5-103)$$

对于较稀固溶体 $n=\frac{1}{2}$ ，对于浓固溶体 $n=1$ ，对于浓度介于两极限情况之间的固溶体 $n \approx 2/3$ 。

一般认为，置换式溶质原子在固溶体中引起的点阵畸变较小，而溶解度较大，易于表现出(5-101)式所示的强化效果。间隙式溶质原子在固溶体中引起较大的非球对称性畸变，溶解较小，易于遵从(5-98)式所示的强化规律。但须指出，间隙式溶质原子在固溶体中，一般总是优先与缺陷相结合，故已不再完全属于均匀强化的范畴，只能用(5-98)式近似表征间隙原子的固溶强化效果。

参 考 文 献

- [1] G. Snoek and A. Seeger, Acta Met., 7(1959), 469.
- [2] H. Suzuki, in Dislocations and Mechanical Properties of Crystals, John Wiley and Sons, (1957), 361.
- [3] J. P. Hirth, Met. Trans., 1(1970), 2367.
- [4] N. F. Mott and F. R. N. Nabarro, Report of a Conference on Strength of Solids, 1(1948).
- [5] R. L. Fleischer, Acta Met., 11(1963)203.
- [6] P. Feltham, Br. J. Appl. Phys., 1(1968), 303.

第六章 第二相强化机制

所谓第二相强化是指弥散分布于合金基体组织中的第二相粒子可成为阻碍位错运动的有效障碍，是一种用于强化金属材料的有效方法之一。按照第二相特性不同，又常将第二相强化分为沉淀强化和弥散强化两种。沉淀强化相粒子系经固溶化和时效处理后获得的弥散分布的第二相粒子；弥散强化相粒子则是在金属中加入或形成的较稳定的第二相粒子，常指通过内氧化及粉末冶金等办法人为加入到金属基体的第二相粒子。

虽然沉淀强化与弥散强化有所不同，两者的共同点都体现在第二相粒子或质点对位错运动的阻碍作用，可统称为质点强化。实际上固溶强化也是一种质点强化，只是质点的尺寸很小（为溶质原子）而已。所以，可将溶质原子、沉淀强化相粒子及弥散强化相粒子统称为障碍质点，并建立统一的障碍理论。

§ 6-1 质点障碍模型

如图6-1所示，当滑移位错与障碍质点相遇时，在通过之前要发生弓弯。位错线的弓弯程度可用角度 ϕ （见图6-1）表示，位错线脱离障碍时的临界角度为 ϕ_c 。很显然， ϕ_c 直接度量了障碍的强度（ $0 \leq \phi_c \leq \pi$ ）。对弱障碍而言，位错经轻度弓弯（ $\phi_c \approx \pi$ ）便可通过障碍；而对强障碍而言，位错需经深度弓弯（ $\phi_c \approx 0$ ）才能通过障碍。

建立质点障碍模型就是建立临界切应力或屈服应力与质点障碍强度之间的关系。下面将介绍用于描述质点障碍作用的两个模型。

一、Orowan模型

假设障碍为点状质点，并在滑移面上呈方阵排列，而且基体是各向同性的弹性介质。据§ 1-3的讨论，可以把位错线张力近似地取为 $Gb^2/2$ 。滑移位错遇障碍质点受阻时，外加切应力与位错线弯曲半径 r 之间的关系如下：

$$\sigma = \frac{Gb}{2r} \quad (6-1)$$

由图6-2可见，如果点状质点列的间距为 L ，则有下面几何关系：

$$\frac{\theta}{2} + \frac{\phi}{2} = 90^\circ$$

$$\sin \frac{\theta}{2} = \cos \frac{\phi}{2}$$

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{L}{2r}$$

故

$$r = \frac{L}{2\cos \frac{\phi}{2}} \quad (6-2)$$

把(6-2)式代入(6-1)式，得

$$\sigma = \frac{Gb}{L} \cos \frac{\phi}{2} \quad (6-3)$$

这便是Orowan公式⁽¹⁾。可见，对于一定间距的障碍质点而言，位错线弓弯程度越大，所需外加切应力 σ 愈大。

在外加切应力作用下，位错通过障碍的脱锚条件可表示为：

$$\phi = \phi_c \quad (6-4)$$

式中， ϕ_c 为质点的障碍强度。如图6-2所示，在障碍质点处，存在如下受力平衡条件；

$$2T \cos \frac{\phi_c}{2} = F^* \quad (6-5)$$

式中， F^* 为障碍质点对位错的钉扎力。这便是位错通过障碍质点的临界条件，此时的临界切应力 σ_c 为

$$\sigma_c = \frac{Gb}{L} \cos \frac{\phi_c}{2} \quad (6-6)$$

所以，常把 $\cos \frac{\phi_c}{2}$ 称为障碍强度因子。可按此因子的大小将障碍对位错的钉扎作用分为强钉扎和弱钉扎。其主要差别在于位错脱锚时，所达到的临界弓弯程度不同。

上述障碍模型的主要特点是，质点呈阵列分布，各质点的障碍强度一样。滑移位错可在多点同时突破钉扎作用后，快速自由运动，无须再进一步考虑其它质点的影响。这种模型主要适用于强钉扎障碍质点。当位错经深度弓弯通过障碍质点时，需克服位错线张力引起的回复力的阻碍作用。在 $\phi = 0$ 时，回复力达到最大，故位错线突破障碍后便不会受到更大的阻碍作用。

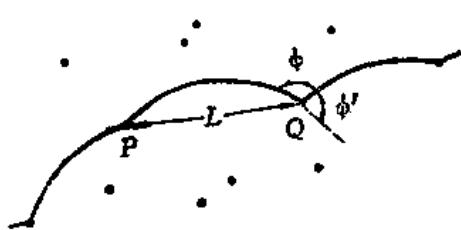


图 6-1 滑移位错遇混乱分布障碍质点弓弯示意图

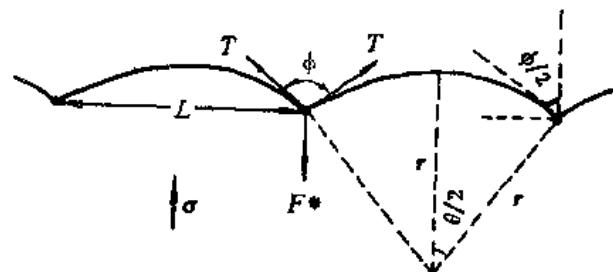


图 6-2 滑移位错遇方阵排列质点弓弯示意图

二、Friedel模型

通常障碍质点随机分布，其间距与各质点的障碍强度也不尽相同。这样位错在外加切应力的作用下，易在薄弱处($\phi_c \approx 180^\circ$)脱锚。如图6-3所示，B处障碍强度较小，

滑移位错易先在此处突破。但在位错线突破障碍后，很快遇到附近的障碍质点D而受阻，达到新的平衡位置ADC。而且，位错线在到达ADC位置之前，仍要受到因弯曲而引起的线张力的阻碍。故位错线在到达ADC位置后能否继续前进，将取决于在A或C处是否达到脱锚的临界条件。如在A处脱锚的临界条件应是

$$2T \cos \frac{\phi_A}{2} = F_A^* \quad (6-7)$$

式中， F_A^* 为A质点对位错的钉扎力， T 为位错的线张力。 ϕ_A 为突破B点的位错线到达ADC位置时，A质点两侧弓弯位错线间的夹角。显然， ϕ_A 的大小与D质点的位置有关。这样一来，滑移位错能否全线连续突破障碍应受障碍质点在滑移面上的平均间距 λ 所控制，而与质点沿位错线分布的平均间距 L 无直接联系。

可由图6-3所示的几何关系求出障碍质点在滑移面上的平均间距 λ 值。可以认为，在滑移面上质点数量较多时，圆弧AB和ADC的半径 r 大体上相等。设 A_1 为位错线在B点开始突破障碍时所扫过的面积； A 为位错线突破B点后所扫过的面积； A_2 为ADC圆弧所包围的面积，即 $A_2 = A + 2A_1$ 。由于位错线在扫过面积 A 时只与D质点相遇，故面积 A 相当于一个质点所占的平均面积，即

$$An_s = 1 \quad (6-8)$$

式中， n_s 为单位滑移面积上的质点数。由于 $\theta_1/2$ 和 $\theta_2/2$ 很小，可以近似求出：

$$A_1 = \frac{2}{3}r^2 \left(\frac{\theta_1}{2}\right)^3$$

及

$$A_2 = \frac{16}{3}r^2 \left(\frac{\theta_1}{2}\right)^3$$

则

$$\begin{aligned} A &= A_2 - 2A_1 = 4r^2 \left(\frac{\theta_1}{2}\right)^3 \\ &= 4r^2 \sin^2 \frac{\theta_1}{2} \\ &= 4r^2 \cos^2 \frac{\phi^*}{2} \end{aligned} \quad \text{图 6-3 障碍质点呈非方阵排列时滑移位错局部突破障碍模型}$$
(6-9)

