

## § 7-9 实际晶体中的位错

前面介绍了位错的一般性质，本节将讨论实际晶体中的位错，特别是面心立方晶体中的位错。

### 一、面心立方晶体中的位错

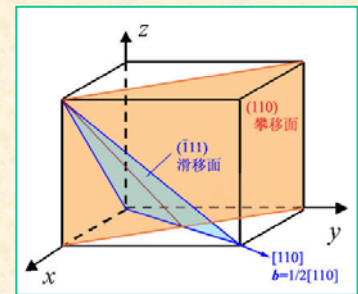
#### 1、全位错

**定义：**柏氏矢量为沿着滑移方向的原子间距的整数倍的位错。

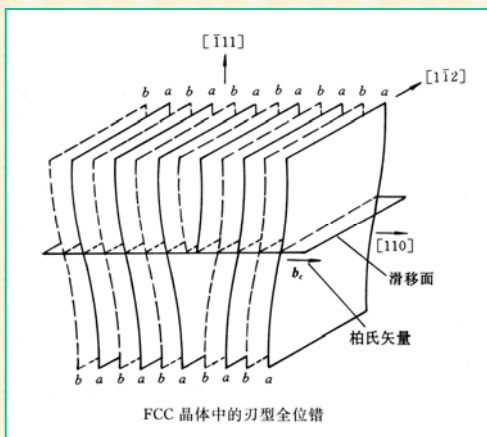
若沿着滑移方向连接相邻原子的矢量为 $s$ ，则全位错的柏氏矢量 $b=ns$ ，为正整数，一般 $n=1$ ，此时位错的能量最低。

FCC晶体的全位错的柏氏矢量应为 $b=a/2\langle 110 \rangle$ ，简写成 $b=1/2\langle 110 \rangle$ 。全位错的滑移面是 $\{111\}$ ，刃型位错的攀移面（垂直于滑移面和滑移方向的平面）是 $\{110\}$ 。

图中FCC晶体的滑移面为 $(\bar{1}11)$ 晶面，柏氏矢量方向为 $[110]$ 晶向， $b=1/2[110]$ ；半原子面（攀移面）为 $(110)$ 晶面，其堆垛次序为 $ababab\cdots$



将滑移面 $(\bar{1}11)$ 水平放置，攀移面 $(110)$ 则为垂直位置，FCC中刃型全位错如下图所示。由于形成位错时不能改变FCC的晶体结构，故在 $a$ 层和 $b$ 层之间必须插入 $b$ 、 $a$ 两层半原子面才能形成全位错。

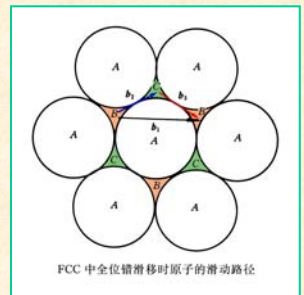


#### 2、不全位错

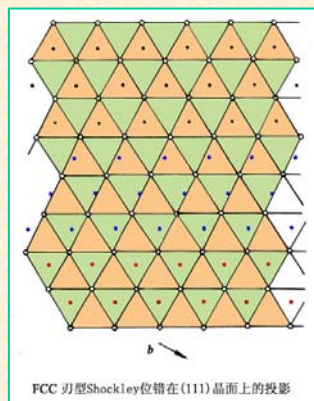
柏氏矢量小于滑移方向上的原子间距的位错称为**分位错**；大于原子间距，但不是整数倍的位错称为**不全位错**。实际研究中没有必要将它们细分，可以统称为不全位错。

##### (1) Shockley分位错

右图所示为FCC晶体的 $(111)$ 晶面（纸面），注意 $ABC$ 三层原子的位置， $b_1$ 为全位错柏氏矢量。当 $B$ 层及以上原子由 $B$ 位置滑移到 $B'$ 位置时，分两步进行需要的能量更小： $B \rightarrow C$ ， $C \rightarrow B'$ 。



