

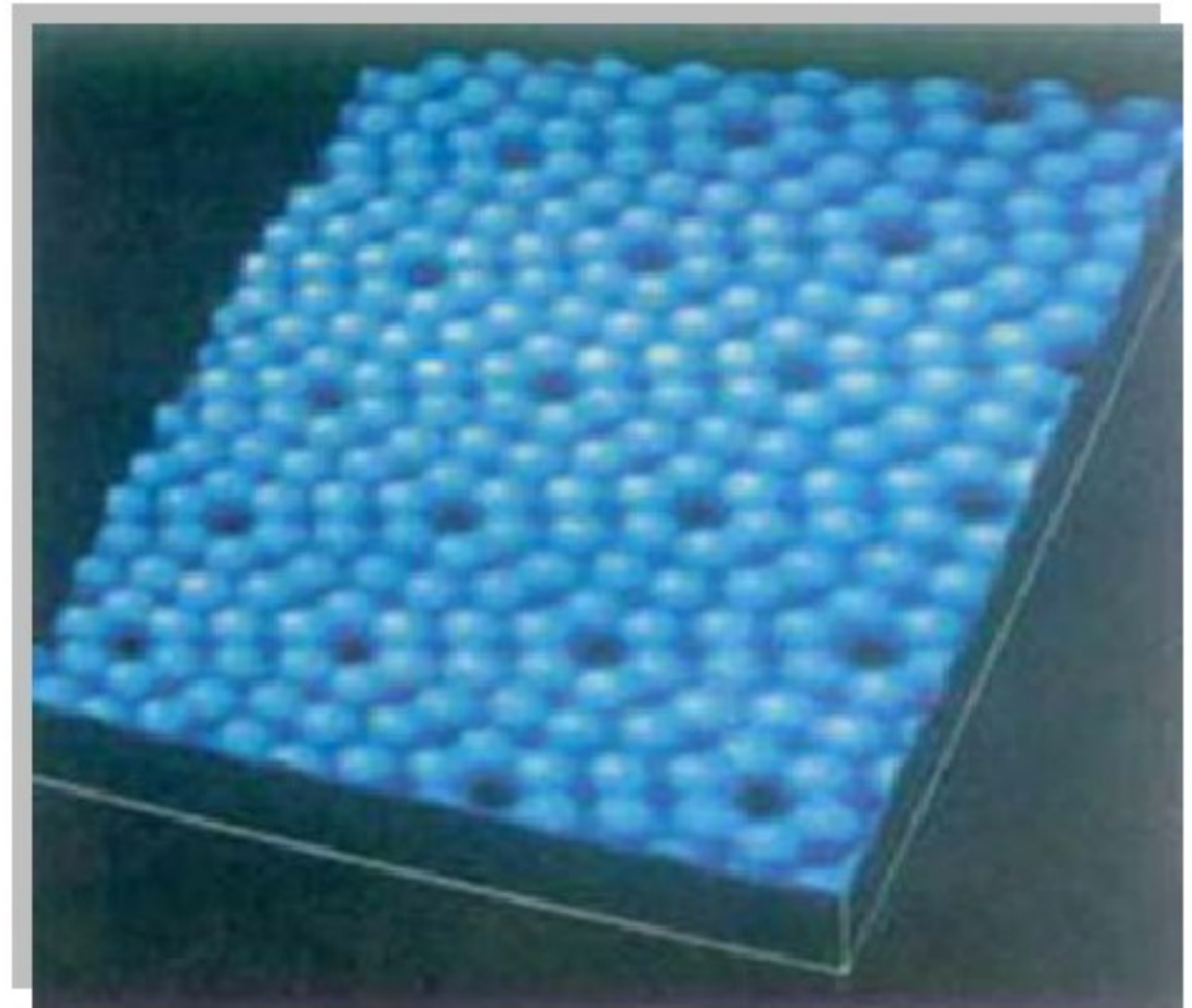
第一章 工程材料中的原子排列

- § 1.1 原子键结合
- § 1.2 原子的规则排列
 - § 1.2.1 晶体学基础
 - § 1.2.2 晶体结构及其几何特征
- § 1.3 原子的不规则排列
 - § 1.3.1 点缺陷
 - § 1.3.2 线缺陷
 - § 1.3.3 面缺陷

§ 1.1 原子键结合



原子模型

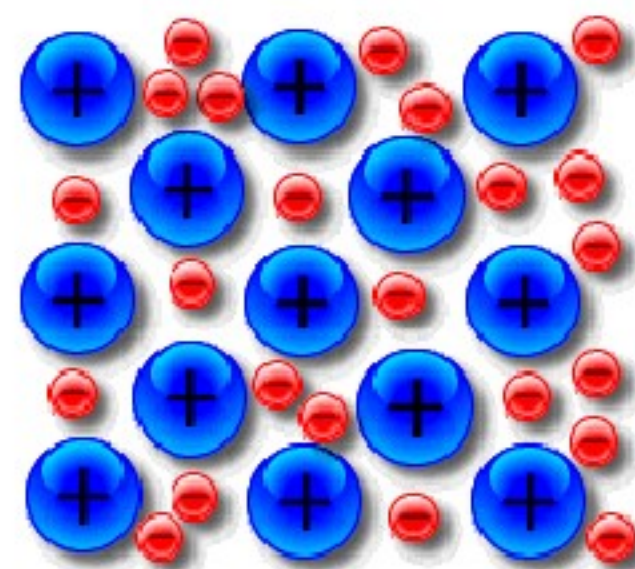


硅表面隧道扫描

§ 1.1.1 固体中原子的结合键

◆ 金属键：

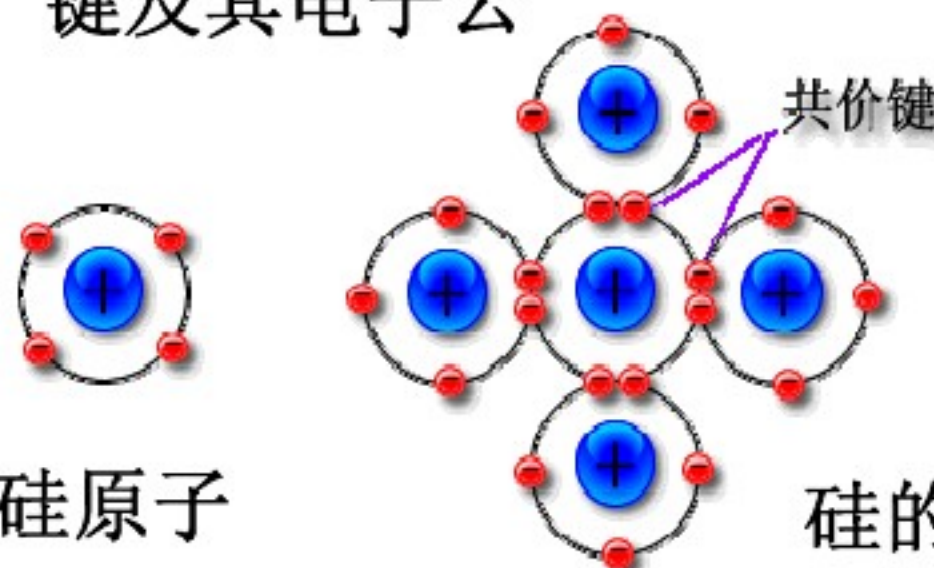
——正离子和电子之间的相互吸引，使正离子与电子结合起来。



金属原子正常堆积时的金属键及其电子云

◆ 共价键：

——原子间通过共用电子对(电子云重叠)所形成的化学键。



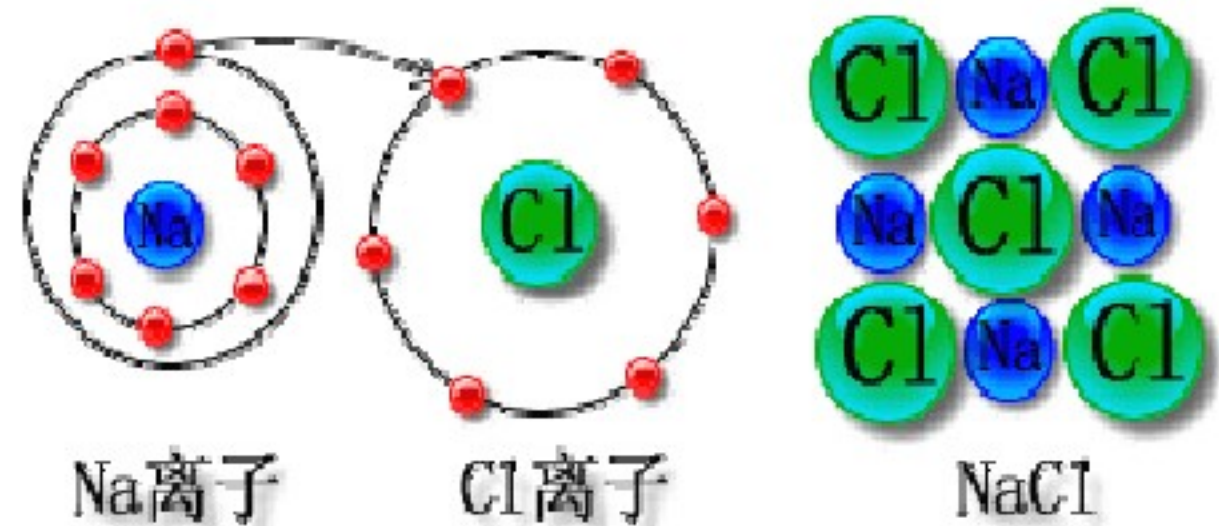
硅原子

硅的四个共价键

§ 1.1.1 固体中原子的结合键

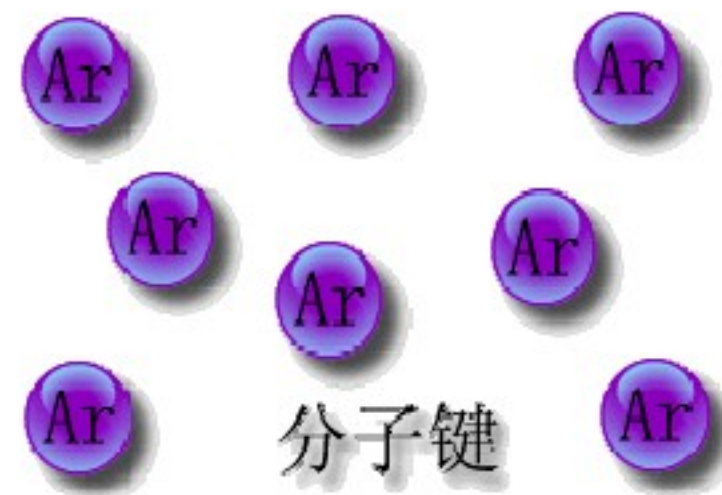
◆ 离子键：

——正离子和负离子由于静电引力相互吸引；当它们充分接触时会产生排斥，引力和斥力相等时即形成稳定的离子键。



◆ 分子键(范德瓦尔斯力)：

——一个分子带正电的部位，同另一个分子带负电的部位之间就存在比较弱的静电吸引力，这种吸引力就称为范德瓦尔斯力。

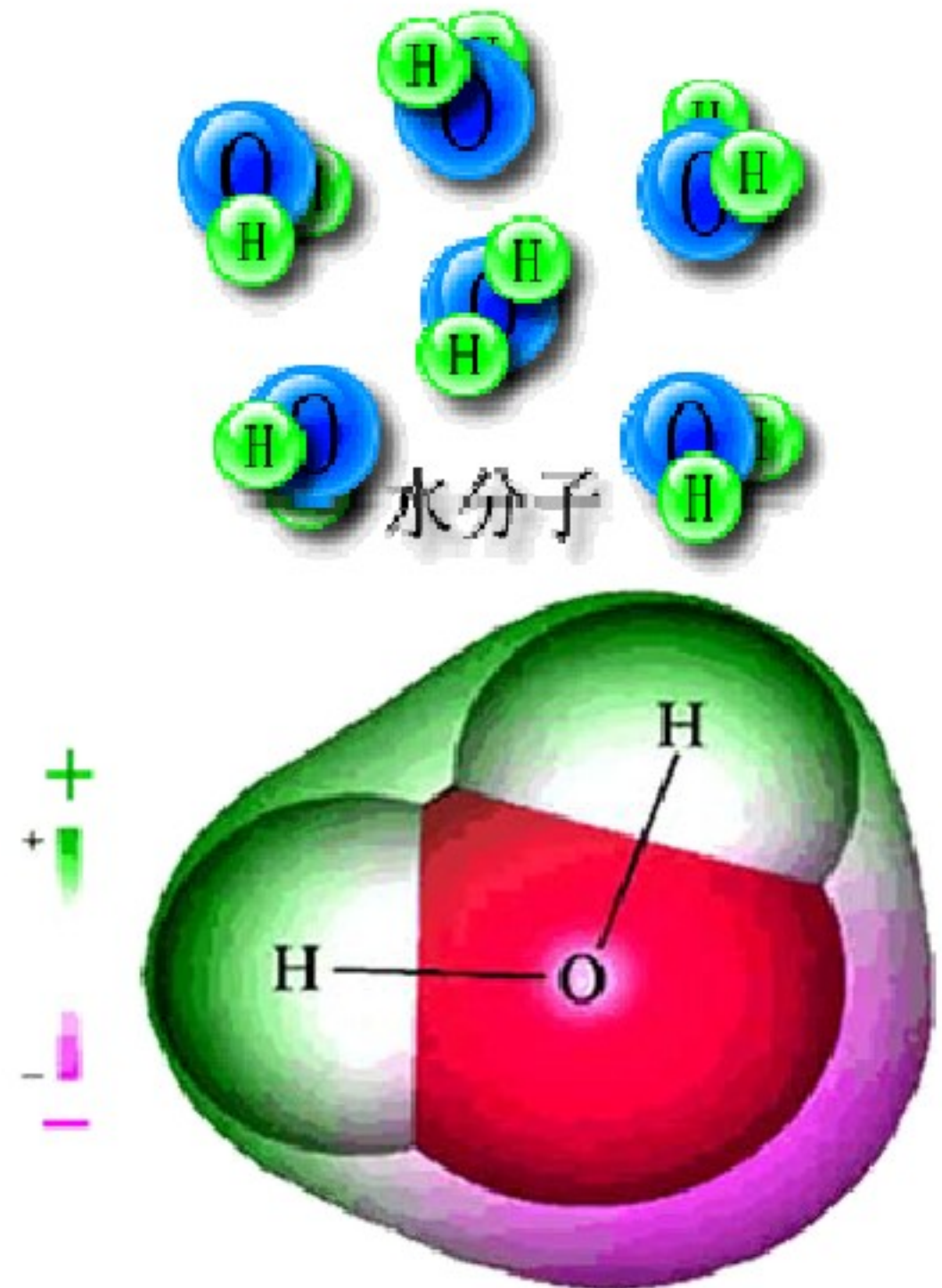


§ 1.1.1 固体中原子的结合键

◆ 氢键：

— 氢原子与某一原子形成共价键时，共有电子向这个原子强烈偏移，使氢原子几乎变成一半径很小的带正电荷的核，而这个氢原子还可以和另一个原子相吸引，形成附加的键。

氢键是一种较强的、有方向性的范德瓦尔斯键。



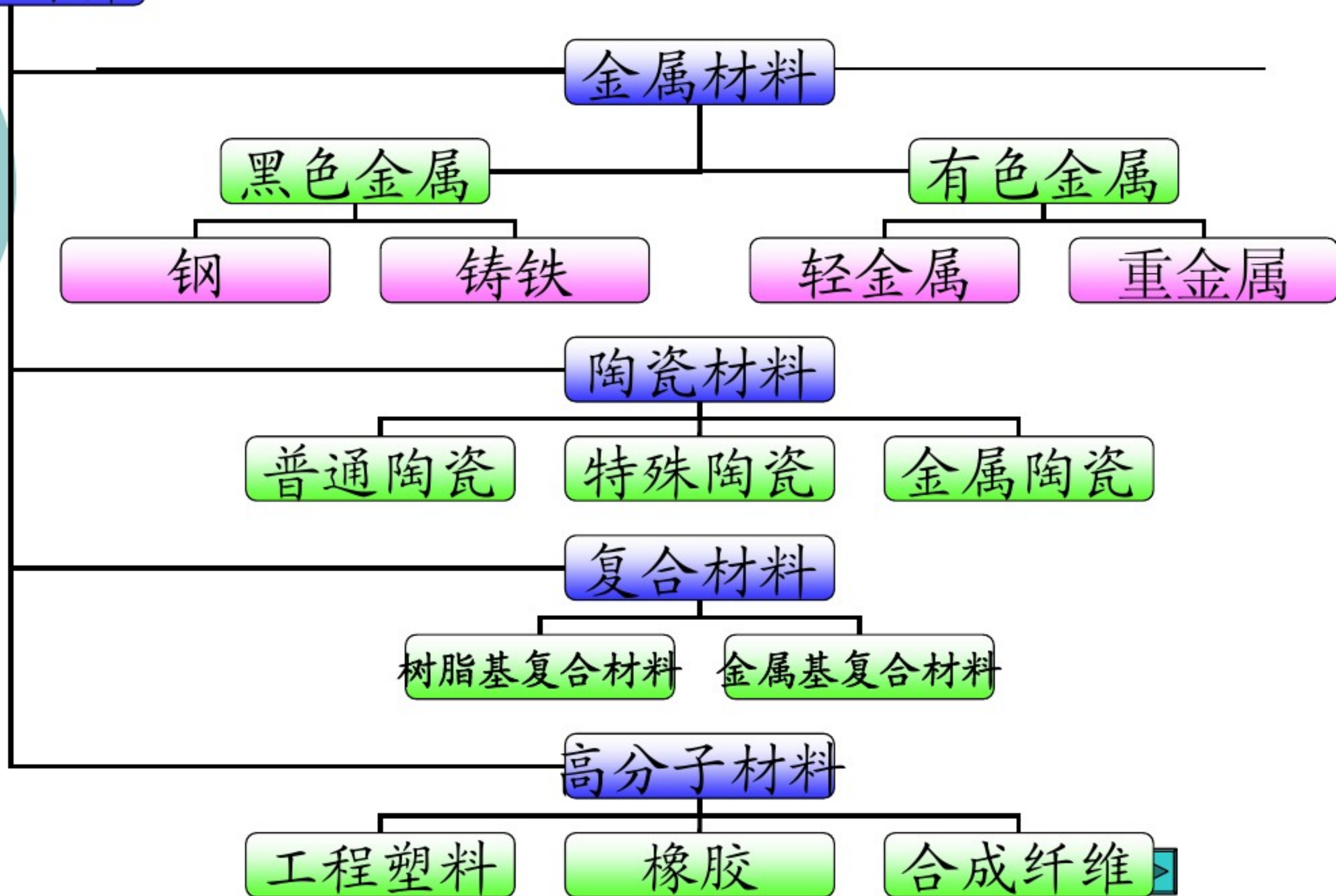
§ 1.1.1 固体中原子的结合键

课件制作：艾云龙

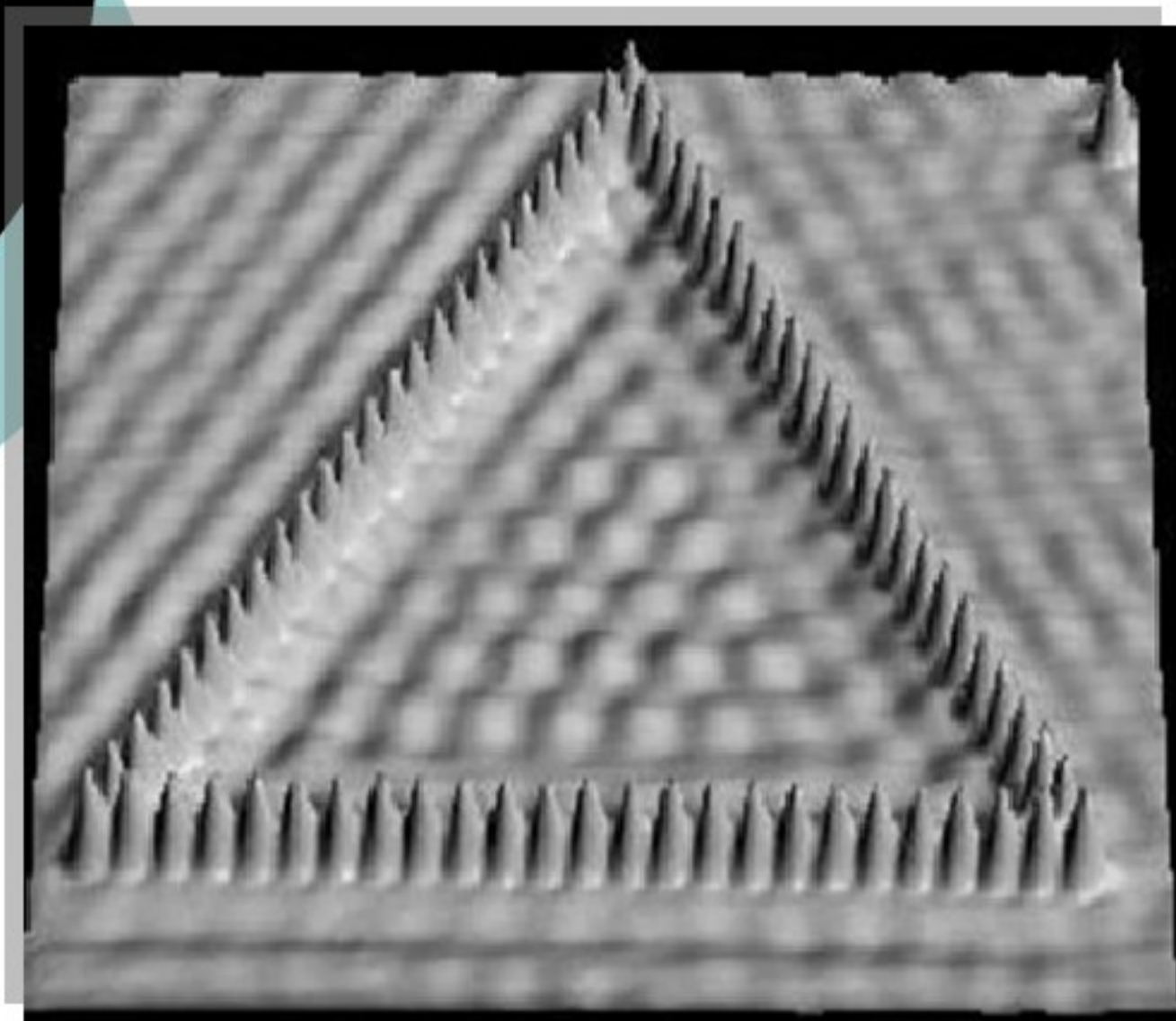
结合键类型	作用力来源	键强度	实例	形成晶体的特点
离子键	原子得、失电子后形成负、正离子，正负离子间的库仑引力	最强	LiCl NaCl KCl GaCl	无方向性键、高配位数、高熔点、高强度、高硬度、低膨胀系数、塑性较差、固态不导电、熔态离子导电
共价键	相邻原子价电子各处于相反的自旋状态，原子核间的库仑引力	强	金刚石 Si Ge Sn	有方向性键、低配位数、高熔点、高强度、高硬度、低膨胀系数、塑性较差、即使在熔态也不导电
金属键	自由电子气与正离子之间的库仑引力	较强	Li Na K	无方向性键、结构密堆、配位数高、塑性较好、有光泽、良好的导热、导电性
分子键	原子间瞬时电偶极矩的感应作用	最弱	Ne Ar	无方向性键、结构密堆、高熔点、绝缘
	氢原子核与极性分		H ₂ O (冰)	

§ 1.1.2 工程材料的分类

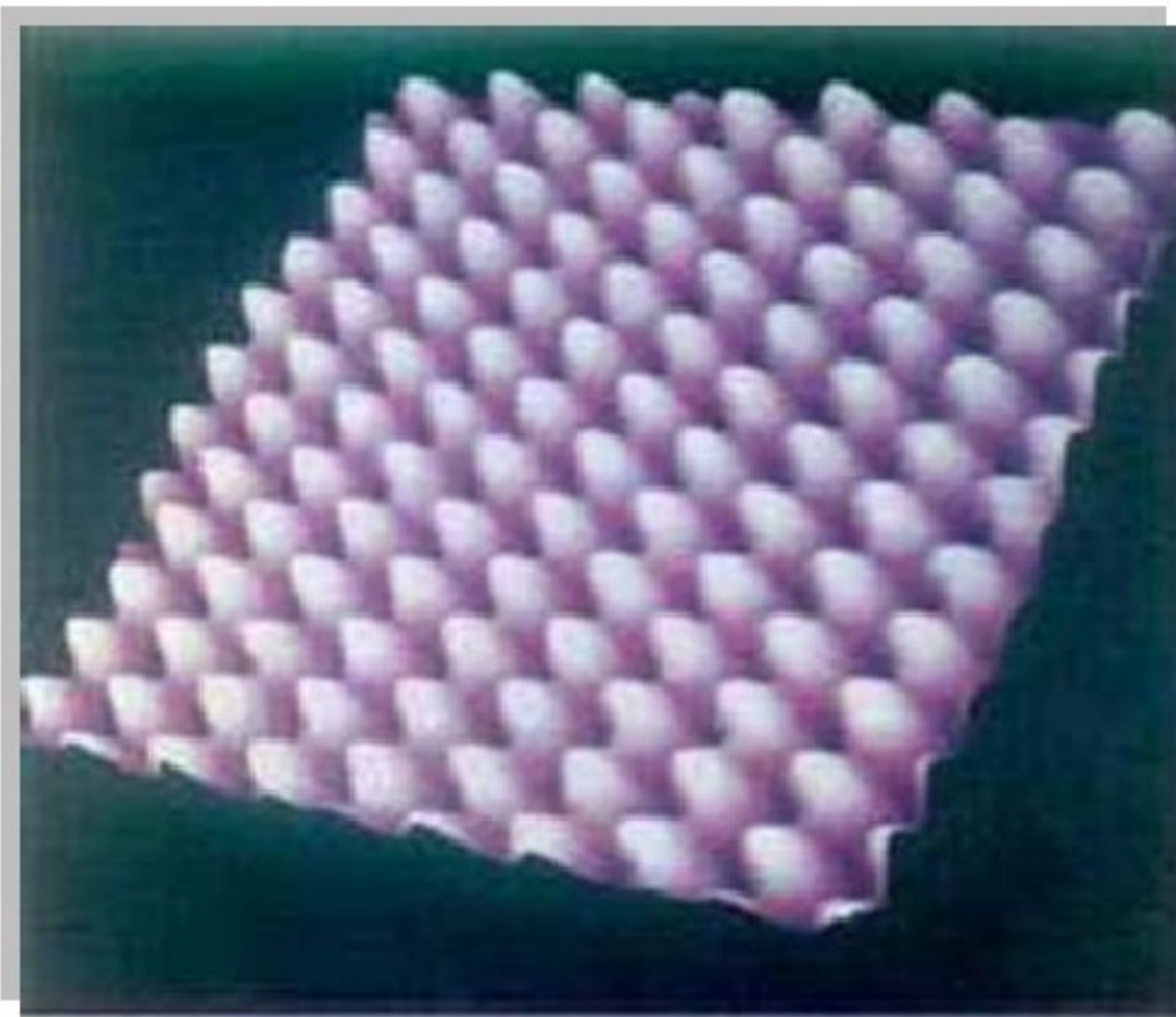
工程材料



§ 1.2 原子的规则排列



在铜基上的铁原子



CaAs表面结构隧道扫描

§ 1.2.1 晶体学基础

1.2.1.1 晶体

晶体-原子(分子)在三维空间按一定规律作周期性排列的固体。

非晶体(如玻璃、松香)-原子是散乱分布, 或仅有局部区域为短程规则排列。

◆ 晶体与非晶体的区别

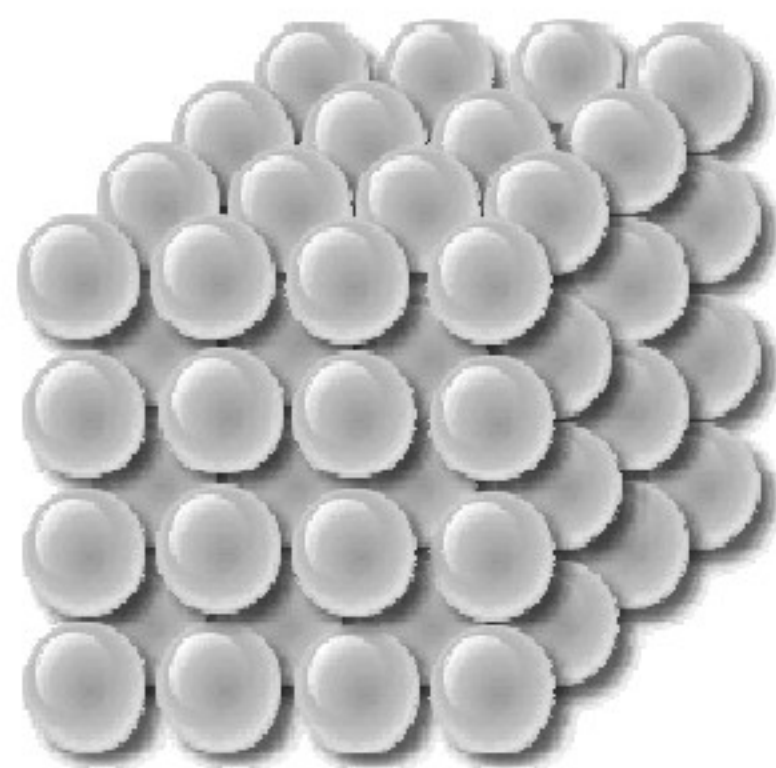
晶体-有确定的熔点, 各向异性。

非晶体-无确定的熔点, 各向同性。

§ 1.2.1 晶体学基础

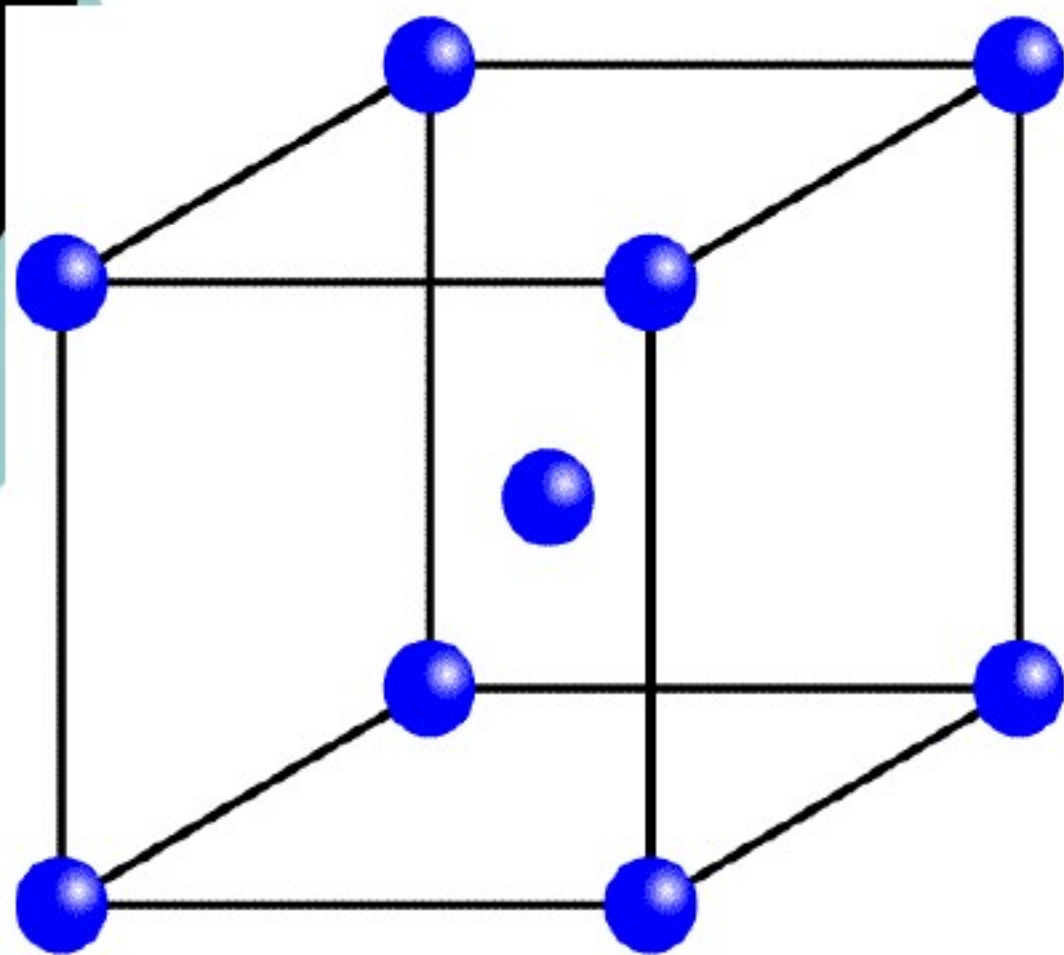
1.2.1.2 晶体结构与空间点阵

- ◆ 晶体结构(点阵)
实际原子排列成的规则集合体。
- ◆ 空间点阵
由环境相同抽象阵点所组成的点阵排列。
- 注意：
环境相同和抽象阵点表达的意思？

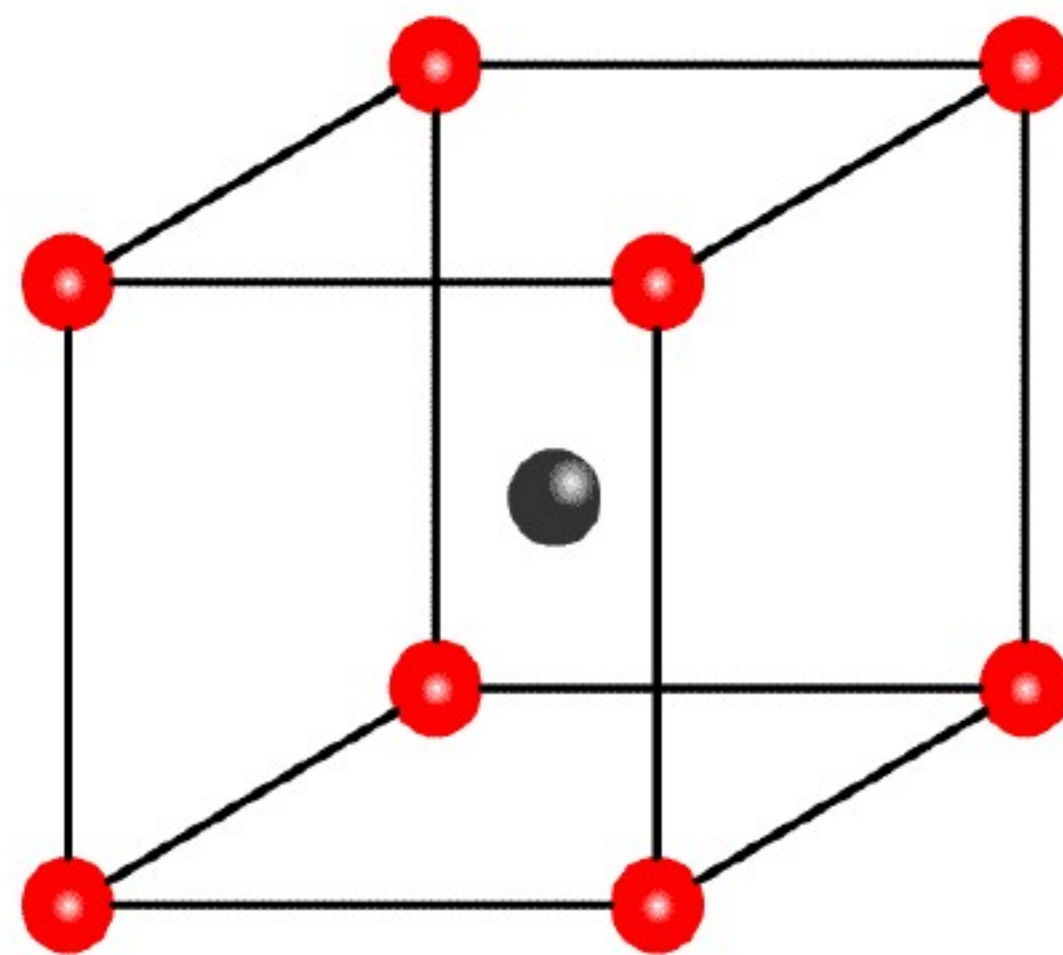


原子堆垛模型

§ 1.2.1 晶体学基础



Cr

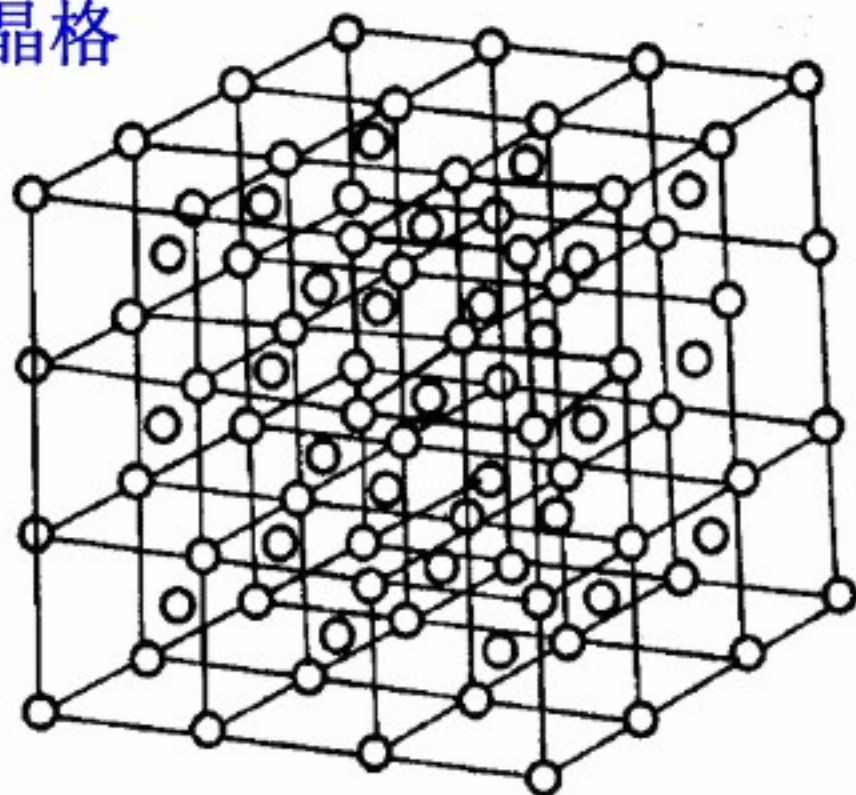


CsCl

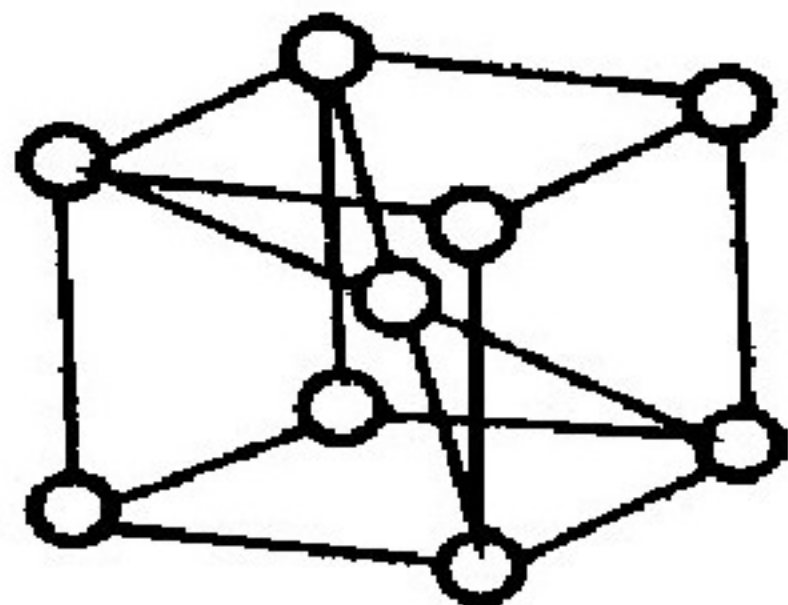
结构相似的不同点阵

§ 1.2.1 晶体学基础

晶格



晶胞



◆ 晶格

晶体中原子排列规律的空间格架

◆ 晶胞

➤ 定义：能够完全反映晶格特征的最小几何单元

➤ 选取原则：

a 能够充分反映空间点阵的对称性；

b 相等的棱和角的数目最多；

c 具有尽可能多的直角；

d 体积最小

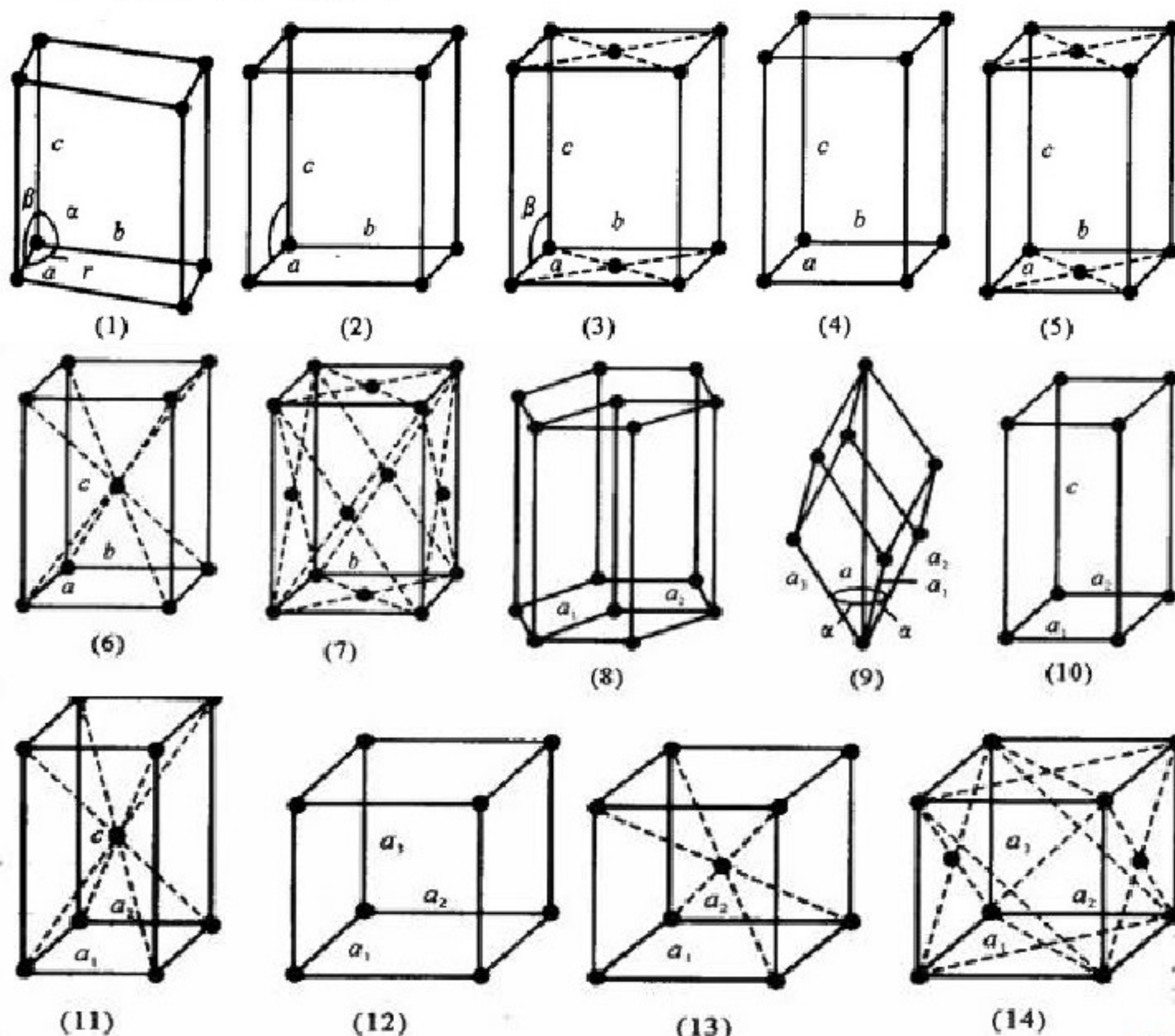
➤ 形状和大小：

有三个棱边的长度 a, b, c 及其夹角 α, β, γ 表示

晶胞中点的位置表示（坐标法）

§ 1.2.1 晶体学基础

1.2.1.3 布拉菲点阵



14种空间点阵的晶胞

§ 1.2.1 晶体学基础

◆ 7个晶系

(1) 三斜晶系: $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

(2) 单斜晶系: $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

(3) 正交晶系: $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

(4) 六方晶系: $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

(5) 菱方晶系: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

(6) 正方晶系: $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

(7) 立方晶系: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

晶 系	空间点阵	分图号	晶 系	空间点阵	分图号
三斜	简单三斜	(1)	六方	简单六方	(8)
单斜	简单单斜	(2)	正方	简单正方	(9)
	底心单斜	(3)		体心正方	(10)
正交	简单正交	(4)	菱方	简单菱方	(11)
	底心正交	(5)	立方	简单立方	(12)
	体心正交	(6)		体心立方	(13)
	面心正交	(7)		面心立方	(14)