式中， ϕ^* 为B点的障碍强度。又因可以近似认为 $A \approx \lambda^2$ ，则

$$\lambda^2 = 4r^2 \cos^2 \frac{\phi^*}{2} \quad (6-10)$$

或

$$r = \frac{\lambda}{2} \cos^{-\frac{1}{2}} \frac{\phi^*}{2} \quad (6-11)$$

将(6-11)式代入(6-10)式，便得

$$\sigma = \frac{Gb}{\lambda} \cos^{\frac{3}{2}} \frac{\phi^*}{2} \quad (6-12)$$

或

$$\sigma = \frac{Gb f}{\lambda} \cos \frac{\phi^*}{2} \quad (6-13)$$

式中, $f = \cos^2 \phi^*/2$ 。这便是Friedel公式⁽²⁾。可见, 当 $\phi^* = 0$ (强钉扎) 及质点呈方阵排布时, 此式即为Orowan公式。

在文献中, 常见(6-13)式中 λ 取为位错线上质点的平均间距 L 。但由(6-3)与(6-13)两式可得

$$\lambda = L \cos^2 \frac{\phi}{2} \quad (6-14)$$

或 $\lambda = fL$ 。所以, 不应简单地将Friedel公式中的 λ 换成 L 。实际上, 这样只能看作是一种巧合。如图6-4所示, 质点呈非方阵排列时, β_{12} 角不为零。故同质点呈方阵排列相比,

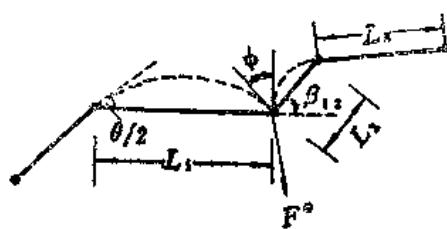


图 6-4 非方阵排列障碍质点阻碍滑移位错运动示意图

在 $\theta/2$ 不变的条件下, 会因 β_{12} 增大而使 ϕ 减小, 并相应引起 $\cos \phi/2$ 增大。这样一来, 若用质点沿位错线分布的平均间距 L 取代(6-13)式中的 λ , 所求得的临界切应力偏高。所以需再引入一个小于1的系数, 得到如下表达式:

$$\sigma = \frac{Gb f}{L} \cos \frac{\phi}{2} \quad (6-15)$$

式中, $f = \cos^2 \phi/2$ 为小于1的系数。这便是修正的Friedel方程。可见, 在障碍质点呈非方阵排列的情况下, 质点数量增加使强化效果增大。这一公式的适用范围较广, 包括固溶强化与第二相强化, 是一个比较接近实际质点强化的表达式。

§ 6-2 沉淀强化机制

沉淀强化系指第二相粒子自固溶体沉淀(或脱溶)而引起的强化效应, 又称析出强化或时效强化。其物理本质是沉淀相粒子及其应力场与位错发生交互作用, 阻碍位错运动。造成沉淀强化的条件是第二相粒子能在高温下溶解, 并且其溶解度随温度降低而下降。

由于在沉淀过程中, 第二相粒子会发生由与基体共格向非共格过渡, 使强化机制发生变化。当沉淀相粒子尺寸较小并与基体保持共格关系时, 位错可以切过的方式同第二相粒子发生交互作用; 而当沉淀相粒子尺寸较大并已丧失与基体的共格关系时, 位错可以绕过方式通过粒子。由于后一种变形及强化方式同弥散强化机制有共同之处, 故常将过时效状态下非共格沉淀相粒子的强化作用归于弥散强化一类。本节主要介绍欠时效及峰时效状态下沉淀相粒子的强化机制。文献上又常称这种强化为可变形粒子强化, 而将过时效沉淀强化及弥散强化称为不可变形粒子强化。当第二相为可变形粒子时, 其强化

进一步计算得出：

$$\tau_c = \alpha G \varepsilon^{\frac{3}{2}} f^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\lambda}{b} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6-18)$$

式中， ε 为共格应变或错配度； f 为沉淀相粒子的体积分数； λ 为沉淀相粒子间距； α 为系数。如设沉淀相粒子近似为半径为 r 的球形，可导出

$$\lambda = \left(\frac{4\pi}{3f} \right)^{\frac{1}{3}} r \quad (6-19)$$

把 (6-19) 式代入 (6-18) 式得

$$\tau_c = \beta G \varepsilon^{\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{b} \right)^{\frac{1}{2}} f^{\frac{1}{3}} \quad (6-20)$$

式中， β 为与位错类型有关的常数（如对刃型位错 $\beta = 3$ ；对螺型位错 $\beta = 1$ ）。这是文献上常用的一种关系式。可见，随着沉淀相粒子的共格应变及体积分数的增加，沉淀强化效果不断增大。通常时效峰出现在沉淀相与基体共格关系开始破坏之时，便是这种共格应变强化机制控制的结果（如图 6-8 所示）。

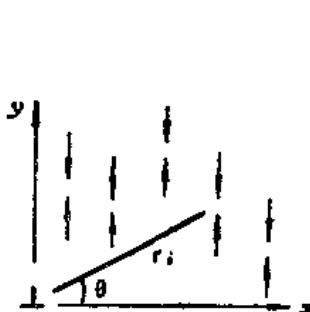


图 6-7 刃位错与其周围 GP 区的交互作用

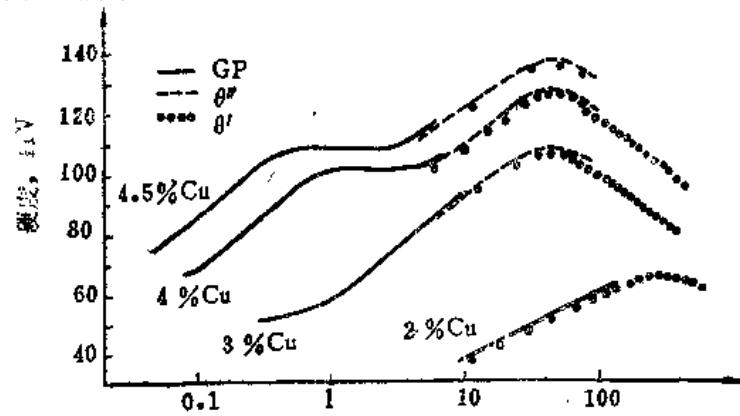


图 6-8 Al-Cu 合金在 130°C 时效的硬化曲线

二、化学强化

当滑移位错切过沉淀相粒子时，会在粒子与基体间形成新界面，如图 6-9 所示。由于形成新界面需使系统能量升高，而引起强化效应。Kelly 和 Nicholson^[6] 将这种强化效应称为“化学强化”，并由下式表达：

$$\tau_c = \frac{2\sqrt{6}}{\pi} \frac{f \gamma_s}{r} \quad (6-21)$$

式中， τ_c 为由化学强化效应引起的临界切应力（增量）， f 为沉淀相的体积分数， γ_s 为界面能， r 为粒子半径。显然这种强化机制对薄片状沉淀相粒子较为重要。这是由于薄片状粒子表面积-体积比大，易由

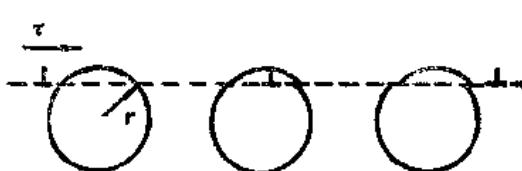


图 6-9 位错切过沉淀相粒子形成新界面示意图

位错切过而引起较大的表面积增量。

三、有序强化

许多沉淀相粒子是金属间化合物，呈有序点阵结构并与基体保持共格关系。当位错切过这种有序共格沉淀粒子时，会产生反相畴界而引起强化效应。同在长程有序固溶体中位错运动相类似，位错切过有序沉淀相粒子时也易于诱发位错成对运动，如图6-10所示。领先位错在其扫过有序沉淀相粒子时，因产生反相畴界而受阻发生弯曲。尾随位错因可消除沉淀相粒子内的反相畴界，能呈直线状跟随领先位错运动。两位错间的平衡距离 l 取决于后续位错所受到的作用力与两位错间斥力的平衡结果，可由下式^[7]求出：

$$l \approx \frac{Gb}{2\pi K\tau_1} \quad (6-22)$$

式中， K 为系数，对刃型位错为 $(1-\nu)$ ，对螺型位错为1； τ_1 为作用于后续位错上的切应力，在数值上等于外加切应力 $(\tau = \tau_1)$ 。