如果上面的 $B$ 层原子有一部分只滑移了第一步，而另一部分不滑动，这样在滑移了一次的区域和未滑移区域的边界处就形成了一个柏氏矢量小于滑移方向上原子间距的**分位错**，称其为**肖克莱分位错**（或**不全位错**）。根据其柏氏矢量与位错线的角度关系可以是纯刃型，纯螺型或混合型的。



##### Shockley分位错的定义：

在FCC晶体中位于 $\{111\}$ 晶面上柏氏矢量为 $b = \frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ 的位错。

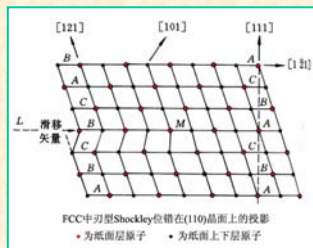
##### Shockley分位错的特点：

- (a) 位于孪生面上，柏氏矢量沿孪生方向，且小于孪生方向上的原子间距： $b = \frac{1}{6}\langle 112 \rangle$
- (b) 不仅是已滑移区和未滑移区的边界，而且是有层错区和无层错区的边界。
- (c) 可以是刃型、螺型或混合型。
- (d) 只能通过局部滑移形成。即使是刃型Shockley不全位错也不能通过插入半原子面得到，因为插入半原子面不可能导致形成大片层错区。

(e) 即使是刃型Shockley不全位错也只能滑移，不能攀移，因为滑移面上部（或下部）原子的扩散不会导致层错消失，因而有层错区和无层错区之间总是存在着边界线，即肖克莱不全位错线。

(f) 即使是螺型肖克莱不全位错也不能交滑移，因为螺型肖克莱不全位错是沿  $\langle 112 \rangle$  方向，而不是沿两个  $\{111\}$  面（主滑移面和交滑移面）的交线  $\langle 110 \rangle$  方向，故它不可能从一个滑移面转到另一个滑移面上交滑移。

Flash动画

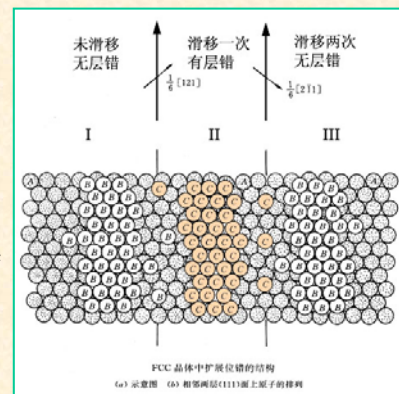


## (2) 扩展位错

定义：

将两个Shockley分位错、中间夹着一片层错的整个缺陷组态称为**扩展位错**。

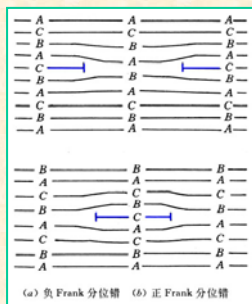
扩展位错的柏氏矢量：  
 $b = b_1 + b_2 = 1/2 \langle 110 \rangle$



## (3) Frank分位错

Shockley分位错是有层错区和无层错区的边界，而层错区是通过局部滑移  $1/6 \langle 112 \rangle$  形成的。

但是除了通过局部滑移来形成层错区，也可以通过插入和抽出部分密排面的方式来形成局部层错区。这个有层错区与无层错区的边界即为Frank分位错，其柏氏矢量为  $b = 1/3 \langle 111 \rangle$ ，该矢量小于FCC晶体中  $\langle 111 \rangle$  方向上的原子间距，所以也是不全位错。对应于插入半层密排面所形成的不全位错称为正弗兰克分位错；而抽成型层错的不全位错称为负弗兰克分位错。



Frank分位错的特点：

- (a) 位于  $\{111\}$  晶面上，可以是直线、曲线和封闭环，但是无论是什么形状，它总是刃型的。因为  $b = 1/3 \langle 111 \rangle$  和  $\{111\}$  晶面垂直。
- (b) 由于  $b$  不是FCC的滑移方向，所以Frank分位错不能滑移，只能攀移（只能通过扩散扩大或缩小）。不再是已滑移区和未滑移区的边界，而且是有层错区和无层错区的边界。