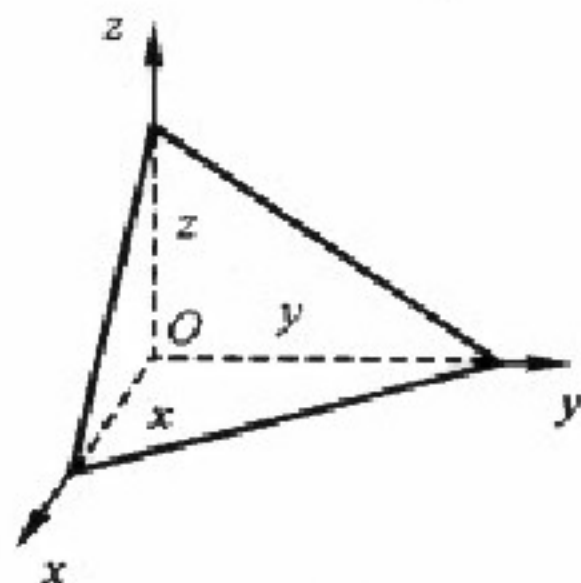
§ 1.2.1 晶体学基础

1.2.1.4 晶向指数和晶面指数

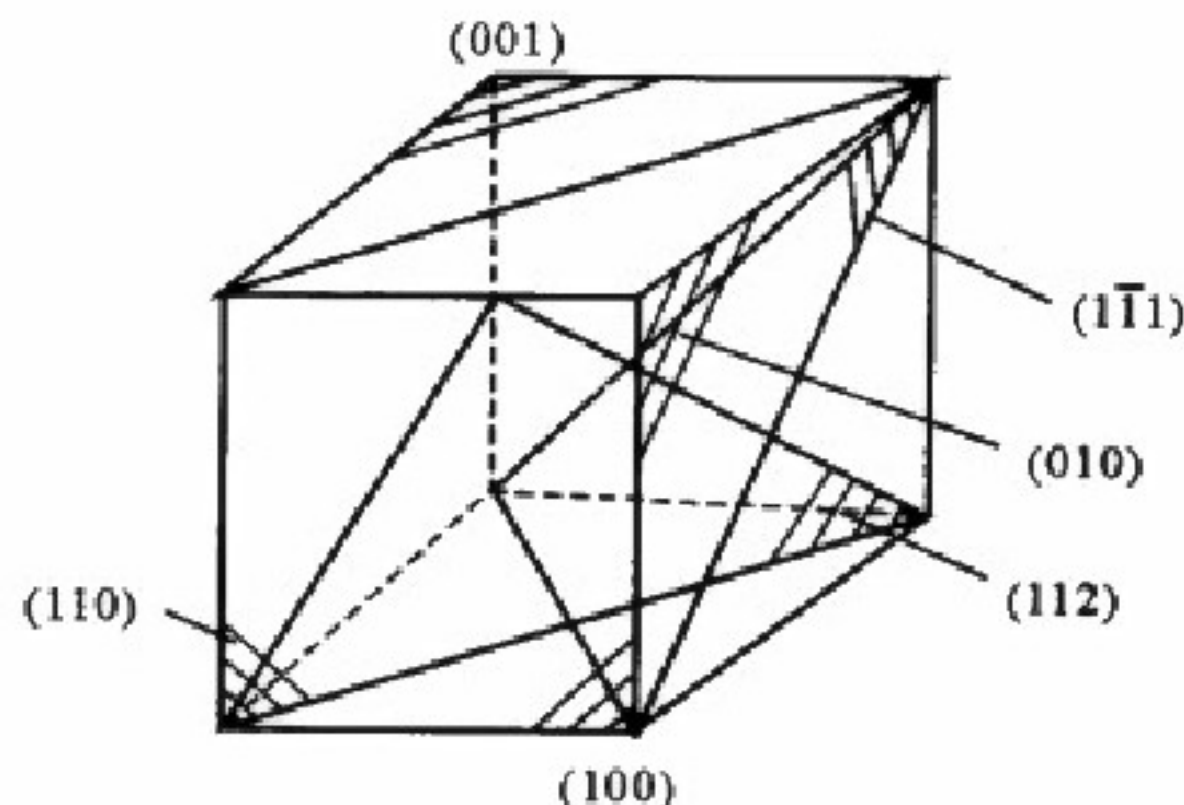
- ◆ 晶向
晶体中某个方向。
- ◆ 晶面
晶体中原子所构成的平面。
- ◆ 晶向指数
确定晶向在晶体中的相对取向。
- ◆ 晶面指数
确定晶面在晶体中的相对取向。
- 国际上通用的是密勒 (w. H. Miller) 指数。

§ 1.2.1 晶体学基础

- ◆ **晶面指数** 确定方法：
 1. 建立坐标系 → 确定原点（**非阵点**）、坐标轴和度量单位
 2. 量截距 x, y, z → 取倒数 $1/x, 1/y, 1/z$
 3. 化整数 $h, k, l = 1/x : 1/y : 1/z$ → 加 $()$ → **(hkl)**
- 指数数字相同而符号相反，是由原点选取不同造成，它们仍互相平行。
- **晶面族** 晶体中凡是具有相同的原子排列方式而只是空间位向不同的各组晶面的统称，用 **$\{hkl\}$** 表示。

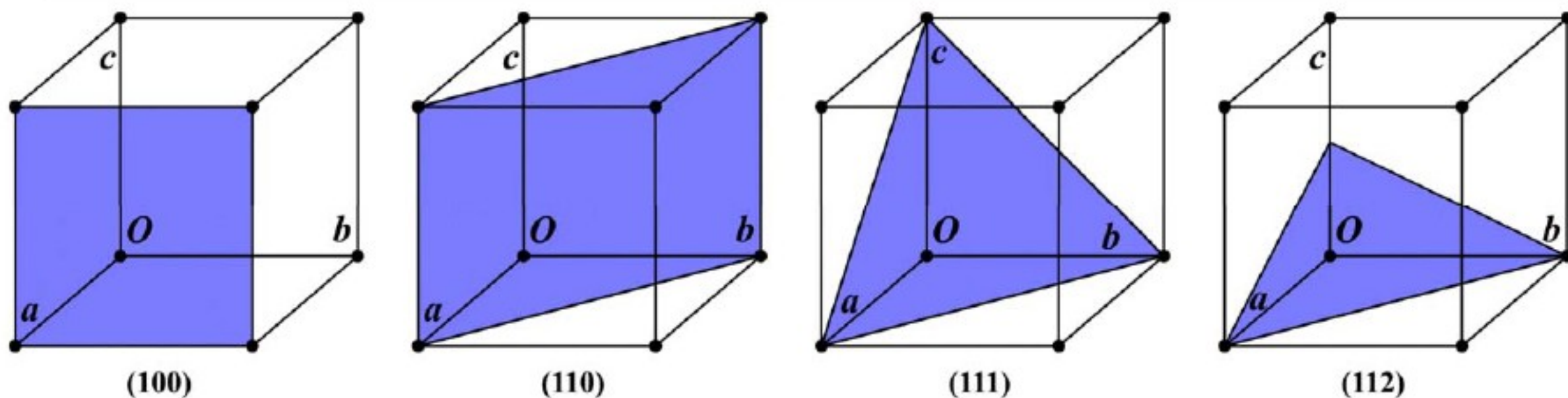


晶面（密勒）指数的确定方法



晶面（密勒）指数的标定

§ 1.2.1 晶体学基础



几个晶面的晶面指数

注意：

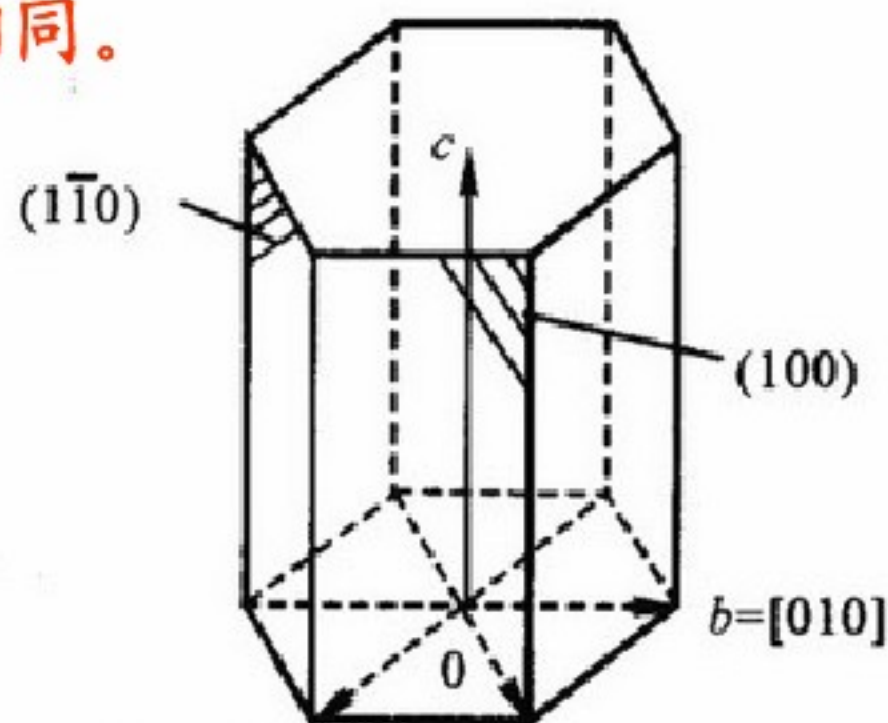
- 指数数字相同而符号相反，是由原点选取不同造成，它们仍互相平行。
- 晶面族 晶体中凡是具有相同的原子排列方式而只是空间位向不同的各组晶面的统称，用 $\{hkl\}$ 表示。
- 在立方晶系中，具有相同指数的晶向和晶面必定是相垂直的，即 $[hkl]$ 垂直于 (hkl) 。此关系不适用于其它晶系。

§ 1.2.1 晶体学基础

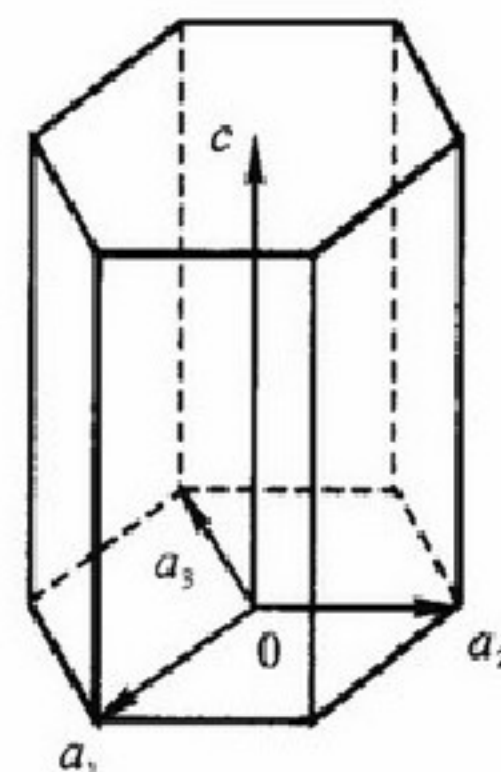
◆ 六方晶系中的晶向、晶面指数

六方晶系参阅下图， a 、 b 、 c 为晶轴，而 a 与 b 间的夹角为120度。按这种方法，六方晶系六个柱面的晶面指数应为 (100) 、 (010) 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(1\bar{1}0)$ 。这六个面是同类型的晶面，但其晶面指数中的数字却不尽相同。

晶向指数也有类似情况，例如 $[100]$ 和 $[110]$ 是等同晶向，但晶向指数却不相同。



$D_1=a=[100]$ $D_2=[110]$
六方晶系的等价晶面和晶向指数



六方晶系的四轴系统

§ 1.2.1 晶体学基础

◆ 六方晶系四指数标定：

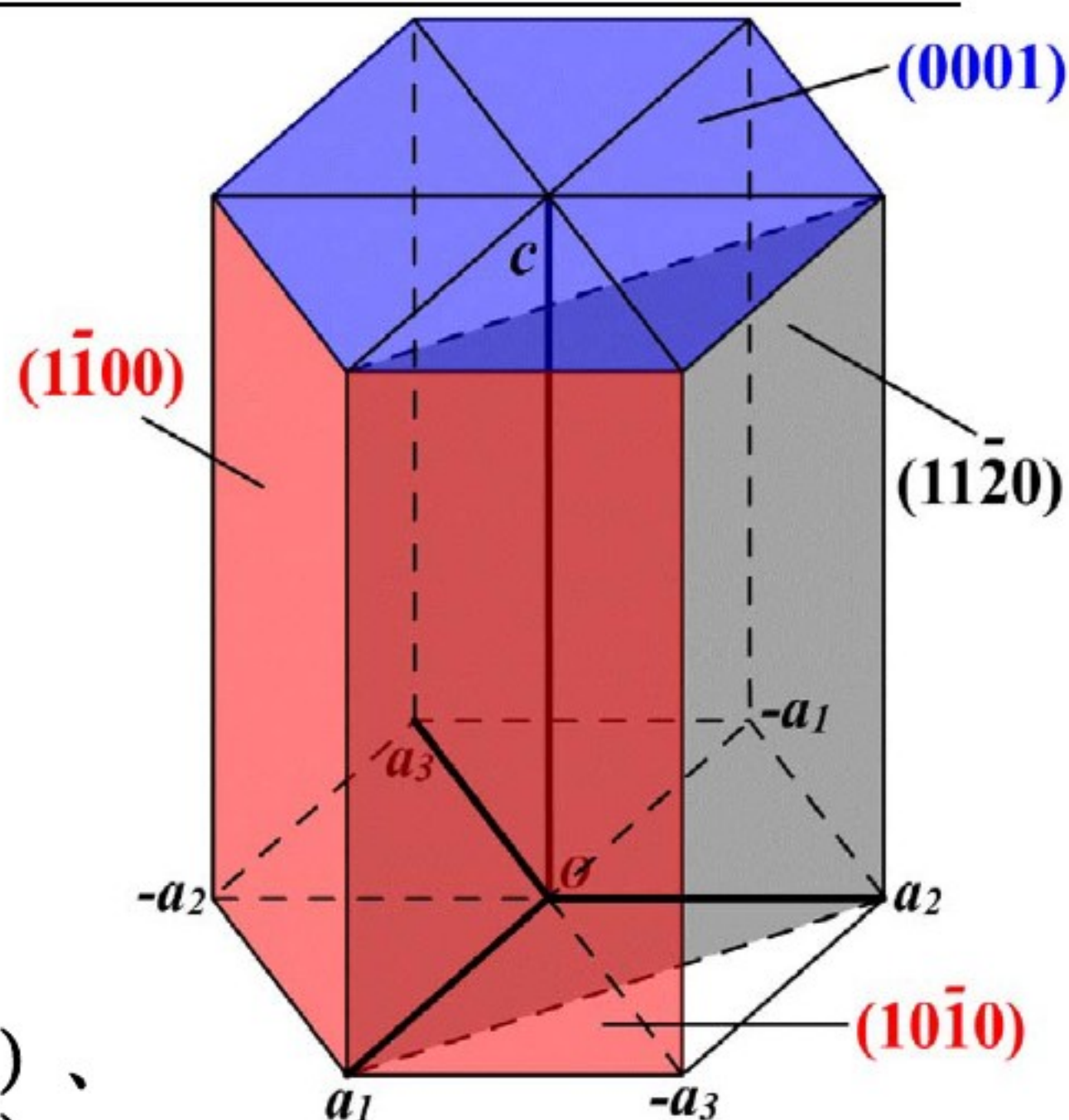
- 以 a_1 、 a_2 、 a_3 和 c 四个轴为晶轴， a_1 、 a_2 、 a_3 彼此间的夹角均为 120° 。

➤ 晶面指数的标定标法

- 与立方系相同（四个截距），用四个数字 $(hki1)$ 表示，其中 $i = -(h+k)$ 。

➤ 六个柱面的指数：

- $(10\bar{1}0)$ 、 $(01\bar{1}0)$ 、 $(1\bar{1}00)$ 、
 (1010) 、 (0110) 、 $(10\bar{1}0)$ ，
 可以把它们归并为 $\{10\bar{1}0\}$ 晶面族。



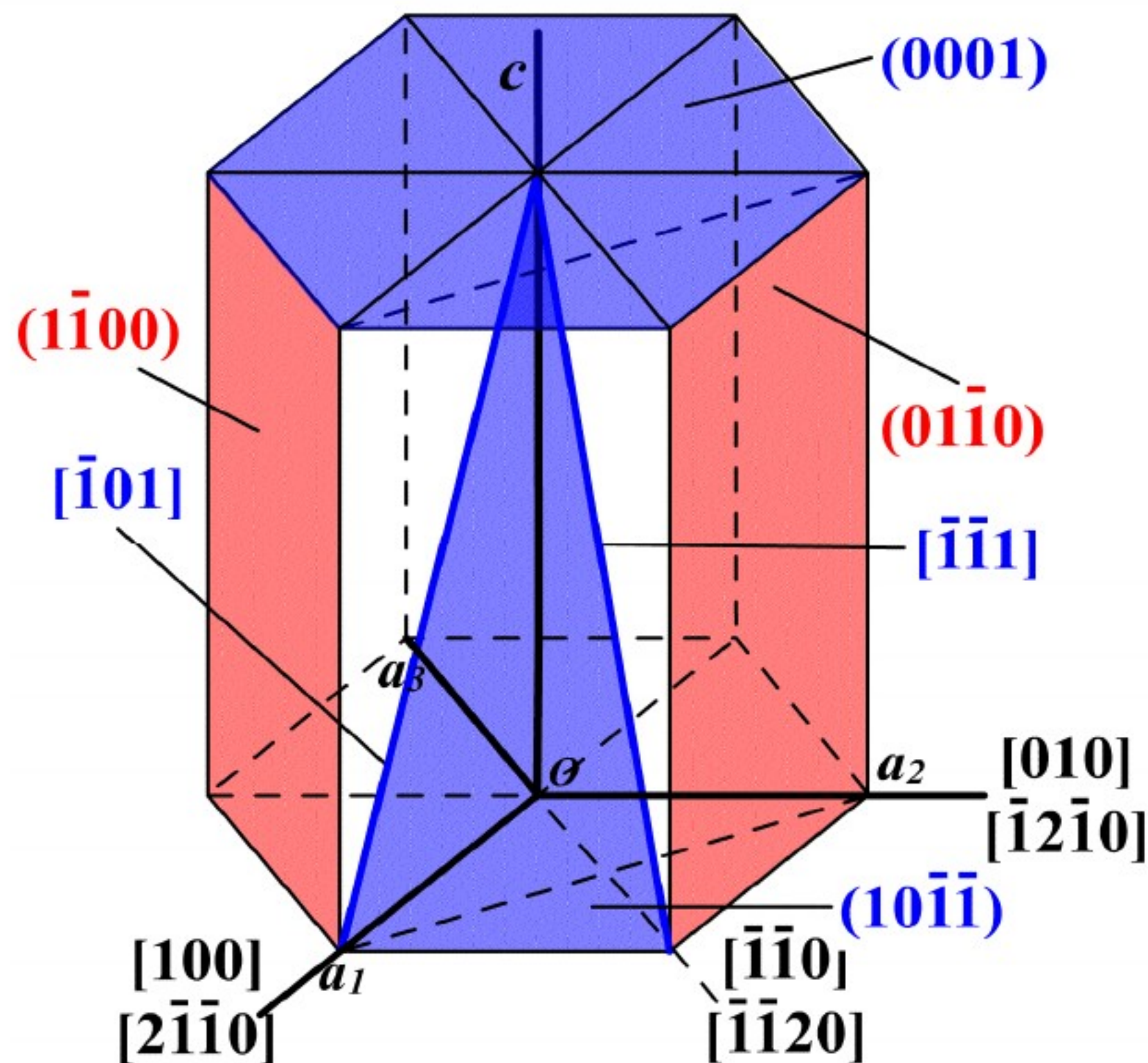
六方晶系面指数

§ 1.2.1 晶体学基础

- 晶向指数的确定须用 $[uvw]$ 四个数来表示，其中： $t = -(u + v)$
- 根据上述规定，当沿着平行于 a_1 、 a_2 、 a_3 轴方向确定 a_1 、 a_2 、 a_3 坐标值时，必须使沿 a_3 轴移动的距离等于沿 a_1 、 a_2 轴移动的距离之和的负数。
- 三轴坐标系标出的晶向指数 $[UVW]$ 与四轴坐标系标出的晶向指数 $[uvw]$ 存在下列关系：

$$\begin{aligned} u &= [2U - V] / 3 ; & v &= [2V - U] / 3 ; \\ t &= -[U + V]; & w &= W \end{aligned}$$
- 对于六方晶系，可先用三轴坐标系标出给定晶向的晶向指数，再利用上述关系按四轴坐标系标出该晶向的晶向指数。这是一种比较方便的办法。

§ 1.2.1 晶体学基础

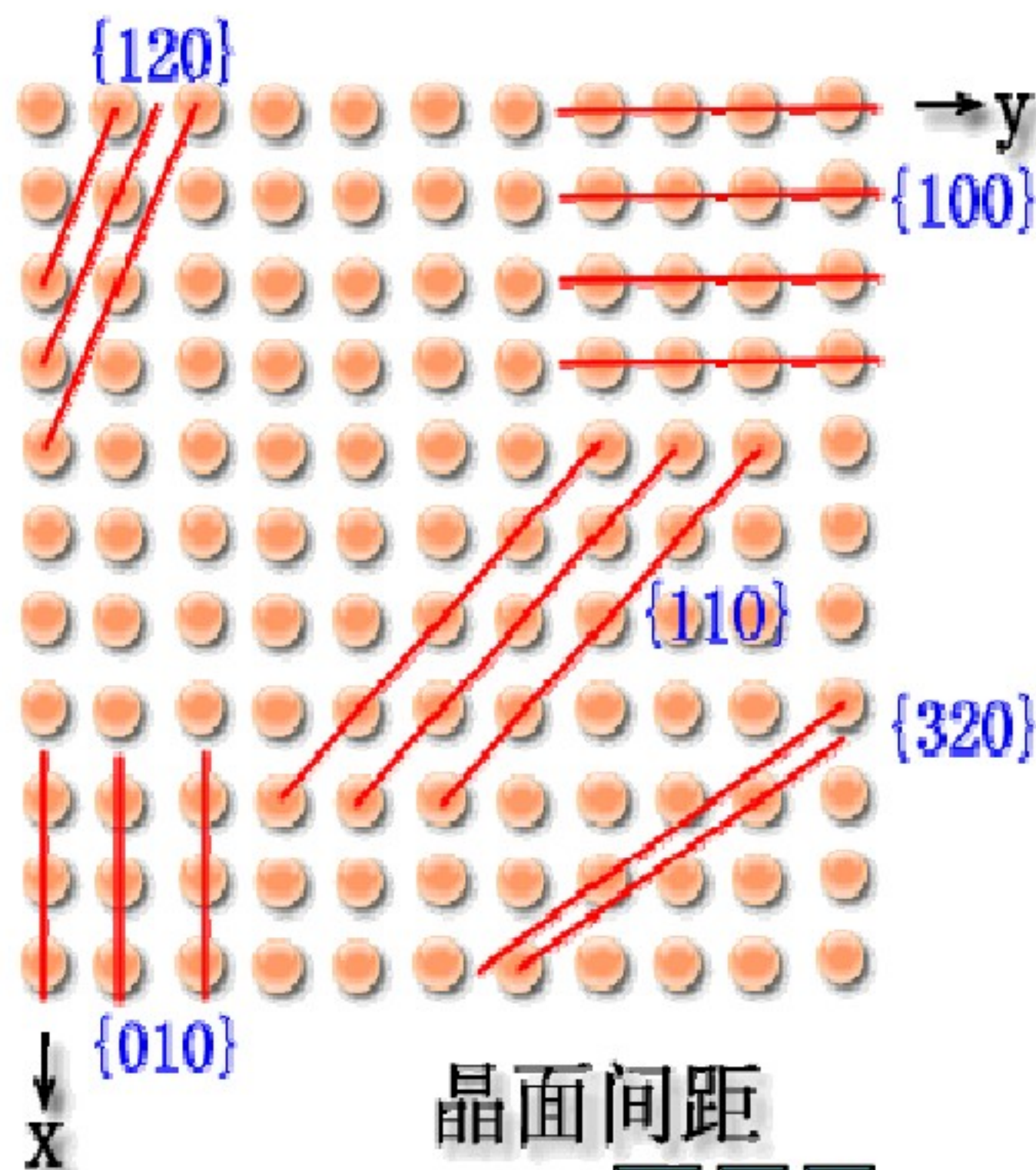


六方晶系的一些晶向指数与晶面指数

§ 1.2.1 晶体学基础

1.2.1.5 晶面间距

- ◆ 低指数晶面的面间距较大;
- ◆ 晶面间距越大, 面上原子排列越紧密;
- ◆ 原子线密度最大的晶向上面间距最大。



§ 1.2.1 晶体学基础

➤ 对立方晶系

$$d_{(hkl)} = a / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

➤ 对正交和四方晶系（四方晶系中 $a=b$ ）

$$d_{(hkl)} = 1 / \sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}$$

➤ 对六方晶系

$$d_{(hkl)} = 1 / \sqrt{\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \left(\frac{l}{c} \right)^2}$$

§ 1.2.1 晶体学基础

必须注意:

- 按以上这些公式所算出的晶面间距是对简单晶胞而言的，如为复杂晶胞（例如体心立方、面心立方等），在计算时应考虑到晶面层数增加的影响。
- 例如，在体心立方或面心立方晶胞中，上、下底面（001）之间还有一层同类型的晶面[可称为(002)晶面]，故实际的晶面间距应为 $d_{001}/2$ 。

§ 1.2.1 晶体学基础

1.2.1.6 晶面夹角

- ◆ 两个空间平面的夹角，可用它们的法线的夹角来表示，因此晶面的夹角也可看成是两个晶向之间的夹角。
- ◆ 根据空间几何关系，可以证明：两个晶向 $[u_1 v_1 w_1]$ 和 $[u_2 v_2 w_2]$ 之间的夹角 ϕ 有如下的关系。

$$\cos \phi = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}}$$

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

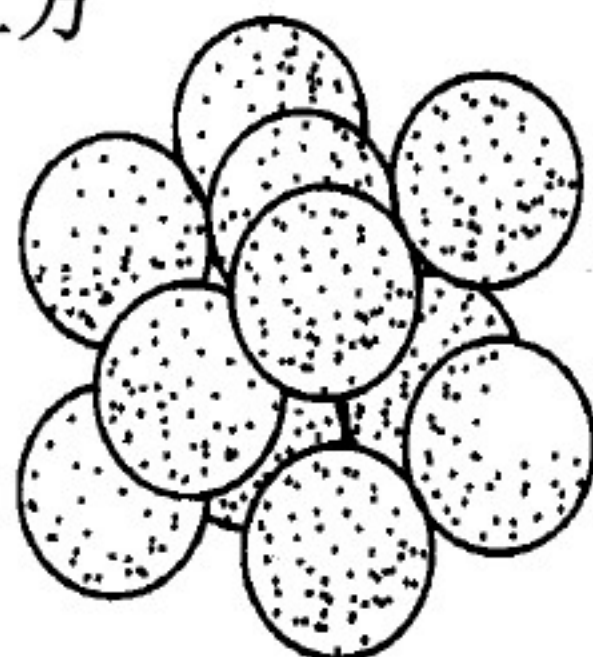
1.2.2.1 金属中常见晶体结构

工业上使用的金属约40种，除少数具有复杂的晶体结构外，大多数金属具有比较简单的高对称性晶体结构。

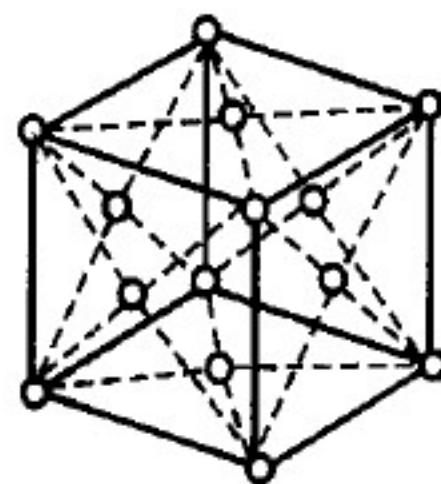
最常见的只有三种：

面心立方 (fcc)；体心立方 (bcc)；密排六方 (hcp)

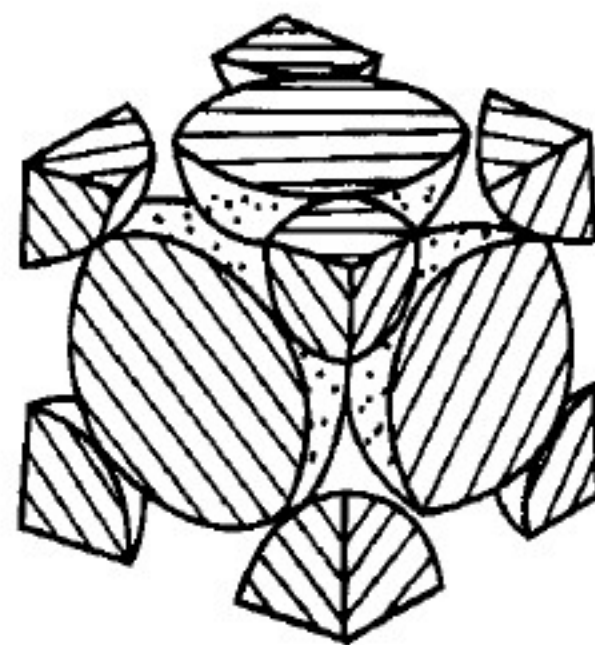
◆ 面心立方



(a)



(b)

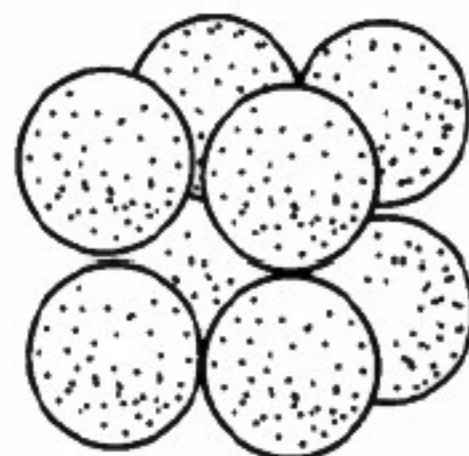


(c)

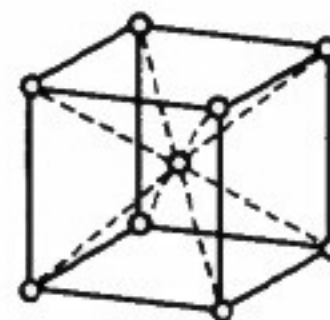
图 1-19 面心立方晶胞

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

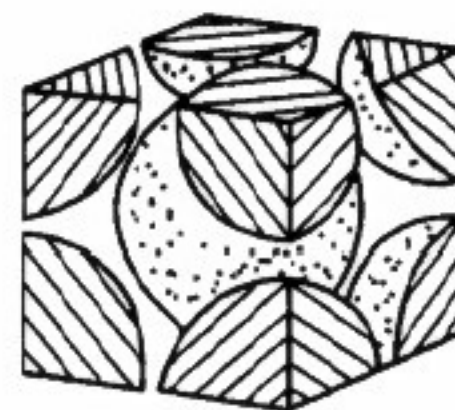
◆ 体心立方



(a)



(b)

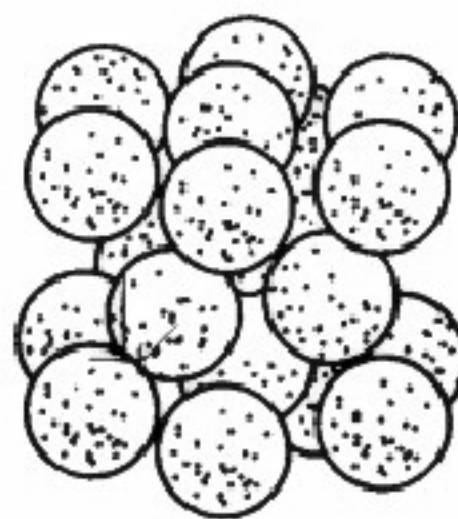


(c)

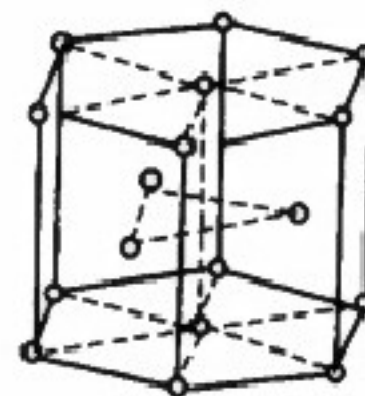
图 1-18 体心立方晶胞

(a) 刚球模型；(b) 质点模型；(c) 晶胞原子数

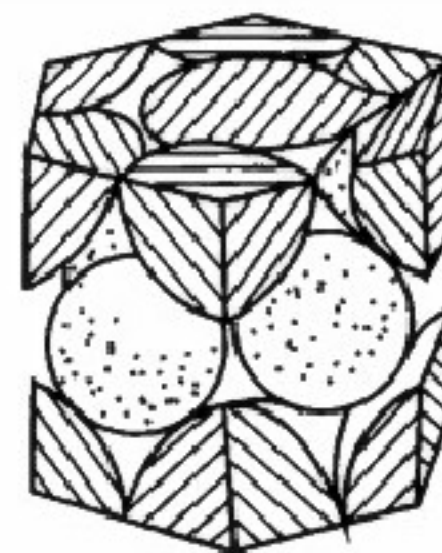
◆ 密排六方



(a)



(b)



(c)

图 1-20 密排六方晶胞

(a) 刚球模型；(b) 质点模型；(c) 晶胞原子数

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

➤ 晶胞原子数：**fcc**=4；**bcc**=2；**hcp**=6

➤ 点阵常数：

晶胞大小是用点阵常数来衡量的，它是表征物质晶体结构的一项基本参数。

体心立方： $R = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ 或 $a = \frac{4\sqrt{3}}{3}R$

面心立方： $R = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ 或 $a = 2\sqrt{2}R$

密排六方： $R = \frac{1}{2}a$ 或 $a = 2R, \frac{c}{a} = 1.633$

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

➤ 晶体原子排列的紧密程度

1. 配位数 (CN)：晶体结构中任一原子周围最近且等距离的原子数。

$$\text{fcc}_{(\text{CN})} = 12; \text{bcc}_{(\text{CN})} = 8; \text{hcp}_{(\text{CN})} = 12$$

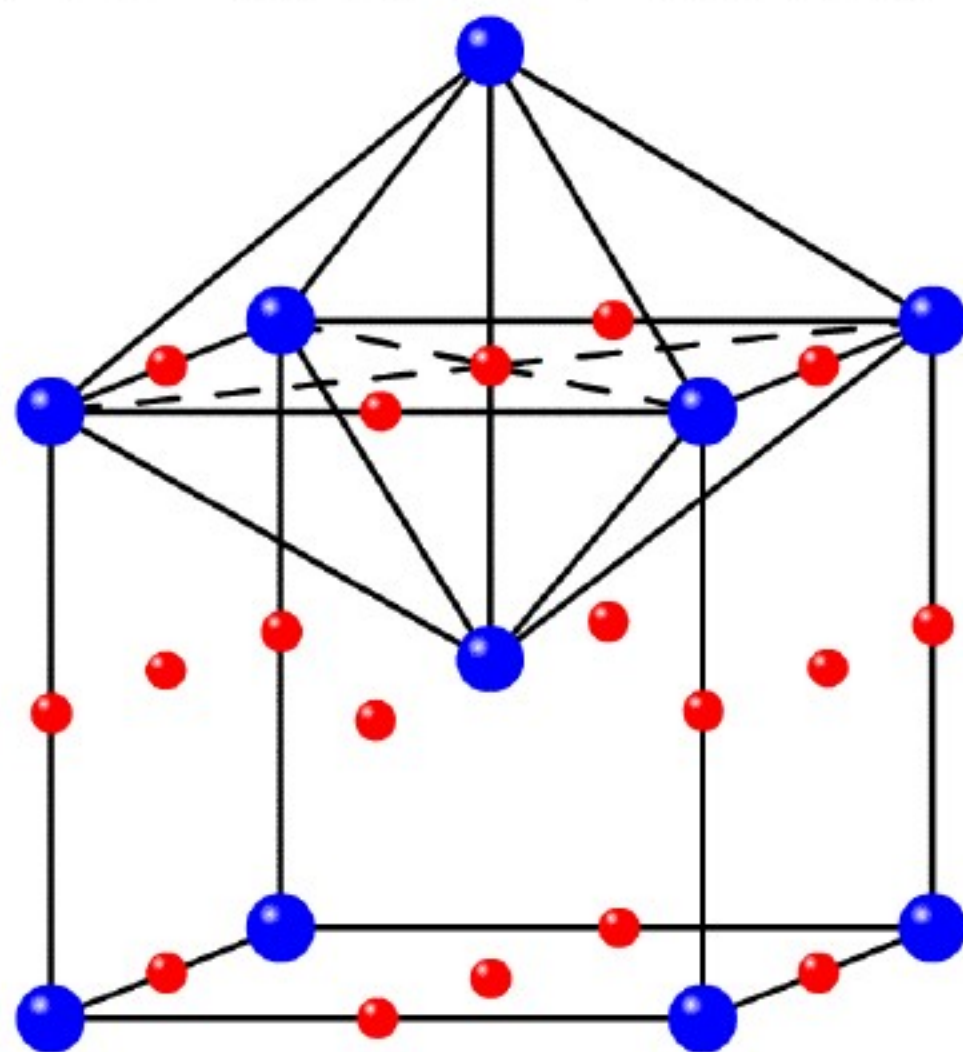
2. 致密度 (k)：晶体结构中原子体积占总体积的百分数, $k = nv/V$ 。

$$\text{fcc}_{(k)} = 0.74; \text{bcc}_{(k)} = 0.68; \text{hcp}_{(k)} = 0.74$$

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

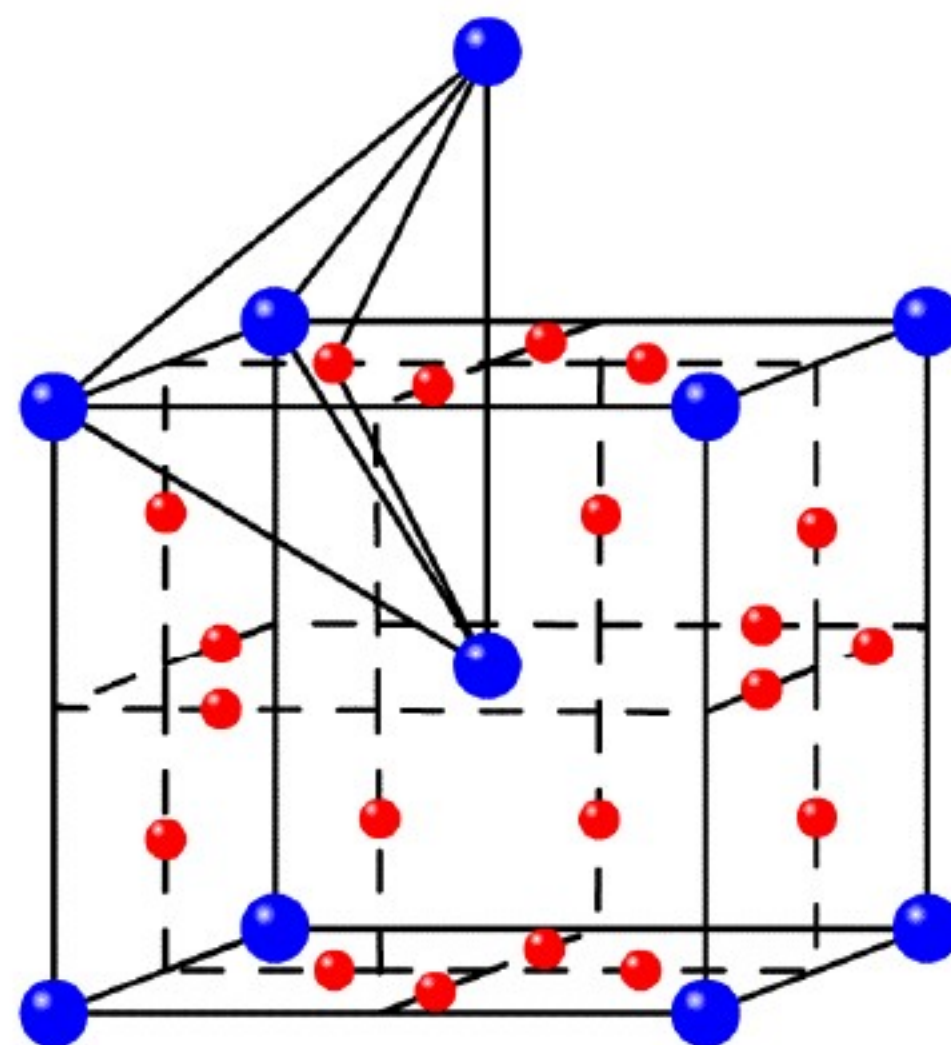
➤ 晶体结构中的间隙

1. 体心立方结构中的间隙



● 点阵原子
● 八面体间隙

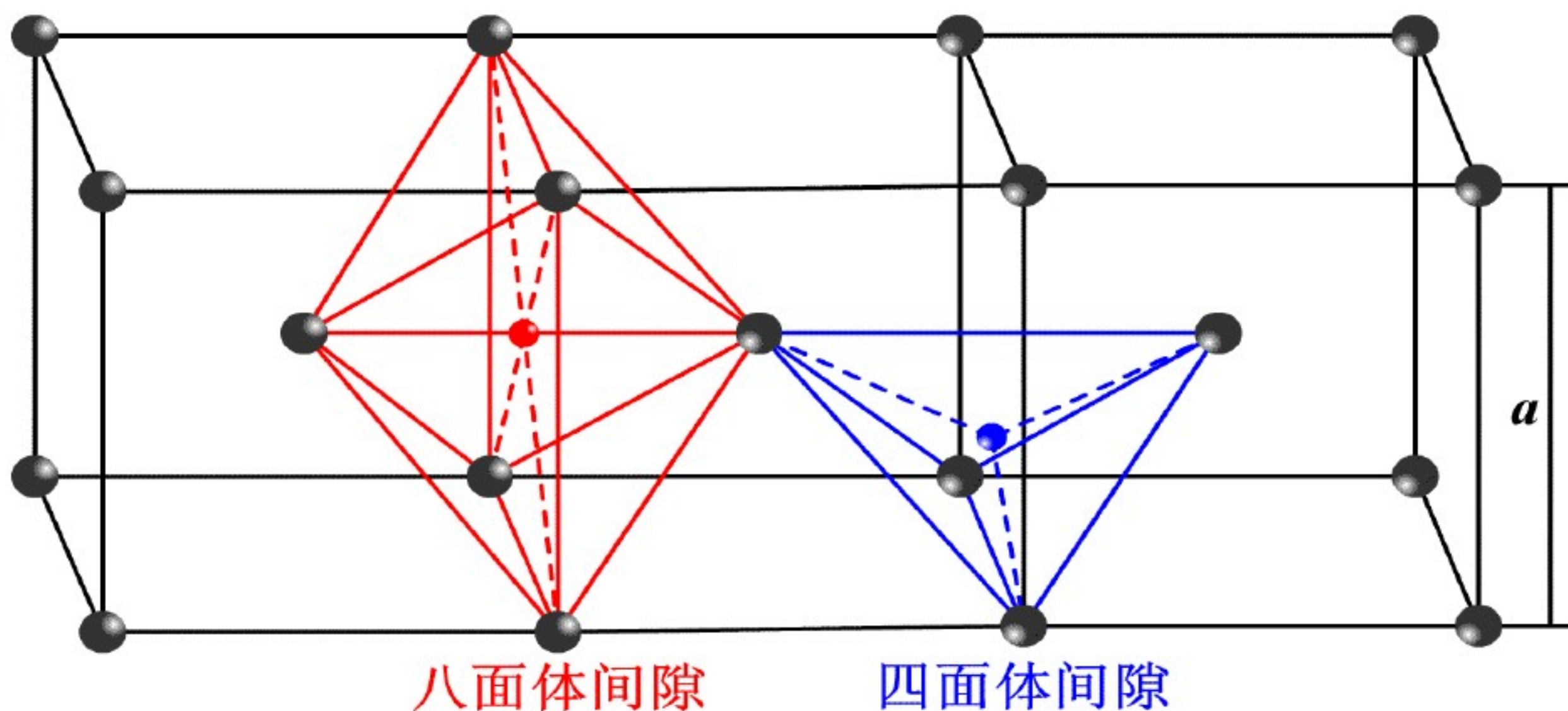
体心立方点阵中的间隙



● 点阵原子
● 四面体间隙

——

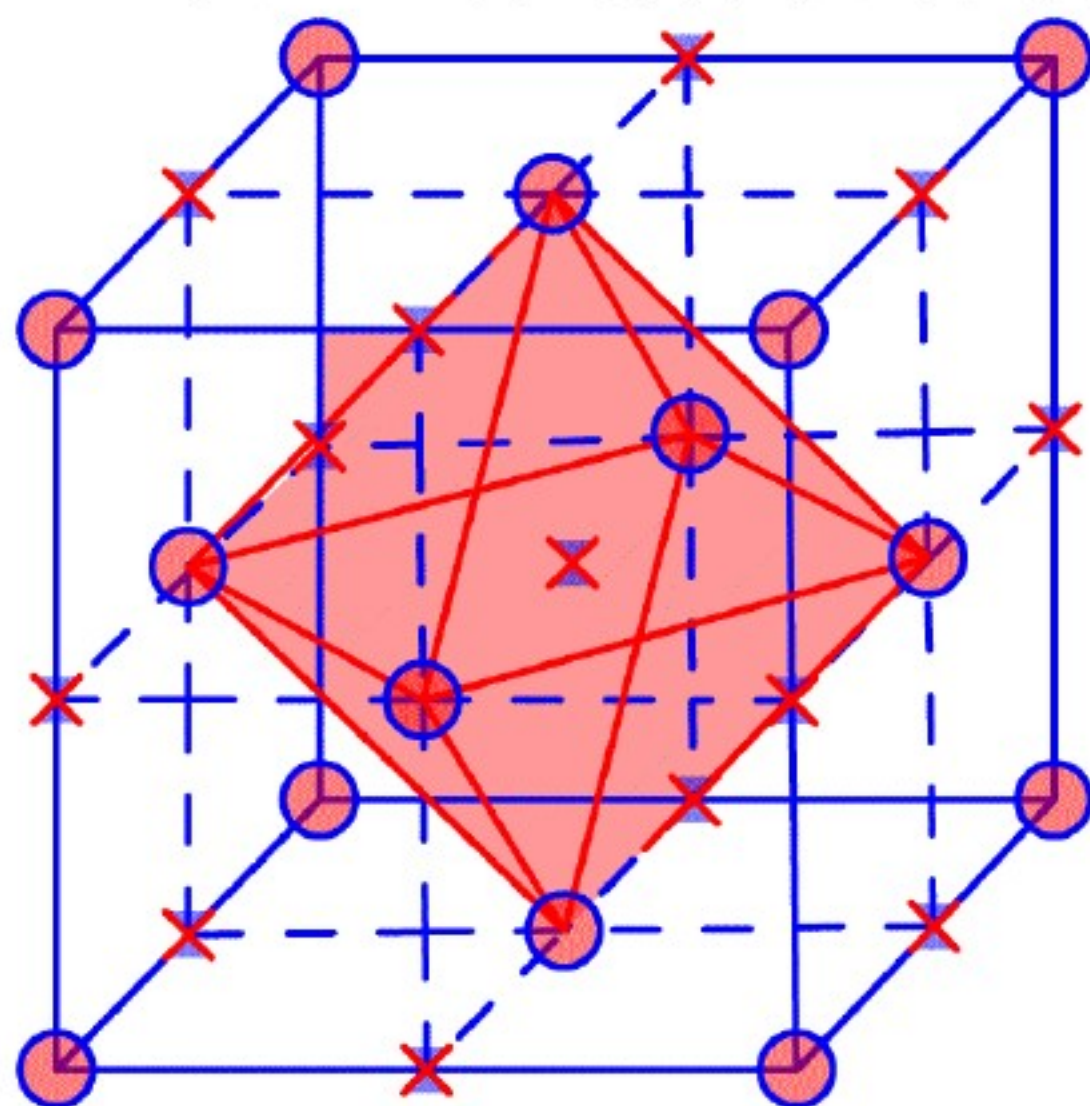
§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征