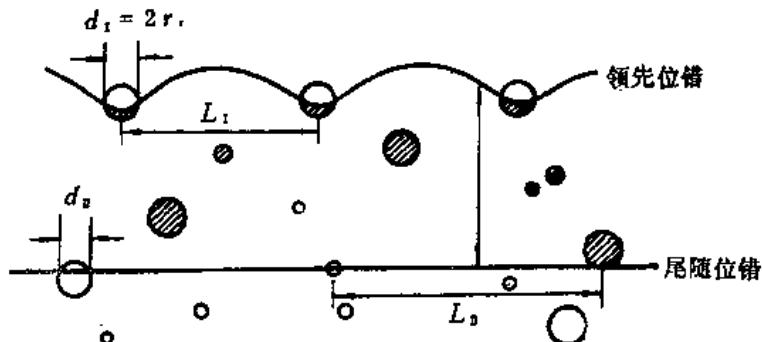


图6-10 有序沉淀相粒子强化示意图（粒子内影线区表示反相畴界）

可用下式粗略表达有序沉淀相粒子对位错切过的阻力：

$$\tau_R = \frac{\gamma f}{b} \quad (6-23)$$

式中， f 为沉淀相粒子的体积分数； γ 为反相畴界能。显然，在图6-10所示的情况下，先导位错所受的切应力应满足下面方程：

$$\tau + \frac{Gb}{2\pi Kl} = \left(\frac{\gamma}{b}\right) \left(\frac{d_1}{L_1}\right) \quad (6-24)$$

式中， d_1 为先导位错所切过粒子的有效距离； L_1 为先导位错所切过粒子间距。同时，尾随位错上所受切应力应满足下式：

$$\frac{Gb}{2\pi Kl} = \tau + \left(\frac{\gamma}{b}\right) \left(\frac{d_2}{L_2}\right) \quad (6-25)$$

式中， d_2 为尾随位错所切过粒子的有效距离； L_2 为尾随位错所切过粒子间距。若 $d_2/L_2 = 0$ 时，使先导位错向前运动的切应力为 2τ 。如 $d_2/L_2 > 0$ 时，可由(6-24)和(6-25)两式得出作用到先导位错上的切应力满足下列方程：

模型来表达模量强化效应，如Kelly和Nicholson⁽¹⁾给出临界切应力（增量）表达式：

$$\tau_c = 0.044 \left(\frac{r_s f}{Gb} \right)^{\frac{1}{2}} \left[0.8 - 0.143 \ln \frac{r_s}{b} \right]^{\frac{3}{2}} \Delta G^{\frac{3}{2}} \quad (6-32)$$

式中， r_s 为沉淀粒子的平均半径， f 为沉淀相的体积分数； G 为基体的切变模量； ΔG 为沉淀相与基体的切变模量差。

Melander和Persson⁽¹⁰⁾给出如下表达式：

$$\tau_c = 0.9 (r_s f)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{T}{b} \right) \left(\frac{\Delta G}{G} \right)^{\frac{3}{2}} \left[2b \ln \left(\frac{2r_s}{f^{\frac{1}{2}} b} \right) \right]^{-\frac{3}{2}} \quad (6-33)$$

式中， T 为位错线张力，其余符号同(6-32)式。

Russell和Brown⁽¹¹⁾给出了比较简单的表达式：

$$\tau_c = \frac{0.8 G b}{L} \left(1 - \frac{E_1^2}{E_2^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6-34)$$

式中， L 为粒子的平均间距； G 为基体的切变模量； E_1 为软相的弹性模量； E_2 为硬相的弹性模量。

遗憾的是，现有模量强化理论尚不尽完善，与实测结果常有一定差别。但在沉淀相粒子与基体的切变模量差别较大时，这种模量强化效应将起着较重要作用。

五、层错强化

当沉淀相粒子的层错能与基体不同时，位错的运动也将会受到阻碍，引起强化。Hirsch和Kelly⁽¹²⁾最早分析了这种强化效应。他们指出，当沉淀相的层错能 γ_s 显著低于基体的层错能 γ_m 时，会引起扩展位错的宽度发生局部变化，即 $W_s > W_m$ (W_m 与 W_s 分别为滑移位错在基体与沉淀相中的扩展宽度)。由此可使单位长度位错能量降低为：

$$\Delta E = K(\theta) \ln \left(\frac{W_s}{W_m} \right) \quad (6-35)$$

式中， $K(\theta)$ 为与 θ 角（位错线与其柏氏矢量的夹角）及 b_s （扩展位错中部分位错的柏氏矢量）有关的系数。由于 θ 角的影响，使刃型位错的 $K(\theta)$ 要比螺型位错的大。 $K(\theta)$ 与 b_s 的关系可由下式表示：

$$K(\theta) \propto \frac{Gb_s^2}{4\pi} \quad (6-36)$$

由此，便使沉淀相粒子成为吸引性障碍，阻碍位错运动。要将位错从这种障碍中拖出来，便需附加局部切应力，即

$$\tau' \approx \frac{\Delta \gamma}{b} \quad (6-37)$$

式中， $\Delta \gamma = \gamma_m - \gamma_s$ 。由这种阻力造成的临界切应力（增量）可由下式表达：

$$\tau_c = 0.59 \left(\frac{\gamma_m - \gamma_s}{b} \right) \left[\frac{3K(\theta) \ln \left(\frac{\gamma_m}{\gamma_s} \right)}{T} \right]^{\frac{1}{2}} C f^{\frac{1}{2}} \quad (6-38)$$

式中， $C = \bar{w}(1 - \beta + \omega)/32r_s^2$ ， \bar{w} 为扩展位错的平均宽度；其余符号意义同上。

显然这种强化机制主要适用于密排点阵，以便形成扩展位错。而且沉淀粒子的层错能与基体相比，要有显著差异。这会使其应用范围受到一定限制。但在一定条件下，这种强化机制将起着重要作用，应该予以充分考虑。

六、派-纳力强化

当沉淀相粒子与基体的派-纳力不同时，也会引起强化效应。此效应对合金临界切应力的贡献与沉淀相粒子的强度(σ_s)和基体的强度(σ_u)之差成正比⁽¹⁸⁾，即

$$\tau_c = \frac{5.2 f^{\frac{2}{3}} r_s^{\frac{1}{2}}}{G^{\frac{1}{2}} b^2} (\sigma_s - \sigma_u) \quad (6-39)$$

综上所述，沉淀强化可能是以上各种强化机制综合作用的结果。在一般情况下，常以共格应变强化作用为主。所以，时效常出现在能使沉淀相粒子与基体共格应变达到最大程度的时效阶段，即沉淀相粒子与基体的关系由共格到半共格过渡的时效阶段。当然，对不同合金而言，起主要作用的强化机制可能有所不同，应视具体情况而定。最后，还应指出，由上述各种切过机制强化的结果，均使合金的强度随沉淀粒子尺寸而增大。但最后达到某一临界尺寸时却使位错难于切过障碍粒子，对位错切过沉淀相粒子的最大临界尺寸可作如下估算：

如图6-11所示，粒子间距为 L ，半径为 r 。若不考虑位错交滑移和攀移的可能性，在外加切应力 τ_c 作用下使位错于两粒子之间弓出时，应满足下述关系

$$\tau_b = \frac{Gb}{L} \quad (6-40)$$

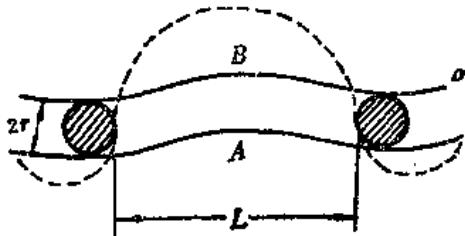


图 6-11 位错切过障碍粒子(实线)和在粒子间弓出(虚线)

如果位错切过沉淀相粒子时，应产生一高能界面，设其单位面积能量为 γ ，则它与这时所加切应力 τ_c 之间应满足下面方程：

$$\tau_c b L 2r = \pi r^2 \gamma$$

或

$$\tau_c = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{r \gamma}{b L} \quad (6-41)$$

如 $\tau_c > \tau_b$ 时，位错将在粒子间弓出；而 $\tau_c < \tau_b$ 时，粒子将产生切变。这样，位错切过沉淀相粒子的临界条件则可由 $\tau_b = \tau_c$ 求出。由(6-40)式和(6-41)式就可求出可变形粒子的最大半径应为：

$$r_c = \frac{2Gb^2}{\pi \gamma} \quad (6-42)$$

可见，此临界粒子的大小主要取决于界面能 γ 。一般对共格粒子而言，粒子直径小于150Å时，位错均切过粒子滑移；对非共格粒子而言，粒子直径大于1μm时，位错均绕过粒子滑移。

§ 6-3 弥散强化机制

弥散强化是通过在合金组织中引入弥散分布的硬粒子，阻碍位错运动，导致强化效应。所谓硬粒子是指粒子本身不变形，位错难于切过。对作为强化相的硬粒子有两个基本要求，一是其弹性模量要远高于基体的弹性模量；二是要与基体呈非共格关系。获得这样硬粒子的方法有内氧化及烧结等，是人为地在金属基体中添加弥散分布的硬粒子。此外，从强化机制角度也常将合金过时效或钢的回火，作为弥散强化的方法看待。这是从实用上把强化相粒子是否与基体具有共格关系看作区分弥散强化与沉淀强化的界限。