注意与Shockley分位错的特点进行比较。

## 二、密排六方晶体和体心立方晶体中的位错

同FCC晶体一样，除存在全位错外，也有Shockley分位错和Frank分位错存在，但它们的结构（有关晶面和晶向）、柏氏矢量等各不相同。（略）

## § 7-10 位错反应

由一个位错分解成几个新位错或由几个位错合成一个新位错的过程称为位错反应。

### 一、位错自发反应的条件

1、几何条件：

$$\sum_{j=1}^n b'_j = \sum_{i=1}^m b_i$$

即，新位错的柏氏矢量之和应等于反应前位错的柏氏矢量之和。

2、能量条件：

$$\sum_{j=1}^n b_j'^2 < \sum_{i=1}^m b_i^2$$

即，新位错的总能量应小于反应前位错的总能量。

前面讲过位错的弹性能  $E_e = \alpha G b^2$

例如，FCC的全位错分解为Shockley分位错： $b \rightarrow b_1 + b_2$

$$\text{反应式: } \frac{1}{2} [\bar{1} 10] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{2} 1 1] + \frac{1}{6} [\bar{1} 2 \bar{1}]$$

$$\text{几何条件: } \sum_{j=1}^n b'_j = b_1 + b_2 = \frac{1}{6} [\bar{3} 30] = \frac{1}{2} [\bar{1} 10] = b = \sum_{i=1}^m b_i \quad \text{符合}$$

计算能量：

$$\text{反应前: } \sum_{i=1}^m b_i^2 = b^2 = \left[ \left( \frac{1}{2} \right) \sqrt{(-1)^2 + (1)^2 + (0)^2} \right]^2 = \frac{1}{2}$$

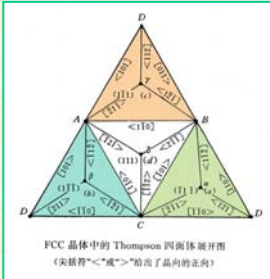
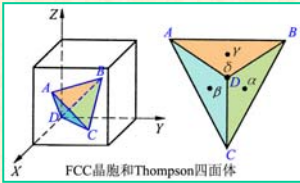
$$\text{反应后: } \sum_{j=1}^n b_j'^2 = b_1^2 + b_2^2 = \left( \frac{\sqrt{6}}{6} \right)^2 + \left( \frac{\sqrt{6}}{6} \right)^2 = \frac{1}{3}$$

$$\text{符合能量条件: } \sum_{j=1}^n b_j'^2 < \sum_{i=1}^m b_i^2$$

所以此位错反应可以自发进行。

## 二、Thompson四面体

用于表示FCC晶体中的位错反应



Thompson四面体在FCC晶胞中的位置：D点在坐标原点，其余顶点的坐标分别为，A(1/2,0,1/2)，B(0,1/2,1/2)，C(1/2,1/2,0)。四面体4个外表面（等边三角形）的中心分别用 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 、 $\delta$ 表示，并分别对应A、B、C、D四个顶点所对的面。这样A、B、C、D、 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 、 $\delta$ 等8个点中的每2个点连成的向量就表示了FCC晶体中所有重要位错的柏氏矢量。

## 1、罗-罗向量

由四面体顶点A、B、C、D（罗马字母）连成的向量：

$$\overrightarrow{DA} = \frac{1}{2}[101], \quad \overrightarrow{DB} = \frac{1}{2}[011], \quad \overrightarrow{DC} = \frac{1}{2}[110]$$

$$\overrightarrow{AB} = \overrightarrow{AD} = \overrightarrow{DB} = \frac{1}{2}[\bar{1}10]$$

$$\overrightarrow{AC} = \overrightarrow{AD} + \overrightarrow{DC} = \frac{1}{2}[01\bar{1}]$$

$$\overrightarrow{BC} = \overrightarrow{BD} + \overrightarrow{DC} = \frac{1}{2}[10\bar{1}]$$