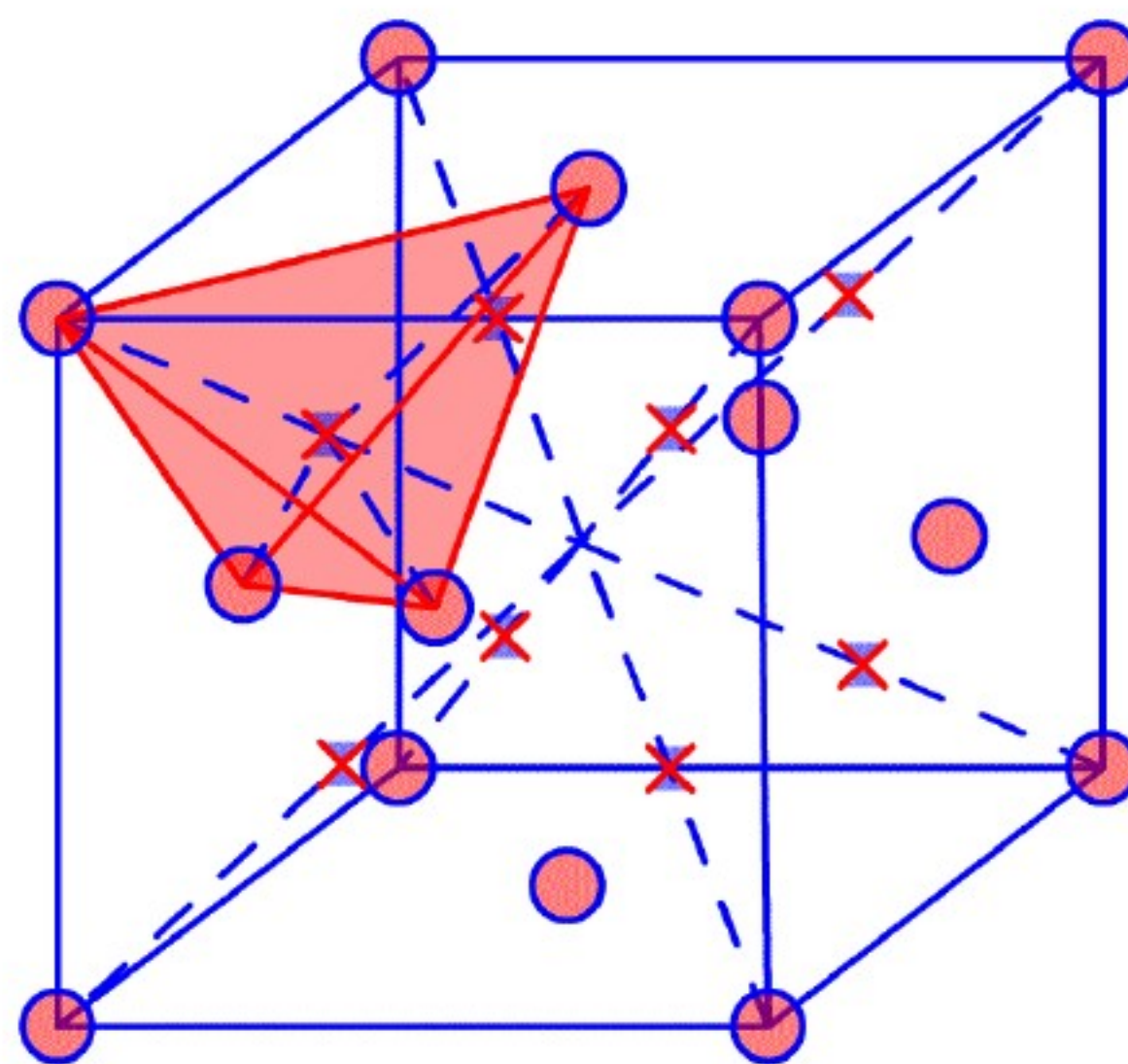
体心立方晶体中八面体空隙与四面体空隙的位置

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

2. 面心立方结构中的间隙



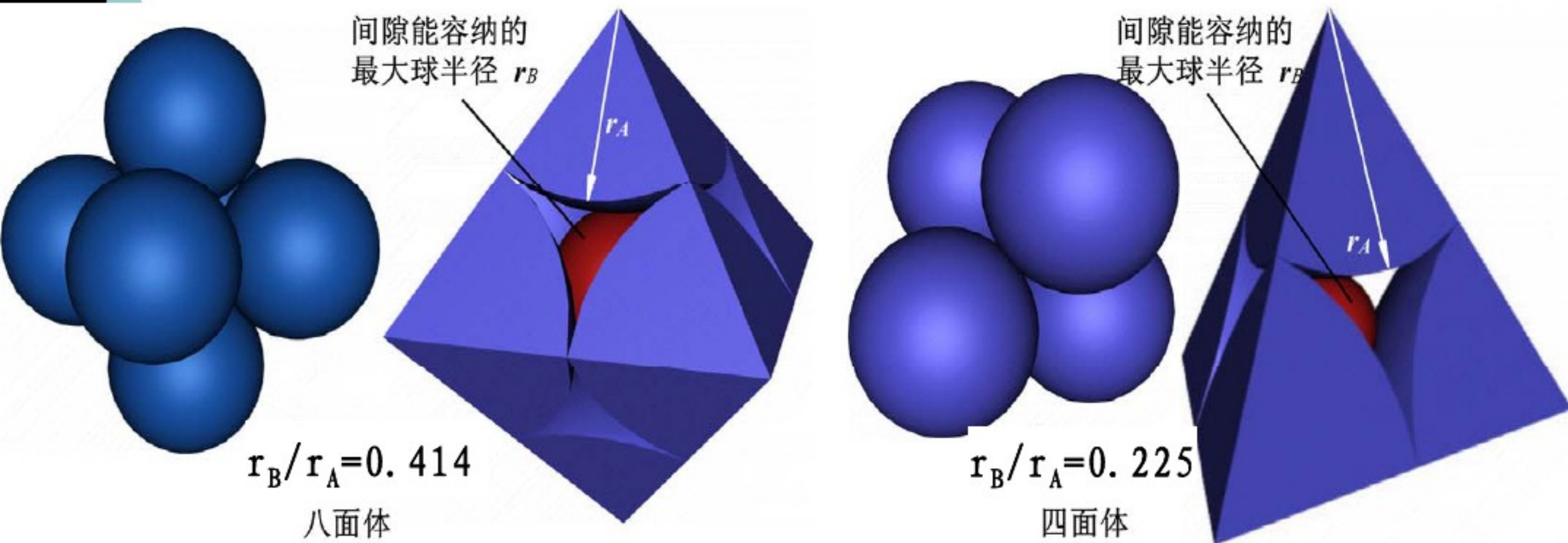
● 点阵原子
× 八面体间隙



● 点阵原子
× 四面体间隙

面心立方点阵中的间隙

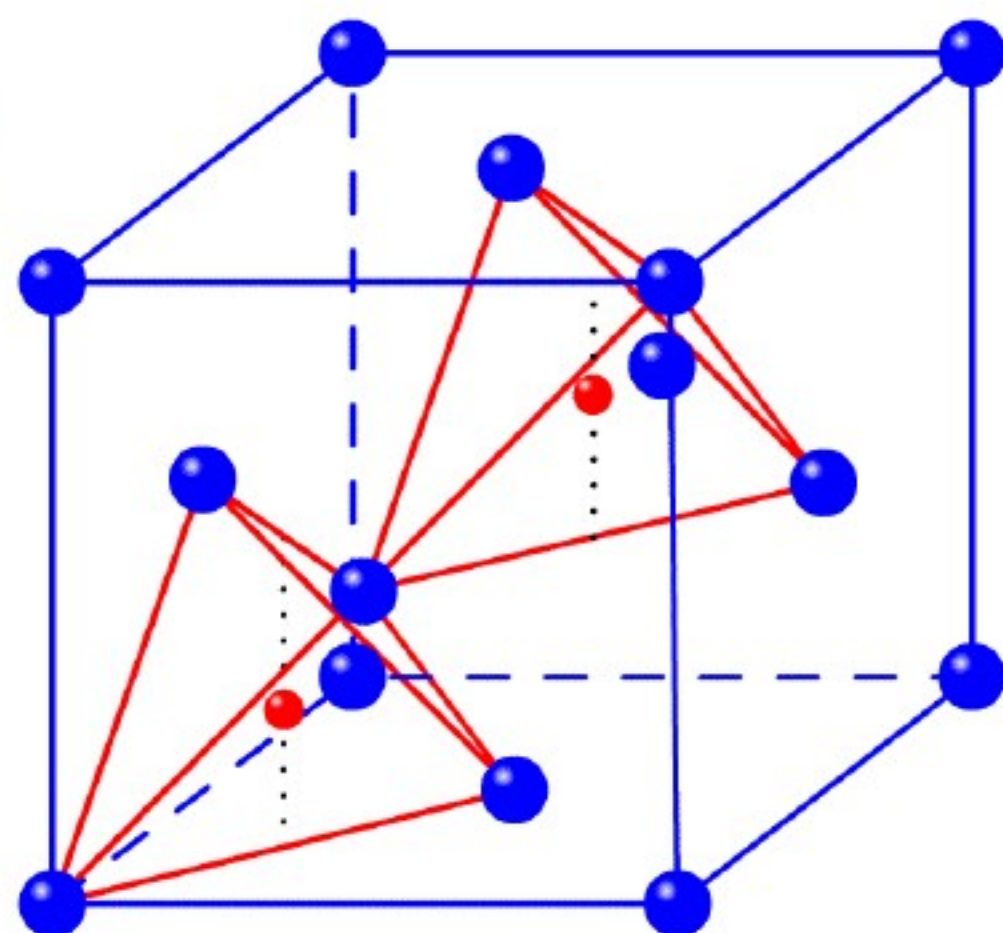
§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征



面心立方晶体中间隙的刚球模型

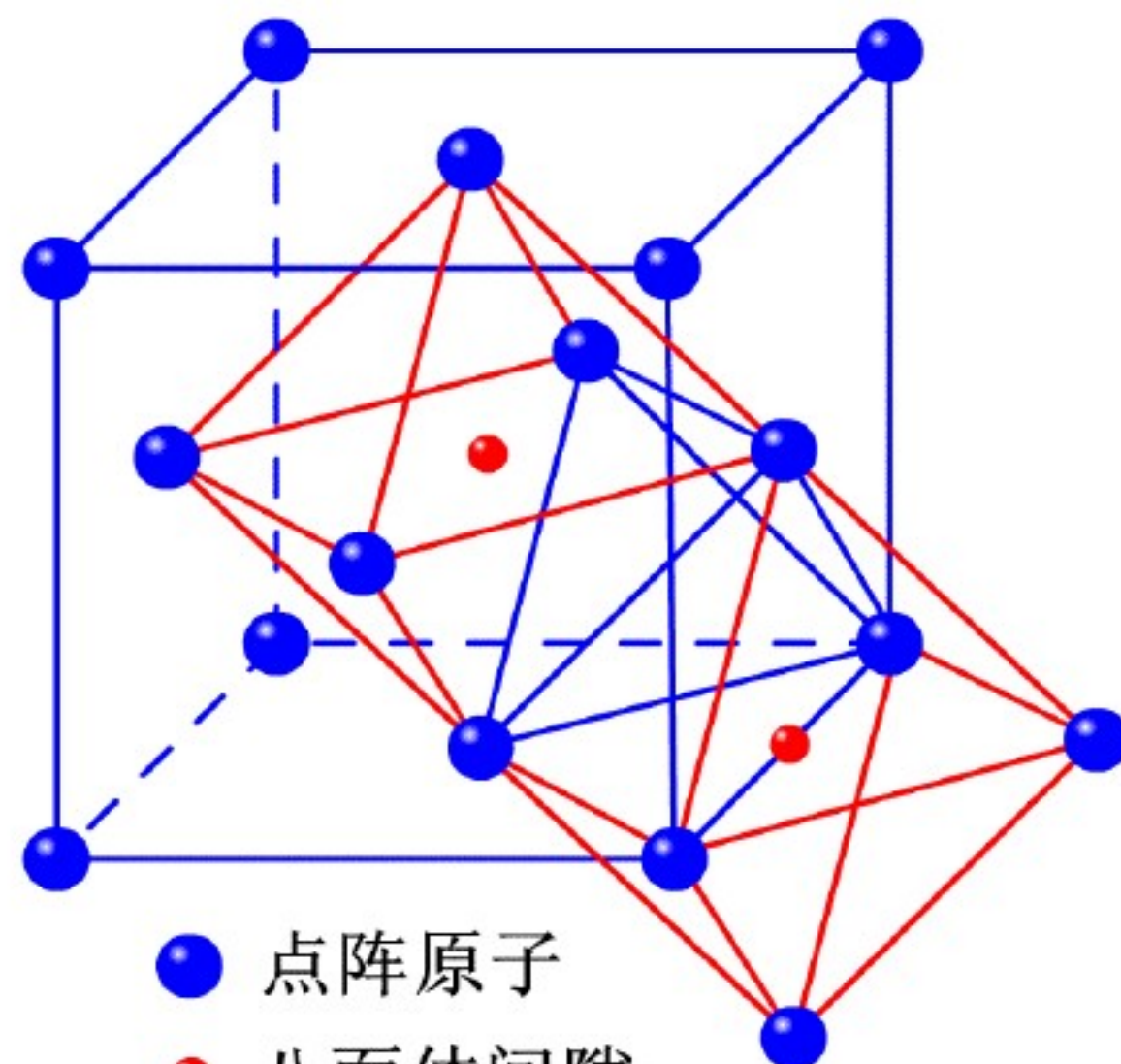
* 设原子半径为 r_A ，间隙中能容纳的最大圆球半径为 r_B ，则可求面心立方结构的四面体间隙和八面体间隙的 r_B/r_A 数值。

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征



- A原子
- 四面体间隙

面心立方晶胞中两个四面体空隙的位置

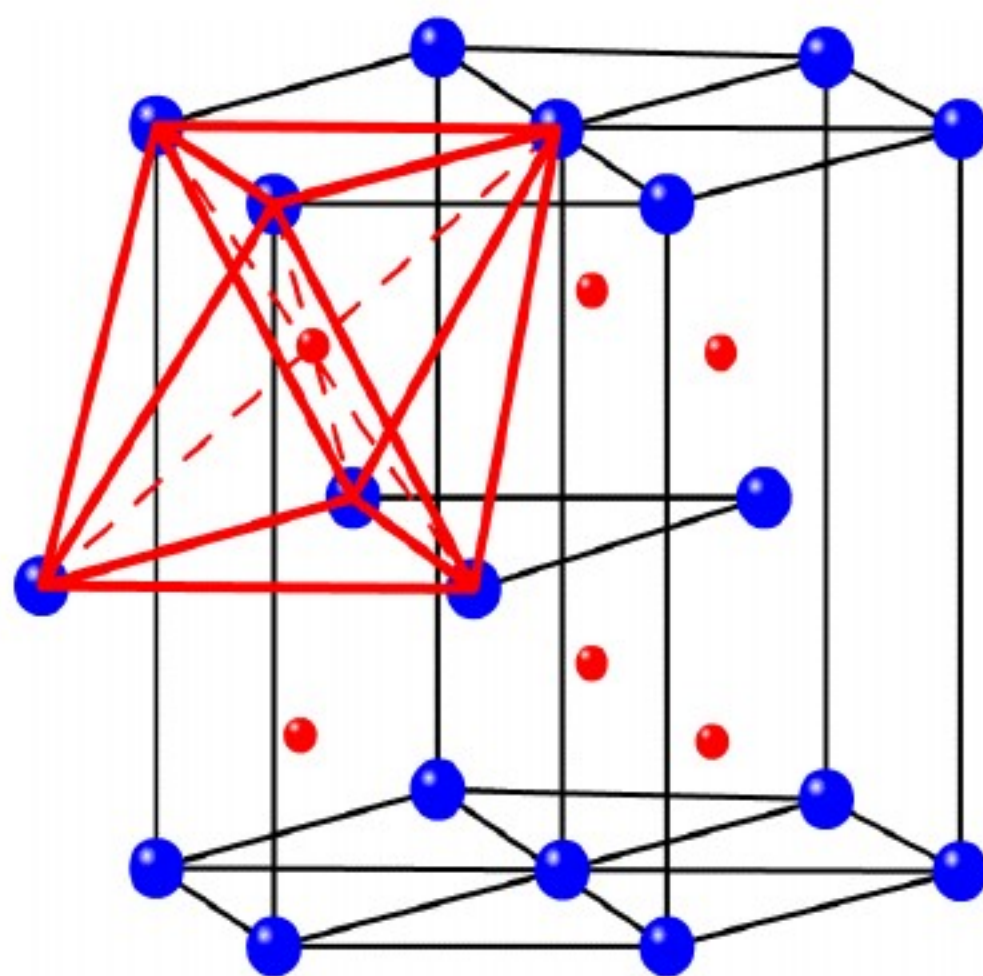


- 点阵原子
- 八面体间隙

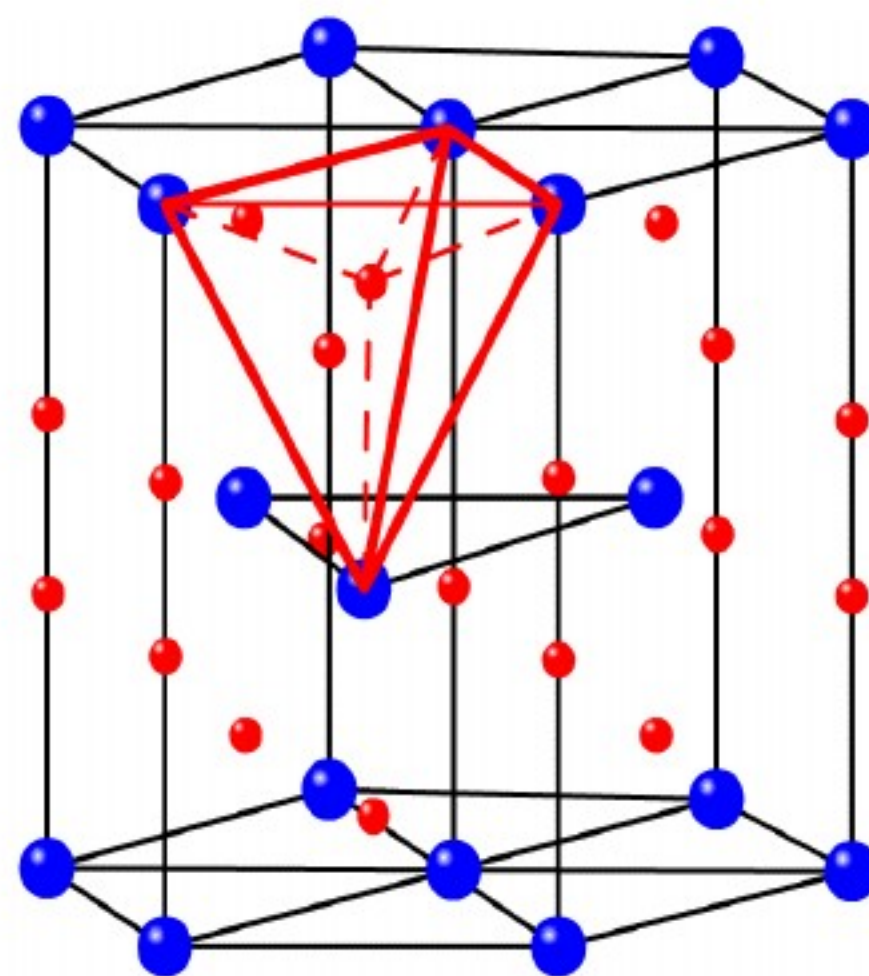
面心立方晶胞中两个八面体空隙的位置

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

3. 密排六方结构中的间隙



- 点阵原子
- 八面体间隙



- 点阵原子
- 四面体间隙

密排六方点阵中的间隙

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

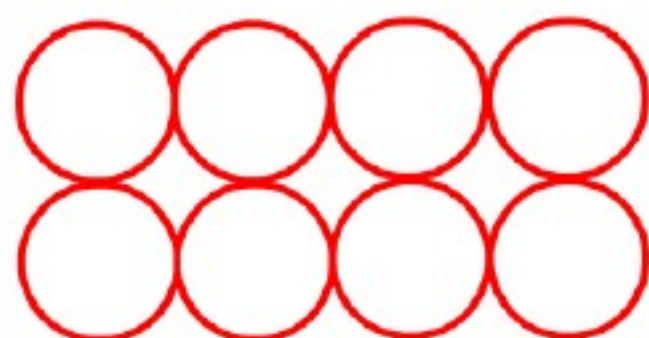
三种典型晶体中的间隙

晶体结构	八面体间隙		四面体间隙	
	间隙数/原子数	r_B/r_A	间隙数/原子数	r_B/r_A
bcc	$6 / 2 = 3$	0.155	$12 / 2 = 6$	0.291
fcc	$4 / 4 = 1$	0.414	$8 / 4 = 2$	0.225
hcp	$6 / 6 = 1$	0.414	$12 / 6 = 2$	0.225

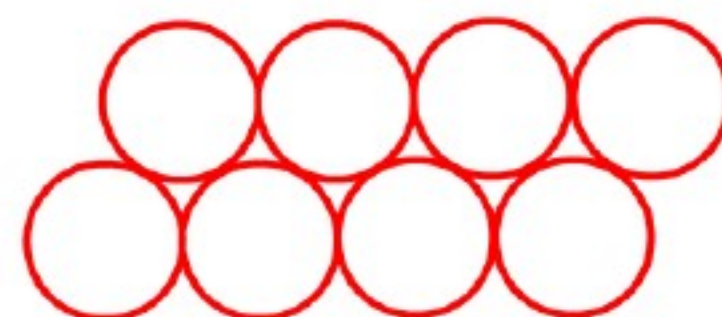
§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

➤ 晶体中原子的堆垛方式

思考：为何面心立方和密排六方结构具有相同的配位数及致密度，却有着不同的晶体结构？

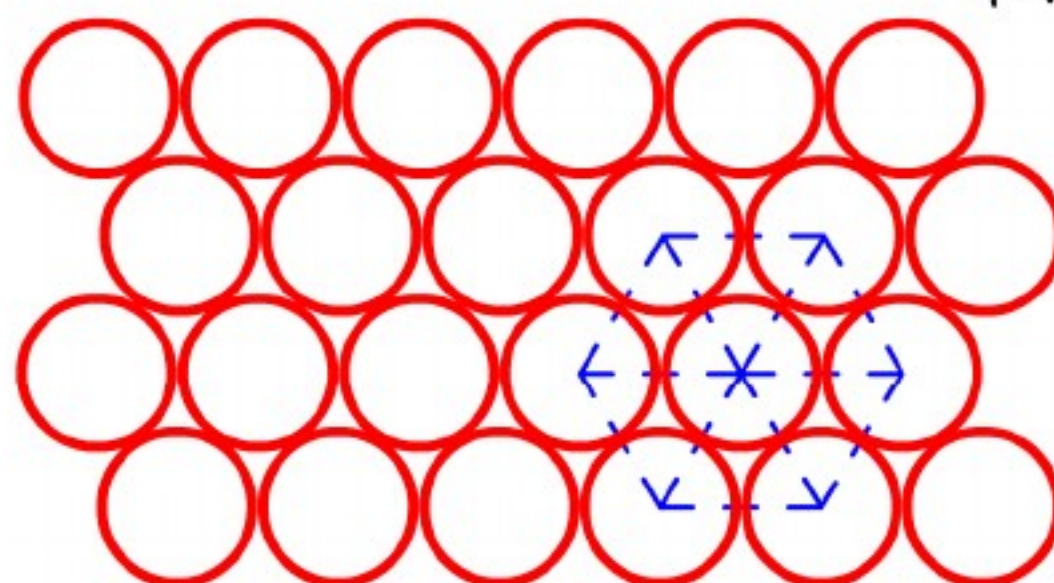


(a)

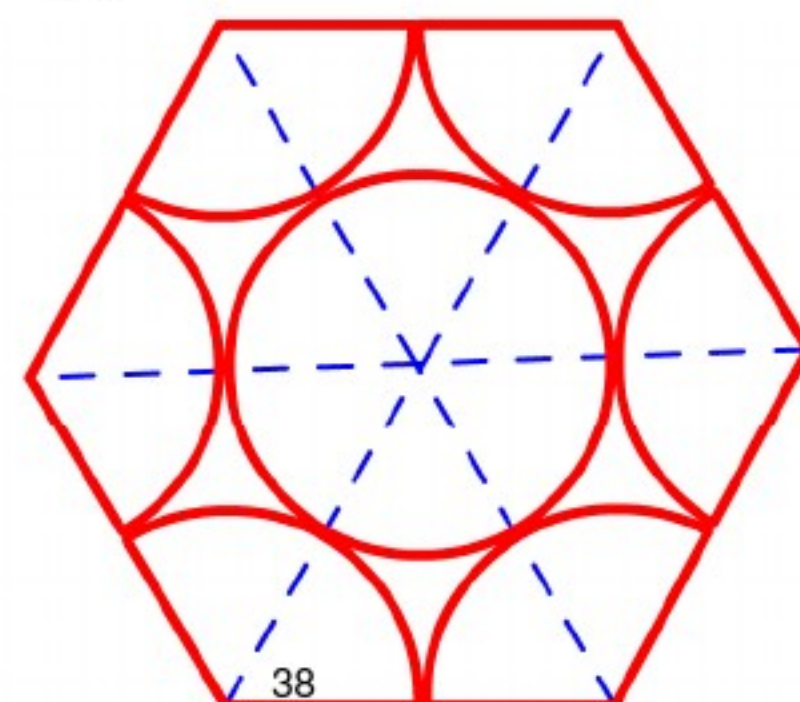


(b)

二维排列方式



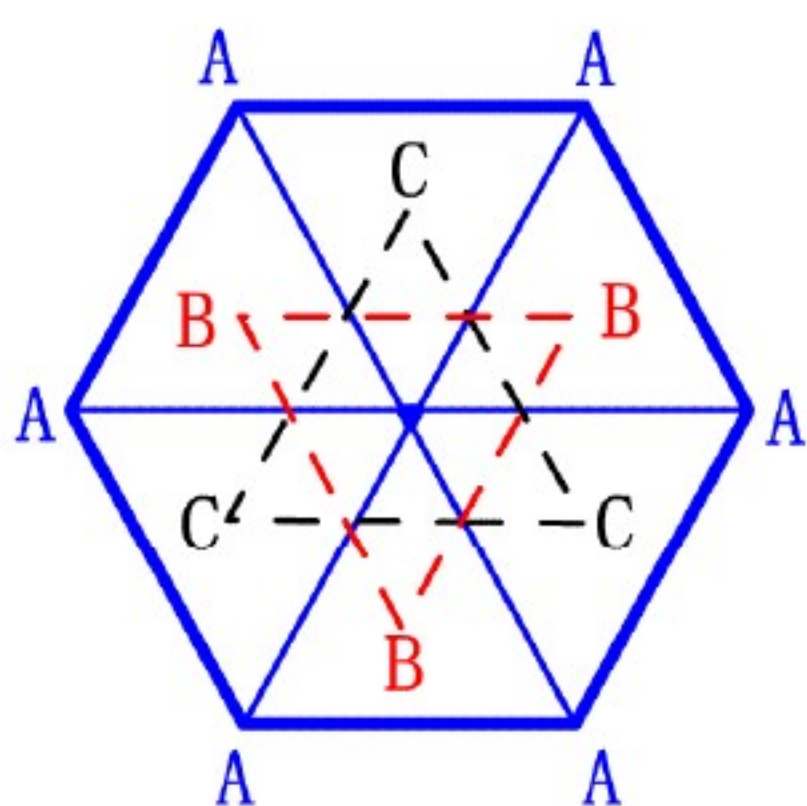
(a)



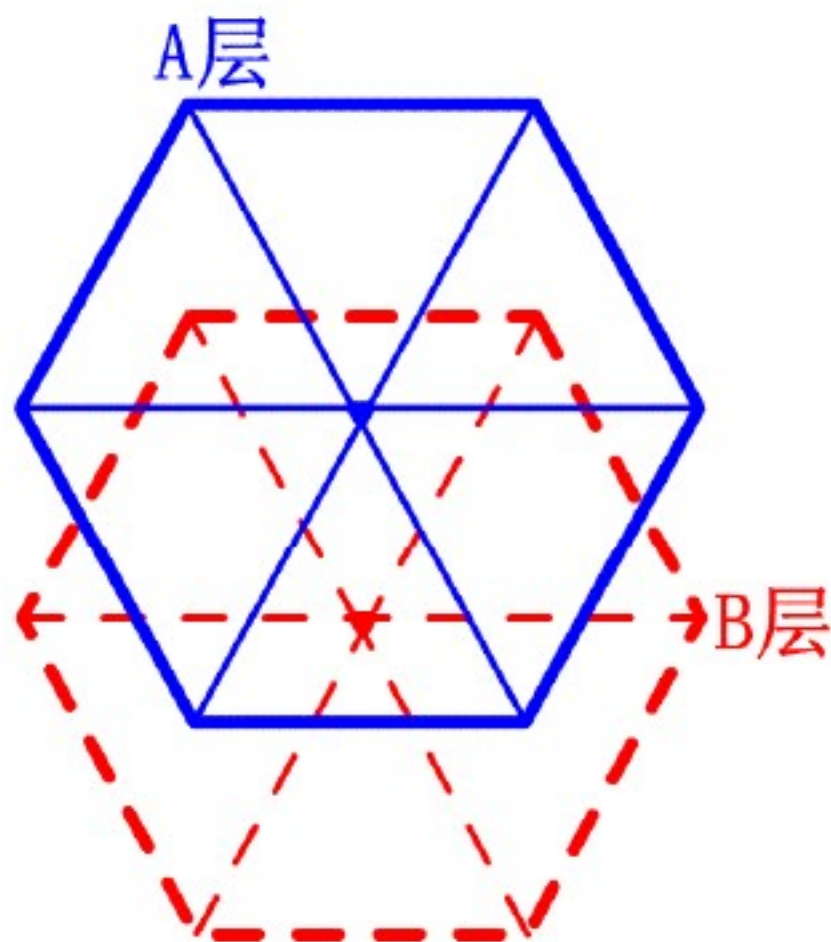
(b)

密排面原子排列方式

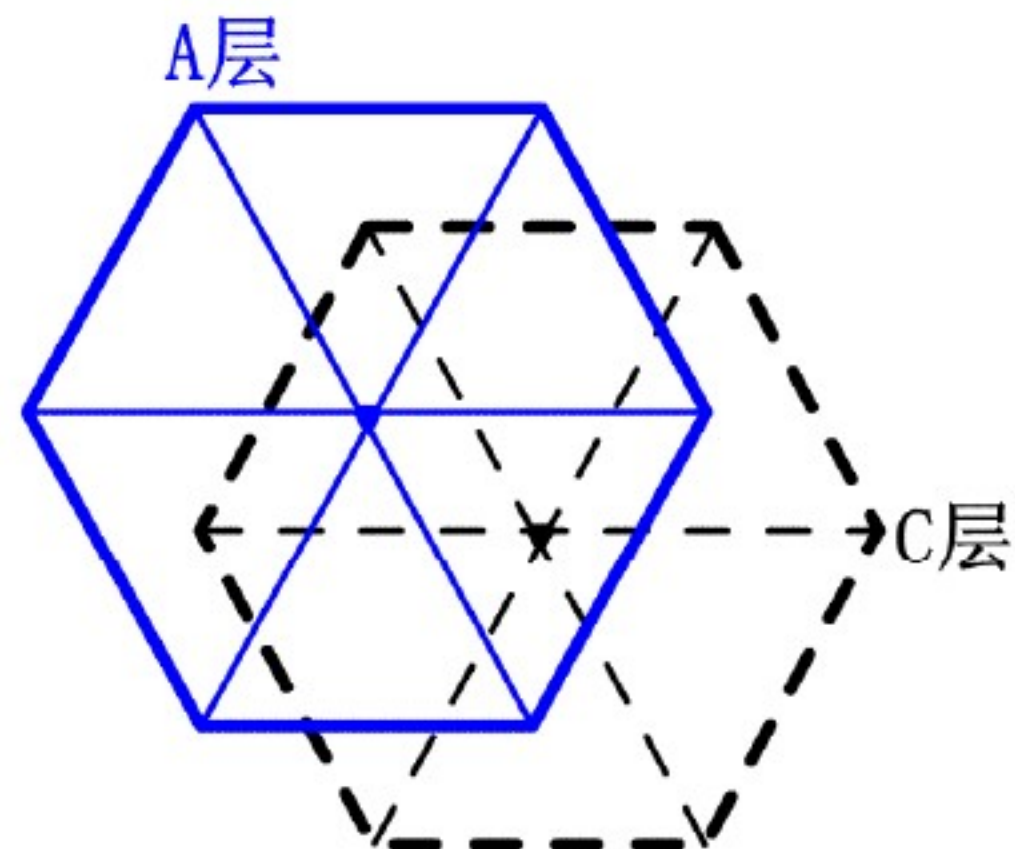
§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征



(a)



(b)



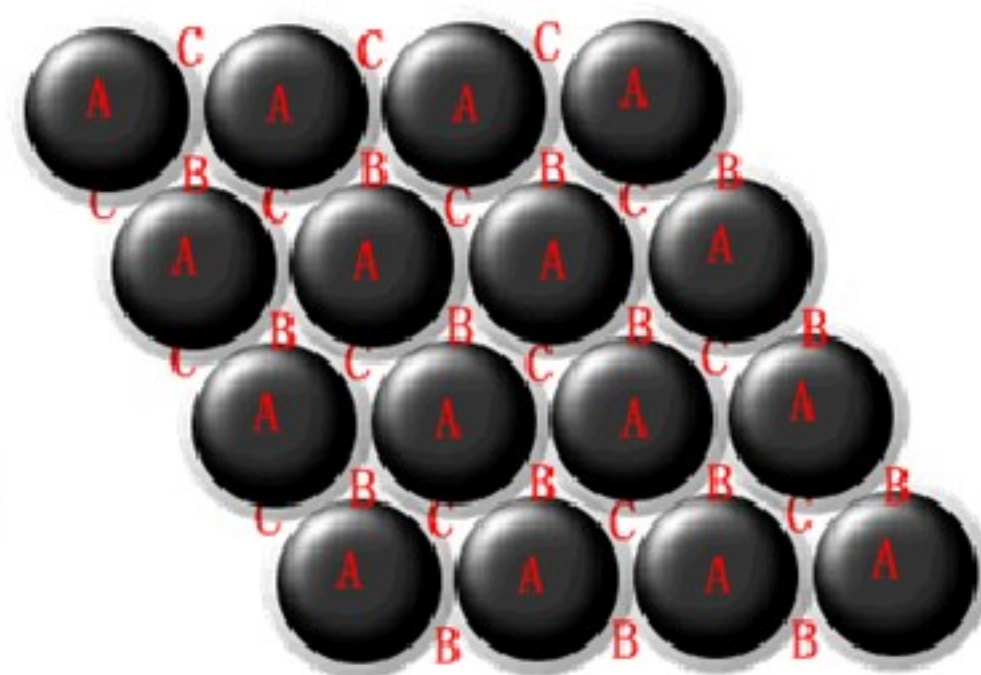
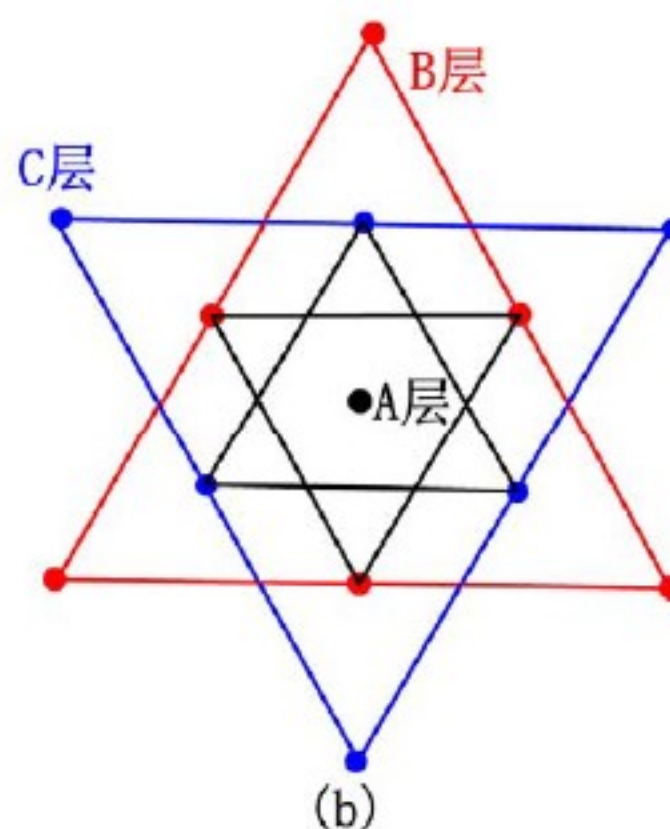
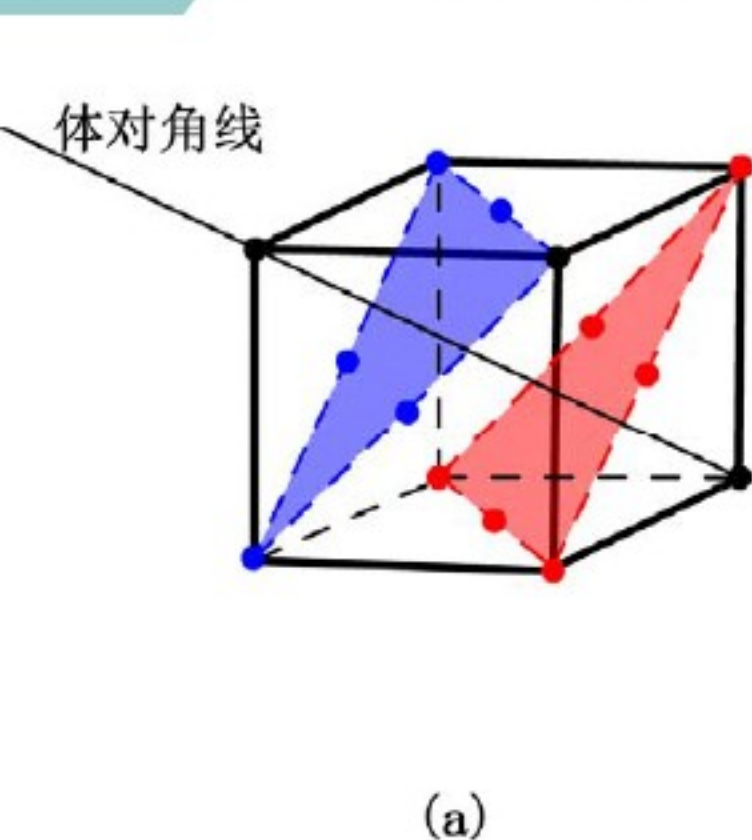
(c)

空隙位置和密排面的堆积方法

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

1. 面心立方结构的堆垛方式

以密排面 $\{111\}$ 沿 $\langle 111 \rangle$ 方向按ABCABC.....顺序堆垛而成



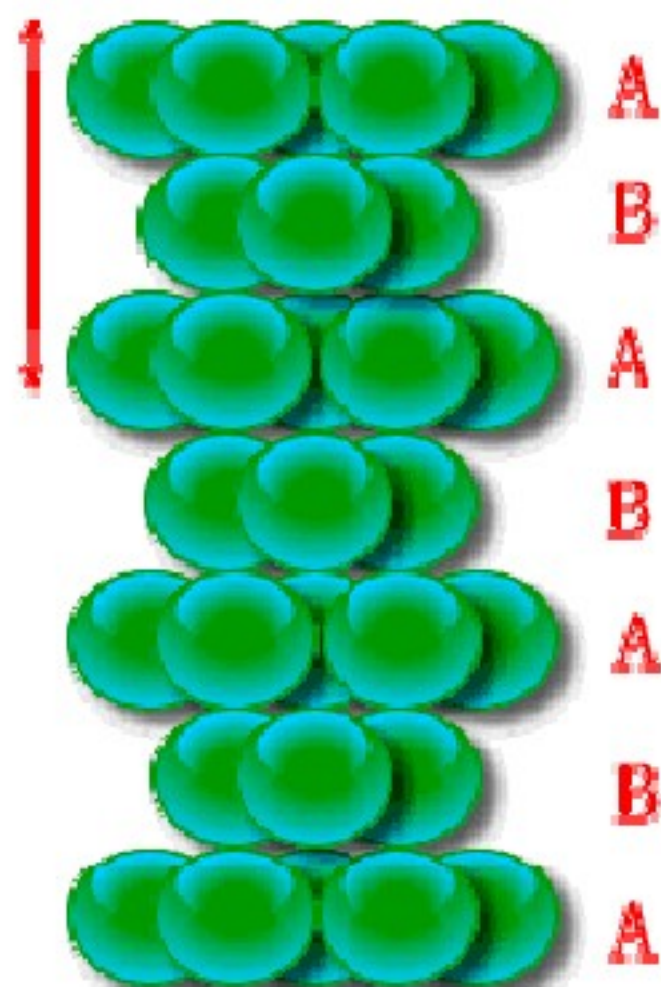
二维密排原子面及其堆积方式

面心立方晶体中的密排面

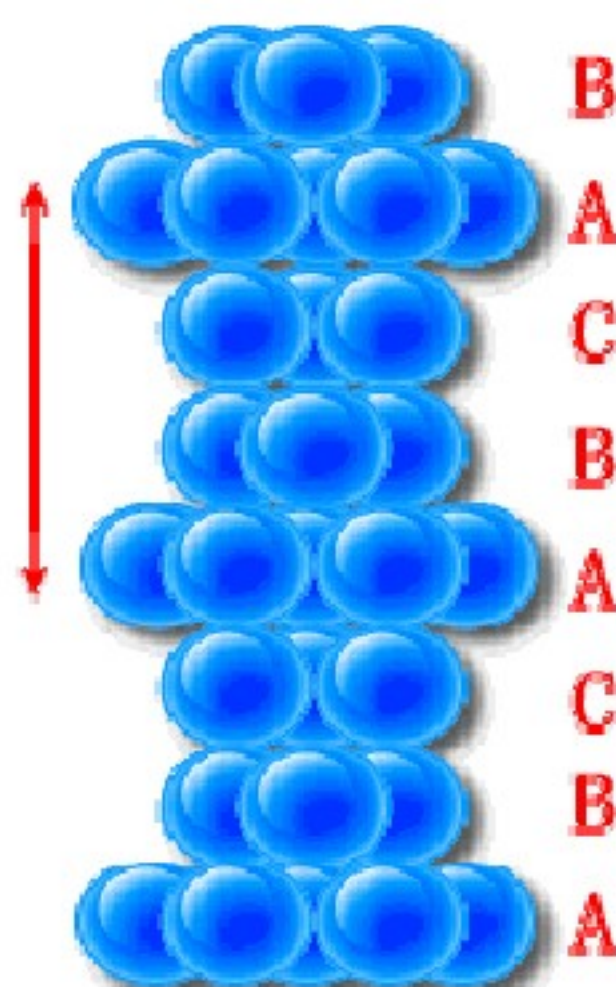
§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