常用的弥散强化相包括碳化物、氮化物、氧化物等。其共同点是障碍强度大 ($\varphi_c \approx 0$ 或 $\cos\phi_c \approx 1$)，故通常用Orowan模型来描述弥散强化的作用机制，即

$$\sigma^* = \frac{Gb}{L} \quad (6-43)$$

式中， σ^* 为临界切应力， L 为硬粒子间距， G 为基体的切变模量。位错以绕过方式通过障碍，并在障碍粒子周围留下位错圈，如图6-12所示。在应用Orowan公式时，尚需考虑以下几方面问题：

一、有效粒子间距的确定

在确定弥散粒子间距时，需考虑粒子本身的尺寸及其与基体界面的影响。如图6-13(a)所示，考虑到粒子本身的尺寸时，应将粒子间距取为：

$$L_e = L - D \quad (6-44)$$

式中， L_e 为有效粒子间距， D 为粒子直径。另外，在第一章中已述及，相界面与位错之间要有一定的交互作用，产生镜像力。由于弥散相粒子的弹性模量显著高于基体，会使基体中的位错受到来自相界面的排斥力（如图1-40所示）。所以，实际上，在硬粒子周围会有一位错不能进入的区域，如图6-13(b)所示。这相当于因镜像排斥力而使粒子的直径“增加”了“ $2x$ ”，则有：

$$L_e \approx L - D - 2x \quad (6-45)$$

在一般情况下，可取 $x \approx 0.1D$ ，则

$$L_e = L - 1.2D$$

因此，Orowan公式应取下面的形式：

$$\sigma^* = \frac{Gb}{L - 1.2D} \quad (6-46)$$

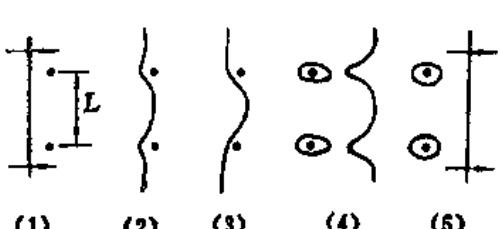


图 6-12 位错绕过弥散相粒子并在其周围形成位错圈
成位错圈

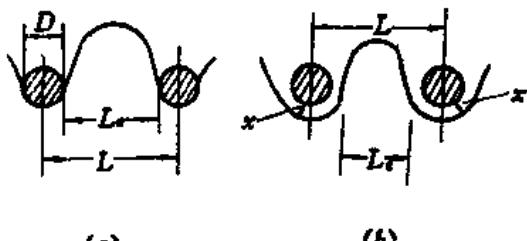


图 6-13 有效粒子间距
(a)不考虑界面的影响 (b)考虑界面的影响

增大。故两者对强化效果的影响有一定的补偿作用。这说明，综合考虑粒子的尺寸与间距对强化效果的影响较为合理。

三、硬粒子与基体变形不协调对强化的影响

在Orowan模型中，仅考虑了位错线弓弯绕过硬粒子时，由于位错线长度增加所引起的线张力阻力。所得结果往往偏低，尚须考虑硬相粒子与软基体变形的不协调性⁽¹⁵⁾。对于临界切应力而言，仅和起始塑性变形有关，故可主要考虑两相在弹性变形阶段的不协调性。如图6-15所示，可把在外加切应力作用下硬粒子与基体的变形协调关系(6-15a)分解为三个元过程：(1)设想取出圆形的硬粒子，则在外加切应力作用下，基体发生弹性剪切变形，使孔的形状改变(如图6-15b)；(2)将硬粒子放回已变形的孔中时，因粒子本身不变形必然引起基体产生附加的弹性变形(如图6-15c中小箭头所示)，以维持界面的连续性；(3)由于两相变形不协调的结果，引起与外加切应力方向相反的反向切应力，如图6-15(d)。这种反向切应力是由两相变形不协调所引起的一种像应力。每一个硬粒子均可以给出一对反向切应力。在基体中含有许多弥散分布的硬粒子的情况下，可由若干对反向切应力叠加给出总的反向切应力，相应便引起反向的弹性切应变，如图6-16所示。这样，晶体在外加切应力作用下所产生的有效弹性切应变 ϵ_s 应由下式给出：

$$\epsilon_s = \epsilon_A - \epsilon_B \quad (6-54)$$

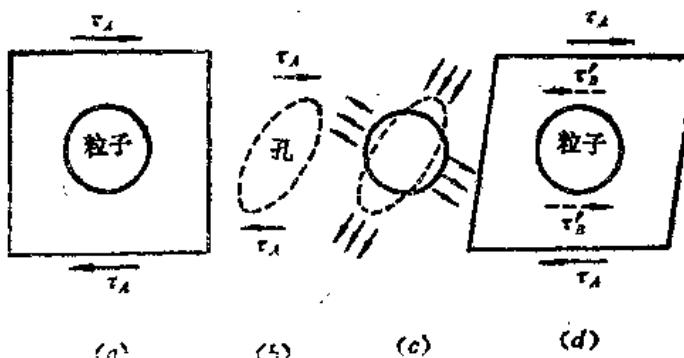


图 6-15 硬粒子与基体变形不协调模型

(a)在外加切应力作用下基体产生弹性切变 (b)取走粒子，在 τ_A 作用下孔切变
(c)放回粒子引起基体附加变形 (d)粒子附近基体中产生反向切应力($\tau'_B \propto 1/r^3$)

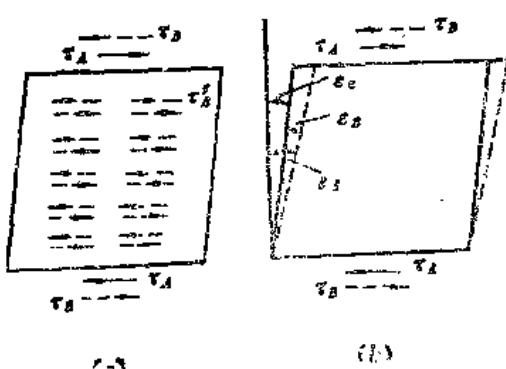


图 6-16 由许多硬粒子引起反向切应力及反向切应变示意图(a)将每一硬粒子视为引起短程的像应力源，并相互叠加在晶体表面引起反向切应力 (b)晶体的有效切应变 ϵ_s 及反向切应变 ϵ_B

式中， ϵ_A 为外加切应变， ϵ_B 为反向像切应变。因此，位错在外加切应力作用下所需克服的有效切应力应为：

$$\tau_s = \tau_A - \tau_B \quad (6-55)$$

式中， τ_A 为外加切应力， τ_B 为反向像切应力。由Orowan公式所求出的临界切应力应为 τ_s^* ，故得总的阻力为：

$$\tau_A^* = \tau_s^* + \tau_B^* \quad (6-56)$$

式中， τ_s^* 为产生起始塑性变形所需的外加切应力； τ_B^* 为产生起始塑性变形所需克服

的剪切应力； τ^* 为位错线张力所引起的有效临界剪切应力。对 τ^* 可视需要由式(6-43)、(6-46)或(6-53)加以计算。

§ 6-4 第二相强化合金的加工硬化行为

加工硬化是金属与合金的重要力学行为，不但直接影响强度而且也会影响塑性。如图6-17所示，塑性失稳的临界条件是：

$$\frac{d\sigma}{de} \leq \sigma \quad (6-57)$$

所以，可通过使 $d\sigma/de$ 增加的幅度大于流变应力增加的幅度来提高均匀真应变 ϵ_u 。需加以注意的是，这里所讲的 $d\sigma/de$ 是指大变形时的加工硬化率。一般趋势是，大变形时的 $d\sigma/de$ 愈高，材料的均匀塑性趋于变好。但若增加小变形时的 $d\sigma/de$ 时，却会使均匀塑性变坏。

提高金属与合金的加工硬化率的关键在于合理选择强化机制。如以Al-Cu合金单晶体变形为例，可能涉及的强化机制有固溶强化、沉淀强化及弥散强化三种。相应的应力-应变曲线如图6-18所示。同纯金属相比，固溶强化几乎不改变加工硬化率，但可使临界剪切应力得到了显著提高，其结果会导致均匀塑性下降。这是常见的固溶强化机制的重要特点。利用沉淀强化时，也几乎不改变合金的加工硬化率，其应力-应变曲线基本上与纯金属相平行。在过时效弥散强化条件下，临界剪切应力同纯金属相比提高不多，却使合金的加工硬化率显著增大。峰时效时，也有较高的加工硬化率。根据上述不同状态下加工硬化率变化及流变应力提高的幅度，可大体上推测出如下趋势：固溶强化与沉淀强化（欠时效）对均匀塑性不利，弥散强化（过时效）有利于改善均匀塑性，而峰时效对均匀塑性影响不大或稍有下降。