罗-罗向量就是FCC中全位错的柏氏矢量

## 2、不对应的罗-希向量

由四面体顶点（罗马字母）和通过该顶点的外表面中心（不对应的希腊字母）连成的向量：

这些向量可以由三角形重心性质求得，例如：

$$\overrightarrow{D\alpha} = \frac{2}{3}\left(\overrightarrow{DC} + \frac{1}{2}\overrightarrow{CB}\right) = \frac{2}{3}\left(\frac{1}{2}[110] + \frac{1}{4}[\bar{1}01]\right) = \frac{1}{6}[121]$$

同理可得：

$$\overrightarrow{D\beta} = \frac{1}{6}[211], \quad \overrightarrow{D\gamma} = \frac{1}{6}[112], \quad \overrightarrow{A\beta} = \frac{1}{6}[\bar{1}1\bar{2}], \quad \overrightarrow{A\gamma} = \frac{1}{6}[\bar{2}1\bar{1}]$$

$$\overrightarrow{A\delta} = \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}], \quad \overrightarrow{B\alpha} = \frac{1}{6}[\bar{1}1\bar{2}], \quad \overrightarrow{B\gamma} = \frac{1}{6}[12\bar{1}], \quad \overrightarrow{B\delta} = \frac{1}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$$

$$\overrightarrow{C\alpha} = \frac{1}{6}[\bar{2}11], \quad \overrightarrow{C\beta} = \frac{1}{6}[\bar{1}21], \quad \overrightarrow{C\delta} = \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$$

不对应的罗-希向量就是FCC中Shockley分位错的柏氏矢量

## 3、对应的罗-希向量

根据矢量合成规则可以求出对应的罗-希向量：

$$\overrightarrow{A\alpha} = \overrightarrow{AB} + \overrightarrow{B\alpha} = \frac{1}{2}[\bar{1}10] + \frac{1}{6}[\bar{1}1\bar{2}] = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$$

$$\overrightarrow{B\beta} = \overrightarrow{BC} + \overrightarrow{C\beta} = \frac{1}{2}[10\bar{1}] + \frac{1}{6}[\bar{1}21] = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$$

$$\overrightarrow{C\gamma} = \overrightarrow{CD} + \overrightarrow{D\gamma} = \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0] + \frac{1}{6}[112] = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$$

$$\overrightarrow{D\delta} = \overrightarrow{DA} + \overrightarrow{A\delta} = \frac{1}{2}[101] + \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}] = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$$

对应的罗-希向量就是FCC中Frank分位错的柏氏矢量。

## 4、希-希向量

所有希-希向量也都可以根据向量合成规则求得：

$$\overrightarrow{\alpha\beta} = \overrightarrow{\alpha A} + \overrightarrow{A\beta} = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}1] + \frac{1}{6}[\bar{1}1\bar{2}] = \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}0] = \frac{1}{3}\overrightarrow{BA}$$

$$\text{同理可得：} \quad \overrightarrow{\alpha\gamma} = \frac{1}{6}[0\bar{1}1] = \frac{1}{3}\overrightarrow{CA}$$

$$\overrightarrow{\alpha\delta} = \frac{1}{6}[101] = \frac{1}{3}\overrightarrow{DA}$$

$$\overrightarrow{\beta\gamma} = \frac{1}{6}[\bar{1}01] = \frac{1}{3}\overrightarrow{CB}$$

$$\overrightarrow{\beta\delta} = \frac{1}{6}[011] = \frac{1}{3}\overrightarrow{DB}$$

$$\overrightarrow{\gamma\delta} = \frac{1}{6}[110] = \frac{1}{3}\overrightarrow{DC}$$