2. 面排六方结构的堆垛方式

以密排面 $\{0001\}$ 沿 $\langle 0001 \rangle$ 方向按ABAB.....顺序堆垛而成



密排六方结构



面心立方结构

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

1.2.2.2 陶瓷的晶体结构

- ✓ 陶瓷是一种多晶态无机材料，是粉末烧结体，一般由**结晶相、玻璃相和气相(气孔)**交织而成。
- ✓ 陶瓷可以是只含一种结晶相的单晶相多晶体，也可以是含有多种晶相的多晶相多晶体，也就是说**除了主晶相外，还有其它副晶相**。
- ✓ 陶瓷中主晶相**主要有硅酸盐、氧化物和非氧化物**三种，主晶相的性能往往能表征材料的基本特性，而且**习惯上也用主晶相来命名陶瓷**。

特点：晶体结构复杂，原子排列不紧密，配位数较低。

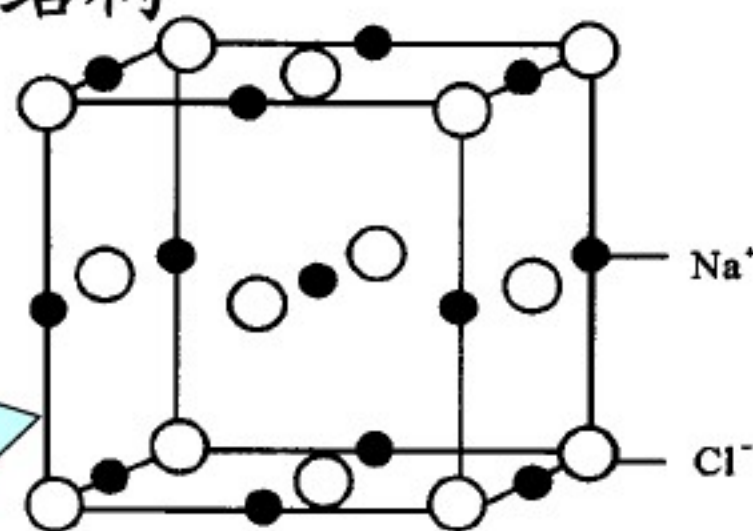
两类结构：

- 1) 离子键结合的陶瓷—**MgO、CaO、ZrO₂、Al₂O₃**等。
- 2) 共价键结合的陶瓷—**SiC、Si₃N₄、SiO₂**等。

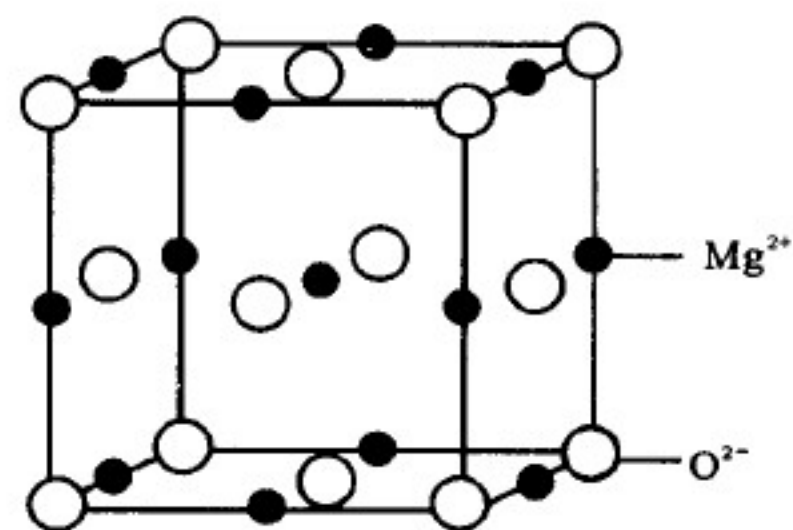
§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

◆ 离子键晶体陶瓷的结构

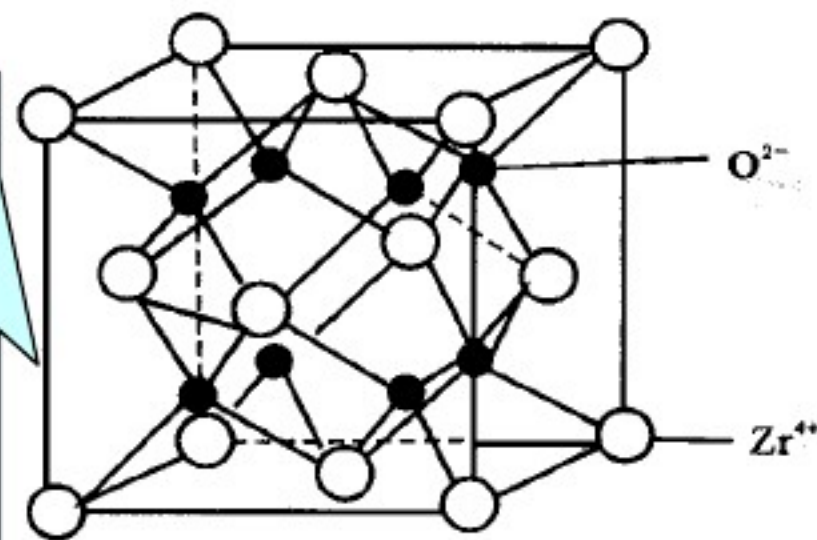
1) 离子晶体结构



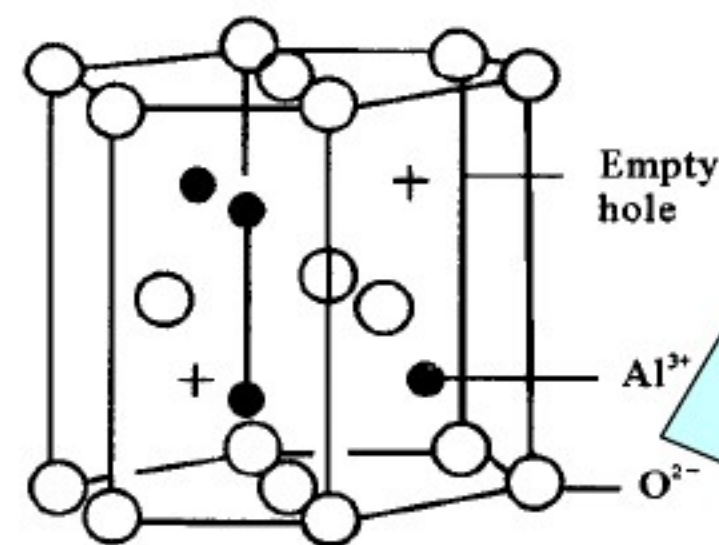
(a)



(b)



(c)



(d)

➤ 两个面心立方点阵穿插而成的超点阵
➤ 单胞离子数：
 $8 \rightarrow 4\text{Na}^+ + 4\text{Cl}^-$

➤ 属 CaF_2 型结构
➤ Zr^{4+} 占据面心立方结构结点位置
➤ O^{2-} 处于四面体间隙中心，即 $(1/4, 1/4, 1/4)$ 。
➤ 单胞离子数：
 $12 \rightarrow 4\text{Zr}^{4+} + 8\text{O}^{2-}$

➤ O^{2-} 处于密排六方结构中的结点上
➤ Al^{3+} 位于八面体间隙
➤ 为维持平衡，只有 $2/3$ 的八面体间隙位置被占据。

图 1-28 离子键晶体陶瓷结构

(a) NaCl 型； (b) MgO 型； (c) ZrO_2 型； (d) Al_2O_3 型

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

2) 离子半径比与配位数

- 离子半径的大小一般遵从下列规律：
- ✓ 在原子序数相近时，阴离子尺寸比阳离子大；
- ✓ 同一周期的阳离子，如 Na^+ 、 Mg^{2+} 、 Al^{3+} ，价数越大离子半径越小；
- ✓ 同一周期的阴离子，价数越大离子半径越大，如 O^{2-} 与 F^- ；
- ✓ 变价元素离子，如 Mn^{2+} 、 Mn^{4+} 、 Mn^{7+} ，价数越大，离子半径越小；
- ✓ 同价离子原子序数越大，离子尺寸越大。
- ✓ 但铜系元素与镧系元素例外。
- 在离子晶体中，配位数是指最邻近的异号离子数。

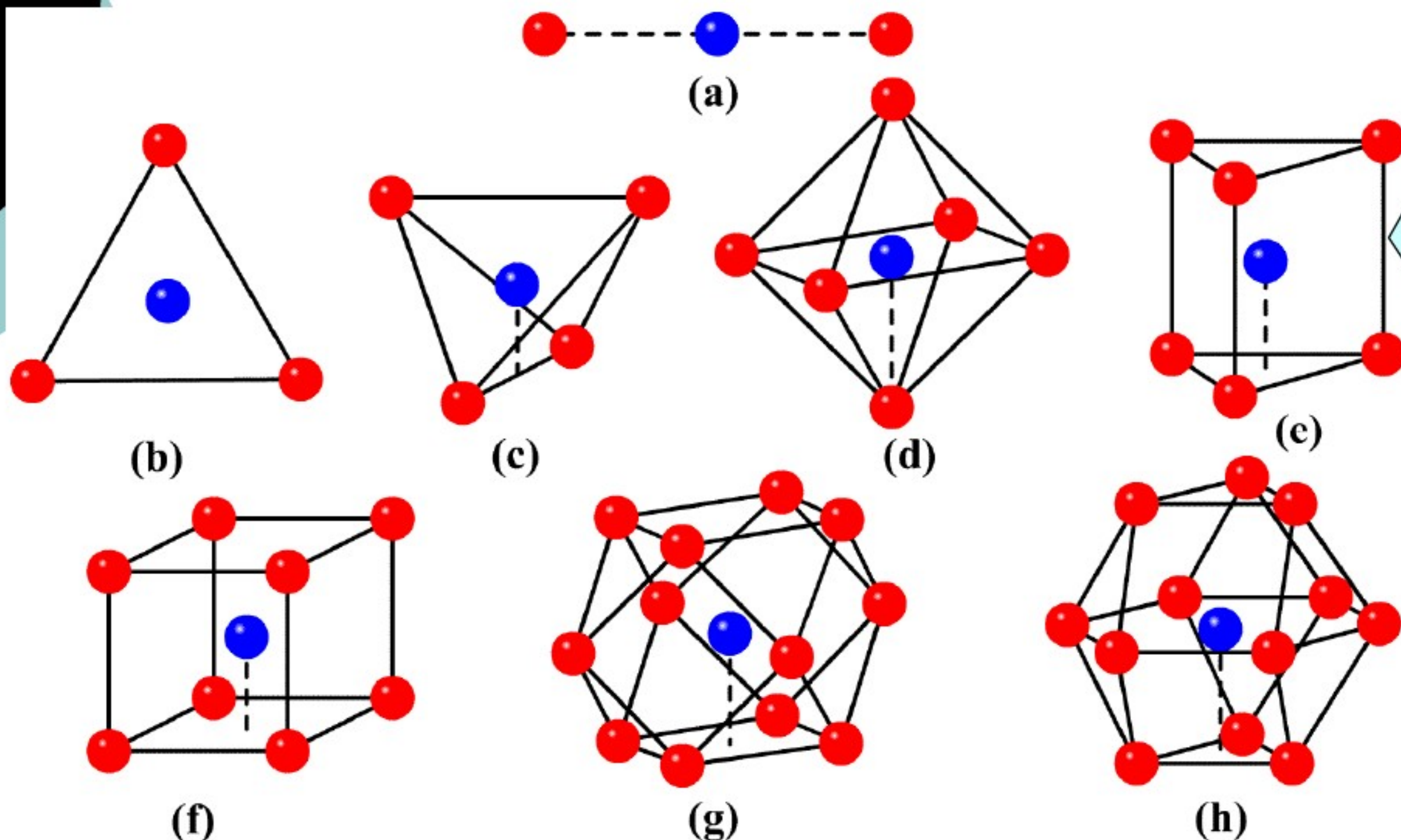
☞ 在描述离子晶体结构时，常用配位多面体。配位多面体就是晶体中最邻近的配位原子所组成的多面体。

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

正负离子半径比值与配位数的关系

r_+/r_- 值	正离子的配位数	负离子多面的体形状	实 例
0.000 - - 0.155	2	哑铃形	干冰 CO_2
0.155 - - 0.225	3	三角形	B_2O_3
0.255 - - 0.414	4	四面体形	$\text{SiO}_2, \text{GeO}_2$
0.414 - - 0.732	6	八面体形	$\text{NaCl}, \text{MgO}, \text{TiO}_2$
0.732 - - 1.000	8	立方体形	$\text{ZrO}_2, \text{CaF}_2, \text{CsCl}$
1.00 以上	12	立方八面体	

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征



负离子配位多面体大多不是正多面体，而是有着某种程度的畸变，例如出现三方柱形的六配位情况，见图e。

各种配位多面体形状

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

◆ 例：

假定离子键结合，计算下列每种化合物中各元素的配位数(CN)：

(a) MgO; (b) Cr_2O_3 ; (c) K_2O

已知：

$$r(\text{Mg}^{2+}) = 0.078\text{nm} \quad , \quad r(\text{Cr}^{3+}) = 0.064\text{nm} \quad ,$$

$$r(\text{K}^{+}) = 0.133\text{nm} \quad , \quad r(\text{O}^{2-}) = 0.132\text{nm}$$

§ 1.2.2 晶体结构及其几何特征

◆ 共价键晶体陶瓷的结构（多属金刚石型结构）

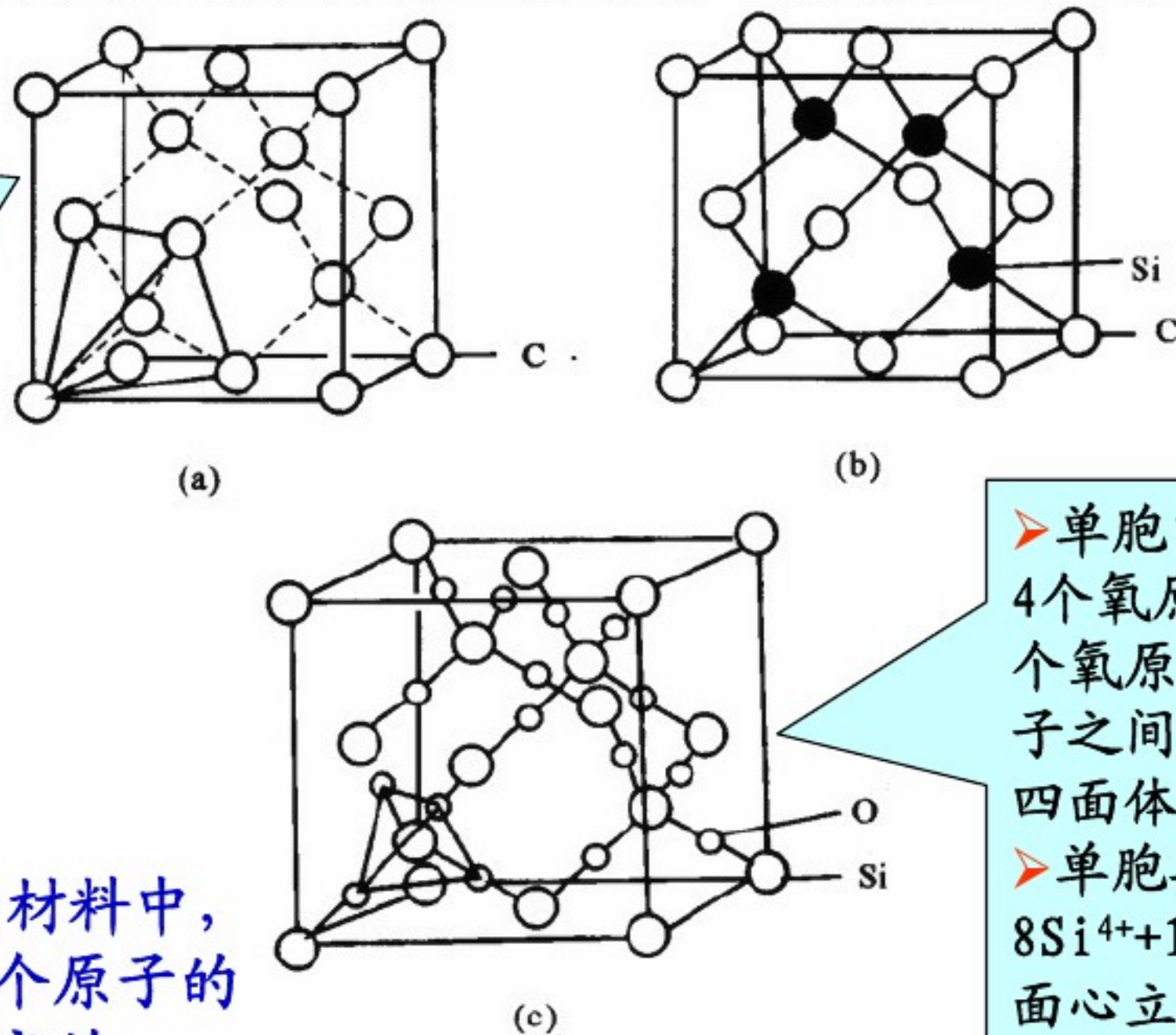
➤ 碳原子位于面心立方结构的结点外，还有4个碳原子位于四面体间隙。

➤ 每个单胞中共8个原子，每一阵点包含两个原子，属面心立方结构。

➤ 配位数为4，**不是密排结构**

● **注：**在共价键结合的材料中，最近邻的数目是由每个原子的价电子层的电子数决定的。

例：H-O-H



➤ 单胞中每1硅原子被4个氧原子所包围，每个氧原子介于2个硅原子之间，起着连接2个四面体的作用。

➤ 单胞共有24个离子： $8\text{Si}^{4+} + 16\text{O}^{2-}$ ，简化成面心立方点阵时，每一阵点包含6个离子， $2\text{Si}^{4+} + 4\text{O}^{2-}$

图 1-30 共价键晶体陶瓷结构
(a) 金刚石； (b) SiC； (c) 高温 SiO₂

§ 1.3 原子的不规则排列

在实际晶体中，通常把晶体中原子偏离其平衡位置而出现不完整性的区域称为**晶体缺陷**。

分类：

点缺陷：在三维方向上尺寸都很小的缺陷。如**空位**、**间隙原子**、**置换原子**等。

线缺陷：在二维方向上尺寸很小，而另一维方向上尺寸较大的缺陷。主要是**位错**。

面缺陷：在一维方向上尺寸很小，在另外二维方向上尺寸较大的缺陷。如**晶界**、**相界**、**表面**等。

§ 1.3.1 点缺陷

1.3.1.1 点缺陷的类型及形成

(1) 空位

肖脱基空位 - 离位原子进入其它空位或迁移至晶界或表面上所形成的空位。

弗兰克尔空位 - 离位原子进入晶体间隙中所形成的空位。

- 为什么在热平衡状态下,几乎不形成弗兰克尔空位,只形成肖脱基空位?

(2) 间隙原子: 位于晶体点阵间隙的原子。

(3) 置换原子: 位于晶体点阵位置的异类原子。

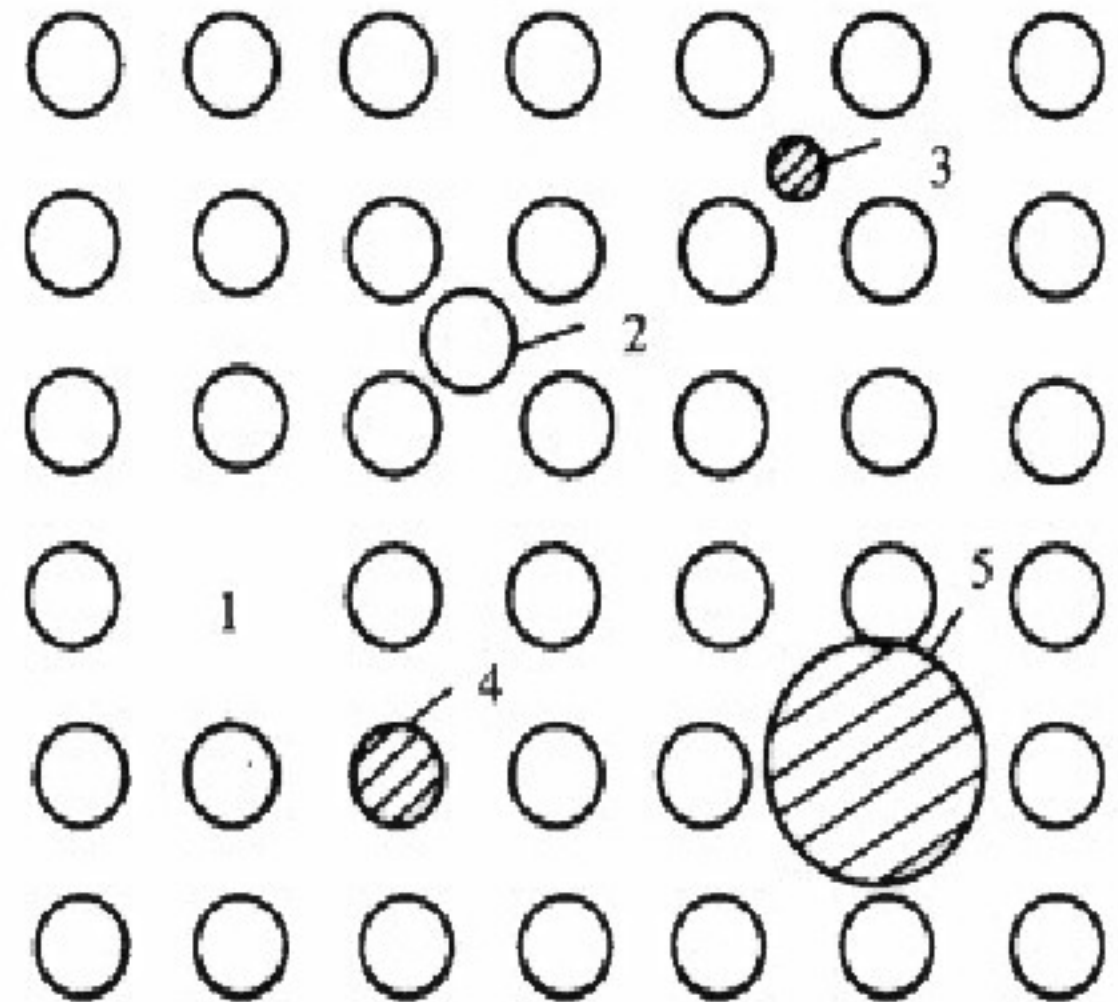


图 1-32 晶体中的各种点缺陷

1—空位; 2—同类型原子的间隙原子;
3—异类原子的间隙原子; 4,5—置换原子

§ 1.3.1 点缺陷

1.3.1.2 点缺陷的平衡浓度

◆ 点缺陷是热力学平衡缺陷

晶体中点缺陷的存在：

- (1) 造成点阵畸变，使晶体的内能升高，增大了晶体的热力学不稳定性；
- (2) 增大了原子排列的混乱程度，改变了其周围原子的振动频率，使晶体的熵值增大。熵值越大，晶体便越稳定。

§ 1.3.1 点缺陷

1.3.1.2 点缺陷的平衡浓度

说明：

上述两个互为矛盾的因素，使晶体中的点缺陷在一定温度下有一定的平衡数目，点缺陷的浓度称为它们在该温度下的热力学平衡浓度。

在一定温度下有一定的热力学平衡浓度，这是点缺陷区别于其它类型晶体缺陷的重要特点。

◆ 点缺陷的平衡浓度

$$C = A \exp(-\Delta E_v/kT)$$

§ 1.3.1 点缺陷

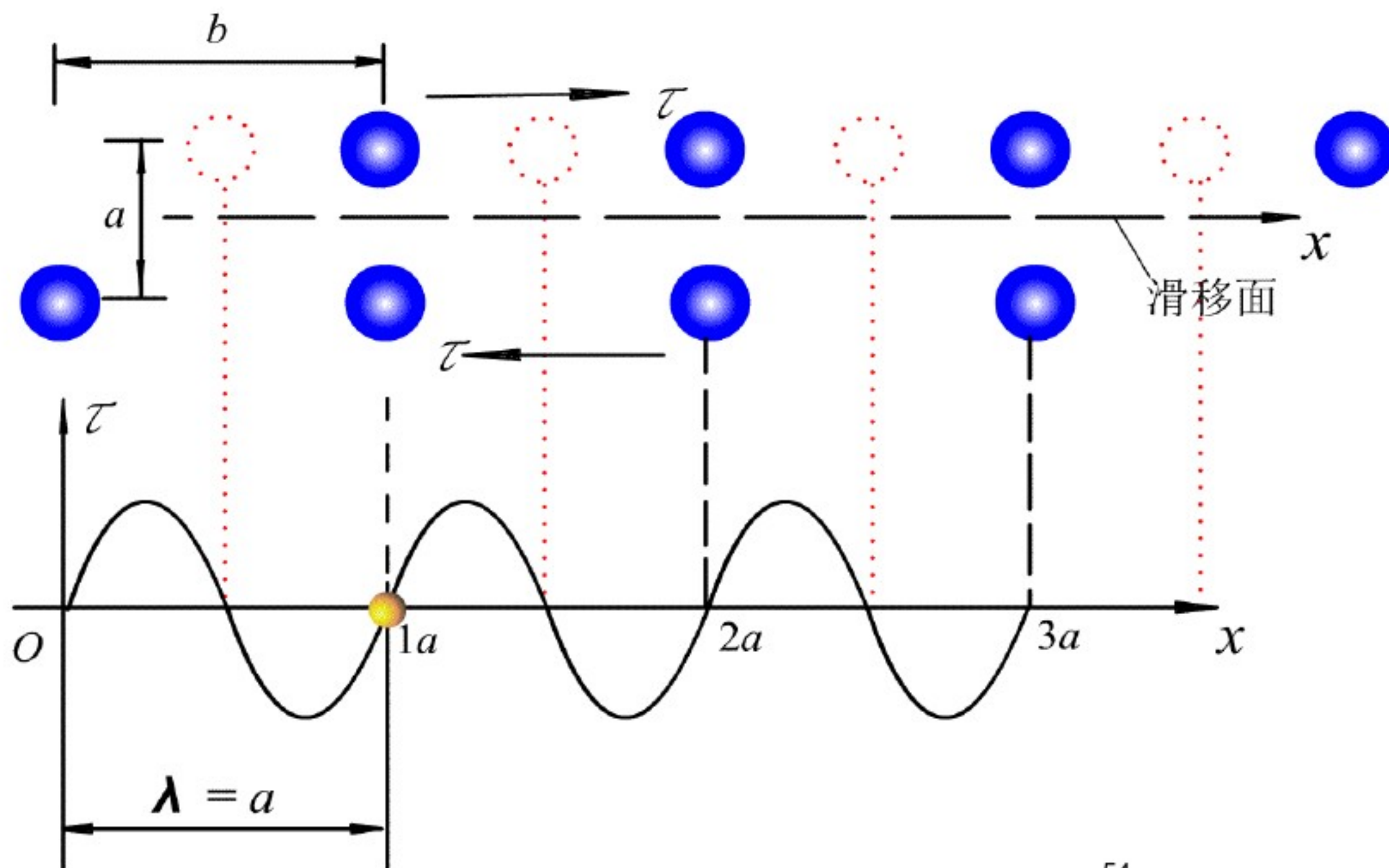
1.3.1.3 点缺陷对晶体性能的影响

一般情形下，点缺陷主要影响晶体的物理性质

- (1) \uparrow 电阻—对传导电子产生强烈散射；
- (2) \uparrow 体积， \downarrow 密度；
- (3) 过饱和点缺陷 \uparrow 屈服强度；
- (4) 点缺陷还影响其他物理性质，如扩散系数、内耗、介电常数等。

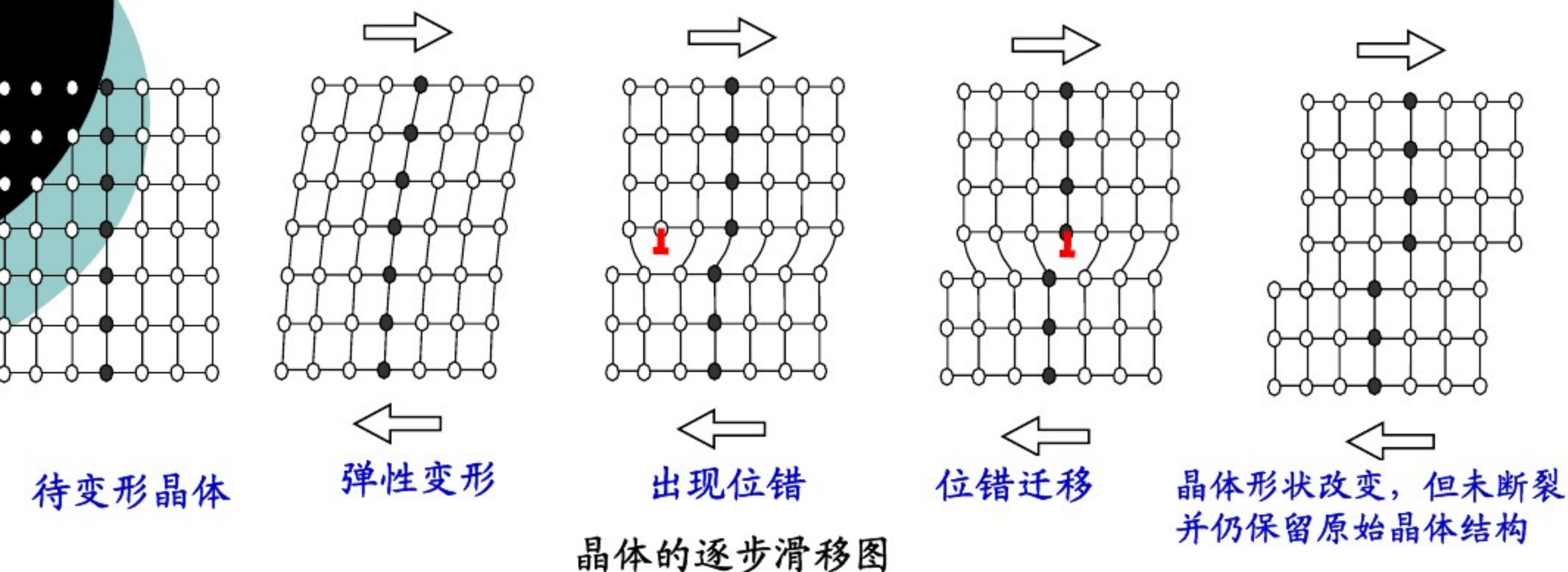
§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.1 位错概念的产生



计算理论切变强度所依据的模型

§ 1.3.2 线缺陷

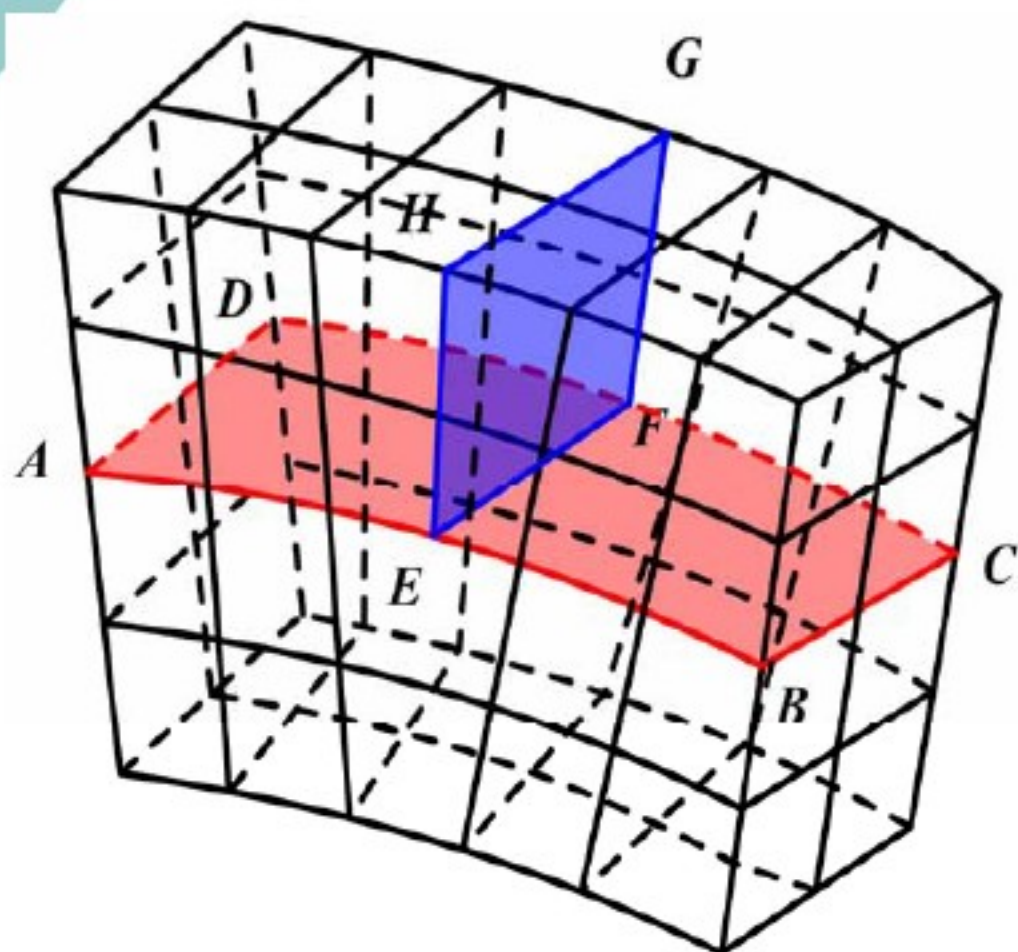


- 1934年，泰勒（G. I. Taylor）、波朗依（M. Polanyi）和奥罗万（E. Orowan）三人几乎同时提出了位错的概念，特别是泰勒把位错与晶体塑性变形时的滑移过程联系起来。
- 1956年利用电子显微镜薄膜透射法观察到位后才完全为人们所接受。
- 最简单的类型有两种：一种是刃型位错，另一种是螺型位错。

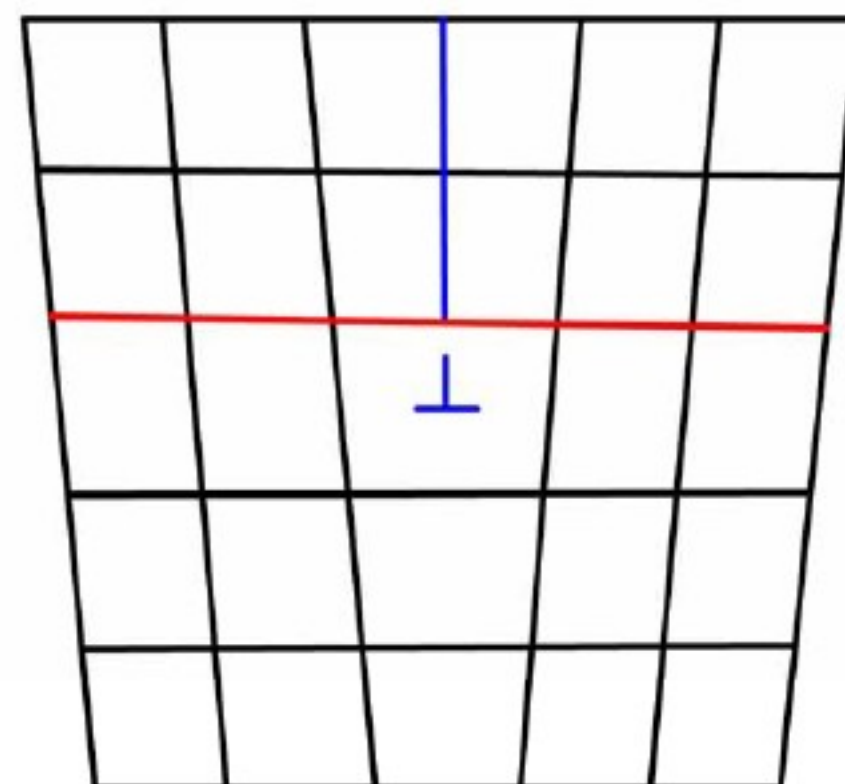
§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.2 位错的基本类型

(1) 刃型位错



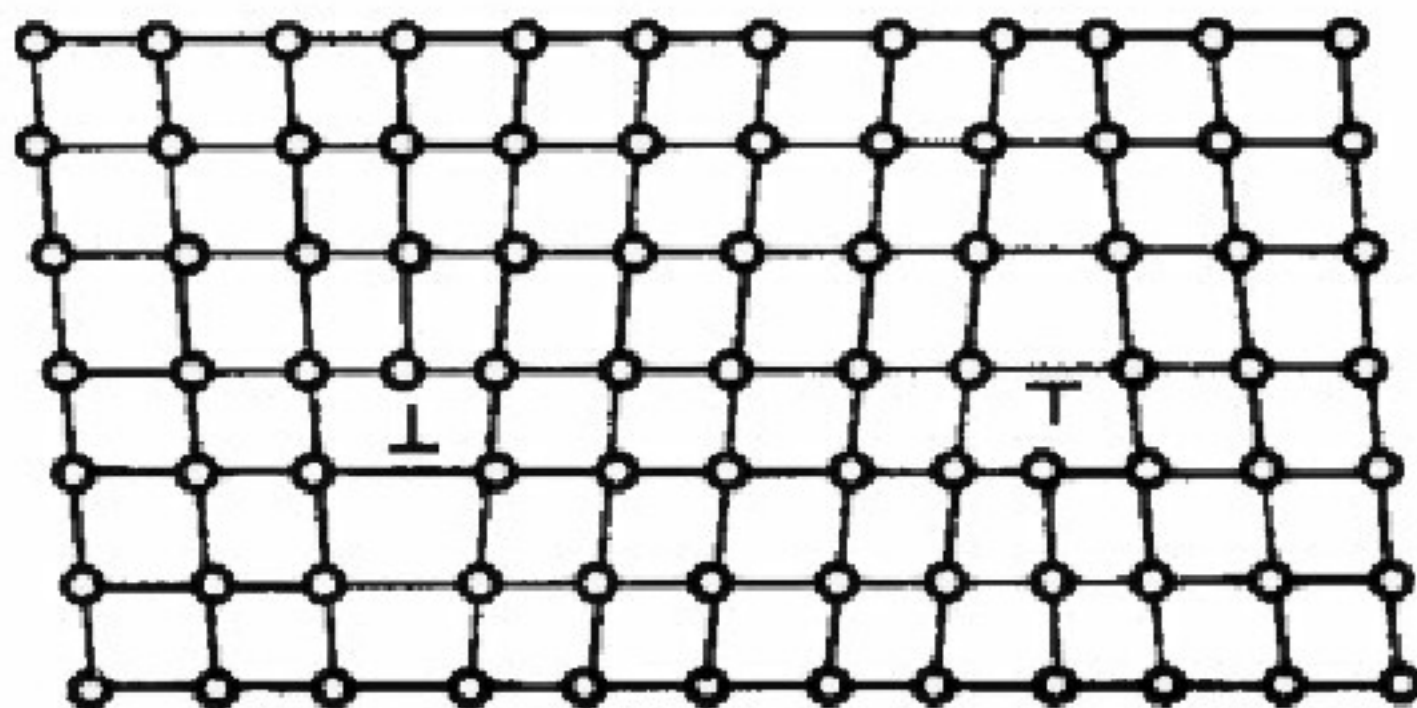
刃型位错



§ 1.3.2 线缺陷

➤ 刃型位错

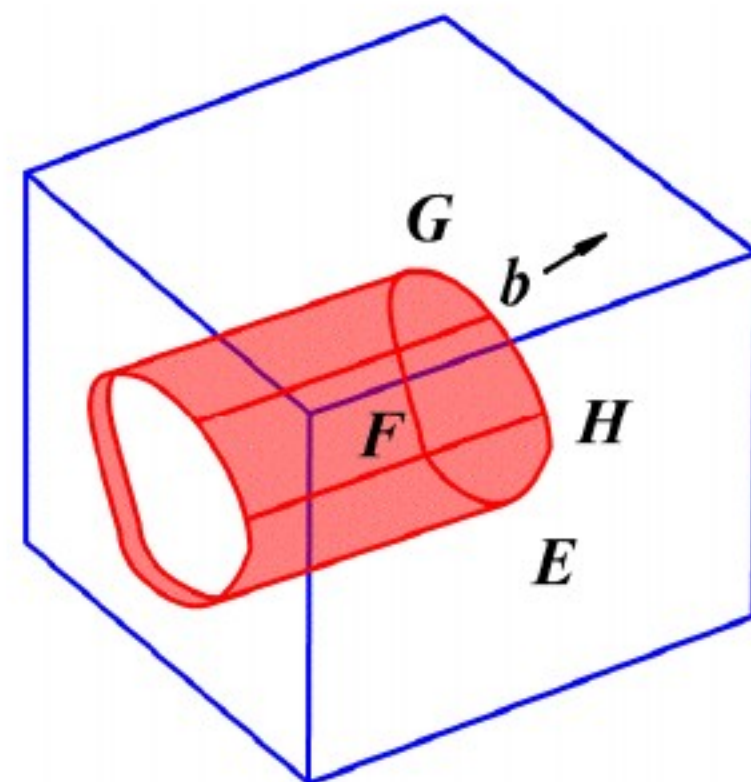
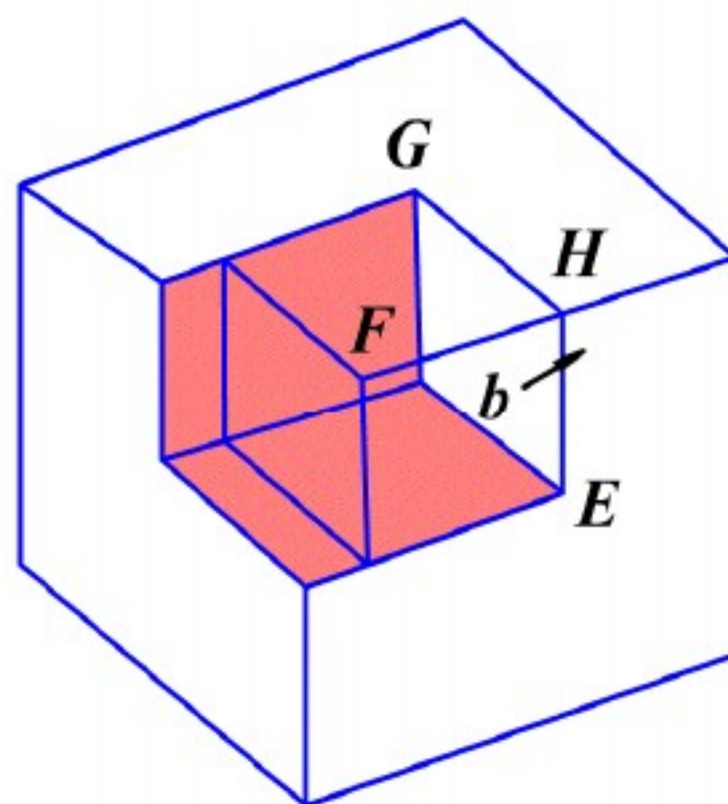
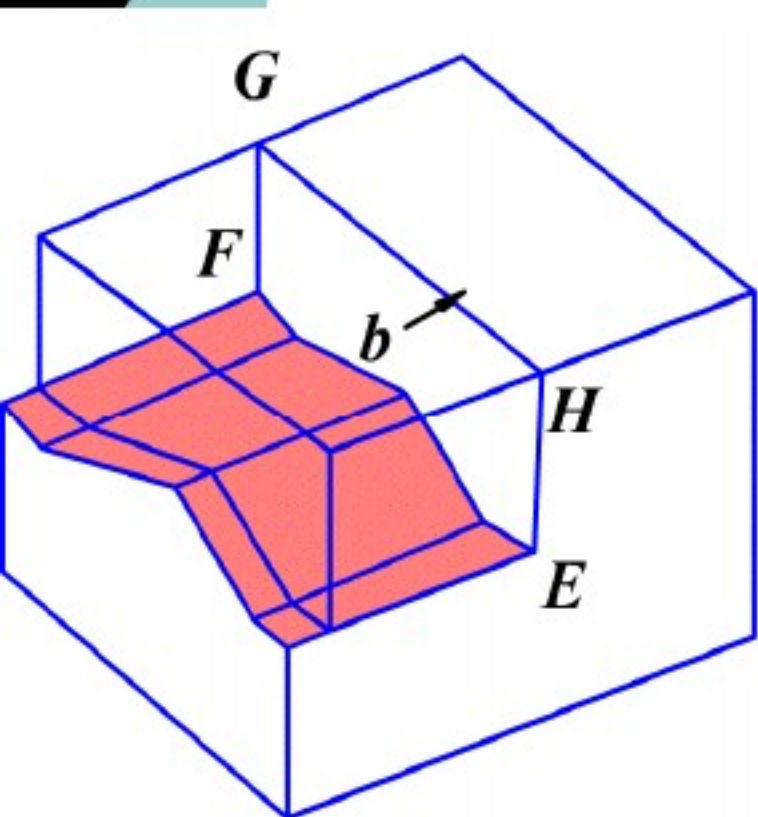
通常把多余半原子面位于晶体上半部的位错线称为**正刃型位错**，用符号“**⊥**”表示；把多余半原子面位于晶体下半部分的位错线称为**负刃型位错**，用符号“**⊥**”表示。（正\负相对而言）