下面分别介绍沉淀强化（欠时效）与弥散强化（过时效）两种状态下合金的加工硬化行为。

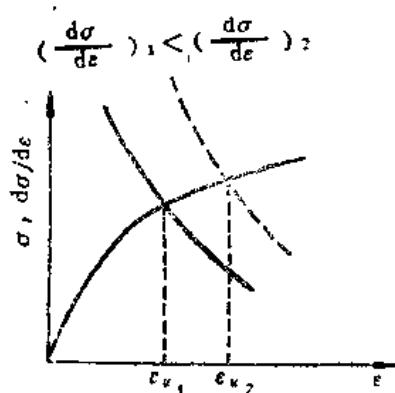


图 6-17 加工硬化率对均匀真应变的影响

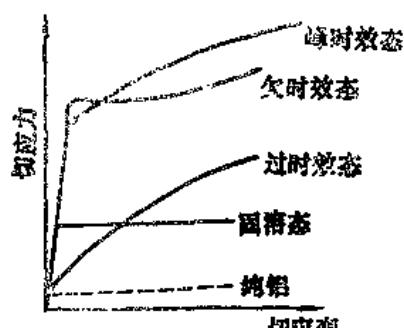


图 6-18 不同状态下 Al-Cu 合金单晶的应力-应变曲线示意图

一、沉淀强化合金的加工硬化行为

沉淀强化机制主要着眼于位错切过沉淀相粒子受阻，加工硬化率较低。形变后，滑移线粗而明显，而且间距较大。这说明变形具有明显的宏观不均匀性。对这种变形行为，可作如下两方面分析：

1. 当第一根位错切过沉淀相粒子时，在粒子表面形成滑移台阶，从而使第二根位错可切割的面积就会减小，并依次类推。这样，每一位错切过粒子的同时，都为后续位错的切过提供了方便条件，使沉淀相粒子对位错运动的阻力逐渐减小。因此，相应的加工硬化率便逐渐降低，并使位错易于沿同一滑移面运动，产生平面滑移。

2. 在有沉淀相粒子存在的情况下，可能使位错平面塞积群受到分割，从而减小其对位错源的反向作用力，降低加工硬化率。

上述分析表明，通过切过机制产生沉淀强化效应的主要特点是临界切应力较高，而加工硬化率较低。或同纯金属相比，其加工硬化率基本不变。故可认为二者加工硬化机制基本相似，只是晶格摩擦力不同而已。对这一加工硬化行为特点在设计和使用沉淀强化型合金时，需加以注意。要防止因加工硬化率较低而带来均匀塑性较小的缺点。这种强化机制的好处是，因沉淀相粒子尺寸较小并与母相有共格关系，使界面匹配较好，因而常表现出较好的断裂应变。

二、弥散强化合金的加工硬化行为

同沉淀强化不同，弥散强化主要来自位错绕过第二相粒子所引起的阻力，加工硬化率较高。形变后，滑移线较短且不易观察，说明变形的宏观均匀性较好。对这种变形行为，可从以下两方面加以说明：

1. 位错绕过粒子对加工硬化的影响

如前所述，位错绕过障碍粒子时，在粒子周围留下位错环。而且，在粒子与位错环之间，以及各位错环之间均保持一定距离。随着绕过障碍的位错数量的增多，将使粒子的有效间距逐渐减小。这便是流变应力随着应变量增加而迅速提高的原因（见6-46式）。

Fisher、Hart和Pry等人⁽¹⁶⁾假设只有一个滑移系统激活时，按照Orowan机制在一定应变量下，每一个硬粒子周围都塞积着N个位错环，如图6-19所示。根据Ansell⁽¹⁷⁾的计算，位错塞积沿滑移面在其中心处所产生的反应力为：

$$\tau_N = \frac{NGb}{r} \quad (6-58)$$

式中，N为每一粒子周围塞积的位错环数，r为粒子半径。考虑到粒子体积分数f的影响，求出相对于无弥散相的强化增量为

$$\tau_N = \frac{cf^{\frac{3}{2}}NGb}{r} \quad (6-59)$$

式中，c约等于3。应该指出，这一理论模型过于简单，只能用于定性描述弥散强化合金的加工硬化行为。实际上，在硬粒子周围形成平面塞积是一种极端情况。由于各位错圈

的应力场相互叠加，会导致领先位错发生交滑移或攀移，使位错塞积出现钝化并形成位错缠结，如图6-20所示。其结果是在塑性变形过程中，使硬粒子周围的位错密度显著增加，导致加工硬化率提高。这种在硬粒子周围所形成的大量缠结位错是在塑性变形过程中，由位错之间偶然相遇而陷住的，称为随机储存位错 (Statistically stored dislocations)。

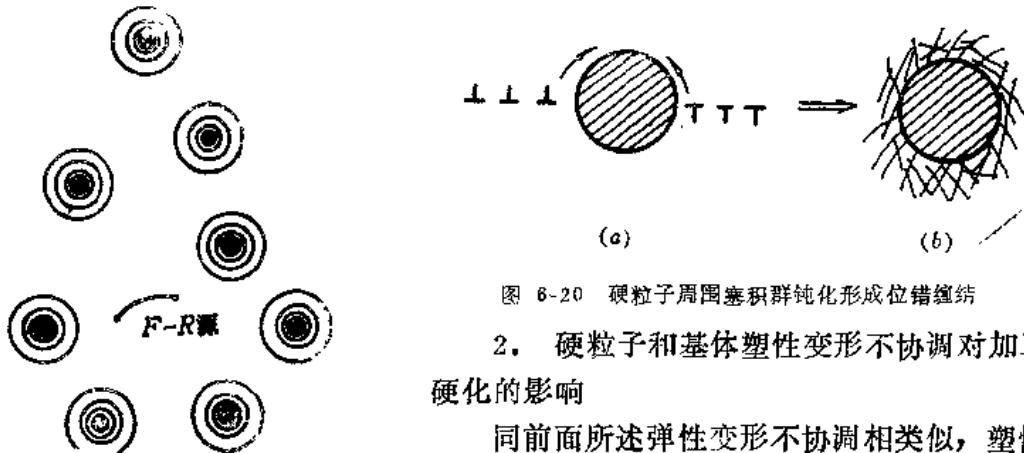


图 6-19 Fisher, Hart 和 Pry 理论模型

同前面所述弹性变形不协调相类似，塑性变形时为使界面不开裂，也要在硬粒子附近基体中形成反向的塑性切变（协调变形），如图6-21所示。其结果在硬粒子周围形成协调变形位错，引起位错密度及加工硬化率提高。由于协调变形与相应位错密度之间存在一定的几何关系，文献上常将协调变形位错称为几何必须位错 (Geometrically necessary dislocations)^[18]。可以证明，协调变形位错密度 ρ_c 主要取决于塑性切应变梯度^[19]，即

$$\rho_c = \frac{1}{b} - \frac{\partial \gamma}{\partial x} \quad (6-60)$$

式中， $\partial \gamma$ 为单滑移系统沿 x 方向开动引起的塑性切应变增量。可见，塑性切应变越大，几何必须位错密度越高。

在硬粒子周围形成协调位错的机制示于图6-22及6-23。首先，可借助于 Orowan 机制在硬粒子周围基体中形成一组切变位错环，以保持“孔”的形状为球形(见图6-22)。

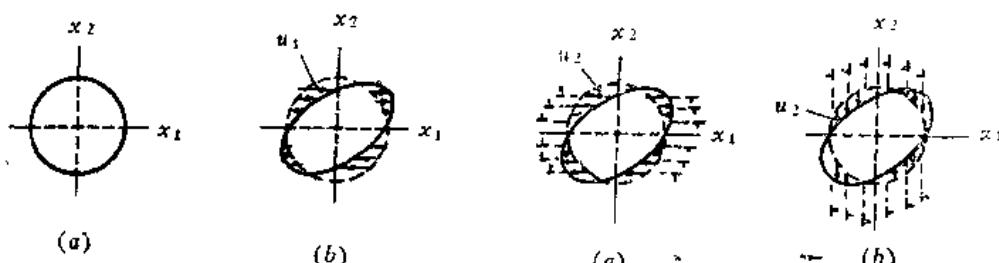


图 6-21 硬粒子与基体协调塑性变形示意图

(a) 变形前球形粒子与孔配合 (b) 孔切变
并受粒子约束引起基体产生反向塑性切应变

图 6-22 在硬粒子周围基体中形成切变位错环示意图

图中所示的两种情况完全等效，主要取决于主滑移面的取向。其次，也可借助于在硬粒子附近形成棱柱位错环产生协调变形（见图6-23）。棱柱位错环的形成涉及物质的迁

文献上，将式中 λ 称为位错几何滑移距离。对球形粒子弥散强化合金，取 $\lambda=r/f$ ；在强化相呈片状时，取 λ 等于片间距。在假设协调变形以棱柱位错环机制为主时，可将流变应力根据(3-37)式写为

$$\tau = \tau_0 + \alpha G b \left(\frac{2\gamma}{\lambda b} \right)^{\frac{1}{2}}$$

或

$$\tau = \tau_0 + \alpha' G \left(\frac{\gamma f b}{2r} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6-64)$$