希-希向量就是FCC中压杆位错的柏氏矢量。

FCC中的位错反应，即位错的合成与分解也可以用Thompson四面体中的向量来表示。

## § 7-11 面缺陷

晶体材料中存在着许多界面，如外表面（surface）与内界面（interface）等。界面通常包含几个原子层厚的区域，该区域内的原子排列甚至化学成分往往不同于晶体内部，又因其在三维空间表现为一个方向上尺寸很小，另外两个方向上尺寸较大，故称为面缺陷（interfacial defects）。

表面是指固体材料与气体或液体的分界面；

内界面包括晶界（grain boundaries）、孪晶界（twin boundaries）、亚晶界（sub-boundaries）、相界（phase boundaries）及层错（stacking faults）等。界面的存在对晶体的力学、物理和化学等性能产生着重要的影响。

本节将简要介绍各类界面的结构，界面能及其对材料性能的影响。



## 一、表面及表面能

晶体内部的原子处于其他原子的包围中，周围原子对它的作用力对称分布，因此它处于均匀的力场中，总合力为零，处于能量最低的状态。而表面原子却不同，它与气相(或液相)接触，处于不均匀的力场之中，其能量较高，高出的能量称为表面自由能(或表面能Surface energy)。

实验测定其数值大约为晶界能的三倍，对于日常广泛应用的大块材料来说，它们的比表面积(单位体积晶体的表面积)很小，因此表面对晶体性能的影响不如晶界重要。但是对于多孔物质或粉末材料，它们的比表面积很大，此时表面能就成为不可忽略的重要因素。

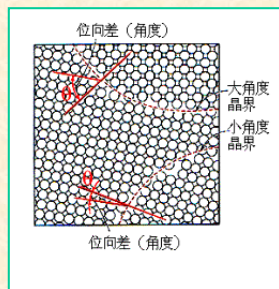
不同晶面的表面能大小不同。这是由于表面能的本质是表面原子的不饱和键，而不同晶面上的原子密度不同。密排面的原子密度最大，则该面上任一原子与相邻晶面原子的作用键数最少，故以密排面作为表面时不饱和键数最少，表面能量低。晶体总是力图处于最低的自由能状态，所以晶体的平衡几何外形应满足表面能总和为最小的原理。自然界的有些矿物或人工结晶的盐类等常具有规则的几何外形，它们的表面常由最密排面及次密排面组成，这是一种低表面能的几何形态。

## 二、晶界和亚晶界

属于同一固相但位向不同的晶粒之间的界面称为**晶界(Grain boundary)**；而每个晶粒有时又由若干个位向稍有差异的亚晶粒所组成，相邻亚晶粒间的界面称为**亚晶界(Sub-grain boundary)**。晶粒的平均直径通常在0.015~0.25mm范围内，而亚晶粒的平均直径则通常在0.001mm的范围内。

二维点阵中晶界位置可用两个晶粒的位向差 $\theta$ 和晶界相对于一个点阵某一平面的夹角 $\phi$ 来确定。根据相邻晶粒之间位向差 $\theta$ 角的大小不同可将晶界分为两类：

**小角度晶界和大角度晶界**。两相邻晶粒的位向差小于 $15^\circ$ 时，称为小角度晶界；位向差大于 $15^\circ$ 时，称为大角度晶界



一般说来，位向差越大，晶界厚度也就越大，界面能也越高。实验证明，小角度晶界是由一系列位错排列而成的。

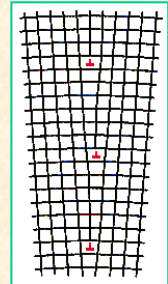
### 1、小角度晶界的结构

按照相邻亚晶粒间位向差的型式不同，小角度晶界可分为**对称倾侧晶界**、**不对称倾侧晶界**、**扭转晶界**等。它们的结构可用相应的模型来描述。

#### (1) 对称倾侧晶界

**对称倾侧晶界(Symmetrical tilt boundary)**可看作是晶界两侧晶体互相倾斜的结果。由于相邻两晶粒的位向差 $\theta$ 角很小，其晶界可看成是由一系列平行的刃型位错所构成。

**Flash-对称倾侧晶界**



对称倾侧小角度晶界的界面能：

$$E = E_0 \theta (A - \ln \theta) \quad E_0 = \alpha G b = \frac{G b}{4\pi(1-\nu)}$$