正、负刃型位错示意图

§ 1.3.2 线缺陷

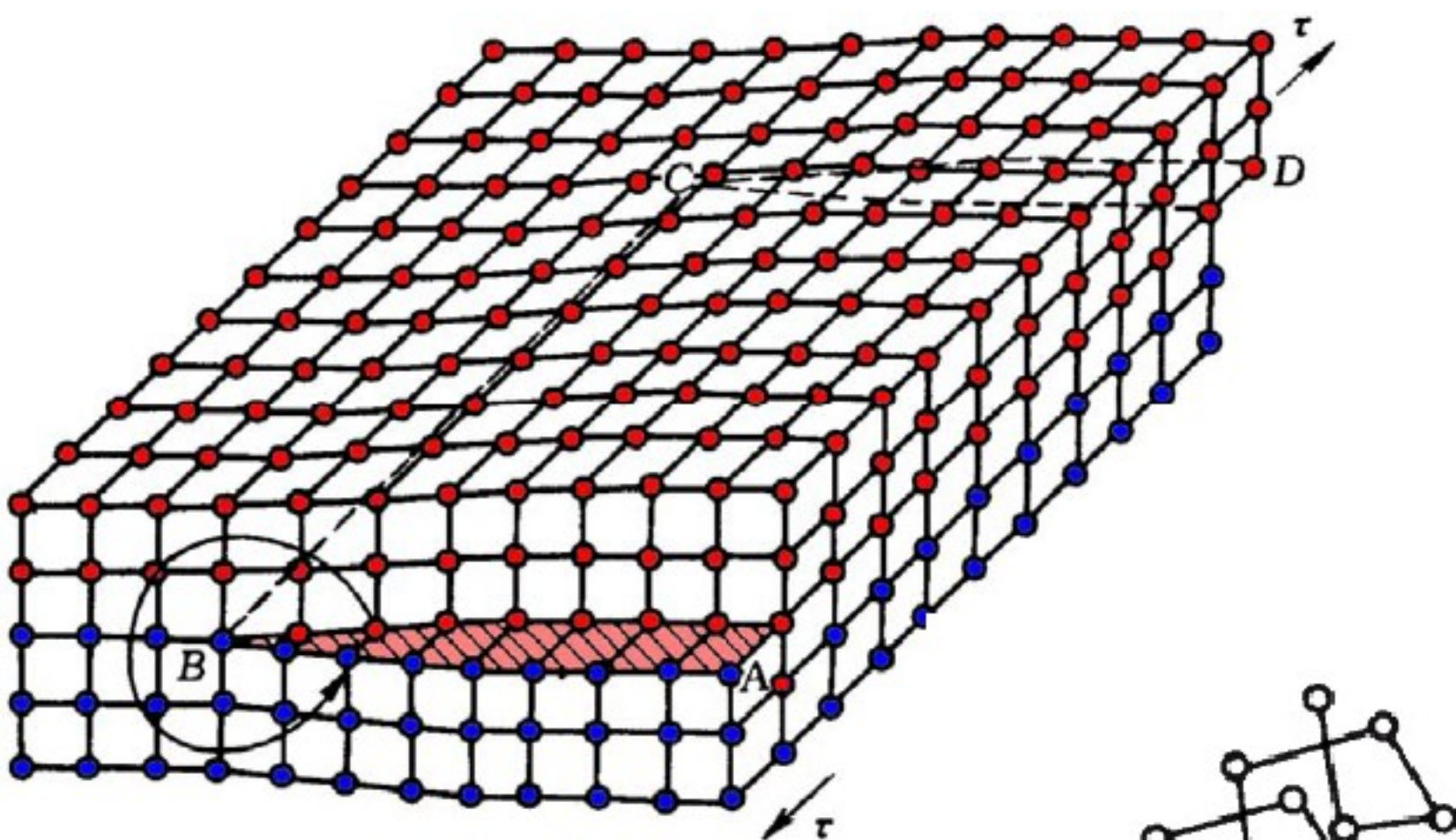
➤ 不同形状的位错线



给出了几种形状的刃型位错线

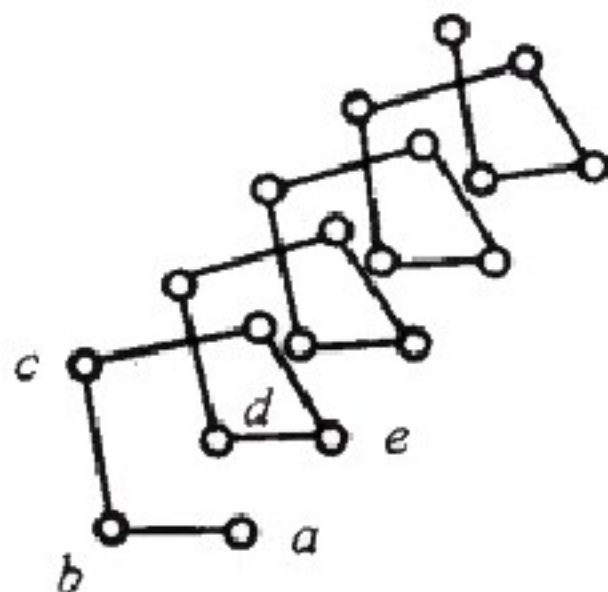
§ 1.3.2 线缺陷

(2) 螺型位错

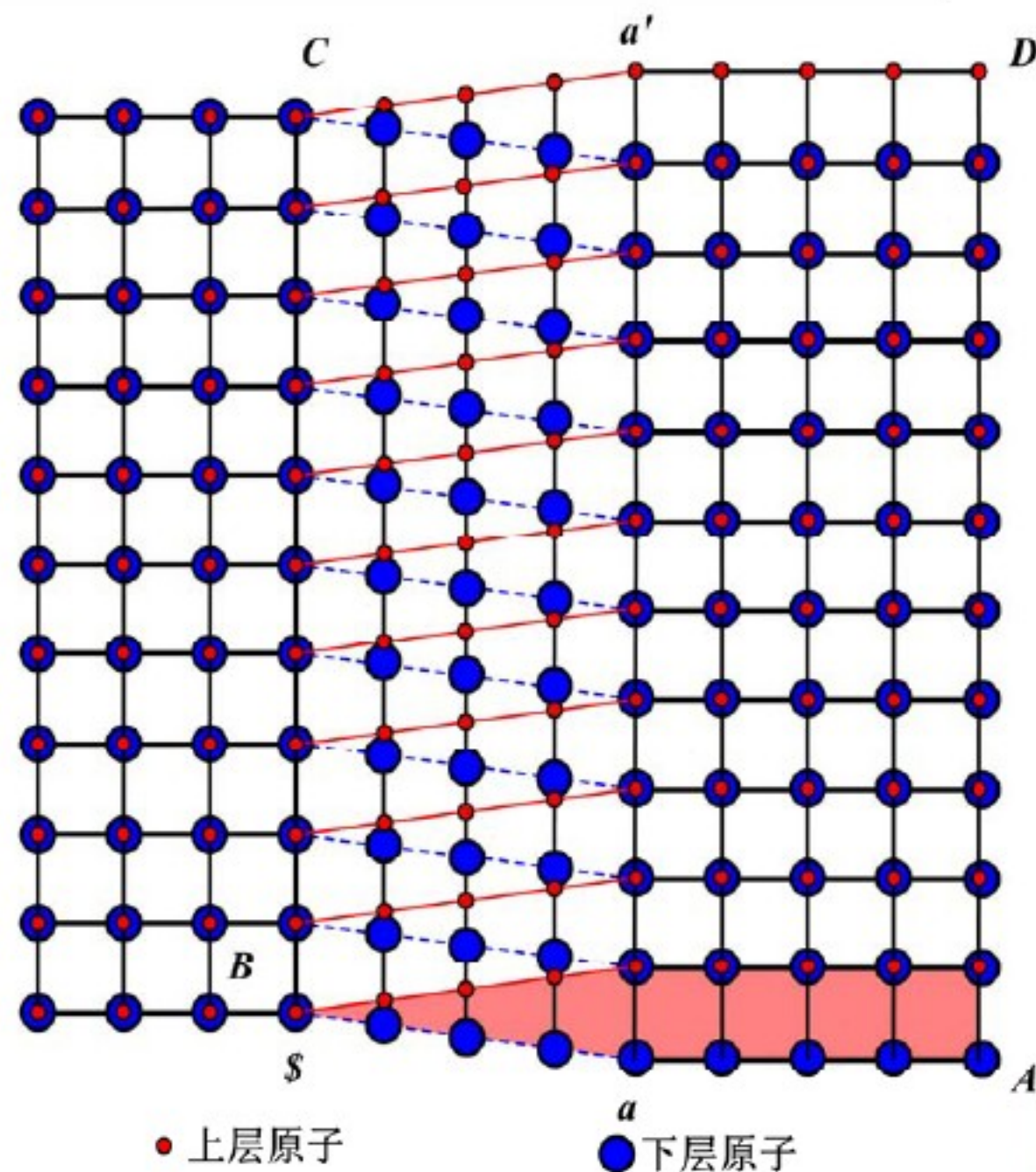


(a) 立体图

右螺型位错: 符合右手法则
 左螺型位错: 符合左手法则
 区别: 绝对而言



螺型位错的原子组态



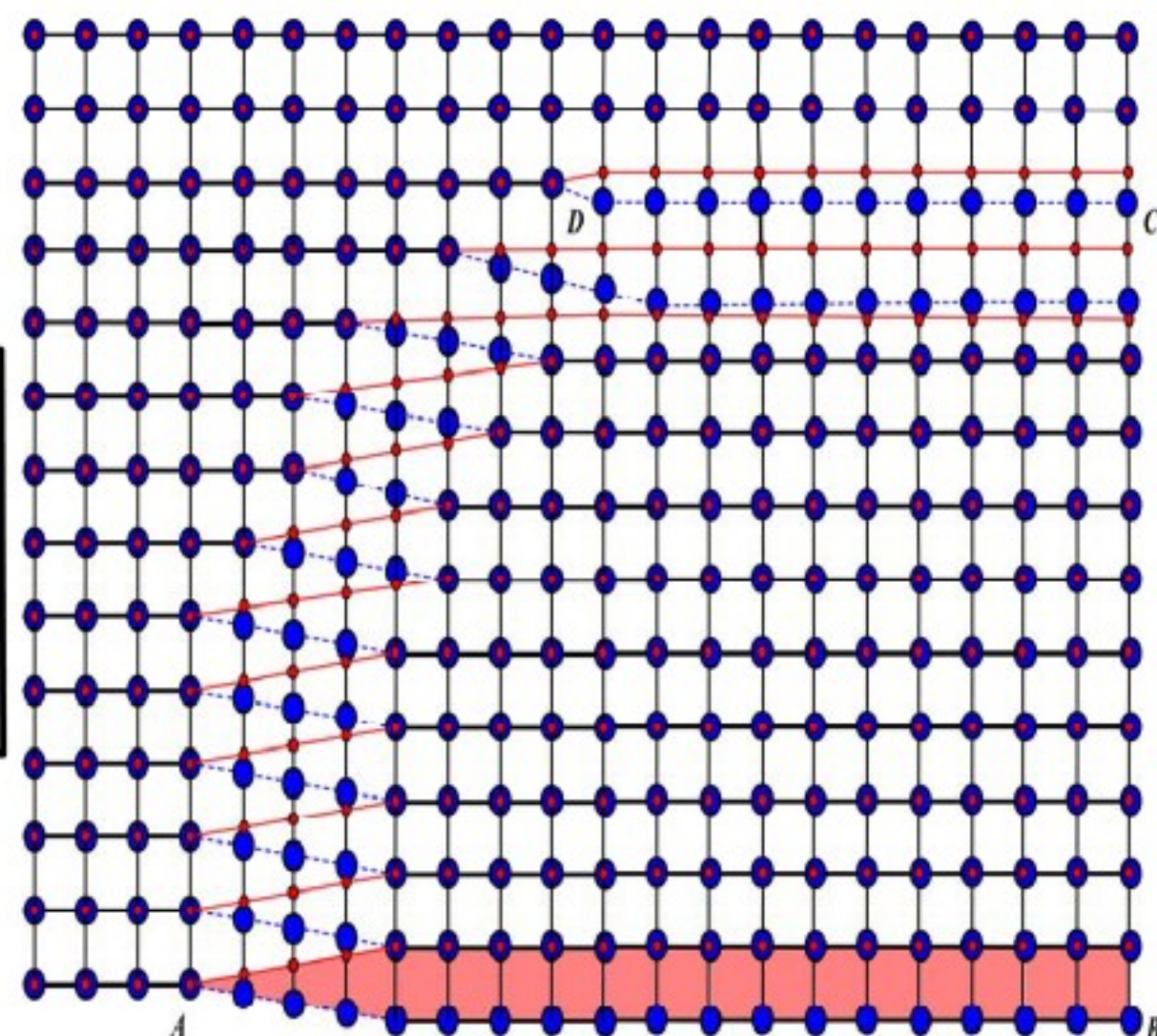
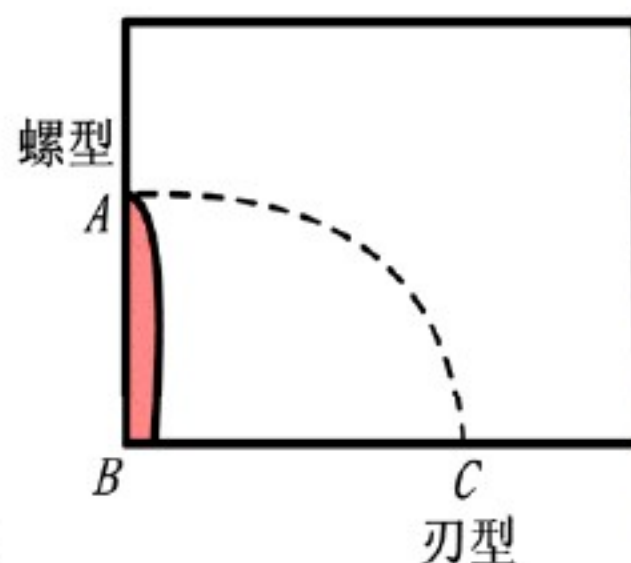
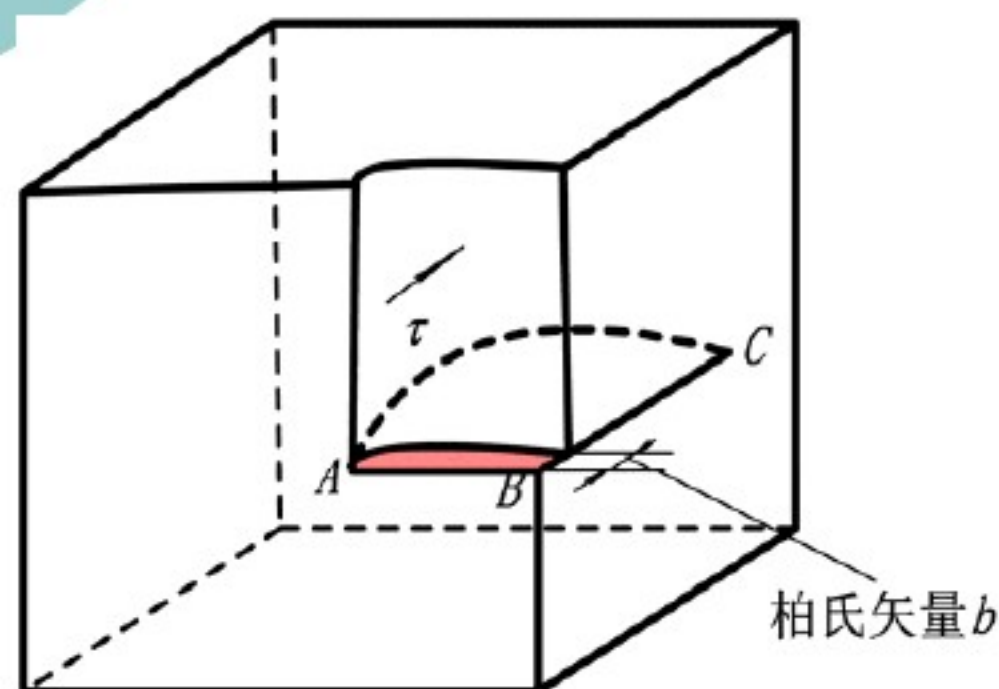
(b) 顶视图

§ 1.3.2 线缺陷

(3) 混合型位错

当位错线与滑移方向既不平行、又不垂直，而是成任意角度 α 时，该位错称为混合型位错。

可以分解为：刃型位错+螺型位错



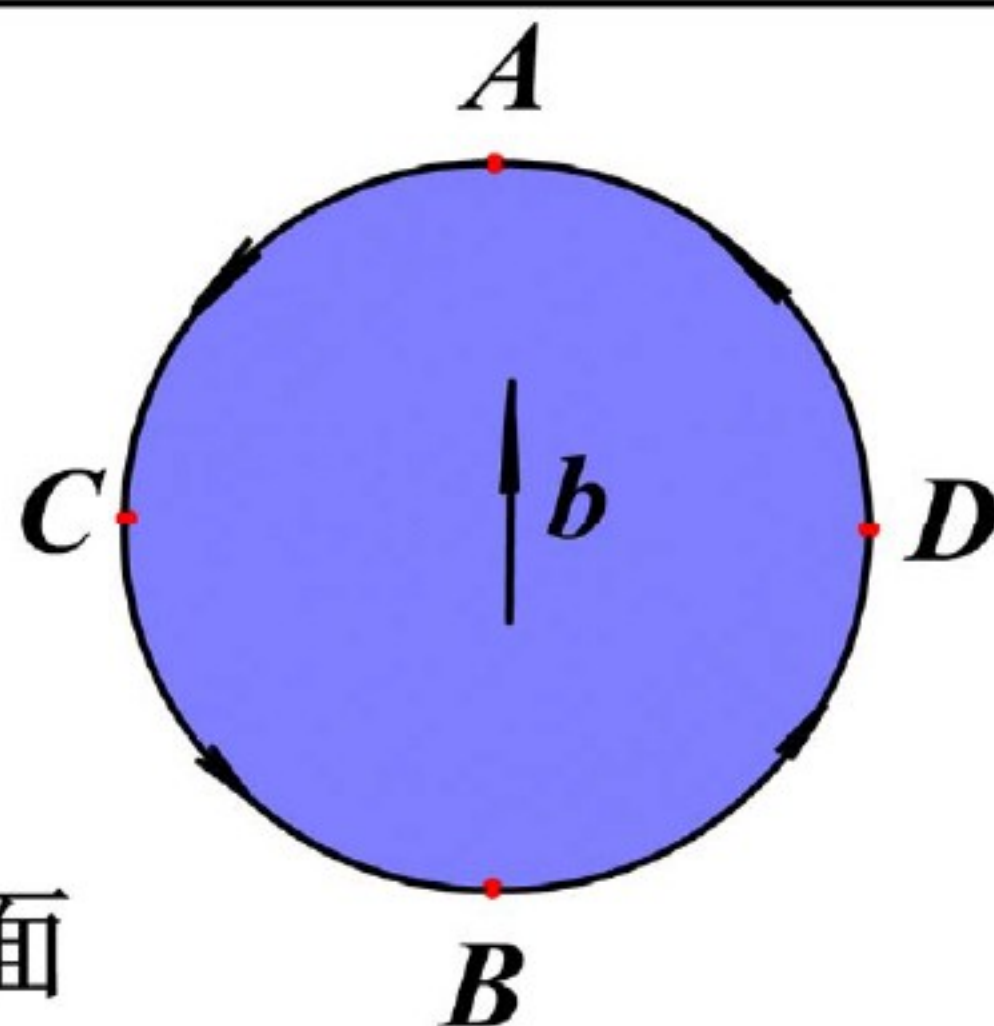
晶体局部滑移形成混合位错

混合位错的原子组态

§ 1.3.2 线缺陷

可以看出：此位错环只是A、B两处是刃型位错，且是异号的；C、D两处是螺型位错，也是异号的；其它各处都是混合型位错。

滑移面



晶体中的位错环顶视图

位错线：已滑移区和未滑移区的边界线。

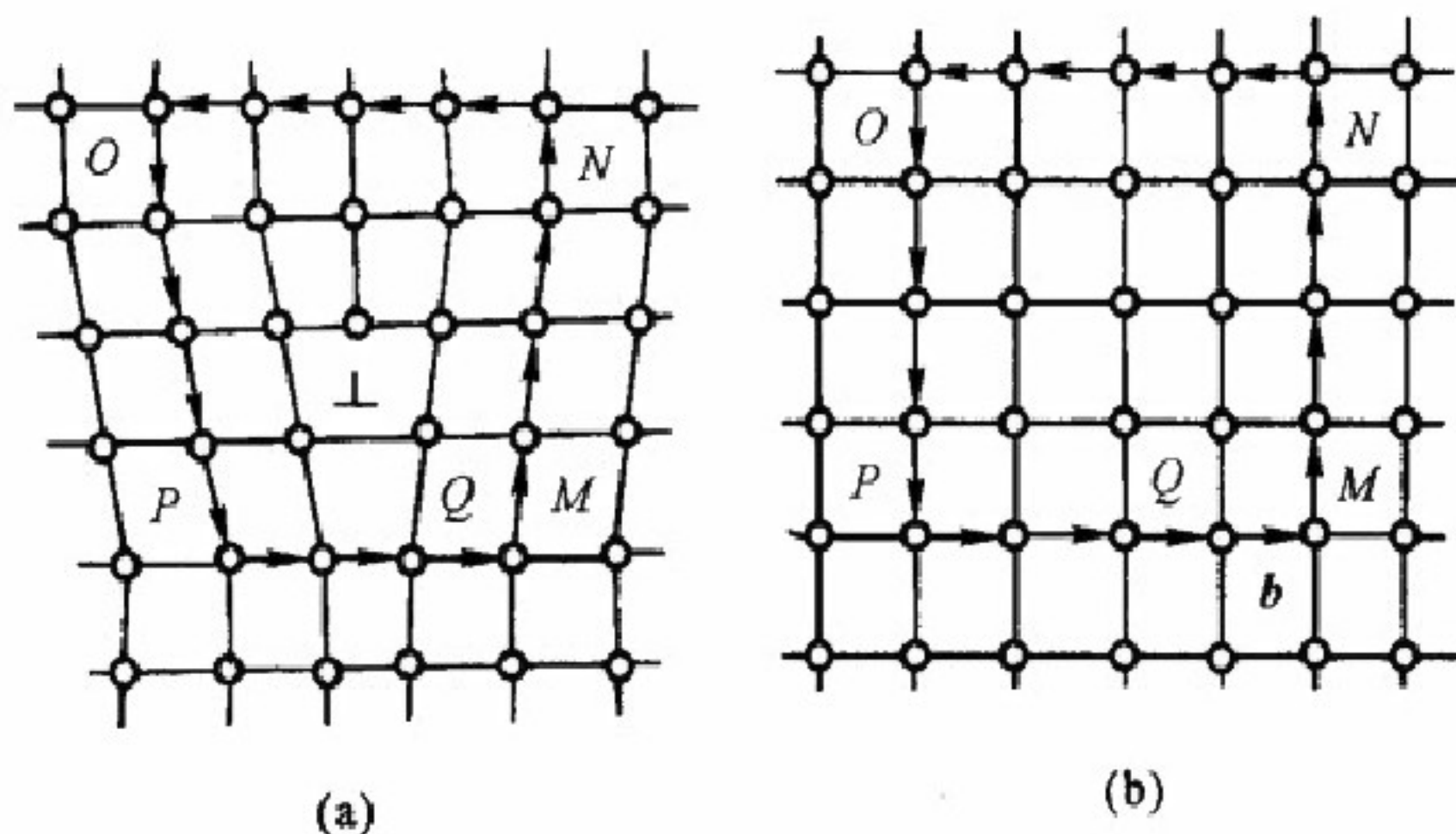
位错具有一个很重要的性质：位错线不能在晶体内部中断。它们只能或者连接晶体表面（包括晶界），或者连接于其它位错，或者形成封闭的位错环。

§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.3 位错的柏氏矢量

1939年，柏格斯(J. M. Burgers)提出应用柏氏回路来定义位错，使位错的特征能借柏氏矢量 b 表示出来。

(1) 柏氏矢量的确定



刃型位错柏氏矢量的确定

(a) 实际晶体的柏氏回路； (b) 完整晶体的相应回路



§ 1.3.2 线缺陷

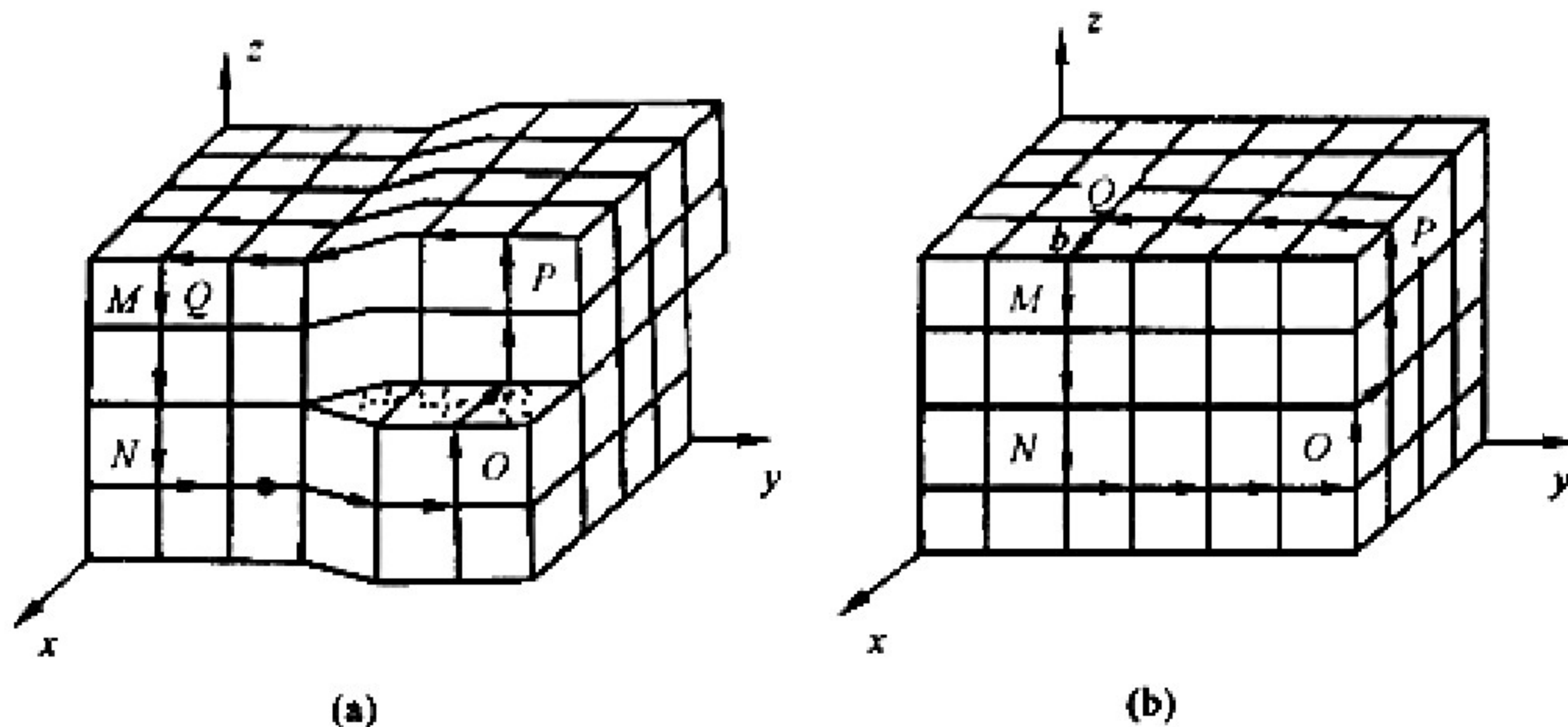
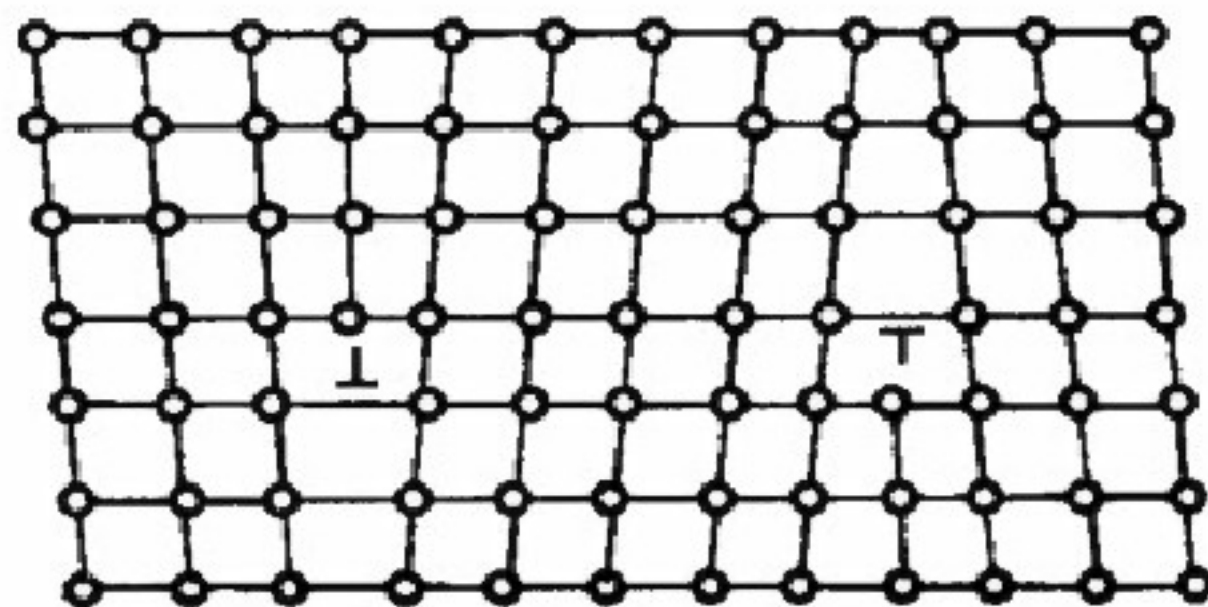
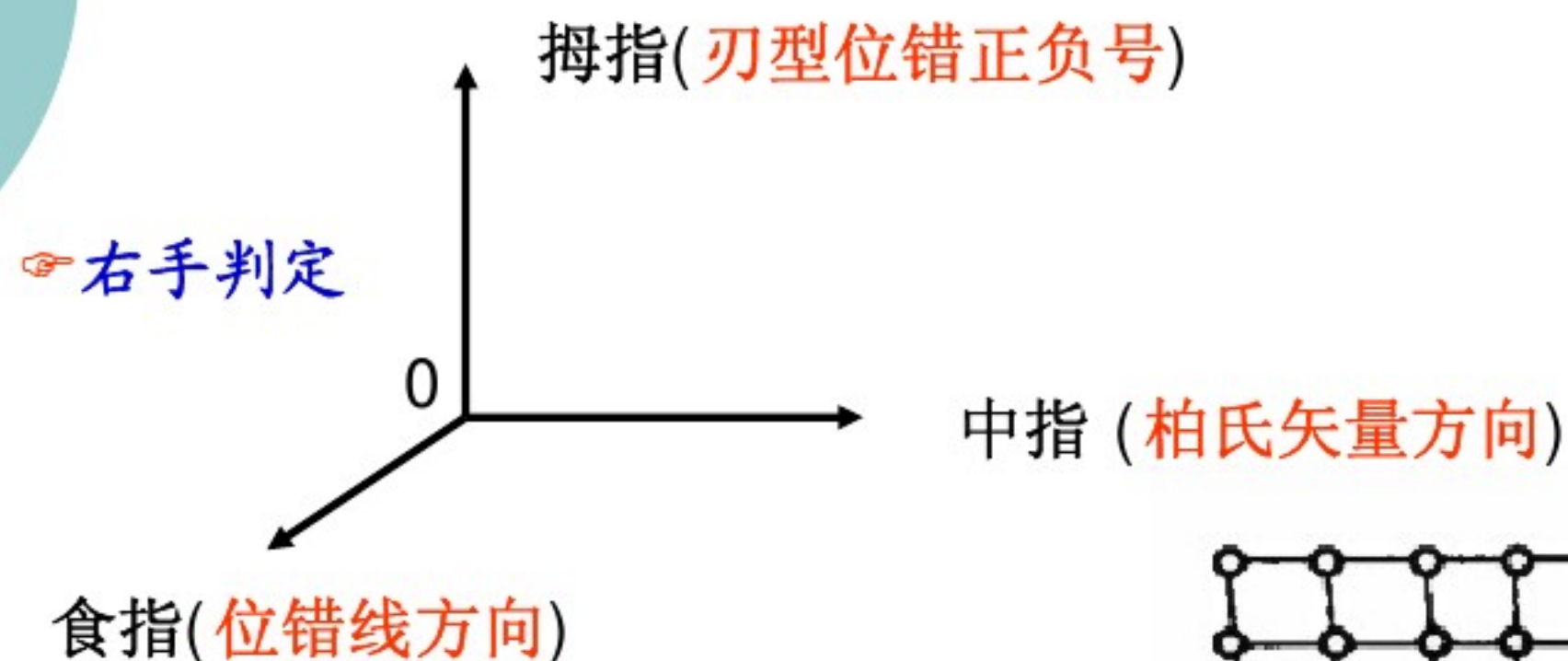


图 1-40 螺型位错柏氏矢量的确定

(a) 实际晶体的柏氏回路； (b) 完整晶体的相应回路

§ 1.3.2 线缺陷

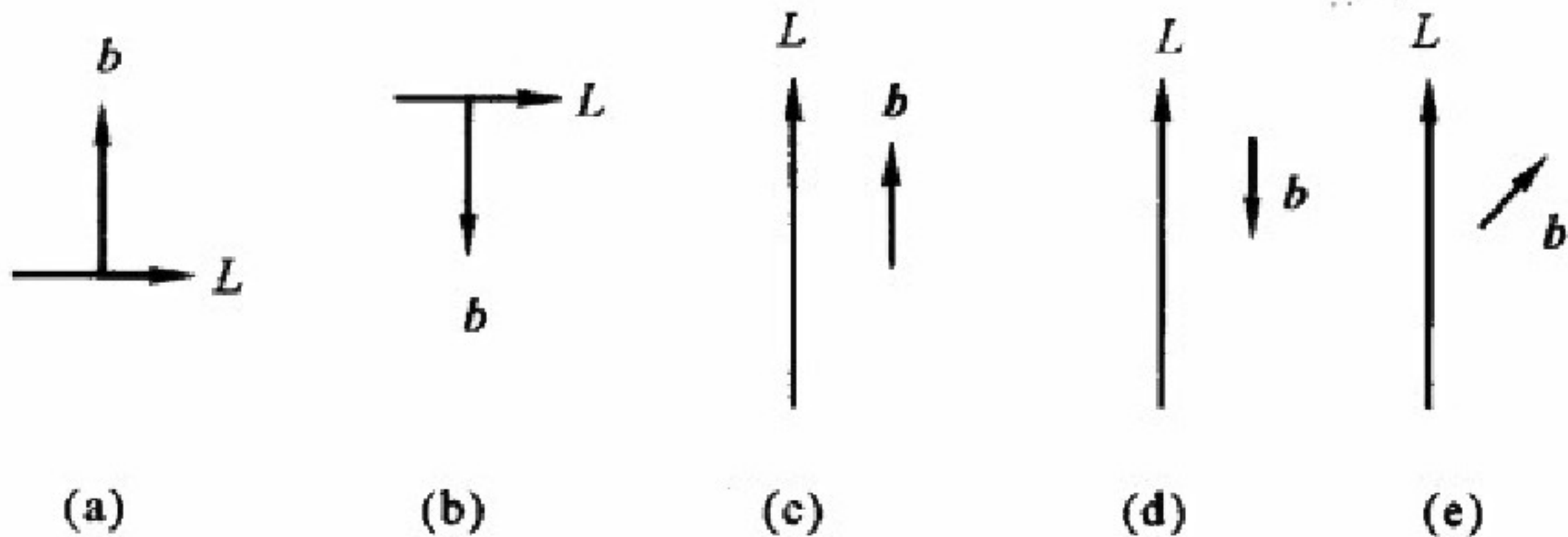
(2) 刃型位错的正负、柏氏矢量与位错线方向之间的关系



正、负刃型位错示意图

§ 1.3.2 线缺陷

- (3) 刃型位错的一个重要特征: $b \perp \text{dis}$ (dislocation)
- (4) 螺型位错的一个重要特征: $b \parallel \text{dis}$
- (5) 混合位错的 b 可分解为 \perp 和 \parallel 位错线的两个分量



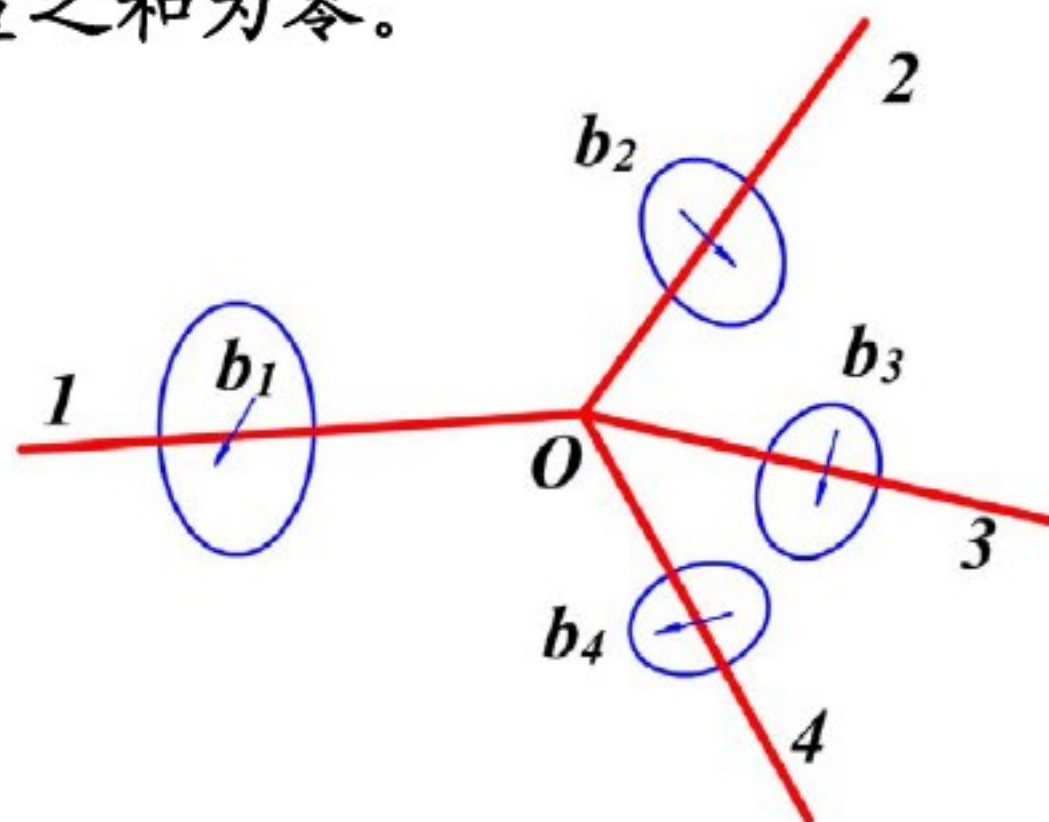
位错类型的确定

(a) 正刃型; (b) 负刃型; (c) 右旋; (d) 左旋; (e) 混合型

§ 1.3.2 线缺陷

(6) 柏氏矢量的物理意义及特性

- 物理意义：表示位错区域点阵畸变总量的大小和方向。该矢量的模 $|b|$ 表示畸变的程度，称为位错的强度。
- 特性：
 - 1) 若所有位错线均指向（或离开）一个结点，则它们的柏氏矢量之和为零。



$\Sigma \underline{b}_s = 0$ 的证明

§ 1.3.2 线缺陷

- 2) 一条位错线具有唯一的柏氏矢量，位错线只能终止在晶体表面或晶界上。(唯一性)
- 3) $b = \sum_{i=1}^n b_i$ 如果所作的柏氏回路包含有几个位错，则得出的柏氏矢量是这几个位错的柏氏矢量之总和。(交叉性)
- 4) 当一根位错线在滑移面上扫动时，扫过部分的晶体即发生滑移，滑移量为柏氏矢量模，滑移方向为柏氏矢量方向。

§ 1.3.2 线缺陷

(7) 柏氏矢量的表示方法

- b 的方向 → 晶向指数表示
- b 的大小 — 位错强度 → $|b|$ — 表示该晶向原子间的距离
- 立方晶系中位错的柏氏矢量可记为：

$$b = \frac{a}{n} [uvw]$$

- 柏氏矢量的模为：

$$|b| = \frac{a}{n} \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$$

注： n —视具体点阵类型。简单立方 $n=1$ ；bcc或fcc， $n=2$ 或3、6分别对应单位位错或两种类型的不全位错。

§ 1.3.2 线缺陷

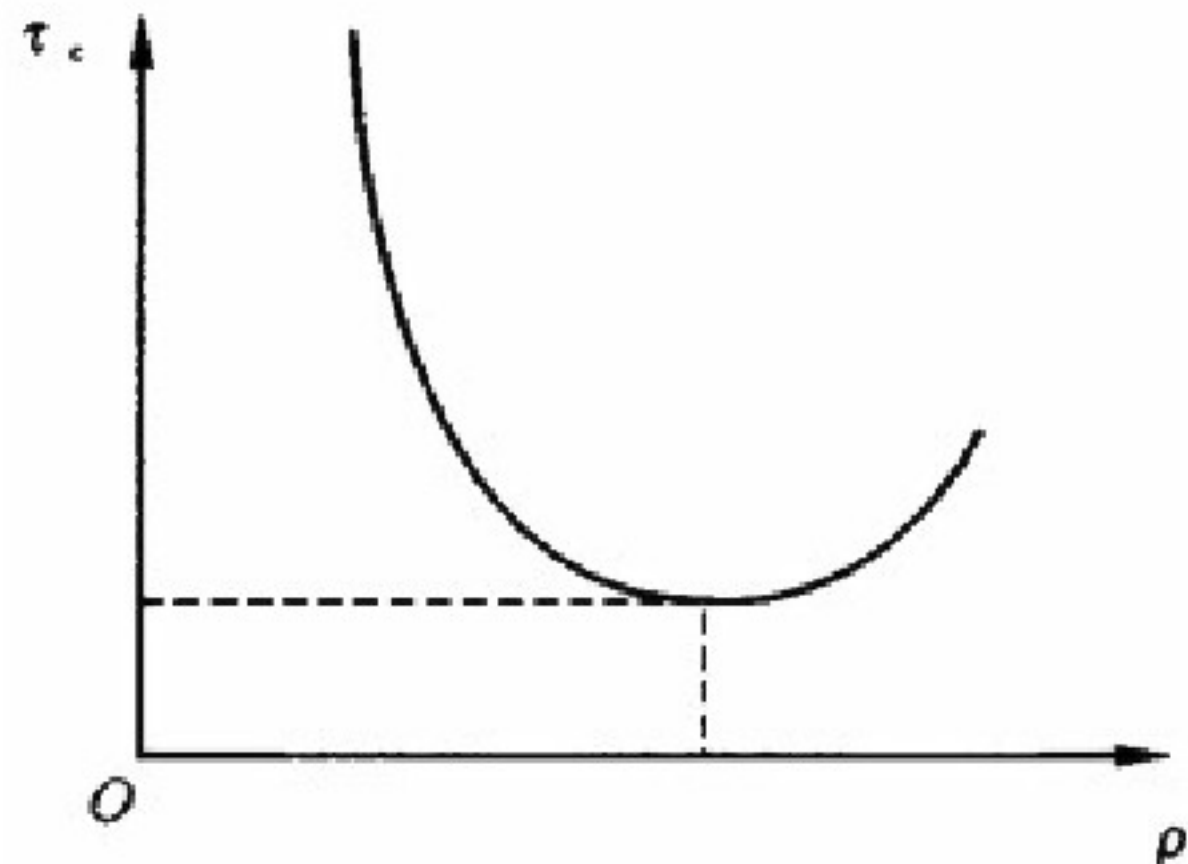
1.3.2.4 位错密度

表示方法：

$$1) \rho_v = L/V$$

$$2) \rho_s = n/A$$

$$3) \rho_v > \rho_s$$



晶体强度 τ_c 与
位错密度 ρ 的关系

§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.5 作用在位错上的力及位错运动

(1) 作用在位错上的力

➤ 根据虚功原理，切应力使晶体滑移所做的功应与法向“力”推动位错滑移所做的功相等。

➤ 设位错贯穿晶体长度为 L ，当滑移 ds 距离时，法向力作功为： $W_2 = Fds$ 。

➤ 若晶体滑移面总面积为 A ，位错滑移 ds 距离使滑移区同样增加 ds 距离，产生的滑移量为：

$$\left(\frac{Lds}{A} \right) b$$

➤ 于是分切应力所作的功应为： $W_1 = (\tau A) \left(\frac{Lds}{A} \right) b = W_2 \quad \therefore F = \tau bL$