其中， τ_0 为晶格摩擦力， α 同 α' 为两常数。这样便得到了抛物线型的加工硬化曲线。

综上所述，硬粒子弥散强化有利于形成协调变形位错，提高加工硬化率。这将有益于改善合金的均匀塑性。但若硬粒子本身开裂或在其与基体的界面处开裂，易于形成裂纹源，降低合金的断裂抗力。故宜尽量减小弥散相粒子尺寸，以综合改善合金的强度与塑性。一般认为，将弥散相粒子直径减小到20nm以下，可有效防止粒子本身及界面开裂。目前，这在实践上尚有一定难度，可作为合金组织设计所追求的目标。

§ 6-5 纤维强化机制

纤维强化主要着眼于将具有高强度的金属或非金属纤维引入塑性的基体金属，获得复合材料，造成显著的强化效果。同上述的沉淀强化及弥散强化不同，增强纤维的作用已不单纯作为阻碍基体金属中位错运动的障碍，其本身要能直接承受载荷。基体组元主要用于粘结或胶合增强纤维并传递应力。在外力作用下，基体产生弹性乃至塑性变形时，会发生应力由基体向增强纤维转移现象。下面分析纤维增强金属基复合材料的变形行为及强度表达式^[20]。

一、纤维增强复合材料的变形行为

在单向拉伸条件下，连续长纤维增强复合材料的应力-应变曲线如图6-25所示。在未达到基体的弹性极限之前，纤维与基体均只产生弹性变形，可由下式求得复合材料的弹性模量 E_c ：

$$E_c = E_f V_f + E_m V_m = E_f + V_m (E_m - E_f) \quad (6-65)$$

式中， V_f 和 V_m 分别为纤维与基体的体积分数； E_f 和 E_m 分别为纤维与基体的弹性模量。在应力-应变曲线的第二阶段，基体开始塑性变形，而纤维仍进行弹性变形。这一阶段大体上开始于无纤维基体的屈服应变，故可用基体的应力-应变曲线的斜率取代 E_m ，并由下式求得 E_c ：

$$E_c = E_f V_f + \left(\frac{d\sigma}{d\varepsilon} \right)_m V_m \quad (6-66)$$

因在基体金属塑性变形时，其应力-应变曲线的斜率 $(d\sigma/d\varepsilon)_m$ 小于 E_m ，又可得出：

$$E_e \approx E_f V_f + E_m (1 - V_f) \quad (6-67)$$

故可以认为，纤维增强复合材料在第二阶段变形具有准弹性。在第三阶段变形时，纤维与基体均发生塑性变形。由金属纤维增强的复合材料易于呈现此变形阶段；而若纤维的脆性较大（如硼纤维）时，往往在此阶段开始便发生断裂。最终在第四阶段，将由纤维断裂导致整个试样的断裂。

二、长纤维增强复合材料的抗拉强度

在上述应力-应变曲线的四个阶段中，以第二阶段最为重要。设 σ_f 为纤维的抗拉强度（近似等于其断裂强度）， σ'_m 为当纤维被拉伸到其抗拉强度时基体所承受的拉伸应力，则复合材料的抗拉强度可写成

$$\sigma_c = \sigma_f V_f + \sigma'_m (1 - V_f) \quad (6-68)$$

因此， σ_c 应与 V_f 呈直线关系（混合律）。

利用纤维强化的目的旨在使复合材料的强度 σ_c 显著高于基体金属的抗拉强度 σ_m ，即 $\sigma_c \gg \sigma_m$ 。由此可由下式求得所需纤维的临界体积分数 V_c ：

$$\sigma_f V_f + \sigma'_m (1 - V_f) \geq \sigma_m$$

即

$$V_c = \frac{\sigma_m - \sigma'_m}{\sigma_f - \sigma'_m} \approx \frac{\sigma_m}{\sigma_f} \quad (6-69)$$

若 V_f 值很小时，复合材料的强度可能不遵从(6-68)式。这是因为难于有足够数量的纤维有效地约束基体延伸变形，导致纤维迅速达到断裂应力而发生断裂($\sigma_f = 0$)。在这种情况下，需由基体通过应变硬化承受载荷，故由(6-68)式可得出复合材料的强度应符合下式：

$$\sigma_c \geq \sigma_m (1 - V_f) \quad (6-70)$$

因此，欲由(6-68)式给出复合材料的强度时，所需纤维的最小体积分数应为：

$$V_{min} = \frac{\sigma_m - \sigma'_m}{\sigma_f + \sigma_m - \sigma'_m} \quad (6-71)$$

当 $V_f < V_{min}$ 时，复合材料的强度将由(6-70)式给出。纤维的体积分数与复合材料强度的关系，以及 V_c 和 V_{min} 所在位置如图6-26所示。

应该指出，上述分析是假设纤维与基体的轴向应变相等所得出的结果。实际上，两组元的应变难于相等，应用混合律计算尚有一定困难。Mileiko^[21]针对纤维与基体均有明显塑性的复合材料得出如下修正公式：

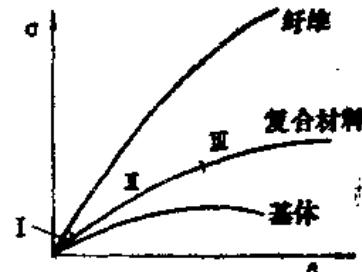


图 6-25 纤维、基体及复合材料的应力-应变曲线

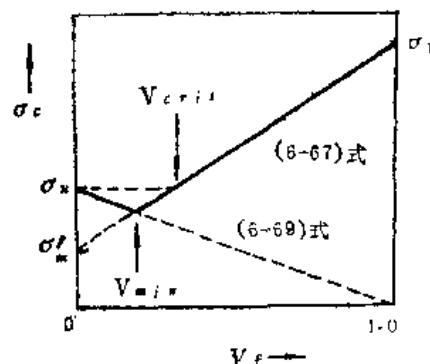


图 6-26 连续纤维增强复合材料的强度与纤维体积分数的关系

$$\sigma_c = \sigma_f V_f \lambda_f + \sigma_m V_m \lambda_m \quad (6-72)$$

式中，

$$\lambda_f = \left(\frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_f} \right)^{e_f} \exp(\varepsilon_f - e_f);$$

$$\lambda_m = \left(\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_m} \right)^{e_m} \exp(\varepsilon_m - e_m)$$

其中 ε_f 、 ε_m 和 e_c 分别为纤维、基体及复合材料与抗拉强度相对应的真应变。显然，若纤维与基体等应变（即 $\varepsilon_f = \varepsilon_m$ ）时，(6-72) 式便简化为 (6-68) 式。

三、短纤维增强复合材料的抗拉强度

纤维的长度是影响复合材料性能的重要因素。由于纤维与基体金属间在弹性模量上有很大差别，受轴向载荷时会在两者界面产生切应力。同时，纤维本身还要承受轴向拉应力。图6-27示出这两种应力沿纤维长度方向上的变化。在纤维的两端切应力较大，引起基体金属产生塑性流变。为充分利用纤维的高强度，在纤维应变达到其断裂应变前，应避免基体中的流变区从纤维端部向中部发展。故在基体与纤维间传递的应力限度将由基体金属的临界切应力 τ_0 所决定。在通常情况下，可将传递到长度为 L 和直径为 d 的纤维上的最大拉应力 σ_{max} 如下式所示：

$$\sigma_{max} = \frac{2\tau_0 L}{d} \quad (6-73)$$

若令 σ_{max} 等于纤维的断裂强度 σ_f ，则可得出纤维的临界长度为

$$L_c = \frac{\sigma_f d}{2\tau_0} \quad (6-74)$$

或者，临界长径比为

$$\frac{L_c}{d} = \frac{\sigma_f}{2\tau_0} \quad (6-75)$$

当纤维的长度超过 L_c 时，复合材料将因纤维断裂而导致破坏，故可充分发挥其强度潜力。

可由下式给出短纤维（包括晶须）增强复合材料的抗拉强度：

$$\sigma_c = \sigma_f V_f \left[1 - (1 - \beta) \frac{L_c}{L} \right] + \sigma'_m (1 - V_f) \quad (6-76)$$

其中， β 为约等于 0.5 的常数。可见，短纤维的强化效果低于连续的长纤维。纤维越短，强化效果越小。但当 L_c/L 值较小时，这种差别明显变小。因此，利用纤维强化时，纤维的弹性模量、强度及体积分数越高越好，并且宜使纤维在金属基体中连续地同方向分布。