式中 $A$ 为积分常数， $E_0$ 与 $b$ 成正比，见上右式。

#### (2) 不对称倾侧晶界

**Flash-不对称倾侧晶界**

$$\text{界面能: } E = E_0 \theta (A - \ln \theta) \quad E_0 = \frac{G b}{4\pi(1-\nu)} (\cos \phi + \sin \phi)$$

#### (3) 扭转晶界

**Flash-扭转晶界**

$$\text{界面能: } E = E_0 \theta (A - \ln \theta) \quad E_0 = \frac{G b}{2\pi}$$

可见角度 $\theta$ 越大，界面能就会越大。

### 2、大角度晶界的结构 **Flash-大角度晶界**

晶粒之间的晶界通常为大角度晶界。大角度晶界的结构较复杂，原子排列很不规则。

分界面上既包含有同时属于两晶粒的原子 $D$ ，也包含有不属于任一晶粒的原子 $A$ ；既包含有压缩区 $B$ ，也包含有扩张区 $C$ 。这是由于晶界上的原子同时受到位向不同的两个晶粒中原子的作用所致。

总之，大角度晶界上原子排列比较紊乱，但也存在一些比较整齐的区域。因此，晶界可看成坏区与好区交替相间组合而成。随着位向差分的增大，坏区的面积将相应增加。纯金属中大角度晶界的宽度一般不超过3个原子间距。

### 三、晶界的特性

◆晶界处点阵畸变大，存在晶界能。晶粒的长大和晶界的平直化都能减少晶界面积，从而降低晶界的总能量，这是一个自发过程。晶粒的长大和晶界的平直化均需通过原子的扩散来实现，因此，温度升高和保温时间的增加，均有利于这两过程的进行。

◆晶界处原子排列不规则，在常温下晶界的存在会对位错的运动起阻碍作用，致使塑性变形抗力提高，宏观表现为晶界较晶内具有较高的强度和硬度。晶粒越细，材料的强度越高，这就是**晶界强化**；高温下则由于晶界存在一定的粘滞性，易使相邻晶粒产生相对滑动。

◆晶界处原子偏离平衡位置，具有较高的能量，并且晶界处存在较多的缺陷如空穴、杂质原子和位错等，故晶界处原子的扩散速度比在晶内快得多。

◆在固态相变过程中，由于晶界能量较高且原子活动能力较大，所以新相易于在晶界处优先形核。原始晶粒越细，晶界越多，则新相形核率也相应越高。

◆由于成分偏析和内吸附现象，特别是晶界富集杂质原子的情况下，往往晶界熔点较低，故在加热过程中，因温度过高将引起晶界熔化和氧化，导致“过热”现象产生。

◆由于晶界能量较高、原子处于不稳定状态，以及晶界富集杂质原子的缘故，与晶内相比晶界的腐蚀速度一般较快。这就是用腐蚀剂显示金相样品组织的依据，也是某些金属材料在使用中发生晶间腐蚀破坏的原因。

### 四、孪晶界

#### Flash-孪晶

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

孪晶的形成与堆垛层错有密切关系。例如，面心立方晶体是以{111}面按ABCABC...的顺序堆垛而成的，如果从某一层开始，其堆垛顺序发生颠倒，就成为ABCACBACBA...，则上下两部分晶体就构成了镜面对称的孪晶关系。可以看出...CAC...处相当于堆垛层错，接着就按倒过来的顺序堆垛，仍属正常的FCC堆垛顺序，但与出现层错之前的那部分晶体顺序正好相反，故形成了对称关系。

孪晶界可分为两类，**共格孪晶界(Coherence twin boundary)**和**非共格孪晶界(Incoherence twin boundary)**。