单位长度位错所受的力： $f = F/L = \tau b$

◆ 这个结果可以推广到任意形状有位错。

图表明在分切应力 τ 作用下，柏氏矢量为 b 的刃型位错滑移与晶体滑移的情况。

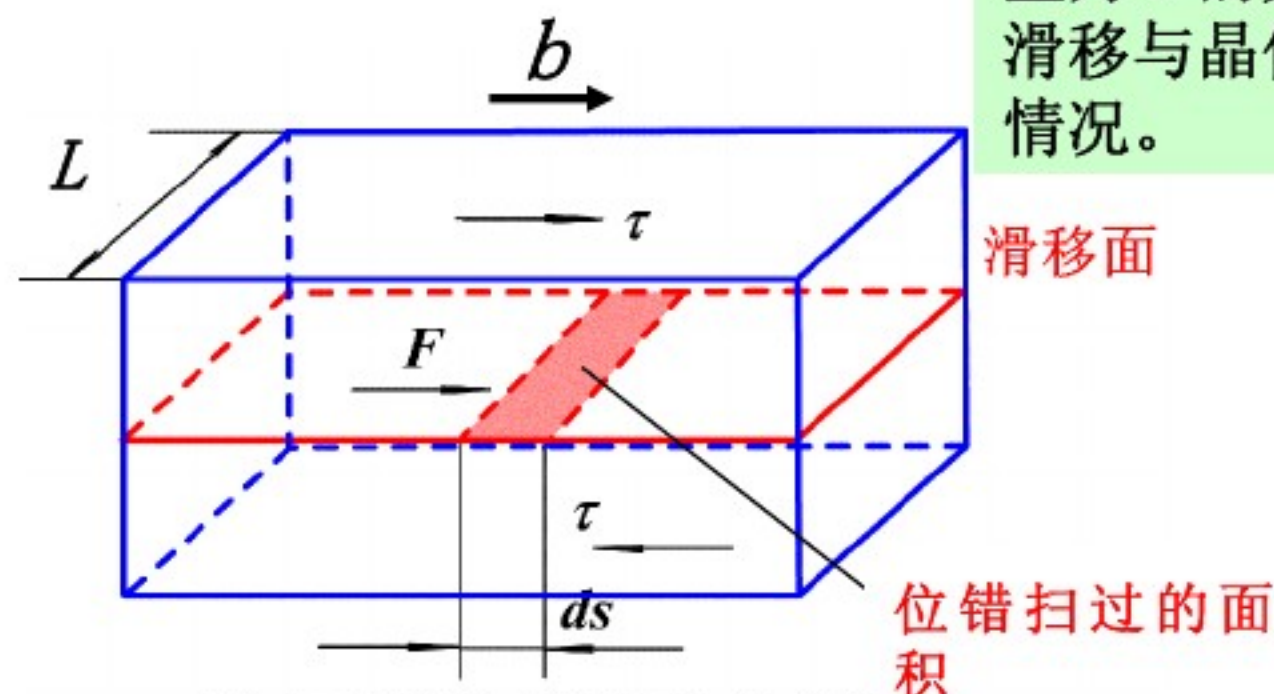


图 刃型位错运动作用力

➤ 方向永远垂直位错线，并沿滑移面指向未滑移区。

§ 1.3.2 线缺陷

(2) 位错上的运动

1) 位错的滑移

➤ 刃型位错运动与晶体滑移

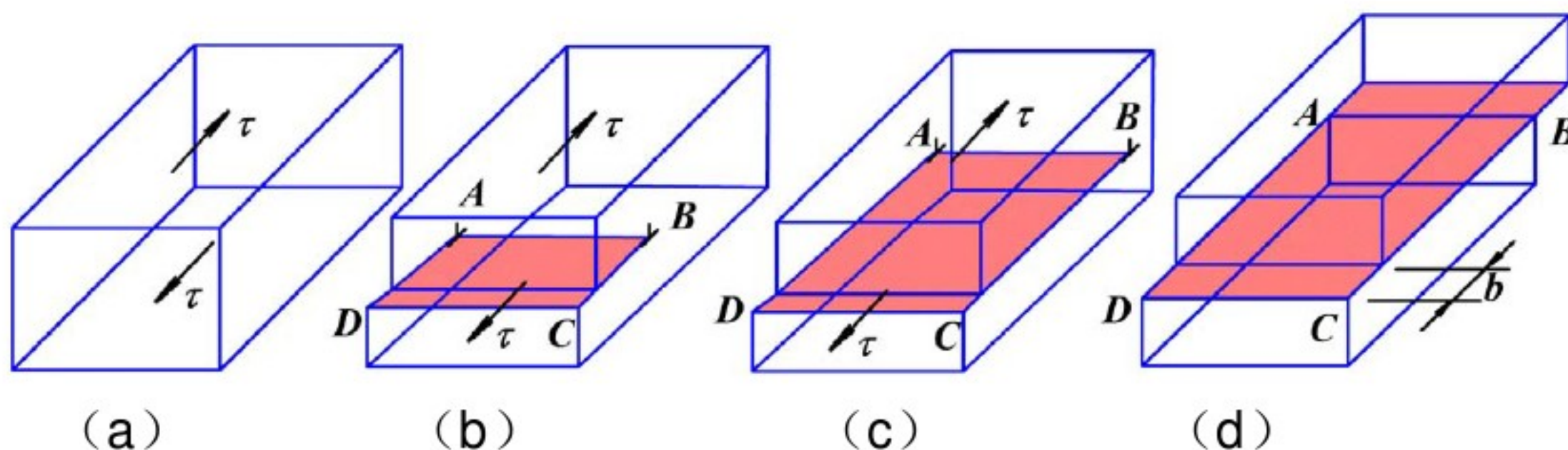


图 刃型位错的滑移过程

(a) 原始状态的晶体；(b)、(c) 位错滑移中间阶段；(d) 位错移出晶体表面，形成一个台阶

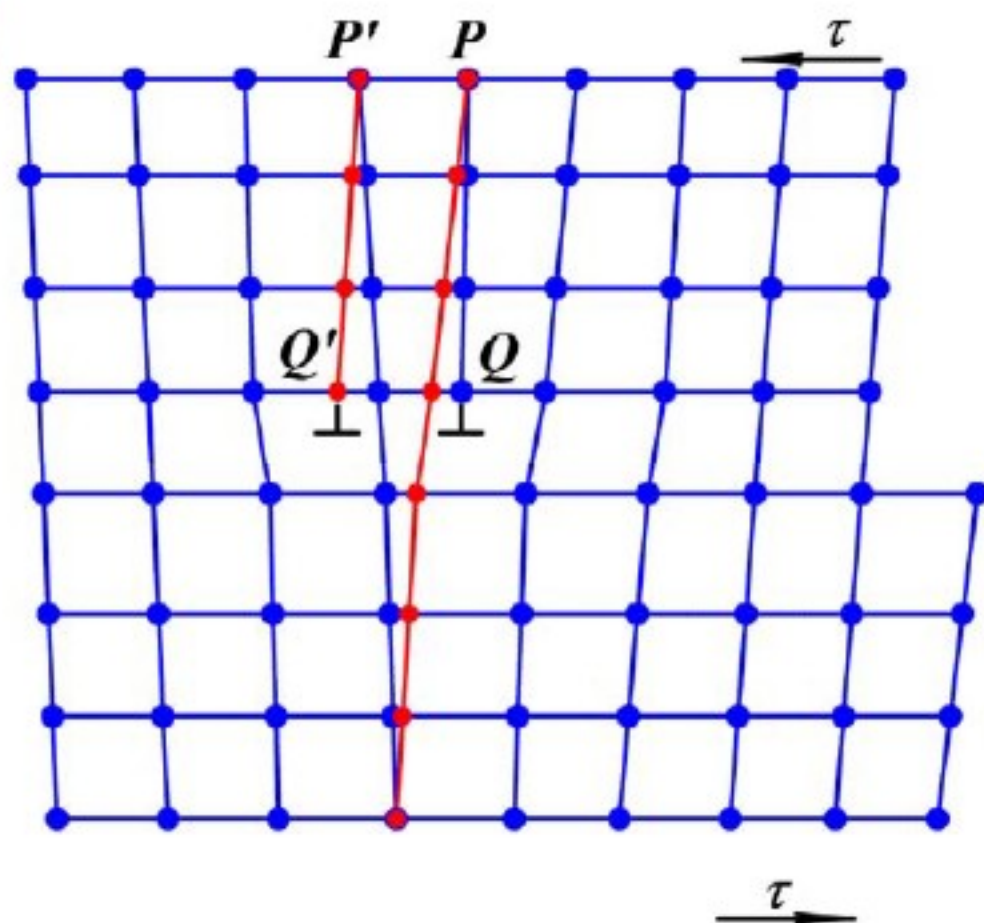
特点： a) 刃dis的滑移面是dis线 \times b 组成平面——唯一的滑移面。

b) 刃dis移动方向 \perp dis线，刃dis移动方向 $\parallel b \parallel \tau \parallel$ 晶体移动方向。

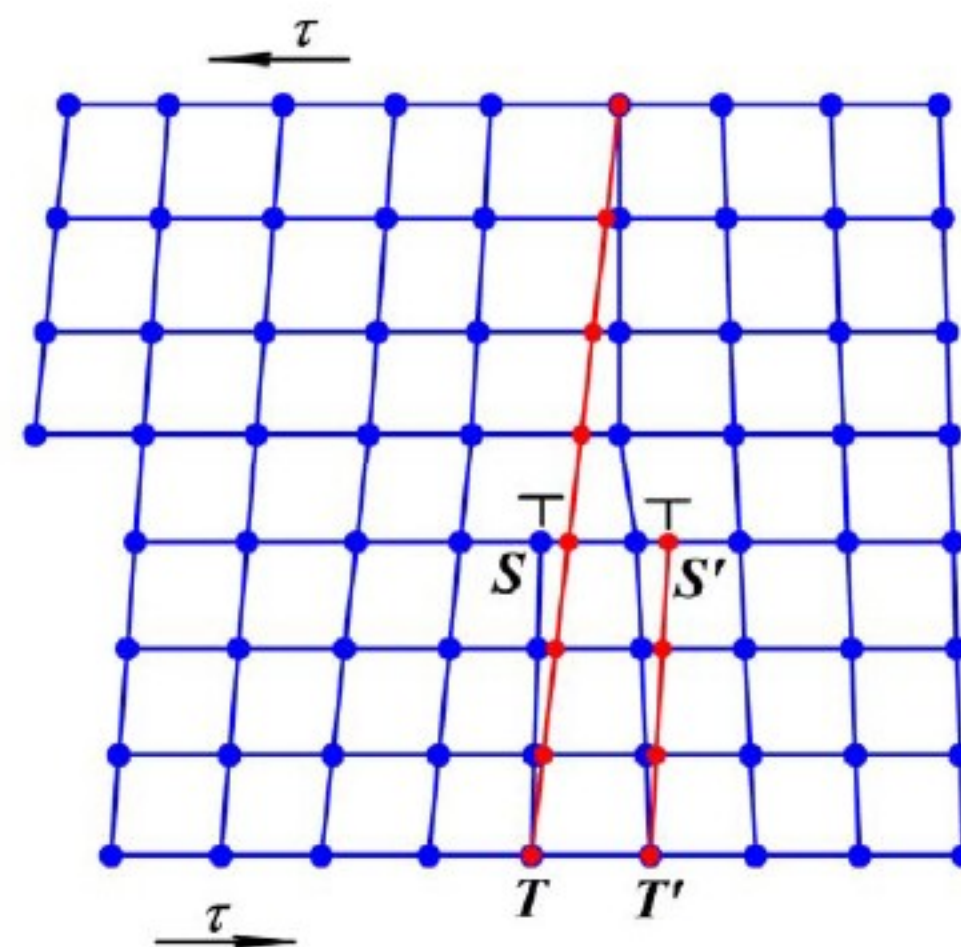
c) 刃dis移出晶体后，晶体滑移面 = b

§ 1.3.2 线缺陷

- 晶体的宏观滑移实际上就是通过位错的滑移运动实现的。



(a) 正刃型位错



(b) 负刃型位错

图 刃型位错滑移

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 螺型位错运动与晶体滑移

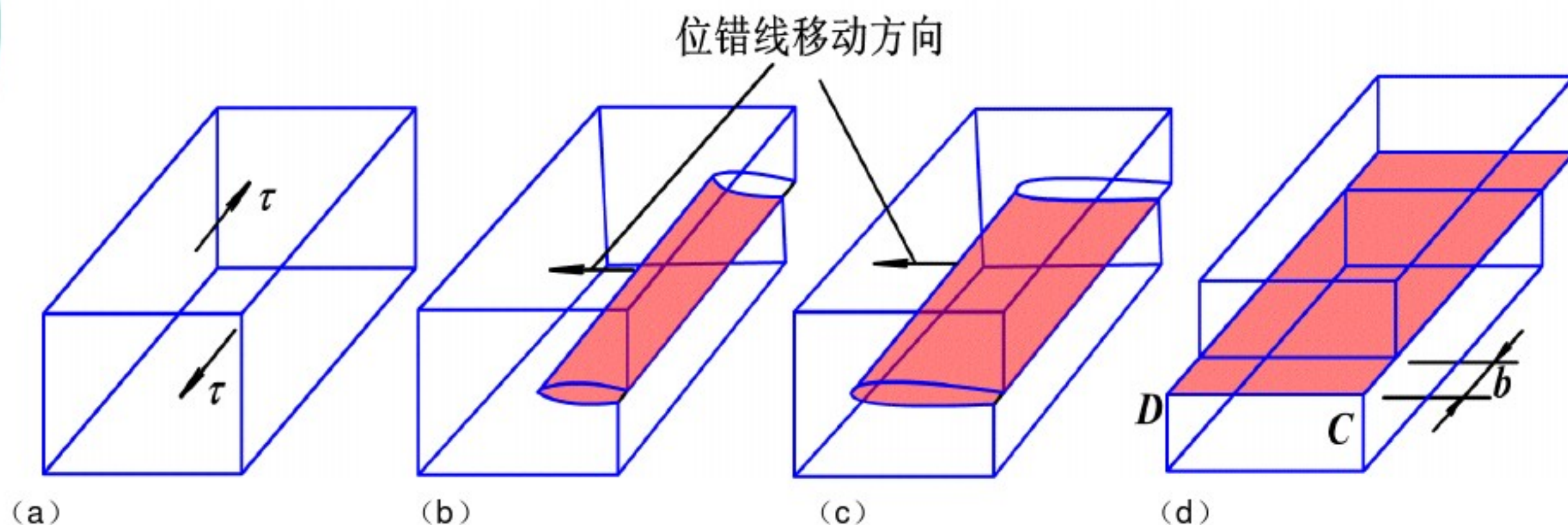


图 螺型位错的滑移过程

(a) 原始状态的晶体；(b)、(c) 位错滑移中间阶段；(d) 位错移出晶体表面，形成一个台阶

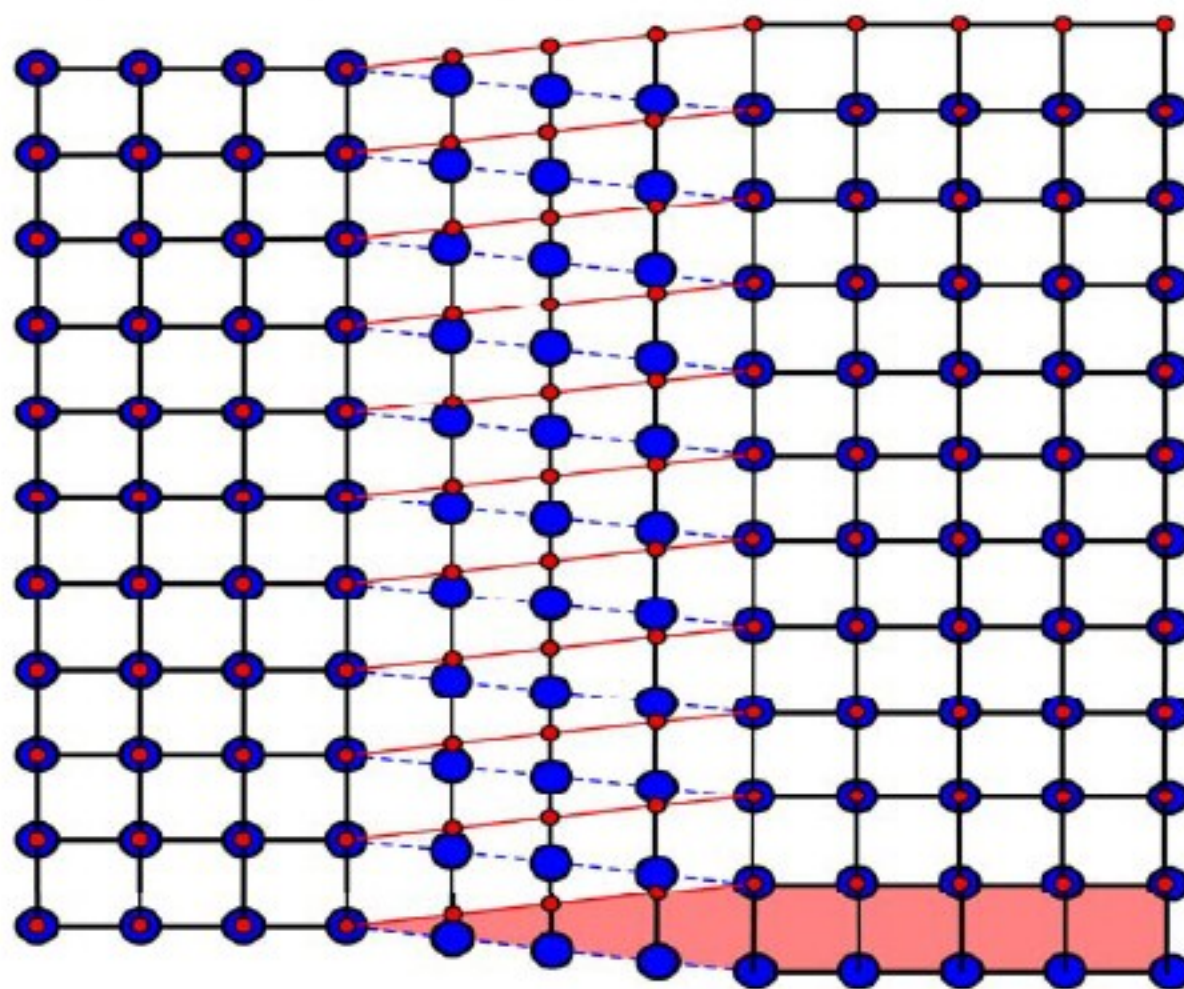
特点： a) 螺dis $\parallel b$ ，滑移面不是唯一的。

b) 螺dis移动方向 \perp dis线， $\perp b$ ， $\perp \tau$ 和 \perp 晶体移动方向。

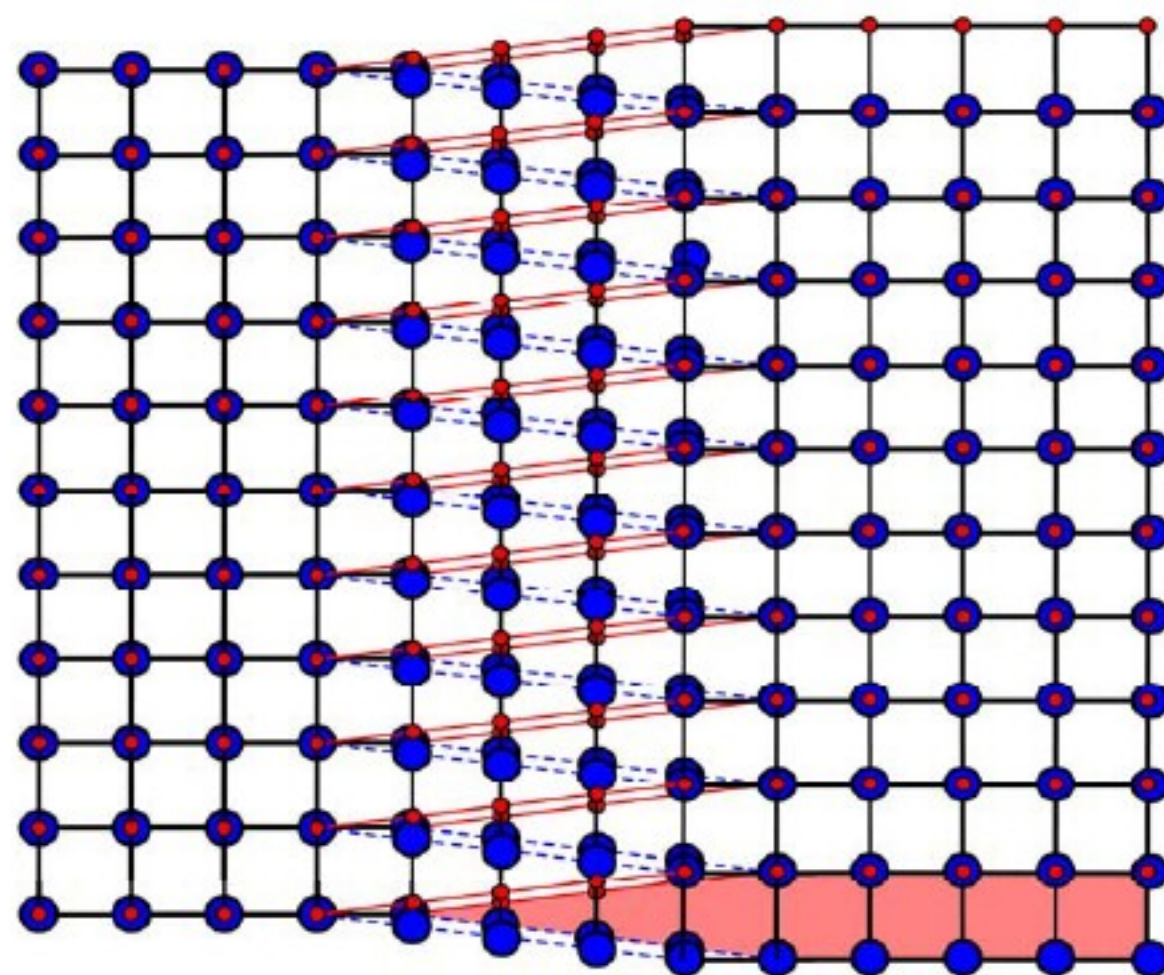
c) 螺dis移出晶体后，晶体滑移面 = b 。

§ 1.3.2 线缺陷

●可以看出，在切应力 τ 的作用下，只要位错周围的原子作微小的位移，螺型位错向左移动一个原子间距。



(a) 原始位置；



(b) 位错向左移动一个原子间距

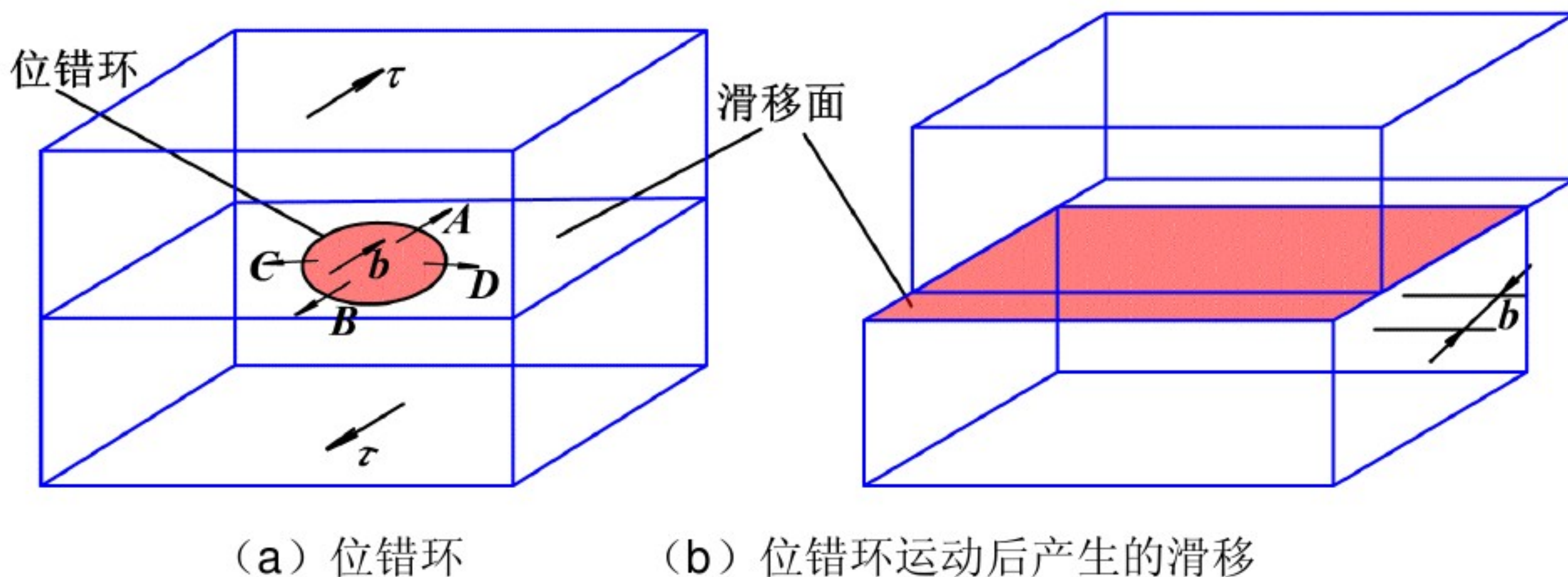
图 螺型位错滑移

“○”表示滑移面下方的原子
“●”表示滑移面上方的原子
虚线表示点阵的原始状态，实线表示位错滑移一个原子间距后的状态。

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 混合型位错与晶体滑移

- 混合位错在切应力作用下，沿其各线段的法线方向滑移，结果使晶体产生与其柏氏矢量相等的滑移量。



(a) 位错环 (b) 位错环运动后产生的滑移
图 位错环的滑移

§ 1.3.2 线缺陷

2) 刃型位错的攀移

➤ 攀移的概念

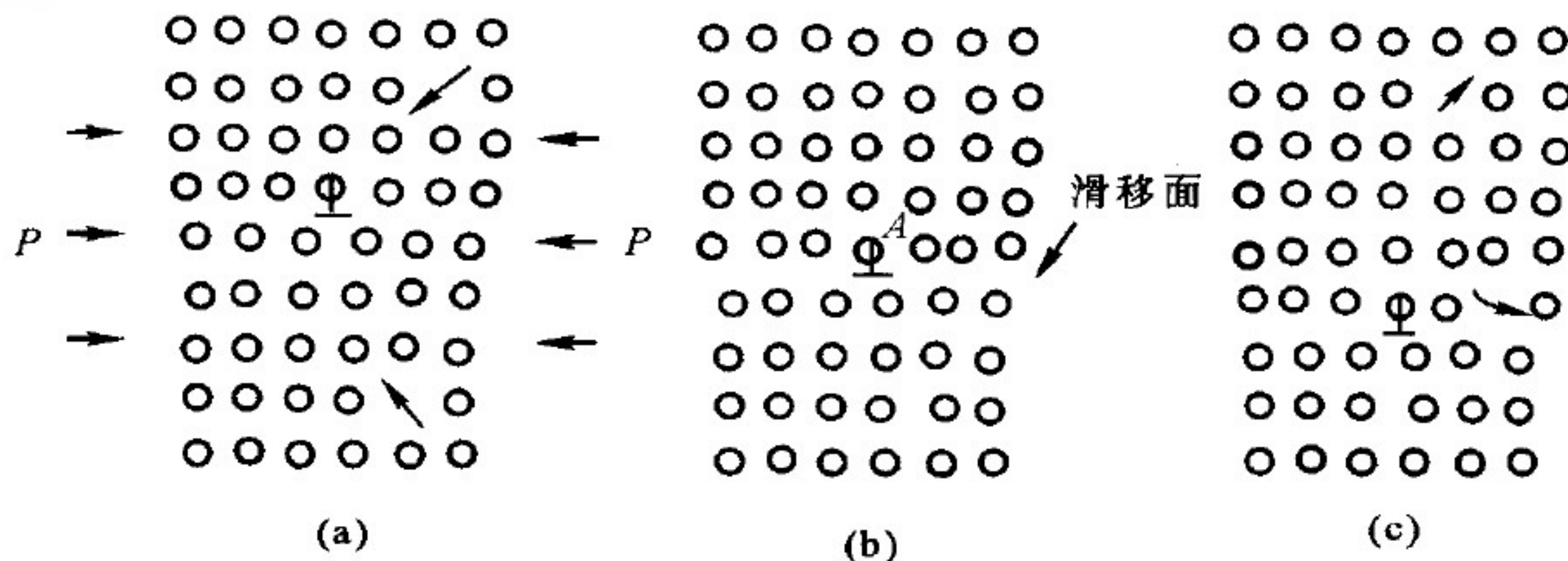


图 1-48 刃型位错的攀移

(a) 正攀移； (b) 未攀移时的位错； (c) 负攀移

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 攀移特点

- ① 攀移通过空位和原子的扩散才能实现，会引起晶体体积变化——**非守恒运动**。
- ② **攀移比滑移困难**，当升高温度时，原子扩散能量增大，攀移才能进行。
- ③ **刃型位错攀移与施加的应力有关：**
 - a) 纯切应力不起作用；
 - b) 拉应力有利于负攀移；
 - c) 压应力有利于正攀移。

§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.6 位错的应力场和应变能

(1) 应力分量

下角标中：

☞ 第一个符号表示应力作用面的外法线方向。

☞ 第二个符号表示应力的指向。

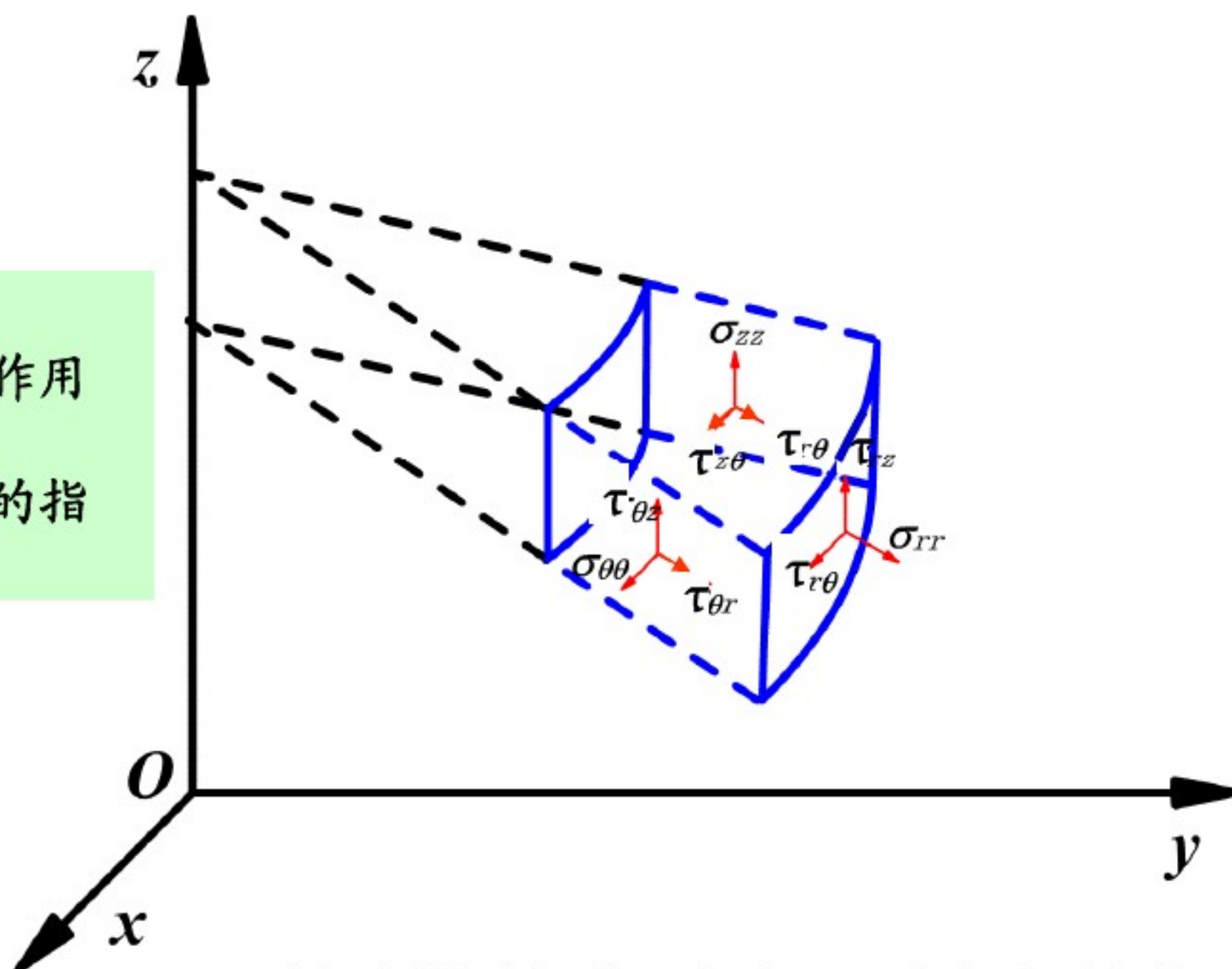


图 圆柱坐标的正应力及切应力表示办法

§ 1.3.2 线缺陷

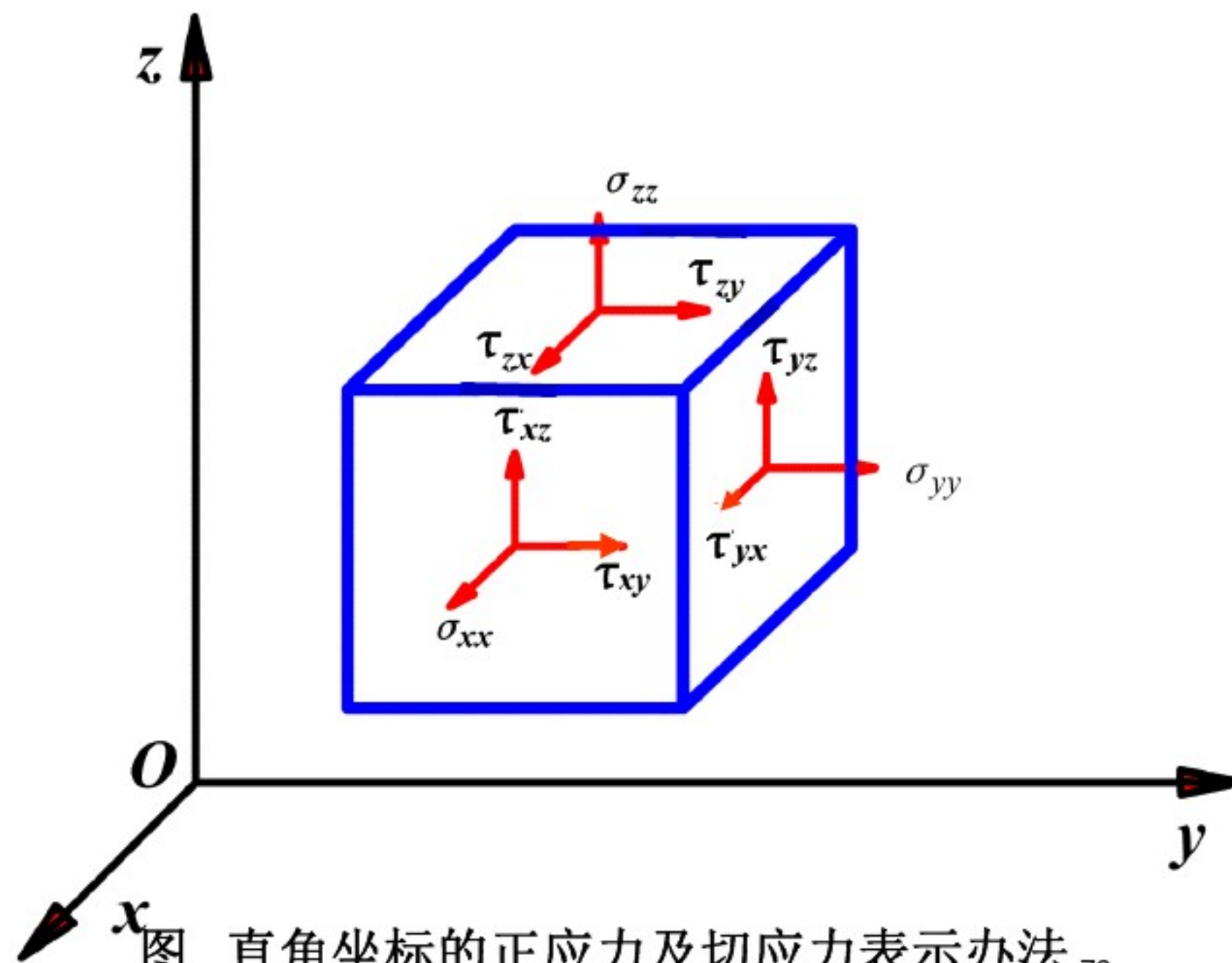


图 直角坐标的正应力及切应力表示办法 79

§ 1.3.2 线缺陷

(2) 螺型位错的应力场

左图的厚壁筒只有 z 方向的相对位移，因而只有两个切应变分量，没有正应变分量。

两个切应变分量用圆柱坐标表示为：

$$\gamma_{r\theta} = \gamma_{z\theta} = \frac{b}{2\pi r} \quad (1-1)$$

相应的切应力分量则为：

$$\tau_{z\theta} = \tau_{\theta z} = G \gamma_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad (1-2)$$

其余七个应力分量均为零。

G - 切变模量 b - 柏氏矢量的模

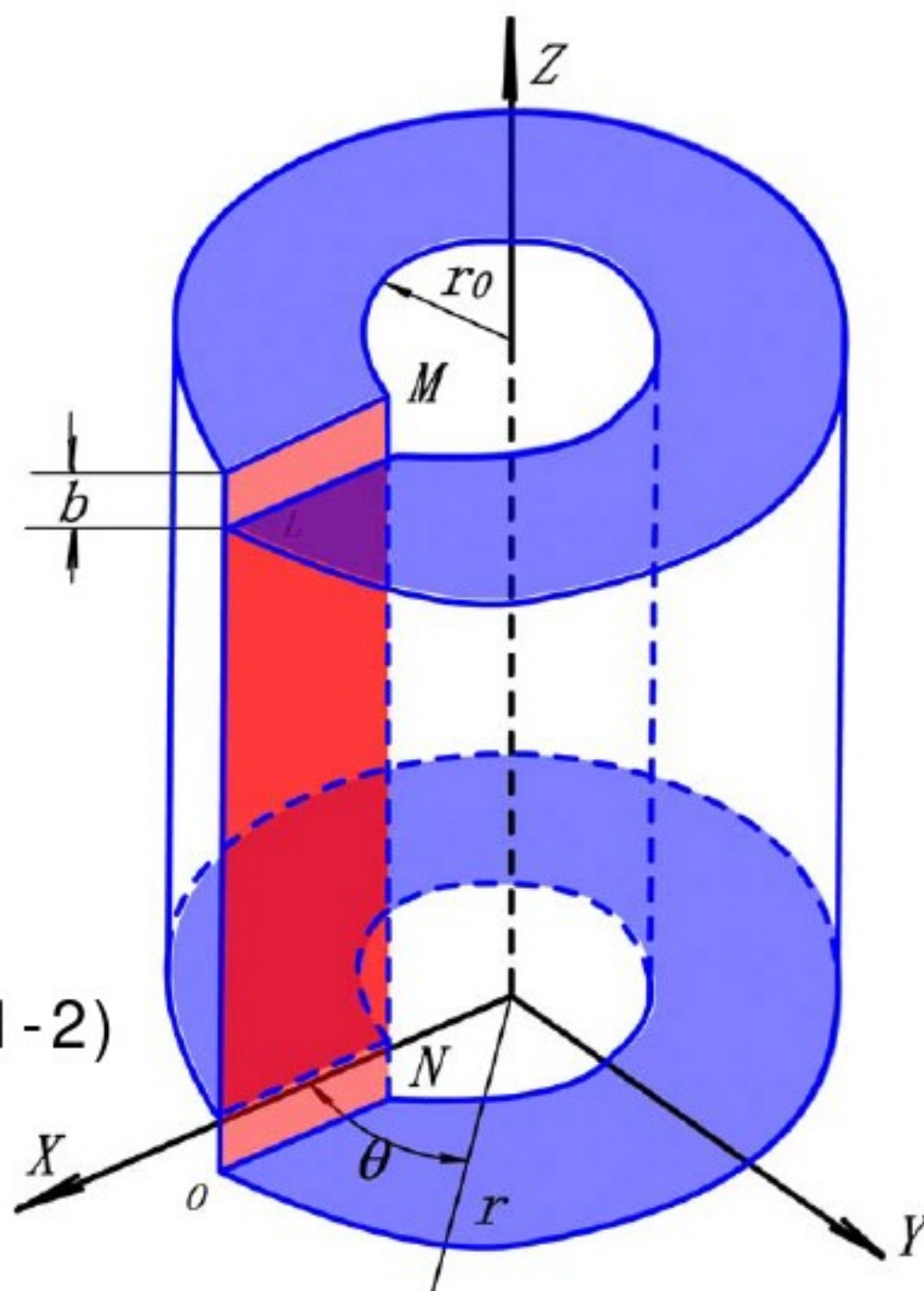


图 螺型位错的连续介质模型

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 螺型位错应力场直角坐标系应力分量：

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

式中 G —切变模量； b —柏氏矢量的模

◆ 特点：

- 没有正应力分量
- 切应力对称分布(中心对称)

§ 1.3.2 线缺陷

(3) 刃型位错的应力场

➤ 直角坐标系应力分量：

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} &= -A \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{yy} &= A \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \\ \tau_{xy} &= \tau_{yx} = A \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \tau_{xz} &= \tau_{zx} = \tau_{yz} = \tau_{zy} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (1-4)$$