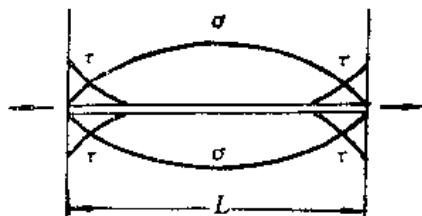


图6-27 在纤维中拉应力 σ 及界面处切应力 τ 沿纤维长度方向上的变化

参 考 文 献

- [1] E.Orowan,in Discussion in the Symposium on Internal Stresses in Metals and Alloys,Inst.Metals,London,(1948),451.
- [2] J.Friedel,Dislocations,Pergamon Press,New York,(1964).
- [3] N.F.Mott and F.R.N.Nabarro,Report of a Conference on Strength of Solids,1(1948).
- [4] V.Gerold and H.Haberkorn,Phys.Stat.Sol.,16(1966),675.
- [5] H.Gleiter,Acta Met.,15(1967),1213;Angew Phys.,23(1967),108.
- [6] A.Kelly and R.B.Nicholson,Progress in Materials Science,Vol.10, No.3,Pergamon Press,New York,(1963).
- [7] L.M. Brown and R.K.Ham,in Strengthening Methods in Crystals, A.Kelly and R.B.Nicholson,eds.,John Wiley and Sons,New York, (1971),62.
- [8] J.Dundurs and T. Mura,J.Mech.Phys.Sol.,12(1964),177.
- [9] P.M.Kelly,Inst.Met.Rev.,18(1973),31.
- [10] A.Melander,et.al.,Acta Met.,26(1978),267.
- [11] K.C.Russell and L.M.Brown,Acta Met.,20(1972),969.
- [12] P.B.Hirsch and A.Kelly,Phil.Mag.,12(1965),881.
- [13] H.Gleiter and E.Hornbogen,Mater. Sci.Eng.,2(1967),285.
- [14] I.LeMay, Principles of Mechanical Metallurgy,Edward Arnold Ltd., London,(1981),185.
- [15] J.D.Eshelby,Proc.Roy.Soc.,A241(1957),376.
- [16] J.C.Fisher,E.W.Hart, and R.H.Pry,Acta Met.,1(1953),336.
- [17] G.S.Ansell,Acta Met.,8(1960),156;9(1961),518.
- [18] A.H.Cottrell,The Mechanical Properties of Matter.,Wiley,(1964), 277.
- [19] M.F.Ashby,in Strengthening Methods in Crystals, A. Kelly and R.B.Nicholson,eds.,John Wiley and Sons,New York,(1971),138.
- [20] G.E.Dieter,Mechanical Metallurgy,Second Edition, McGraw-Hill, New York,(1976),227.
- [21] A.Kelly,in Strengthening Methods in Crystals,A.Kelly and R.B. Nicholson,eds.,John Wiley and Sons,New York,(1971),450.

第七章 强化机制在金属材料组织设计中的应用

长期以来，提高金属材料的强度是人们所追求的重要目标。位错理论与强化机制的发展，为金属材料的组织设计提供了指导原则。本章简要介绍利用强化机制发展高强度金属材料的基本思路。

§ 7-1 晶界强化效应的利用

一、晶界强化在单相合金中的利用

如第四章所指出，晶界强化是使金属材料获得高强度的有效方法。其强化效应可由 Hall-Petch 公式表达。由 (4-18) 及 (4-21) 式可以看出，同材料与处理工艺有关的参数主要涉及：取向因子 m ，单个位错运动的摩擦阻力 τ_0 ，激活位错源所需的临界切应力 τ^* ，及晶粒直径 d 。增大这四个参数均有利于强化。 m 值可有效地反映滑移系多少对激活滑移所需应力的影响，主要取决于晶体结构。在发生有序-无序转变的合金中，有序化使交滑移难于发生，有效地减少滑移系的数量，使 Hall-Petch 斜率增大。 τ_0 是反映合金基体组织中位错运动的摩擦力，随强化机制而不同。提高 τ_0 会减小晶界对强度的相对贡献。如对许多时效硬化型合金而言，控制晶粒尺寸已不再是热处理的主要着眼点。

τ^* 是开动滑面上位错源所需的临界切应力，易受溶质原子在位错上偏聚或沉淀所控制。如在低碳钢中，可由碳在位错线偏聚引起应变时效。在位错线上析出细小的沉淀相粒子能有效钉扎位错。造成适当的过饱和是在位错线上产生间距小的沉淀相粒子的必要条件，可作为提高 Hall-Petch 斜率的有效方法。

在 Hall-Petch 公式中，最重要的组织参数是晶粒直径 d 。不管 m 和 τ^* 值如何，只有在晶粒细小的情况下，才有可能使公式中反映晶界强化效果的第二项具有较大数值。宜将晶粒尺寸减小到 $0.5\sim 5\mu\text{m}$ 范围内，可有效地提高合金的强度。在不发生同素异构转变的单相合金中，细化晶粒的基本途径是提高再结晶形核率及防止晶界移动。

为提高再结晶的形核率，可在组织中引入极少量（体积分数小于 1%）的第二相粒子，作为再结晶核心。在冷变形过程中，非变形粒子周围形成协调变形及大量的几何必须位错，使再结晶的形核率提高。细小的第二相粒子还有利于钉扎晶界，防止晶粒长大。这种钉扎效应来自晶界扫过粒子时，由粒子与基体的界面施加在晶界上的表面张力。

二、晶界强化在复相合金中的利用

利用复相组织是获得超细晶粒的有效方法之一。如通过形成共晶或共析型层片状两相组织，可使合金的强度与片间距呈Hall-Petch关系（见图7-1）。但一般而言，层片型组织的塑性较低，宜获得均匀分布的细小等轴晶粒的复相组织。

在相数少于晶粒周围的平均晶粒数的情况下，相界仍起控制作用，使晶粒长大过程需

通过相界移动发生。晶界移动仅涉及原子的短程运动，而相界移动却需要大量原子在晶粒尺度范围内长程迁移，以维持两相平衡的化学成分。故在有相界存在的条件下，易于显著细化晶粒。两相的自由能差别越大，细化效果越明显。这种细化晶粒效应称为化学稳定化。

双相组织的强度遵从 Hall-Petch 关系。而且，其 Hall-Petch 斜率高，可比其中组成各相的纯金属高约 3 倍。即使各相本身的强度不高，却可从两相分布细小弥散的复合体中获得高强度。若两相的性能相差较大时，主要由强度高的一相决定双相组织的强度，并服从混合律。故在双相合金组织设计时，应适当权衡组织细化与两相性能匹配的重要性。

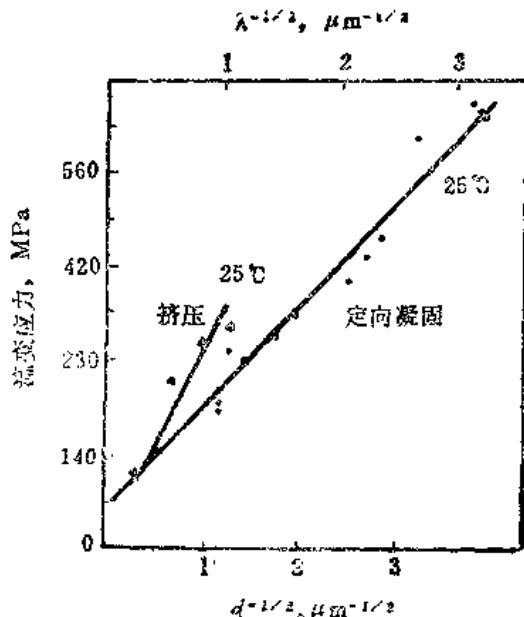


图 7-1 Cu-Ag 共晶合金的室温屈服强度与层片型组织片间距 (λ) 及等轴组织晶粒直径 (d) 的关系

§ 7-2 固溶强化效应的利用

固溶强化可看成是很小的可变形质点引起的强化。利用固溶强化时，溶质原子应在与溶剂原子尺寸差别较大的条件下有足够的固溶度，并形成四方点阵畸变。但这会引起溶解热的增加，导致固溶度下降。Kelly 和 Nicholson^[1]建议，可利用两种彼此交互作用强而同溶剂原子交互作用弱的溶质原子，同时实现固溶强化。如以 Fe-Mn-N 合金为例，由于 Mn 和 N 的交互作用可使三元合金的强度显著高于二元合金。固溶强化对显微组织不敏感。为促进固溶强化可通过无扩散型同素异构转变，使溶质原子在基体组织中有尽可能大的非平衡浓度（如钢中马氏体）。

有序强化是固溶强化的一种重要方式。可以通过热处理改变反相畴尺寸等组织因素影响有序度，以改变合金的强度。

通常固溶强化只提高起始塑变抗力，而不改变加工硬化率，降低均匀真应变。

超点阵位错形式成对运动，由领先位错切过有序相粒子所形成的反相畴界可被沿同一滑移面运动的尾随位错消除。由于领先位错与尾随位错间存在斥力，使合金的强度有所降低。可在合金的组织中引入一定数量的弥散分布的不可变形粒子，以破坏超点阵位错。这样便可迫使位错单个运动，有利于提高强度。