共格孪晶界就是在孪晶面上的原子同时位于两个晶体点阵的结点上，为两个晶体所共有，属于自然地完全匹配是无畸变的完全共格晶面，它的界面能很低，约为普通晶界界面能的1/10，很稳定，在显微镜下呈直线，这种孪晶界较为常见。

#### Flash-孪晶界

如果孪晶界相对于孪晶面旋转一角度，即可得到另一种孪晶界——非共格孪晶界。此时，孪晶界上只有部分原子为两部分晶体所共有，因而原子错排较严重，这种孪晶界的能量相对较高，约为普通晶界的1/2。

依形成原因的不同，孪晶可分为**形变孪晶(Deformation twin)**、**生长孪晶(Grow twin)**和**退火孪晶(Annealing twin)**等。正因为孪晶与层错密切相关，一般层错能高的晶体不易产生孪晶。

### 五、相界

#### Flash-相界

两个相之间的分界面称为**相界**。

按结构特点，相界面可分为**共格相界**、**半共格相界**和**非共格相界**三种类型。

#### 1、共格相界(Coherent phase boundary)

一种无畸变的具有完全共格的相界，其界面能很低。但是理想的完全共格界面，只有在孪晶界，且孪晶界即为孪晶面时才可能存在。对相界而言，其两侧为两个不同的相，即使两个相的晶体结构相同，其点阵常数也不可能相等，因此在形成共格界面时，必然在相界附近产生一定的弹性畸变，晶面间距较小者发生伸长，较大者产生压缩，以互相协调，使界面上原子达到匹配。显然，这种共格相界的能量相对于具有完善共格关系的界面（如孪晶界）的能量要高。

#### 2、半共格相界 (Semi-coherent phase boundary)

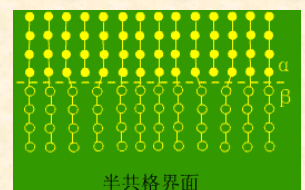
若两相邻晶体在相界面处的晶面间距相差较大，则在相界面上不可能做到完全的一一对应，于是在界面上将产生一些位错，以降低界面的弹性应变能，这时界面上两相的原子部分地匹配，这样的界面称为半共格界面或部分共格界面。半共格相界上位错间距取决于相界面处两相匹配晶面的**错配度**。

错配度  $\delta$  定义为：

$$\delta = \frac{a_\alpha - a_\beta}{a_\alpha}$$

$a_\alpha$  和  $a_\beta$  分别表示相界面两侧的  $\alpha$  相和  $\beta$  相的点阵常数，且  $a_\alpha > a_\beta$ 。由此可求得位错间距  $D$  为：

$$D = \frac{a_\alpha}{\delta}$$

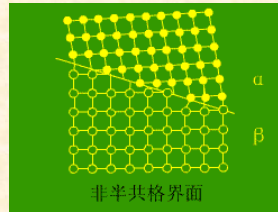


当  $\delta$  很小时,  $D$  很大,  $\alpha$  和  $\beta$  相在相界面上趋于共格, 即成为共格相界; 当  $\delta$  很大时,  $D$  很小,  $\alpha$  和  $\beta$  相在相界面上完全失配, 即成为非共格相界。

### 3、非共格相界(Incoherent phase boundary)

这种相界与大角度晶界相似, 可看成是由原子不规则排列的很薄的过渡层构成。

相界能也可采用类似于测晶界能的方法来测量。从理论上讲, 相界能包括两部分, 即弹性畸变能和化学交互作用能。



弹性畸变能大小取决于**错配度  $\delta$** 的大小; 而化学交互作用能取决于界面上原子与周围原子的化学键结合状况。相界面结构不同, 这两部分能量所占的比例不同。如对共格相界, 由于界面上原子保持着匹配关系, 故界面上原子结合键数目不变, 因此这里应变能是主要的; 而对于非共格相界, 由于界面上原子的化学键数目和强度与晶内相比发生了很大变化, 故其界面能以化学能为主, 而且总的界面能较高。从相界能的角度来看, 从共格至半共格到非共格依次递增。