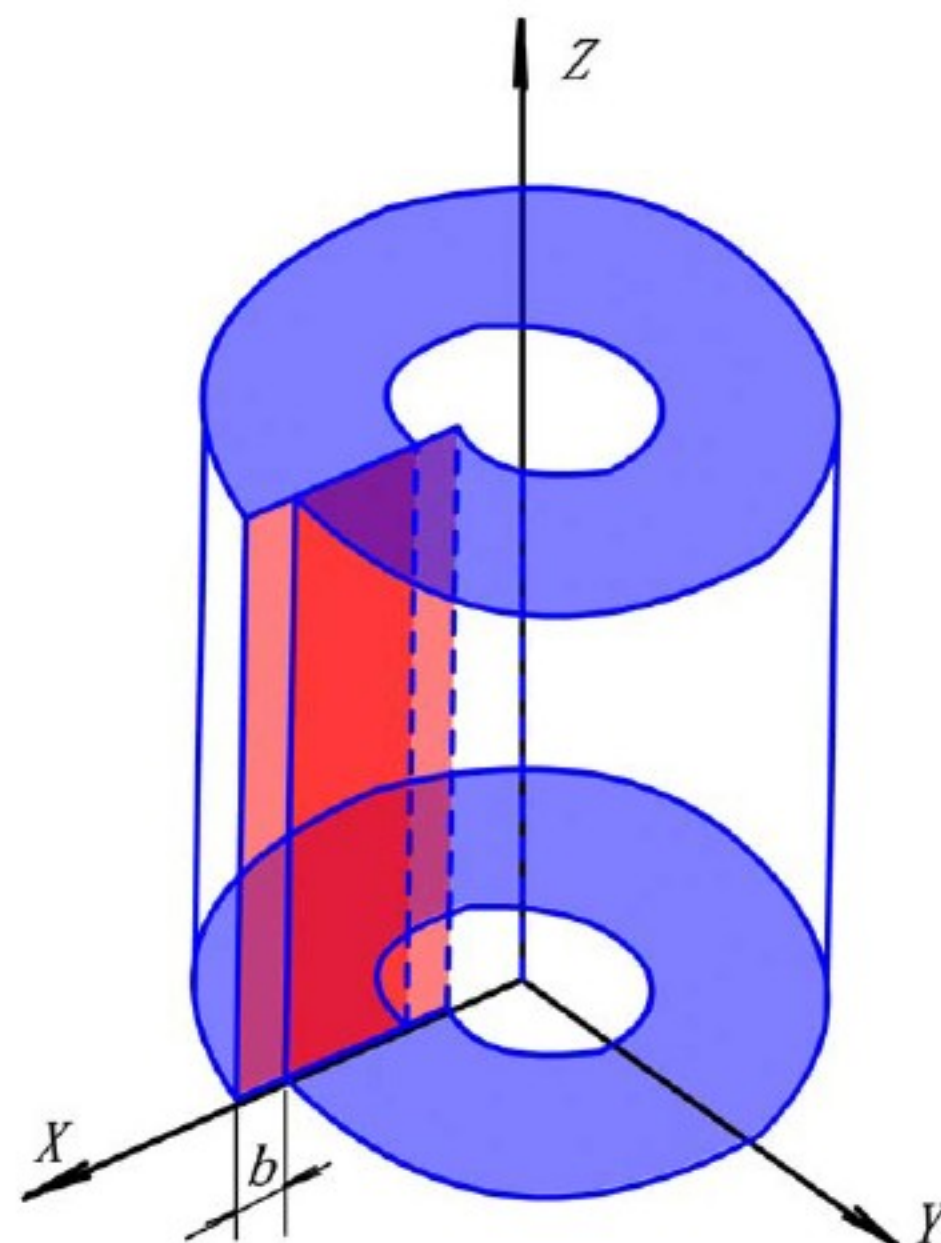


图 刃型位错的连续介质模型

式中 $A = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$ ； ν —泊松比； b —柏氏矢量的模

§ 1.3.2 线缺陷

◆ 特点：

(1) 正应力分量与切应力分量同时存在。

(2) 应力场中任意一点位置，
 $|\sigma_{xx}| > |\sigma_{yy}|$ 。

(3) 当 $y > 0$ 时（滑移面以上区域）， $\sigma_{xx} < 0$ （压应力）；

当 $y < 0$ 时（滑移面以下区域）， $\sigma_{xx} > 0$ （张应力）；

当 $y = 0$ 时（滑移面上），
 $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$ ，即滑移面上没有正应力，只有切应力。

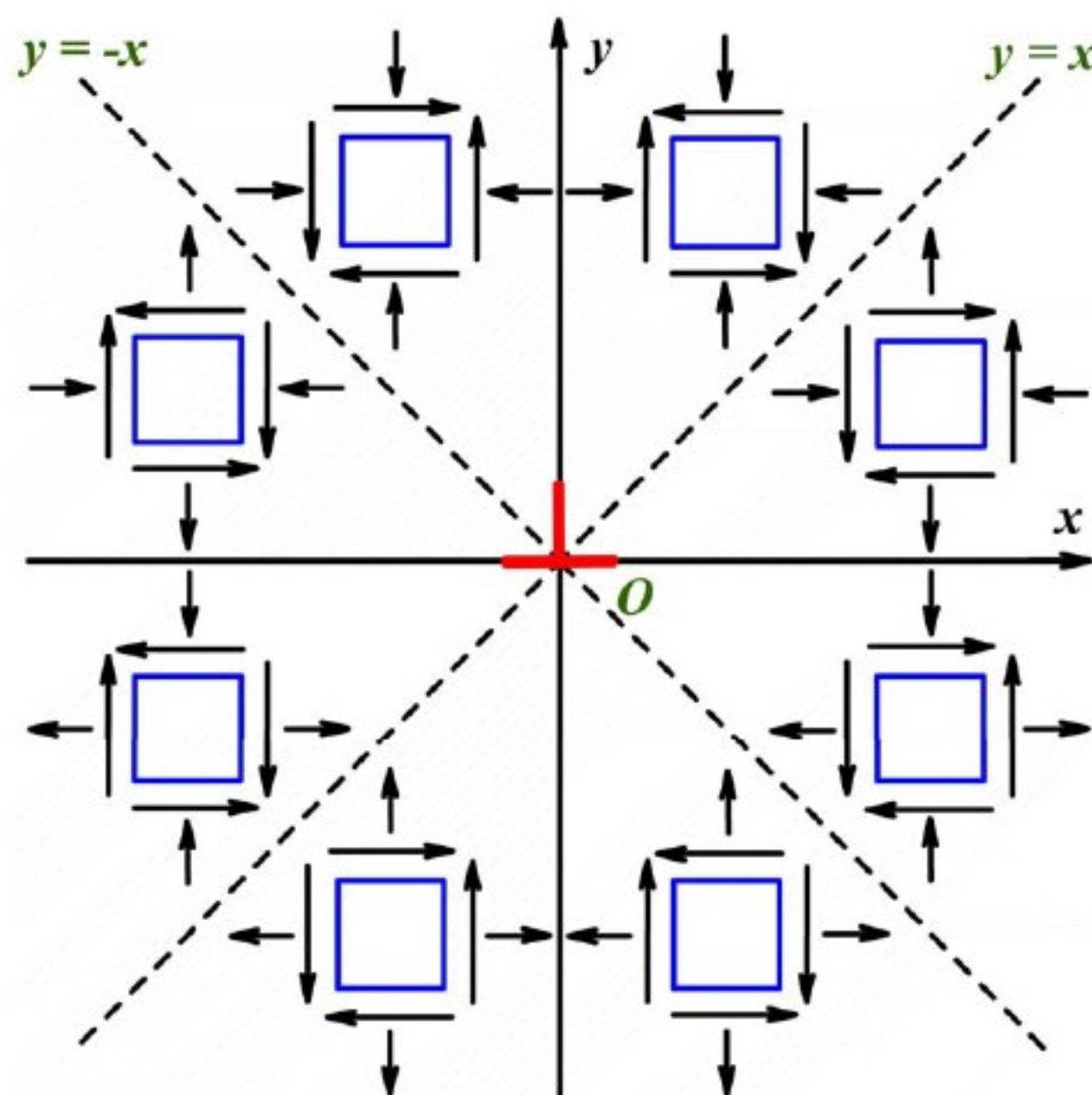


图 正刃型位错周围的应力分布

§ 1.3.2 线缺陷

(4) 位错的应变能

- 晶体中位错的存在引起点阵畸变，导致能量增高，此增量称为位错的应变能，或称为位错的能量。

位错应变能 = 位错中心部分的能量 + 位错周围的弹性能。

- 位错中心部分的能量大约为总应变能的1/10 ~ 1/15左右，故通常予以忽略。

- 单位长度螺型位错的弹性应变能：
$$W_s = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}$$

- 单位长度刃型位错的弹性应变能：
$$W_e = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}$$

式中 r_0 - 位错中心的半径，一般取 $r_0 \approx b \approx 2.5 \times 10^{-10} \text{ m}$;

R - 位错应力场最大作用半径，一般取 $R = 10^{-6} \text{ m}$;

ν - 柏松比，其值为 $0.3 \sim 0.4$ 。

§ 1.3.2 线缺陷

- 混合型位错的因便能可以通过将其分解为螺型位错分量和刃型位错分量，然后进行计算。
 设混合型位错的柏氏矢量 b 与位错线成 ψ 角，则单位长度混合型位错应变能为：

$$W_m = W_s + W_e = \frac{Gb^2 \cos^2 \varphi}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} + \frac{Gb^2 \sin^2 \varphi}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}$$

$$\Rightarrow W_m = \frac{Gb^2}{4\pi k} \ln \frac{R}{r_0}$$

$$\text{式中: } k = \frac{1-\nu}{1-\nu \cos 2\varphi}, \text{ 其值约为 } 0.75 \sim 1$$

◆ $W = \alpha Gb^2$

dis的能量与 b^2 成正比，故 b 越小的位错其能量越低，在晶体中越稳定。

§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.7 位错之间的交互作用

一般情况下, 两个位错之间的相互作用力不仅取决于其柏氏矢量, 而且取决于位错线方向和这两根位错线在三维空间的取向。

(1) 两个平行螺型位错间的作用力

位错 S_1 在 (r, θ) 处的切应力为:

$$\tau_{\theta z} = \frac{Gb_1}{2\pi r}$$

位错 S_2 在此应力作用下受到的力为:

$$f_r = \tau_{\theta z} \cdot b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi r}$$

同理, 位错 S_1 在位错 S_2 应力场的作用下, 也将受到一个大小相等, 方向相反的作用力。

注:

当 b_1 与 b_2 同向, $f > 0$, 同号螺型位错相斥;

当 b_1 与 b_2 反向, 则 $f < 0$, 异号螺型位错相吸。

图表示位于坐标原点和 (r, θ) 处有两个平行于Z轴的螺型位错, 其柏氏矢量分别为 b_1 、 b_2 。

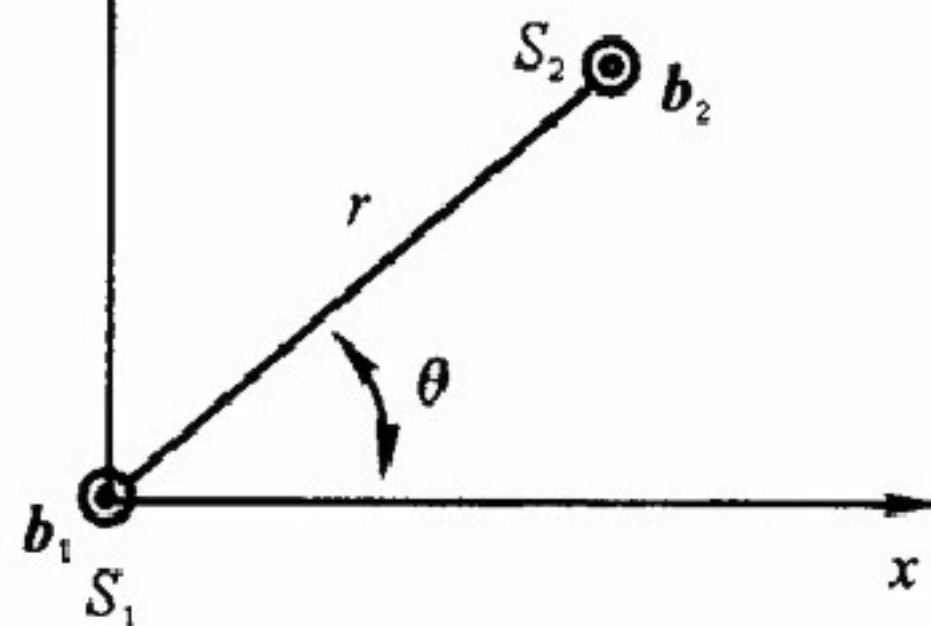


图 平行螺型位错的相互作用

§ 1.3.2 线缺陷

(2) 两个平行刃型位错之间的作用力

由于位错 b_2 的滑移面平行于 X - Z 面，因此在位错 b_1 的各应力分量中，只有切应力分量 τ_{yx} 和正应力分量 σ_{xx} 对位错 b_2 起作用，前者驱使其沿 X 轴方向滑移，后者驱使其沿 Y 轴方向攀移。这两个力分别为：

$$f_x = \tau_{yx} b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$f_y = -\sigma_{xx} b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

图示表示位于坐标原点及 (x, y) 处两个平行于 Z 轴的同号刃型位错，其柏氏矢量 b_1 和 b_2 均与 X 轴同向。

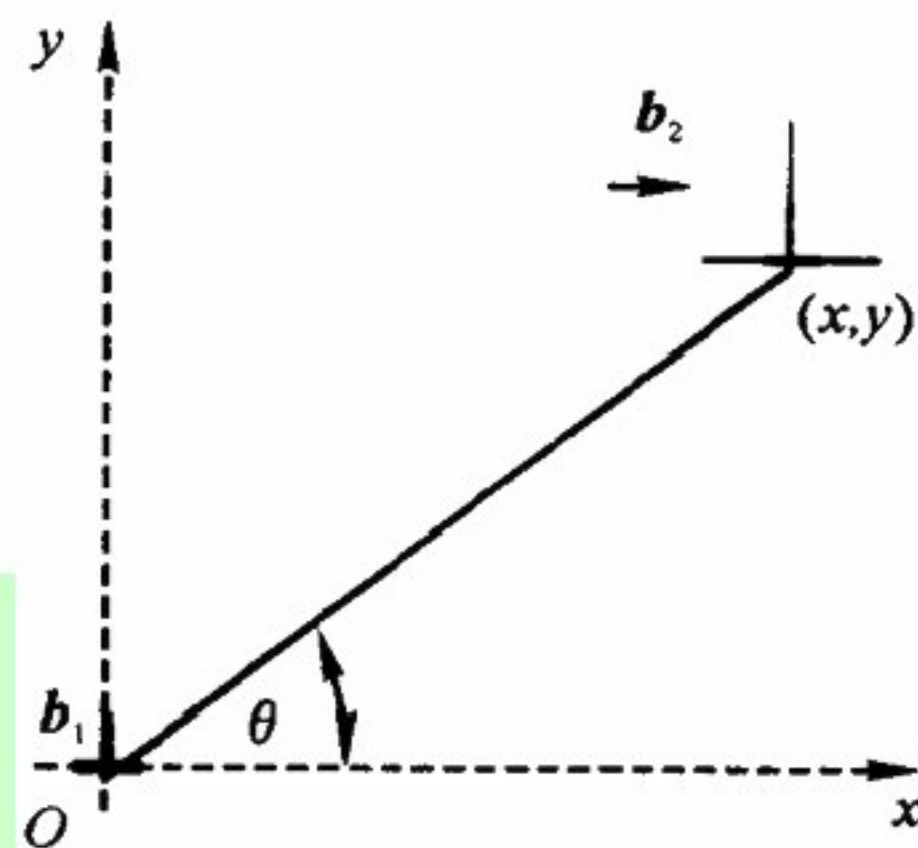


图 平行刃型位错的相互作用

- f_x 是引起滑移的作用力，变化比较复杂，随 b_2 所处的位置不同而改变。
- f_y 是使 b_2 位错沿 y 轴攀移的力。当两个位错同号时，若 b_2 位错在 b_1 位错的滑移面以上，即 $y > 0$ ，则 $f_y > 0$ ， b_2 位错向上攀移；反之， $y < 0$ ，则向下攀移。

§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.8 位错的增殖、塞积与交割

(1) 位错的增殖

1) 机制：主要有F-R源

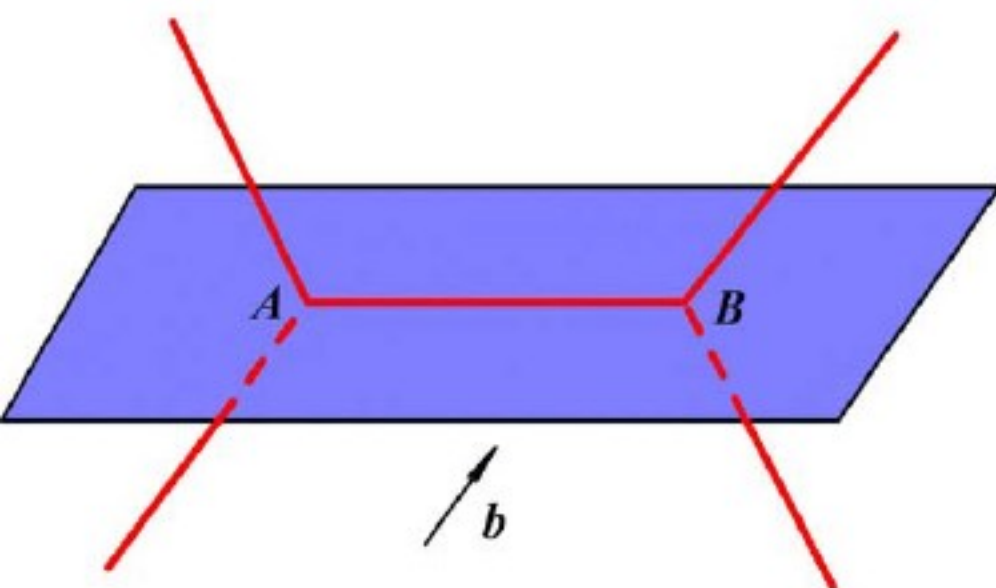
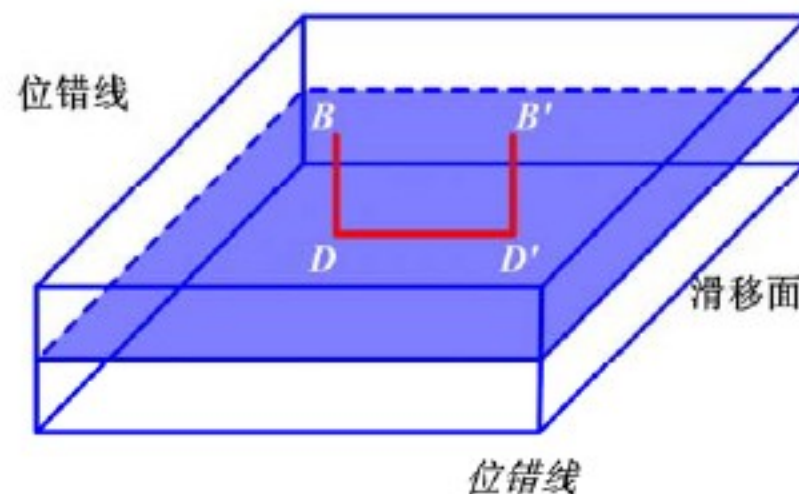
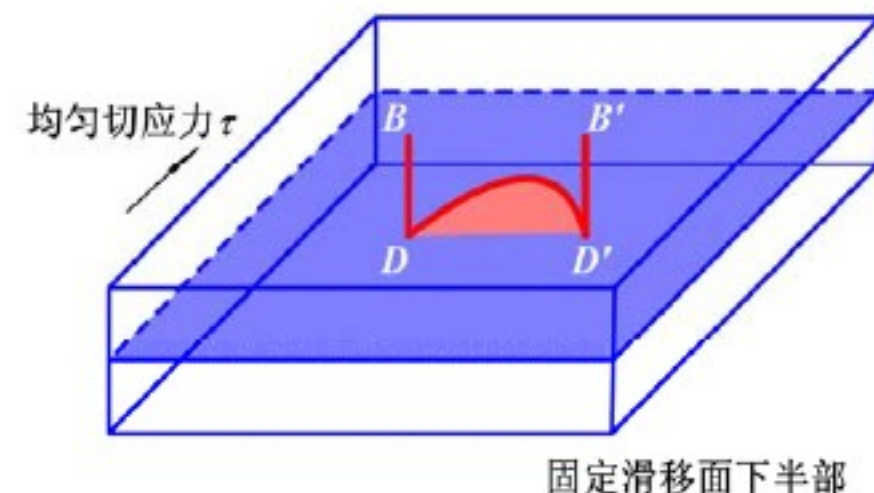


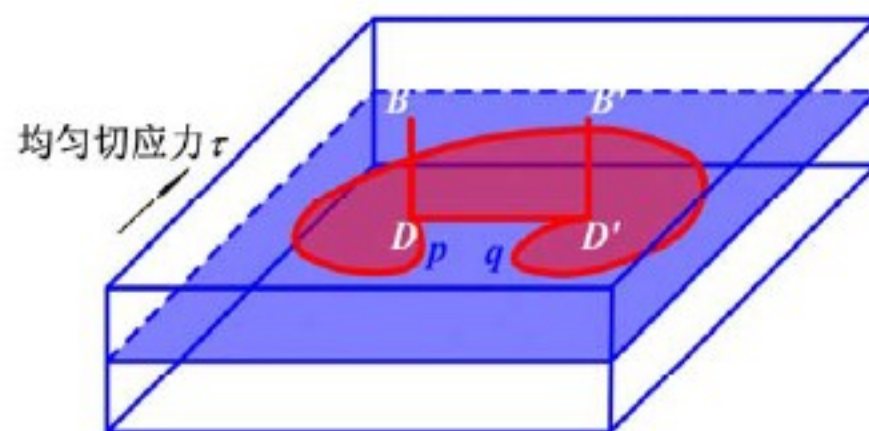
图 弗兰克-瑞德源的结构



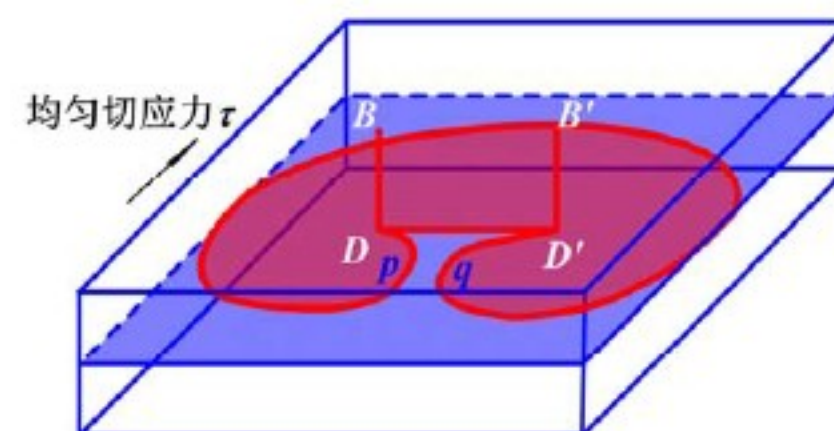
(a)



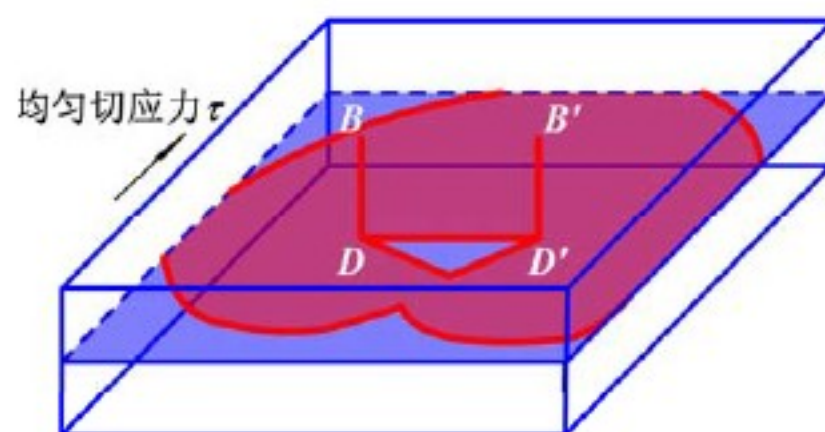
(b)



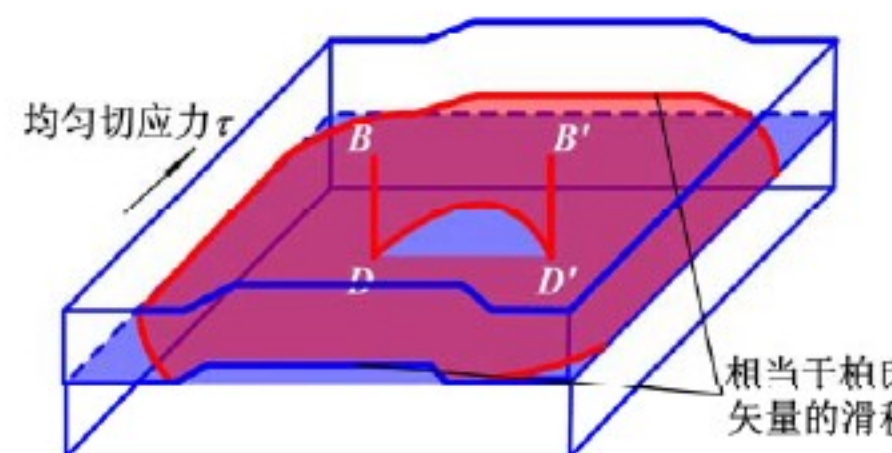
(c)



(d)



(e)



(f)

图 弗兰克-瑞德源的动作过程

§ 1.3.2 线缺陷

2) 位错的线张力(弯曲位错线上的力)

——使位错线增加单位长度时所需的能量,数值上应等于单位长度位错的应变能, 即 $T = \alpha Gb^2$ (对弯曲位错 $\alpha = 1/2$)。

$$\oint ds = 2T \sin \frac{d\theta}{2} \xrightarrow{d\theta \text{ 很小, 且 } ds = r d\theta} \oint = \frac{T}{r}$$

$$\tau b = \frac{T}{r} \approx \frac{Gb^2}{2r} \quad \text{或} \quad \tau = \frac{Gb}{2r}$$

故在切应力 τ 的作用下, 位错线的平衡半径 $r = Gb/2\tau$, 或使位错弯曲到半径为 r 所需要的切应力为:

$$\tau = Gb/2r.$$

注: AB弯成半圆时, 曲率半径最小, 开动 dis 源所需的临界切应力为 $\tau = Gb/L$ (L 为 F-R 源 AB 间距)

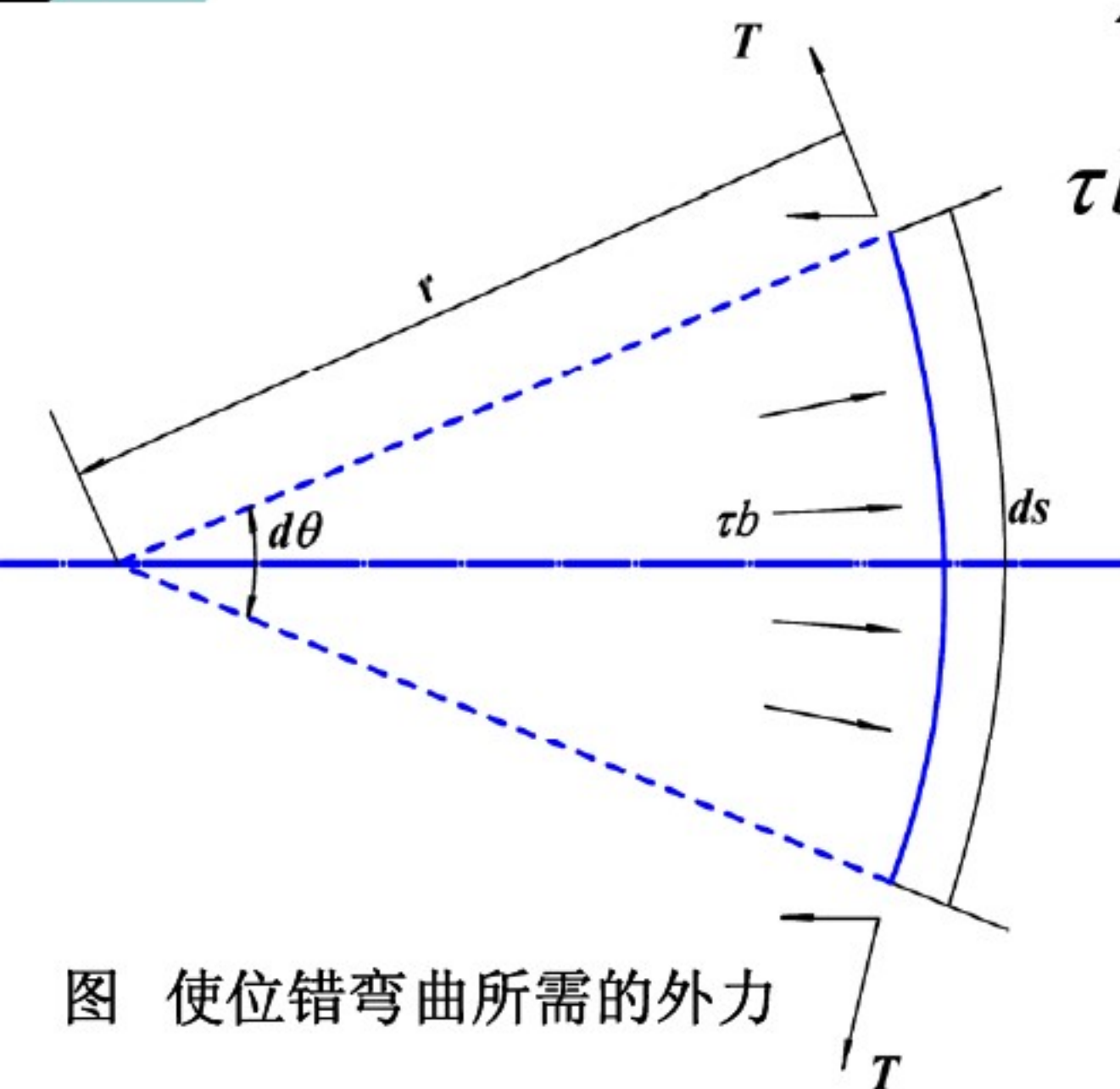


图 使位错弯曲所需的外力

§ 1.3.2 线缺陷

(2) 位错的塞积

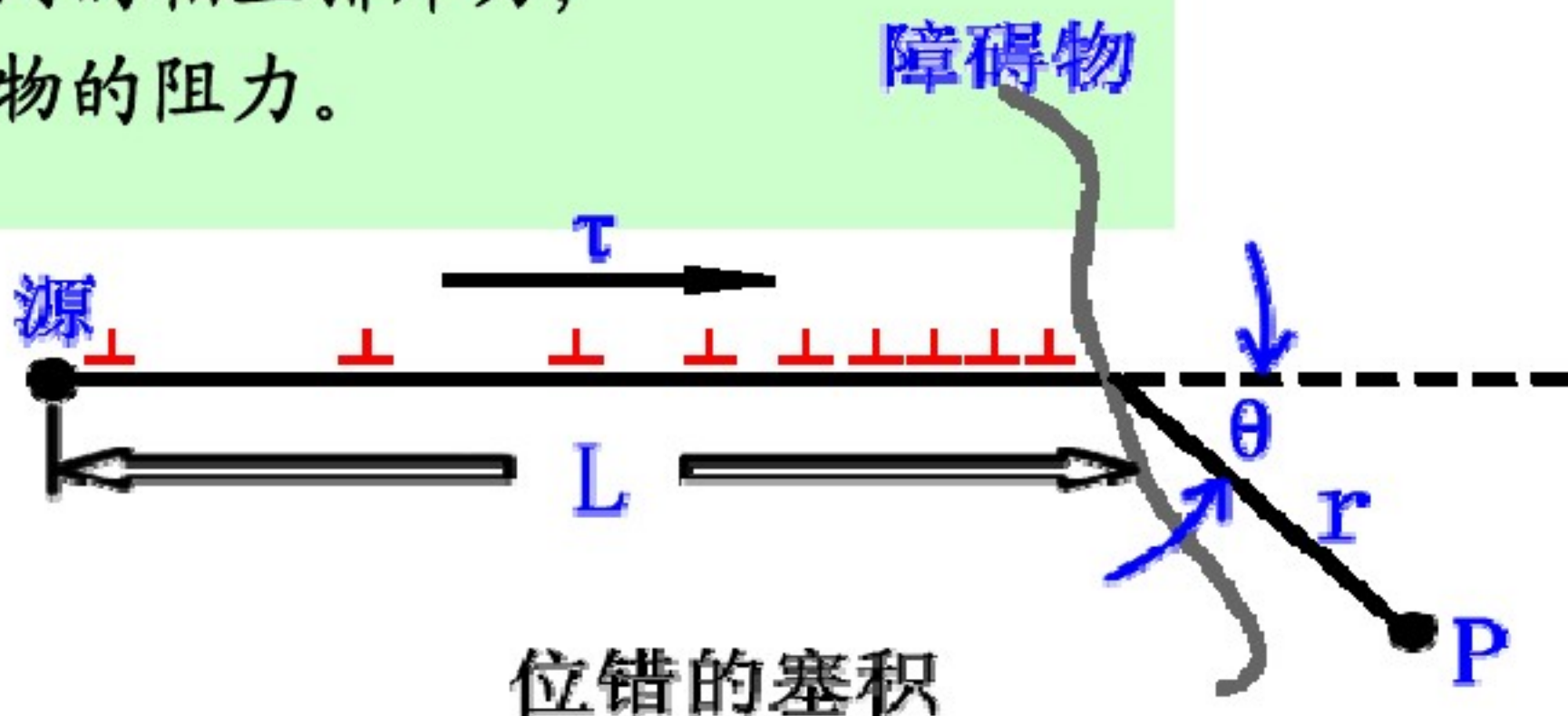
➤ 领先位错在障碍物前被阻止，后续位错被堵塞起来，形成位错的塞积。

➤ 塞积群诸位错所受的力：

(a) 由外切应力所产生的滑移力 τb ；

(b) 位错间的相互排斥力；

(c) 障碍物的阻力。



➤ 如果障碍物与位错源之间的距离为 L ，则沿这段滑移面上可以分布的位错数目为：

$$n = K \pi \tau L / G b$$

螺 dis $K=1$; 刃 dis $K=1-\nu$, τ -作用于滑移面上的外加切应力。

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 塞积的位错群体就称为位错的塞积群，最靠近障碍物的位错称为领先位错。

● 塞积群的平衡条件：

$$n \tau b = \tau_0 b$$

● 障碍物对领先位错的反作用力：

$$\tau_0 = n \tau$$

◆ 说明：

随 $n \uparrow$ ， $\tau_0 \uparrow$ ，如果塞积群不能借交滑移或攀移越过障碍而使应力松弛下来，就会导致晶体发生破裂或迫使障碍的另一边发生塑性变形。

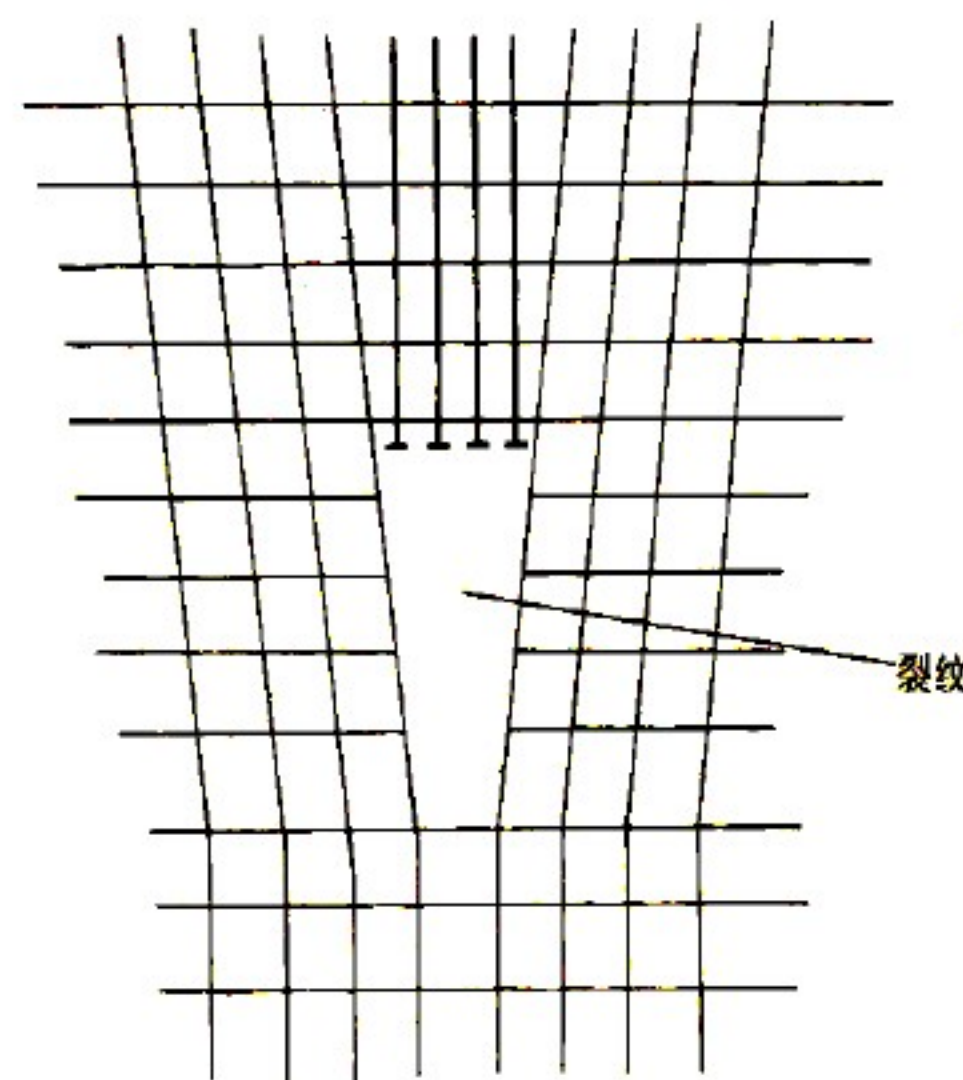


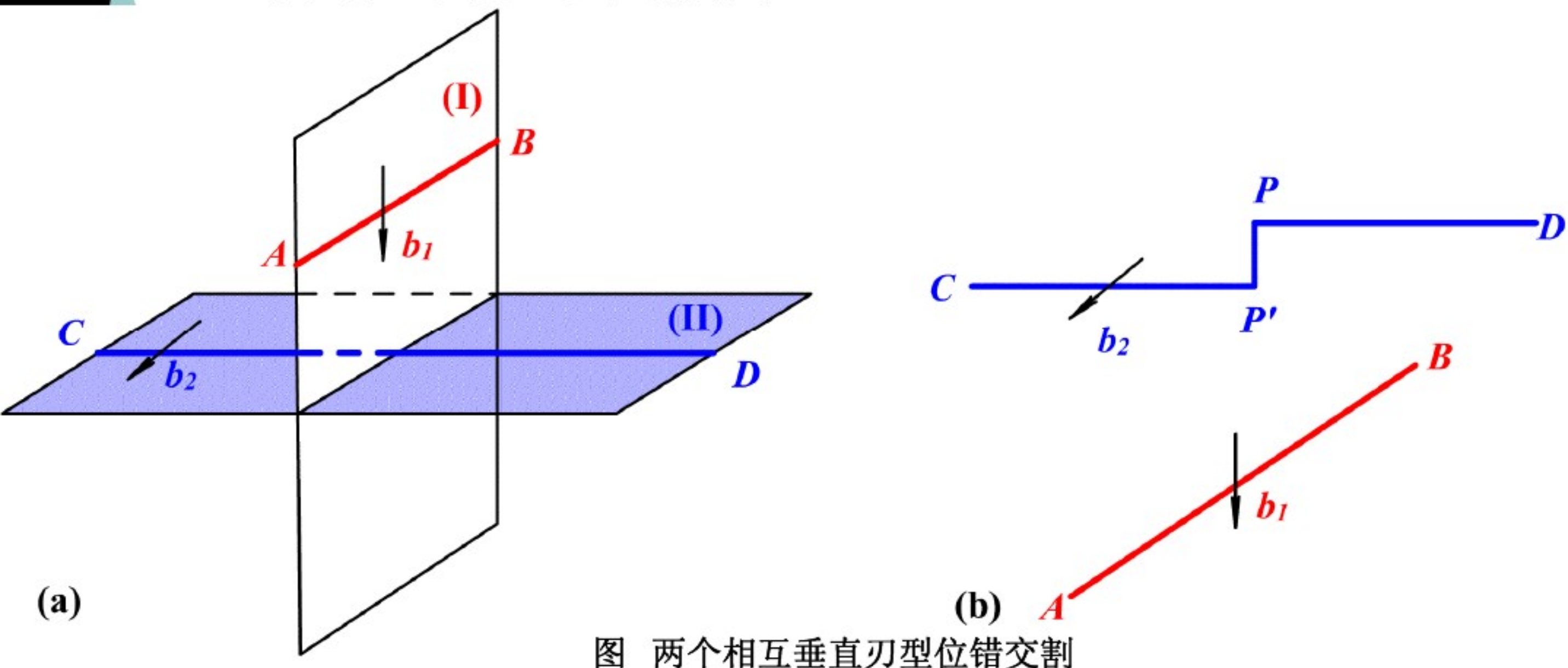
图 刃型位错塞积造成的微裂纹

§ 1.3.2 线缺陷

(3) 位错的交割

1) 两个刃型位错交割

➤ 两个相互垂直刃型位错交割



注：

1) 割阶 $PP' \perp b_2$ ，属刃dis， PP' 可继续移动。

2) 不位于滑移面上的位错台阶成为割阶。

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 两个相互平行刃型位错交割

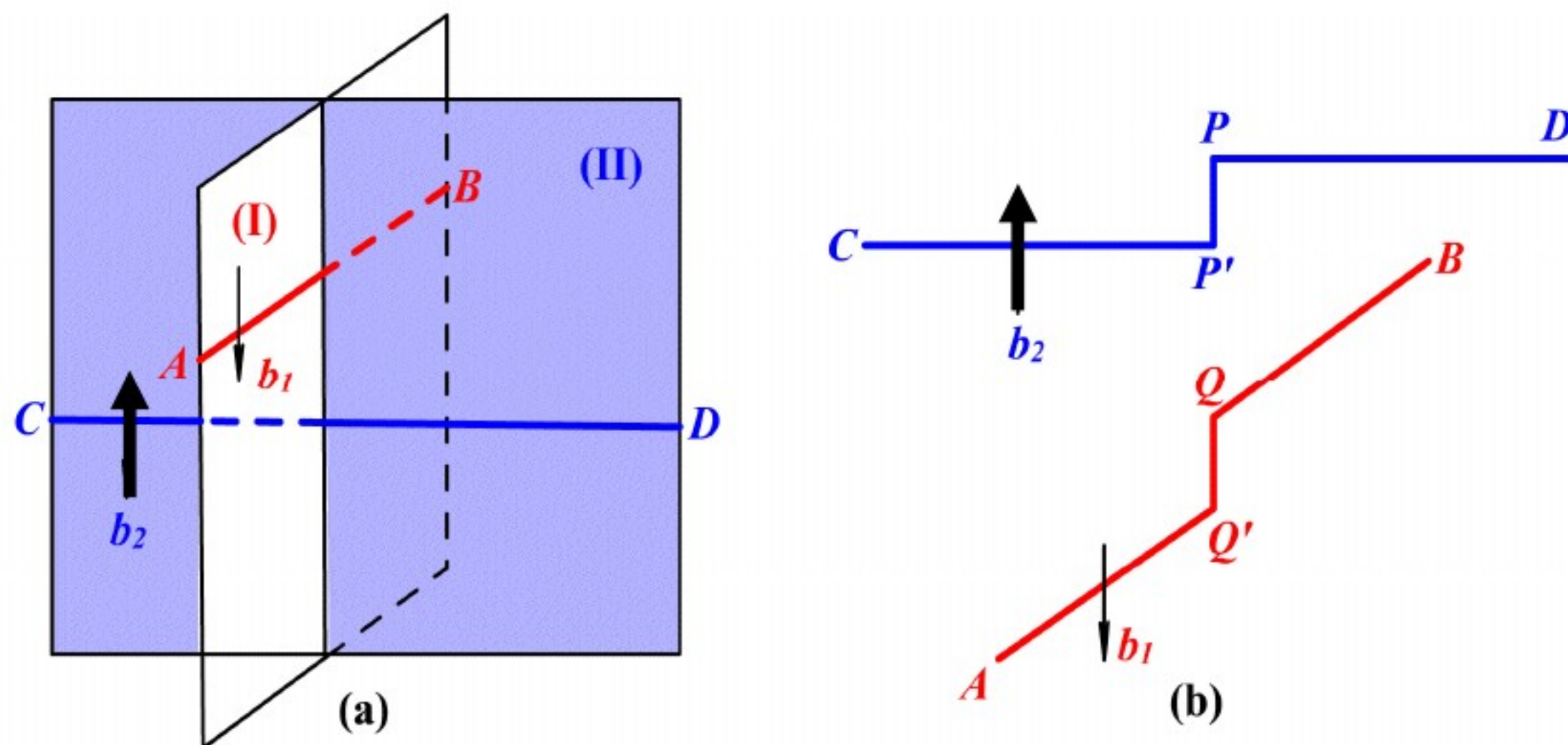


图 两个平行刃型位错交割

- 注：
- 1) 台阶 PP' $\parallel b_2$ ，属螺dis。
 - 2) 台阶 QQ' $\parallel b_1$ ，属螺dis
 - 3) 台阶 PP' 、 QQ' 仍位于原滑移面上，可继续移动。
 - 4) 位于原滑移面上的位错台阶称为扭折。

