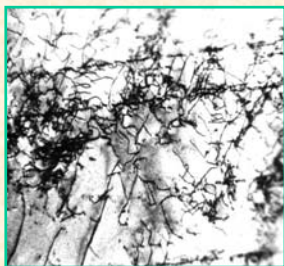


第七章 晶体缺陷



透射电子显微镜下观察到不锈钢316L (00Cr17Ni14Mo2)的位错线与位错缠结

§ 7-1 引言

前面讲的都是理想状态的完整晶体，晶体中没有任何缺陷，晶体中的所有原子都在各自的平衡位置，处于能量最低状态。然而这样的理想晶体在现实中是不存在的，实际晶体中存在着大量的这样那样的缺陷。所以，**实际晶体都是非完整晶体**。晶体中原子排列的不完整性称为**晶体缺陷**。

一、晶体缺陷的分类

按照晶体缺陷的几何形态可以分为四类：

- 点缺陷(point defects)——零维缺陷
- 线缺陷，又称为位错(dislocation)——一维缺陷
- 面缺陷——二维缺陷
- 体缺陷——三维缺陷

二、晶体缺陷对材料的影响

晶体缺陷对晶体材料性能的影响非常大：

- 力学性能**：如，强度、硬度、塑性、韧性等；
- 物理性能**：如，电阻率、扩散系数等、比容、比热容；
- 化学性能**：如，耐蚀性等；
- 冶金性能**：如，固态相变等；
- 工艺性能**：如，锻造性能、冲压性能、切削性能等。

§ 7-2 点缺陷

常见的点缺陷有：

- 空位(vacancy)
- 间隙原子(interstitial atom)
- 置换原子(substitutional atom)

一、空位

空位是由于该处的原子被激活（即获得了足够的能量），跳离了自己的平衡位置而形成的。空位的形成有时还会造成间隙原子的出现。由于空位的存在，使其周围的原子偏离平衡位置，从而使**晶格发生畸变**，所以说空位是一种点缺陷。

空位形成过程——动画

1、空位的分类

- 肖脱基(Schottky)空位**：原子离开晶体（蒸发了）留下的空位。
- 弗兰克尔(Frenkel)空位**：形成空位和间隙原子对。

2、空位形成能和空位平衡浓度

形成一个空位所需的能量称为**空位形成能**，温度越高能够获得空位形成能的原子越多，所以空位的数量也就越多。在平衡状态下，单位体积(1m³)的晶体中含有空位的数量称为**空位的平衡浓度**。

$$C_v = \exp\left(-\frac{\Delta G_v}{RT}\right)$$

式中， $\Delta G_v = \Delta H_v - T\Delta S_v$

- ΔG_v ——1mol空位的生成自由能，
- ΔH_v ——1mol空位的生成焓，
- ΔS_v ——1mol空位的熵增，
- R ——气体常数。

常用公式：

$$N_v = N \exp\left(-\frac{Q_v}{kT}\right)$$

- N ——原子位置的总数，
- Q_v ——1个空位形成能，J
- T ——温度，K
- k ——玻尔兹曼常数， 1.38×10^{-23} J/K (或 8.62×10^{-5} eV/K)

例：在不同温度时，铜晶体中空位的平衡浓度（空位数/m³）

1m ³ 铜中原子位置总数	0℃ (273K)	250℃ (523K)	500℃ (773K)	750℃ (1023K)	1000℃ (1273K)
8.0×10^{28}	2×10^{12}	1.7×10^{20}	1.1×10^{23}	3×10^{24}	2.2×10^{25}

3、过饱和和空位形成

在一定温度时，晶体具有平衡的空位浓度。当空位浓度超过平衡浓度时，就称为**过饱和**。

获得过饱和点缺陷（空位和间隙原子）的方式：

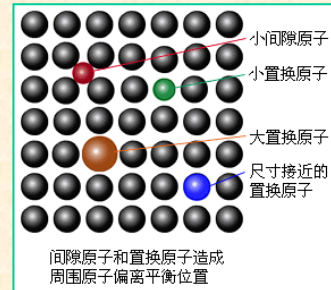
淬火：温度升高，平衡浓度增大，急速冷却后，空位来不及消失，被保留下来，形成过饱和和空位。

冷变形：较低温度下塑性变形，会产生空位，超过此温度时的平衡浓度。

辐照：高能粒子（中子、质子、氘核、 α -粒子、电子等）照射时，晶体点阵上的原子被击出，进入点阵间隙，留下空位，并形成间隙原子。

二、间隙原子和置换原子

间隙原子是指处于晶格间隙中的原子。晶格原子之间的间隙是很小的，一个原子硬挤进去必然使周围原子偏离平衡位置，造成晶格畸变，因此也是一种点缺陷。



间隙原子又可分为两种：

同类的间隙原子，如前所述，一般是空位形成时产生的，空位浓度越高，则同类间隙原子的浓度也越高。

异类间隙原子一般都是半径很小的原子，如钢铁中的碳、氮、硼、氢原子即属此类。尽管这些原子半径很小，但是仍比晶格间隙的尺寸大，所以也会造成晶格畸变。

异类间隙原子在一定温度也有一个平衡浓度，称之为**固态溶解度**，简称“**固溶度**”。**间隙原子的固溶度通常都很小，但是对金属强化却起着极其重要的作用。**

见 § 2-3 合金相结构/固溶体/间隙固溶体

置换原子

置换原子是溶入金属晶体并且占据原来基体原子平衡位置的异类原子。由于置换原子的半径和基体原子的半径总有些差异，所以也会使其周围原子偏离平衡位置，造成**晶格畸变**。

置换原子的固溶度一般较大，有些可以互为置换原子，如Cu-Ni合金，Ni在Cu（或Cu在Ni）中的固溶度可以达到100%，即Cu原子和Ni原子可以互相置换。

见 § 2-3 合金相结构/固溶体/置换固溶体