2. 在一般情况下，沉淀相粒子易在晶界、位错等处非均匀形核。晶界沉淀相易降低合金的塑性，而对强度影响不大。沉淀相在位错上形核所需的过冷度仅为均匀形核的 $1/2$ 到 $1/3$ 。在位错上择优沉淀是大多数时效硬化型合金的重要组织特征。为充分利用位错上沉淀粒子的强化效应，宜显著提高位错密度达 10^{10} 到 10^{11}cm^{-2} ，或在单根位错上实现反复形核沉淀。可通过在淬火与时效之间进行冷变形引入位错，但难于得到均匀的位错分布。在冷变形合金中，位错易以直径约为 $1\mu\text{m}$ 的胞状结构形式存在，导致沉淀相粒子分布不均。在有的情况下，可利用位错作为沉淀相粒子重复形核的场所。当在位错线上形成碳化物沉淀时，可产生体积膨胀（如对NbC可达 $20\sim25\%$ ），导致局部空位贫化而引起位错攀移。其结果便使位错线离开已沉淀的一排粒子，成为重新诱发粒子沉淀的场所。这种在位错上反复沉淀的机制如图7-3^[2]所示。图中表明NbC粒子在Frank部分位错上形核后，通过相邻粒子间位错线攀移引起弓弯，并最终抛下沉淀粒子而到达新的位置。在Frank位错所扫过的区域形成层错。由这种机制在奥氏体钢中Frank位错上反复沉淀的结果，可在发生攀移的{111}面上形成一排细小弥散的粒子。在每一列内粒子间距很小（约 10nm ），而在列间较大（约 $1\mu\text{m}$ ）。若形成这种具有两种粒子间距的微观组织，将有利于强化^[3]。利用这种在位错线上反复形核沉淀的机制可取得相当于提高位错密度的效果。Kotval^[4]认为，奥氏体的层错能及粒子与基体间的错配度对于位错上反复形核具有重要影响。层错能不宜太低，以防位错在诱发沉淀之前分解成Shockley位错；而且，也不宜过高以致层错不易扩

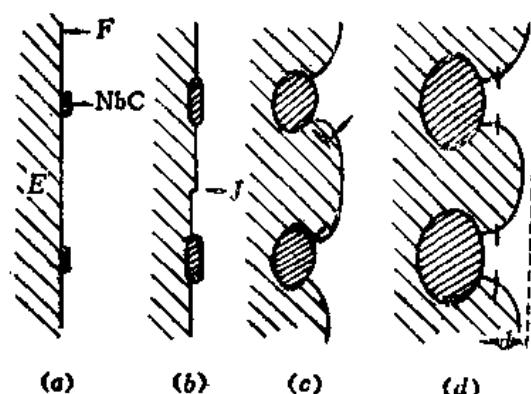


图7-3 位错上反复沉淀机制示意图^[2]

- (a) NbC粒子在Frank位错上形核
- (b) NbC粒子长大
- (c) NbC粒子进一步长大引起粒子间位错线攀移弓弯并在所扫过的区域形成层错
- (d) 粒子继续长大引起相邻的弓弯位错平行线段间相互吸引消毁并使位错线前进距离 d (图中F表示Frank位错; E表示层错; J表示割阶)

展。在沉淀粒子与基体间要有足够大的错配度，能产生足够的驱动力以推动位错从已析出的沉淀粒子列离开，为进一步诱发沉淀准备条件。从这两方面的必要条件出发，碳化物与奥氏体可组成适合于形成位错上反复沉淀的材料体系。在Cu-Ag合金中也发现有这种沉淀效应^[6]。

3. 在时效过程中形成过渡相，有利于提高沉淀粒子分布的均匀性及强化效果。在许多合金系（如Al-Cu合金等）中，存在着晶体结构介于平衡沉淀相与基体之间的过渡相，其形核功较小而形核率较高。过渡沉淀相的分布比较均匀，有利于提供较为理想的第二相强化组织。强化效应主要来源于过渡相粒子与基体间的错配效应及基体中滑移位错

与粒子的交互作用。如可将GP区（溶质原子富集区）看成一种特殊的过渡沉淀相，与基体保持完全共格关系，具有显著的沉淀强化效应。GP区还可以成为诱发半共格过渡沉淀相乃至平衡沉淀相形核的场所，有利于提高强化相分布的均匀性。GP区强化的不足之处在于其尺寸很小，易因热扰动而被位错切过，使合金在较低的温度下才能处于充分的强化状态。

4. 利用基体金属的同素异构转变提高析出相的体积分数，是充分发挥沉淀强化效果的有效途径。溶质原子在基体金属发生同素异构转变前后出现溶解度的显著变化，有利于在转变后形成高度过饱和的固溶体。长期以来，这已经成为钢的强化基础。钢中的马氏体便是碳经 $\gamma \rightarrow \alpha$ 转变后所形成的过饱和固溶体，可通过析出细小的碳化物粒子而显著强化。如在含有V、Nb和Mo等元素的二次硬化钢中，马氏体经高温回火析出细小弥散的合金碳化物使强度显著提高。这些碳化物粒子很小时，可被位错切过而视为可变形粒子^[6]；而在尺寸较大时成为不可变形粒子，使加工硬化率提高。利用铁的同素异构转变也可在马氏体时效钢中形成置换式合金元素的过饱和固溶体，为时效析出大量金属间化合物（如 Fe_2Mo 、 Ni_3Ti 等）准备必要条件。

5. 设法避开平衡相图对固溶度的限制，是合金组织设计时提高析出相体积分数的另一有效途径。几乎所有的金属相互间皆可熔合，从液态急冷可获得固溶度极高的非平衡组织，能打破平衡相图对沉淀相体积分数的热力学限制^[7]。如在一般情况下，Si和Fe等元素在Al中的固溶度仅在1%以下，但可用这种方法获得具有高过饱和度的Al-11%Si^[8]和Al-8%Fe^[9]等合金。在随后时效时，所析出的细小弥散的沉淀相粒子只有在合金重熔时才能回溶。近年来，快速凝固技术的迅速发展已为新型弥散强化合金的应用开辟了广阔的前景。另一种避开相图对固溶度限制的方法是人为地向一种金属中注入一种金属原子。如可采用离子注入技术在Al中注入Pb获得过饱和固溶体，经时效后析出大量沉淀相粒子^[10]。离子注入可用于制取厚度约 $0.1\mu\text{m}$ 的表面硬化层。为增加硬化层厚度，也可以注入易扩散元素（如N），通过其与基体金属内合金元素发生反应而形成高体积分数的可变形沉淀相粒子。

§ 7-4 不可变形粒子强化效应的利用

对不可变形粒子的基本要求是间距小，呈均匀弥散分布。相对而言，其本身的尺寸影响较小。若按单位体积分数同可变形粒子强化相比，不可变形粒子的强化率要高得多。即便在体积分数小于1%时，细小弥散分布的硬粒子也可以引起显著的强化效应^[11]。

利用不可变形粒子弥散强化的主要困难在于获得足够小的粒子间距。采用通常的过时效析出硬粒子时，因其本身结构和性能与基体差别较大而难于均匀弥散形核。在有过渡相沉淀的情况下，对提高平衡相粒子分布的均匀性也无很大补益。即便采用分级时效，也难于完全使硬相粒子呈细小弥散分布，使发展过时效硬化型高强度合金遇到一定困难。通过基体金属的同素异构转变使合金元素获得很高的过饱和度并沉淀析出大量金属间化合物，为克服这种困难开辟了一条途径，如发展马氏体时效钢的思路便是如此。

应用粉末冶金技术使硬粒子弥散分布于金属基体中，是获得弥散强化组织的有效方

- [3] H.J. Harding and R.W.K. Honeycombe, J.Iron Steel Inst., 204 (1966), 259.
- [4] P.S. Kotval, Trans. Met. Soc., AIME, 242(1968), 1651.
- [5] R.Räty and H.M. Miekk-oja, Phil. Mag., 18(1968), 1105.
- [6] C.R. Simcoe, A.H. Nehrenberg, V.Biss, and A.P.Coldren, Trans. ASM, 61(1968), 834.
- [7] P. Duwez, Trans. ASM, 60(1967), 607.
- [8] M. Itagaki, B. C. Giesson, and N. J. Grant, Trans. ASM, 61 (1968), 1330.
- [9] H. Jones, Mat. Sci. and Eng., 5(1969), 1.
- [10] P.A. Thackeray and R.S. Nelson, Phil. Mag., 19(1969), 169.
- [11] M.Von Heimendahl, Acta Met., 15(1967), 1441.
- [12] G.C. Smith, Composite Materials, Iliffe, London, (1966), 27.
- [13] D.R. Maurice and T.H. Courtney, Met.Trans., 21A(1990)2,289.
- [14] Alan Lawley, Journal of Metals, (1986)8, 15.
- [15] F. M. A. Carpay, Acta Met, 18(1970), 747.
- [16] D. T. Llewellyn and J. D. Murray, Metallurgical Developments in High Alloy Steels, Iron and Steel Institute Special Report No. 86, London, (1964), 197.
- [17] P. L. Mangonon and G. Thomas, Met. Trans., 1(1970), 1587.