§ 1.3.2 线缺陷

2) 刃型位错与螺型位错交割

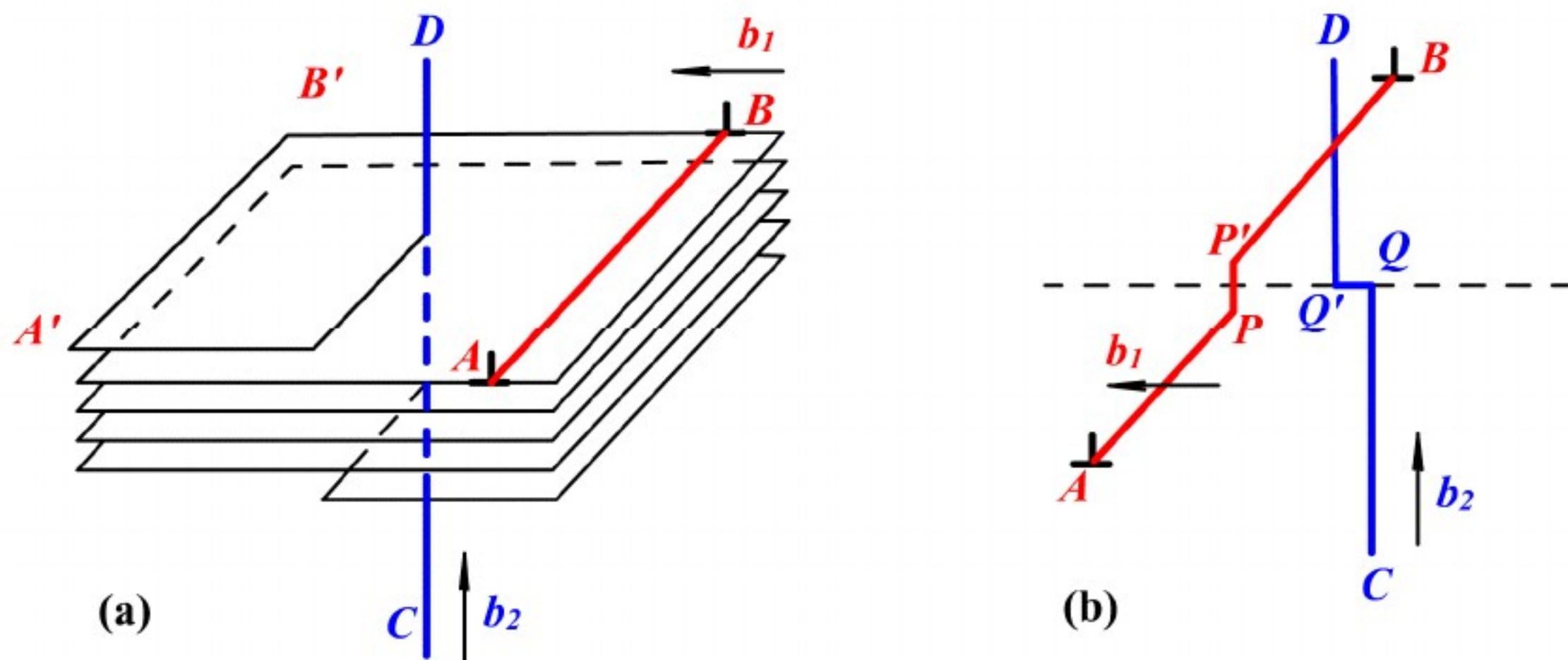


图 刃型位错与螺型位错交割

- 注：
- 1) 台阶 PP' $\perp b_1$ ，属刃dis。
 - 2) 台阶 QQ' $\perp b_2$ ，属刃dis。
 - 3) 台阶 QQ' 移动方向为 b_2 ，螺位错 CD 则沿 $\perp b_2$ 方向移动，两者移动不一致，致使螺位错 CD 滑移受到阻碍产生阻力。

§ 1.3.2 线缺陷

3) 两个螺型位错交割

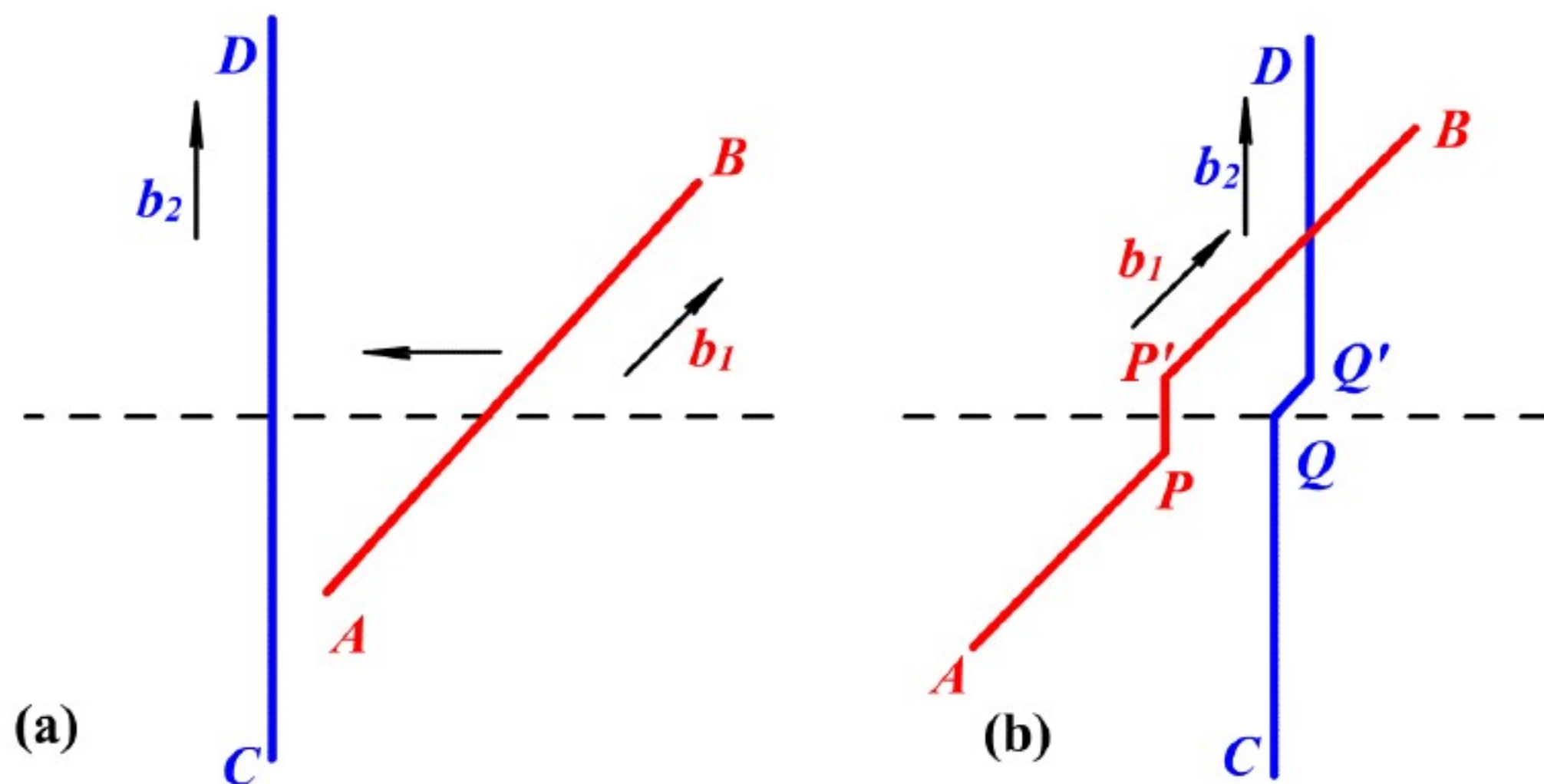


图 两个螺型位错的交割图

注： 1) 两个螺dis交割时彼此都生成刃dis割阶，会阻碍螺dis的移动。
2) 形成的割阶只能攀移。

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 带刃型割阶的螺型位错的运动

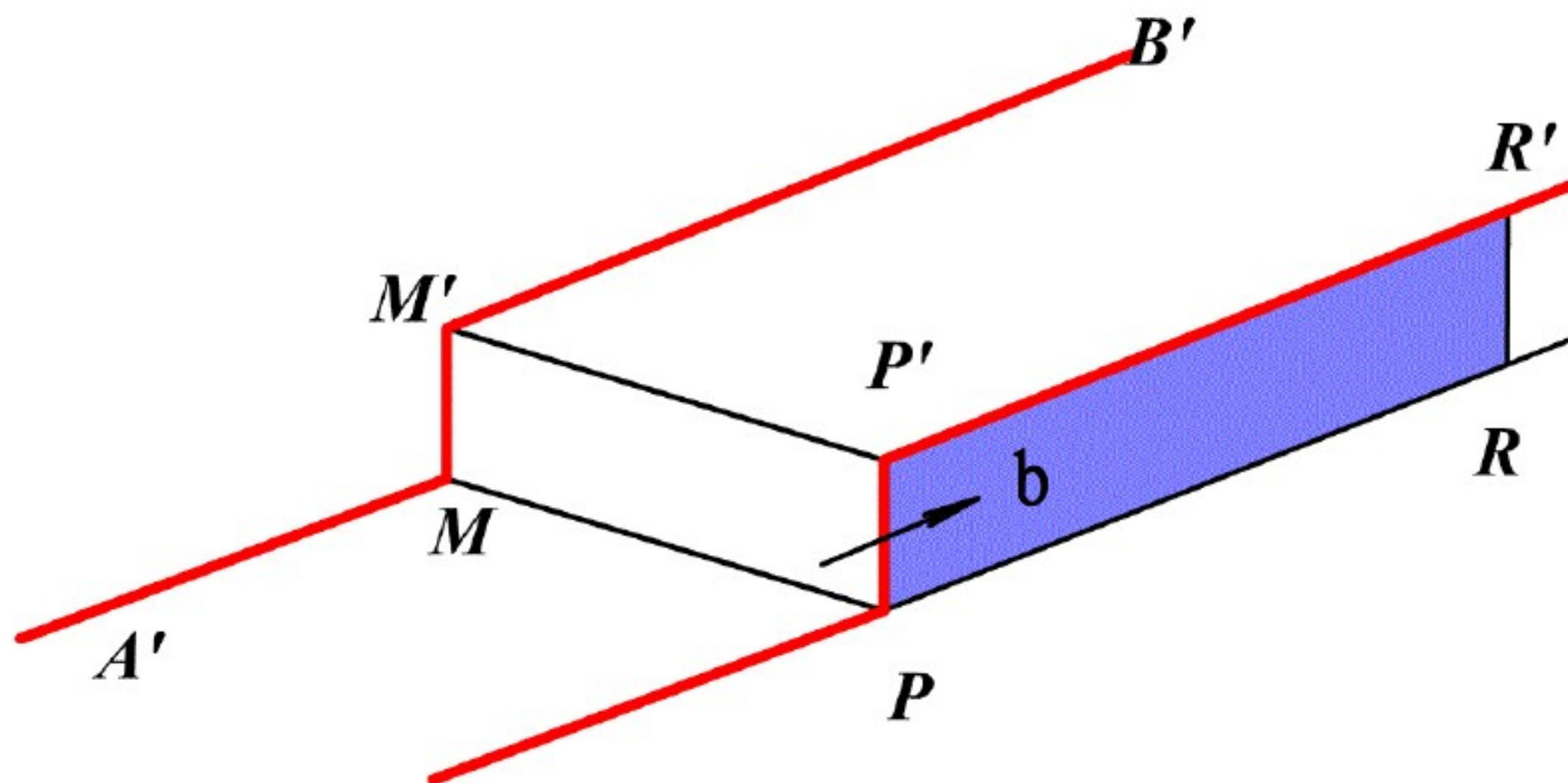


图 带刃型割阶的螺型位错的运动

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 带割阶的螺型位错的滑移过程

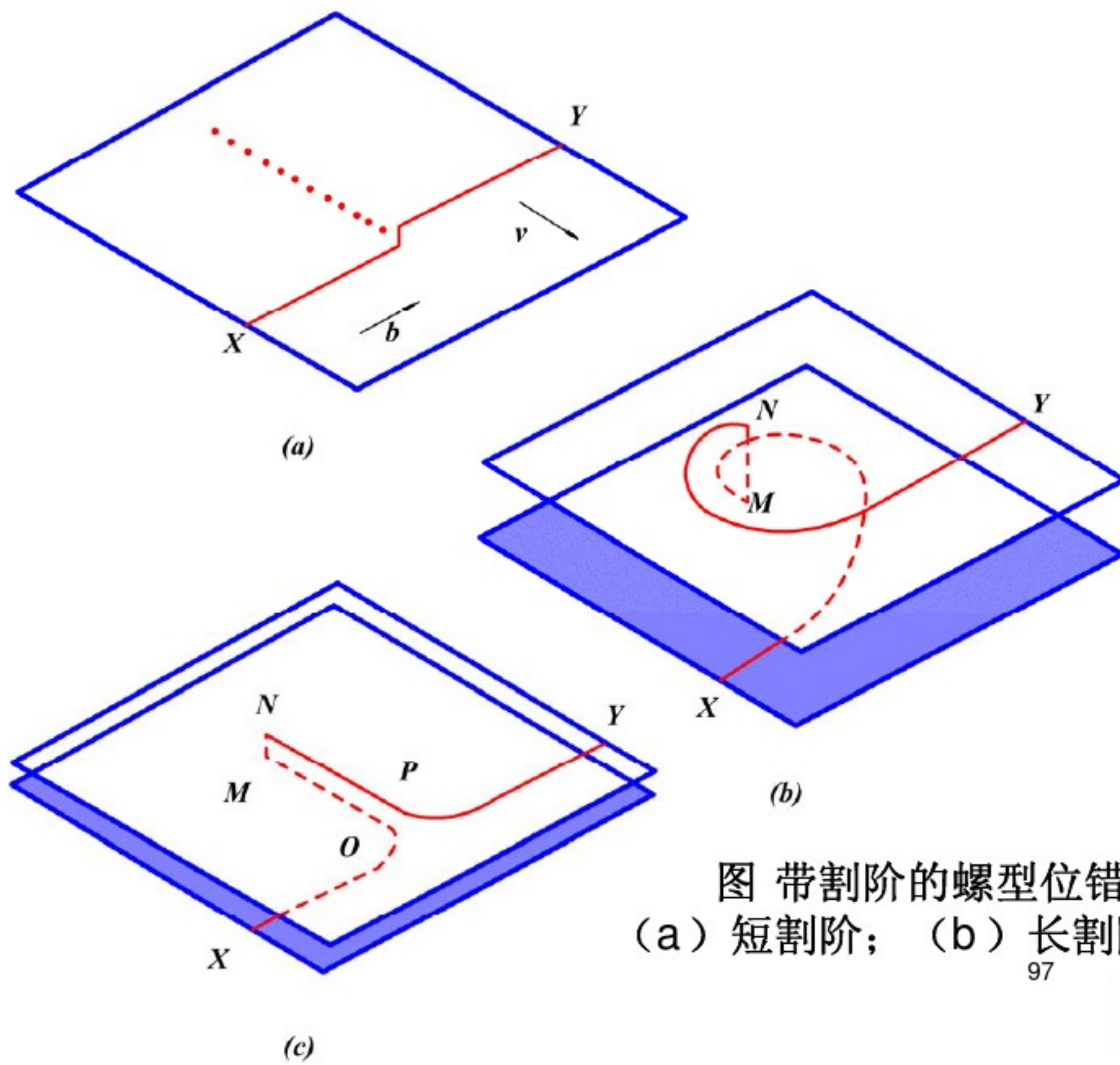


图 带割阶的螺型位错的滑移过程
(a) 短割阶； (b) 长割阶； (c) 中割阶

§ 1.3.2 线缺陷

1.3.2.8 实际晶体中的位错

(1) 实际晶体结构中的单位位错

◆ 实际晶体结构中，位错的柏氏矢量不能是任意的，它要符合晶体的结构条件和能量条件。

- 结构条件：柏氏矢量必须连接一个原子平衡位置到另一平衡位置。
- 能量条件：位错能量正比于 b^2 ，柏氏矢量 b 越小越好。
- 能量较高的位错是不稳定的，往往通过位错反应分解为能量较低的位错组态。

◆ 实际晶体中存在的位错的柏氏矢量限于少数最短的点阵矢量。

- 点阵矢量是点阵中连接任意两结点的矢量。
- 在简单立方点阵中的位错，它的柏氏矢量 b 总是等于点阵矢量。

◆ 在实际晶体结构中，位错的柏氏矢量除了等于点阵矢量外，还可能小于或大于点阵矢量。

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 位错根据柏氏矢量的不同可以分为全位错和不全位错。

1) 全位错

$b = \text{单位点阵矢量}$ —— 单位位错

$b = n \text{单位点阵矢量}$ —— 全位错

- 由于单位位错移动时，不破坏滑移面上下原子排列的完整性、即已滑移区和未滑移区仍有相同的晶体结构，因此又称为完整位错。
- 至于晶体中柏氏矢量等于其它点阵矢量的位错，由于其能量高，所以常通过位错反应分解成能量低的位错。

2) 不全位错

$b \neq n \text{单位点阵矢量}$ —— 不全位错

$b < \text{单位点阵矢量}$ —— 部分位错

- 不全位错移动时，除已滑动区边界上的原子产生错排外，已滑移区滑移面上下的原子也产生的错排，结构呈现不完整，因此这种位错也称为不完整位错。

§ 1.3.2 线缺陷

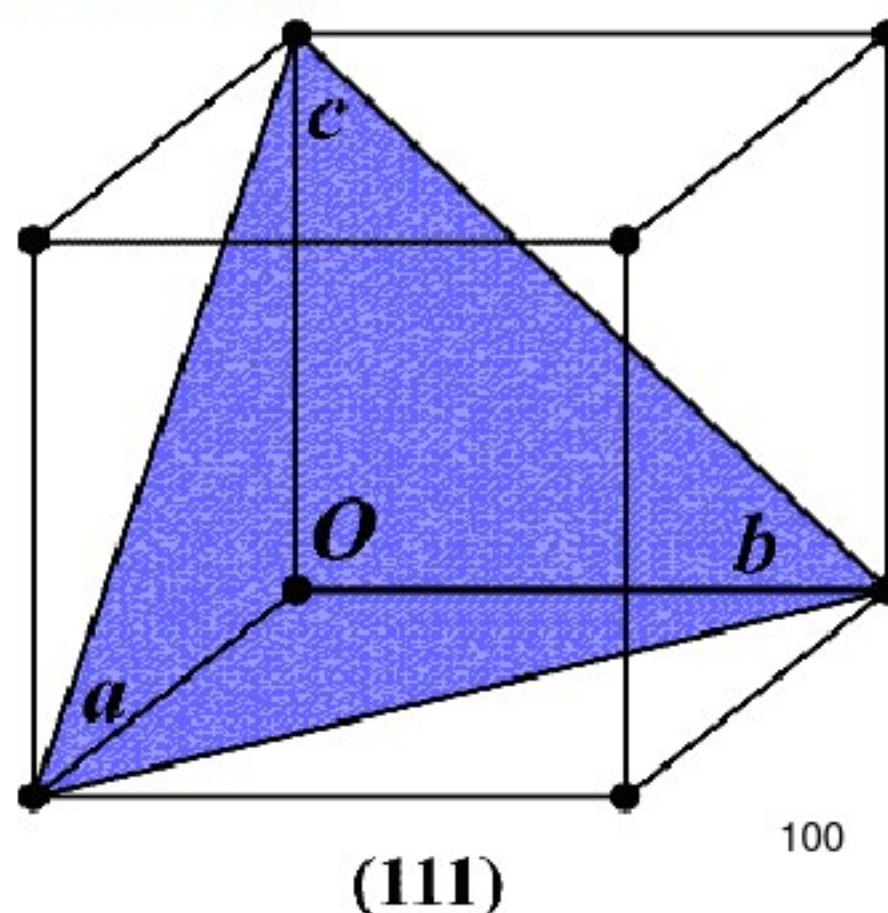
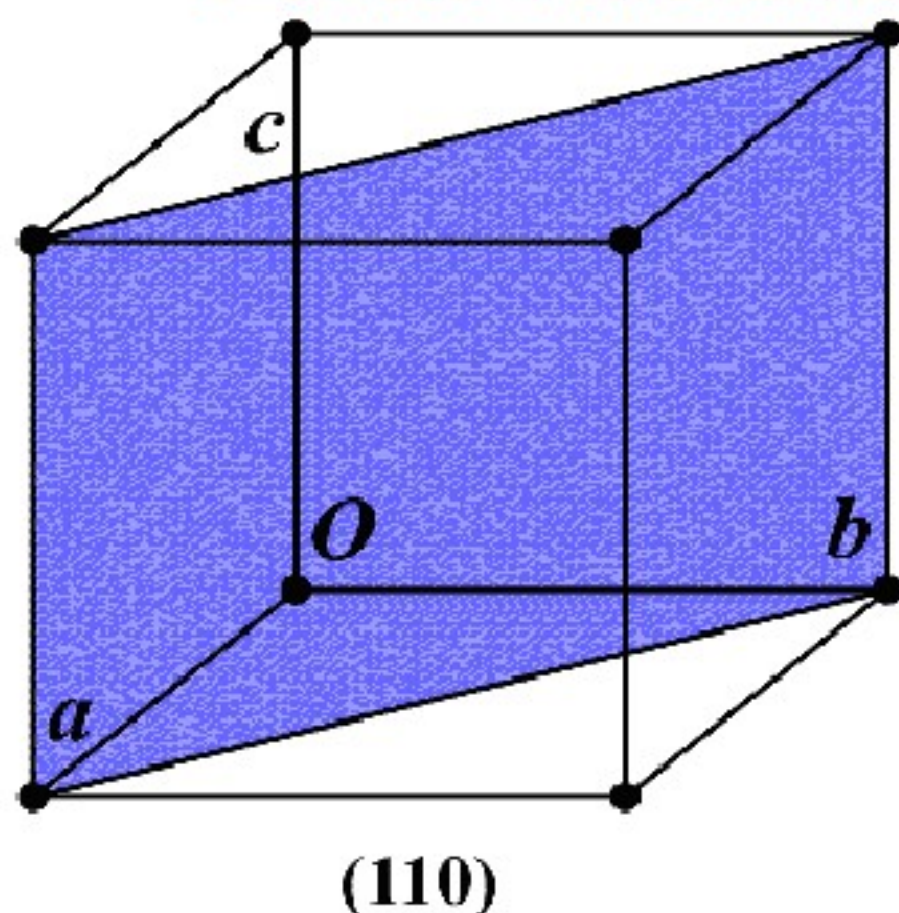
例：三种典型晶体结构单位位错

面心立方结构中 b 为 $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ 、 $|\mathbf{b}| = \frac{\sqrt{2}}{2}a$

体心立方结构中 b 为 $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ 、 $|\mathbf{b}| = \frac{\sqrt{3}}{2}a$

密排六方结构中 b 为 $\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、 $|\mathbf{b}| = a$

* 上述位错等都是最稳定的单位位错。



§ 1.3.2 线缺陷

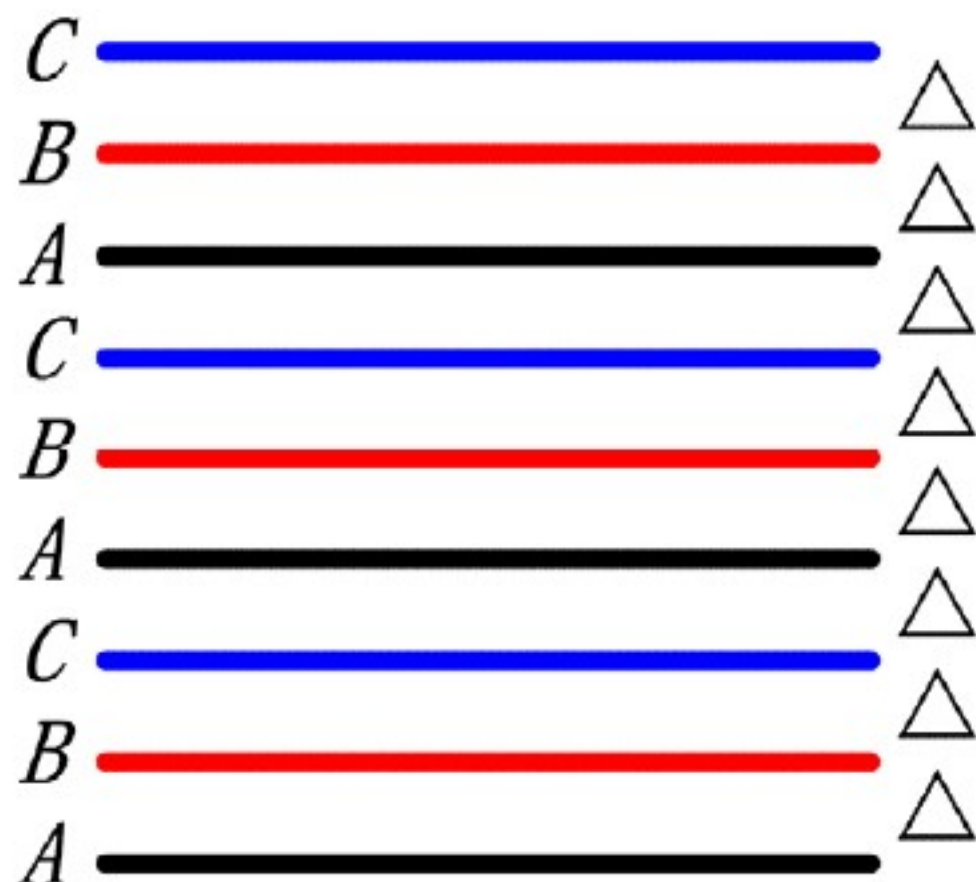
◆ 常见金属晶体中的位错 - 全位错和不全位错

晶体结构	位错类型	柏氏矢量
体心立方	全位错 不全位错	$a/2\langle 111 \rangle, a\langle 100 \rangle$ $a/3\langle 111 \rangle, a/6\langle 111 \rangle, a/8\langle 110 \rangle, a/3\langle 112 \rangle$
面心立方	全位错 不全位错	$a/2\langle 110 \rangle$ $a/6\langle 112 \rangle, a/3\langle 111 \rangle, a/3\langle 110 \rangle, a/6\langle 110 \rangle,$ $a/6\langle 103 \rangle, a/3\langle 100 \rangle$
密排六方	全位错 不全位错	$a/3\langle \bar{1}120 \rangle, a/3\langle \bar{1}123 \rangle, c\langle 0001 \rangle$ $c/2\langle 0001 \rangle, a/6\langle \bar{2}023 \rangle, a/3\langle 1010 \rangle$

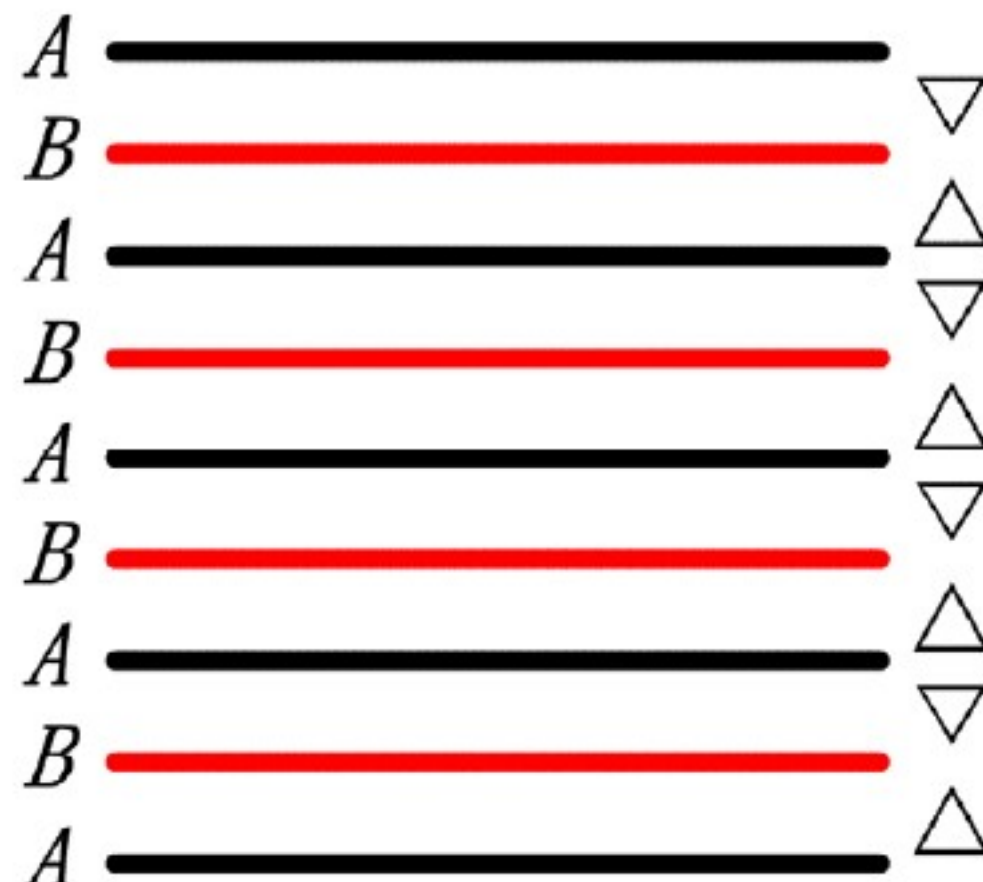
§ 1.3.2 线缺陷

(2) 堆垛层错

- 面心立方结构是以密排面 $\{111\}$ 按.. $ABCABC$..顺序堆垛而成，堆垛方式为 $...\triangle\triangle\triangle\triangle...$ 。
- 密排六方结构是以同样的密排面 $\{0001\}$ 按.. $ABAB$..顺序堆垛起来的，堆垛方式为 $...\triangle\nabla\triangle\nabla...$ 。
- * “ \triangle ”表示AB、BC、CA的堆垛顺序，“ ∇ ”表示BA、AC、CB的堆垛顺序。



(a) 面心立方结构;



(b) 密排六方结构

图 密排面的堆垛顺序

§ 1.3.2 线缺陷

- ◆ 堆垛层错(简称层错):在晶体中,某一区域的晶面堆垛顺序出现差错,造成晶体缺陷(面缺陷)的现象。

例如:面心立方晶体中形成的堆垛层错(途径)

①抽出一层:



②插入一层:



* 正常堆垛顺序中抽去A层晶面,则A以上的各层晶面将垂直落下一层的距离,这就相当于各层晶面发生



a) 抽出型; (b) 插入型
图 面心立方结构的堆垛层错

$\frac{a}{3}\langle 111 \rangle$ 的滑移。

§ 1.3.2 线缺陷

➤ 密排六方结构正常是由密排面 $\{0001\}$ 按照 ABABAB...，即 $\triangle \nabla \triangle \nabla \triangle \dots$ 的顺序堆垛，它也可能形成堆垛层错，其层错包含有面心立方晶体的堆垛顺序。

➤ 密排六方晶体的层错也有两种类型：

① 抽出型层错为 $\dots \nabla \triangle \nabla \nabla \triangle \nabla \dots$ ，即 $\dots \text{BABACAC} \dots$ ；

② 插入型层错为 $\dots \nabla \triangle \nabla \nabla \nabla \triangle \nabla \dots$ ，即 $\text{BABACBCB} \dots$ 。

B
↓
↑

◆ **层错能：**产生单位面积层错所需的能量。

- 形成层错时，几乎不引起点阵畸变，但却破坏了晶体的完整性和周期性，使电子发生反常的衍射效应，使晶体的能量升高。
- 一般来说，层错能越高，出现层错的几率就越小。

§ 1.3.2 线缺陷

(3) 不全位错

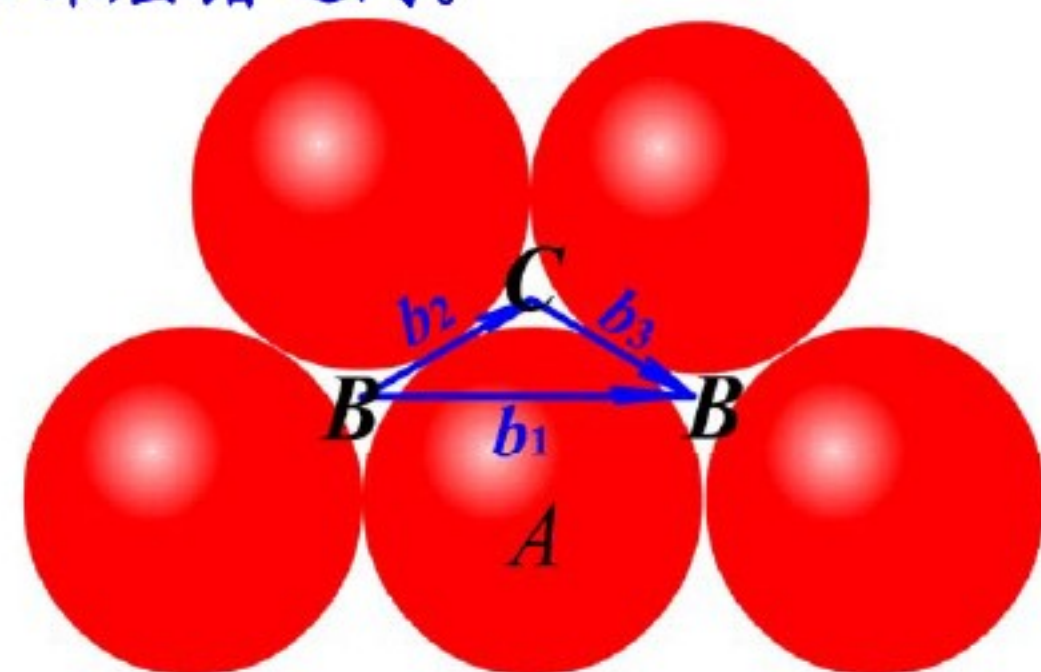
- 当层错只在某些晶面的局部区域内发生、并不贯穿整个晶体时，则层错区与完整晶体之间的边界是位错。这种位错的 b 小于点阵矢量，所以是不全位错。
- 不全位错引起的能量变化介于全位错和堆垛层错之间。

1) 肖克莱 (Shockley) 不全位错

FCC晶体中滑移面 (111) 上的一层 (A层) 原子。当全位错滑移时，A层上面的B层原子通过

$$\frac{a}{6}[11\bar{2}]$$

的滑移从B位置滑到相邻的B位置。而直接沿 $[110]$ 方向滑动会和相邻的A层原子发生显著的碰撞使晶体发生较大的局部畸变，能量显著增加。



$$b_1 = \frac{1}{2}[10\bar{1}] \quad b_2 = \frac{1}{6}[11\bar{2}] \quad b_3 = \frac{1}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$$

图 FCC中全位错滑移时原子的滑动路径

- 从能量上考虑，B层原子的有利滑动路径应该是分两步：
 第一步是通过 $\frac{a}{6}[11\bar{2}]$ 的滑移到达C位置
 第二步再通过 $\frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$ 的滑移从C位置滑移到相邻的B位置。

§ 1.3.2 线缺陷

注：面上的“●”代表前一个面上的原子，
“●”代表后一个面上的原子。

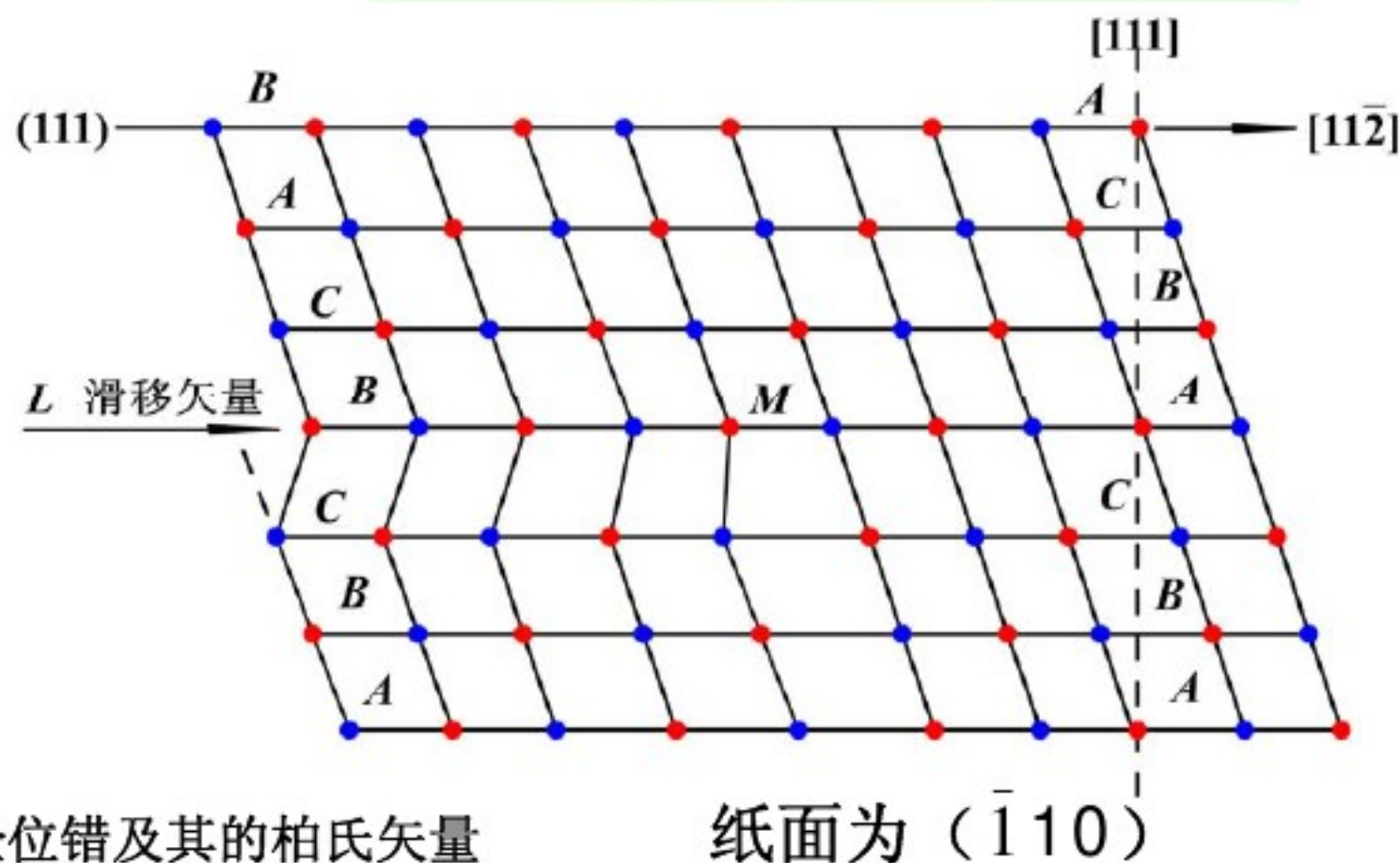
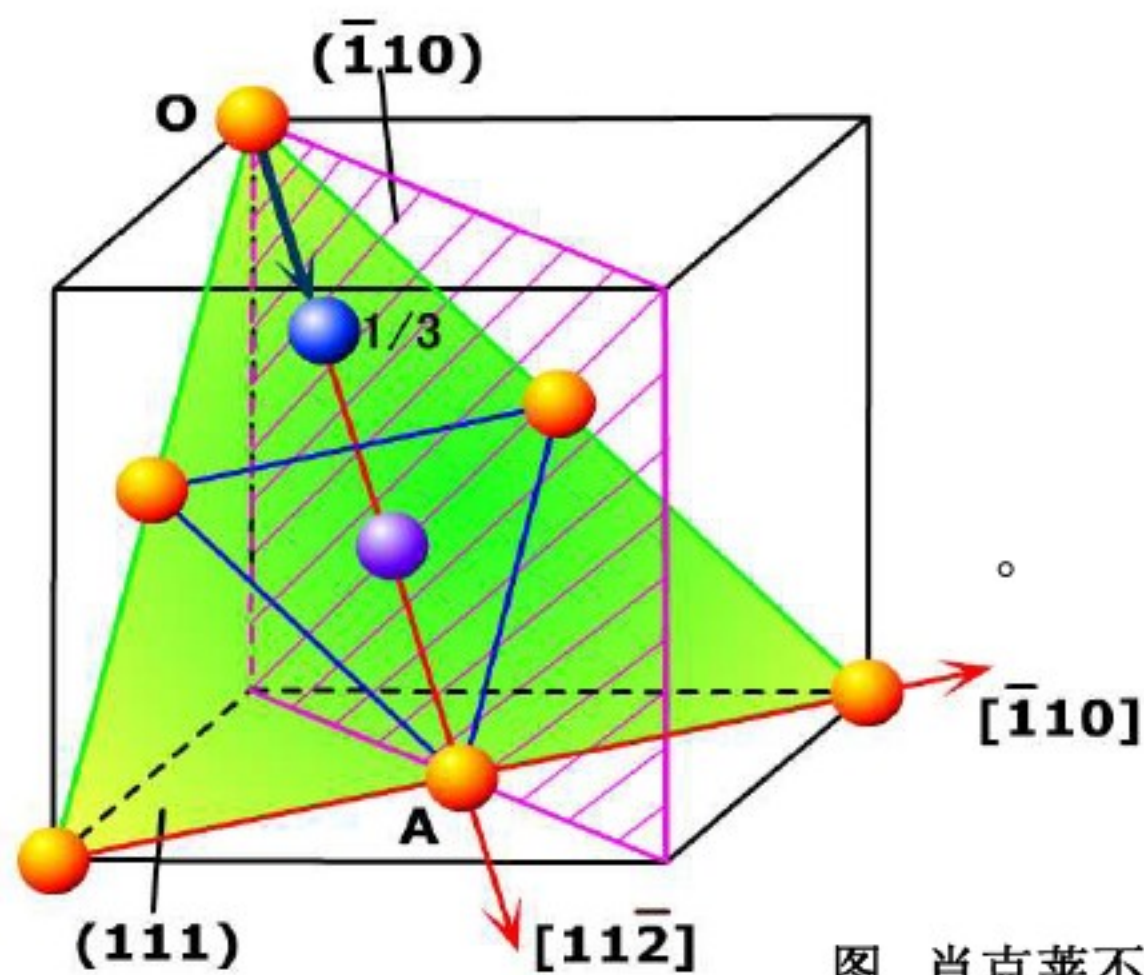


图 肖克莱不全位错及其的柏氏矢量

图示：ABCABC \rightarrow A \triangle B \triangle C ∇ B \triangle C \triangle A \triangle

$\begin{matrix} \text{A} \\ \text{C} \\ \text{B} \end{matrix}$

肖克莱不全位错：如果在FCC的 $\{111\}$ 面某区域发生 $\frac{a}{6}[11\bar{2}]$ 的滑移，在已滑移区与未滑移区的交界线M（垂直于纸面）即形成肖克莱不全位错。

§ 1.3.2 线缺陷

◆ Shockley 不全位错的特点：

- ① $b = \frac{a}{6} [11\bar{2}]$ ；
- ② $b \parallel$ 层错面（也是滑移面）；
- ③ 可以是刃型、螺型或混合型；
- ④ 位错线只能是平面曲线（层错是沿平面发生的）；
- ⑤ Shockley 不全位错只能在层错面上滑移。

§ 1.3.2 线缺陷

2) 弗兰克 (Frank) 不全位错

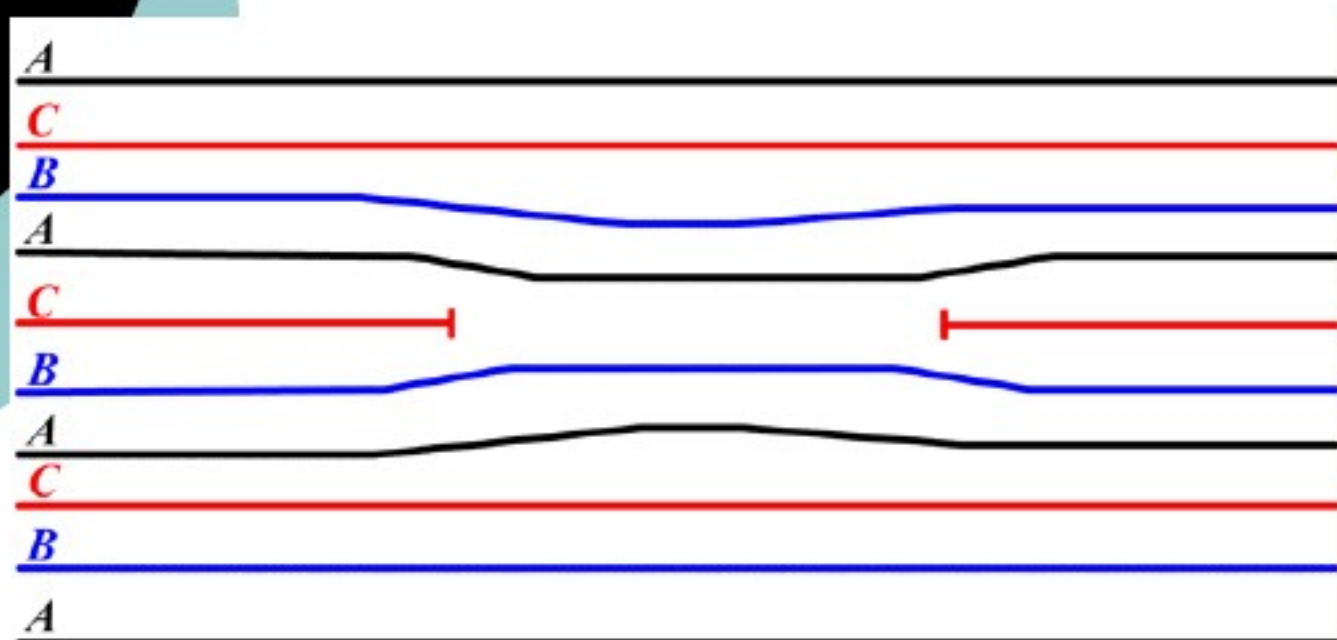


图 负弗兰克位错

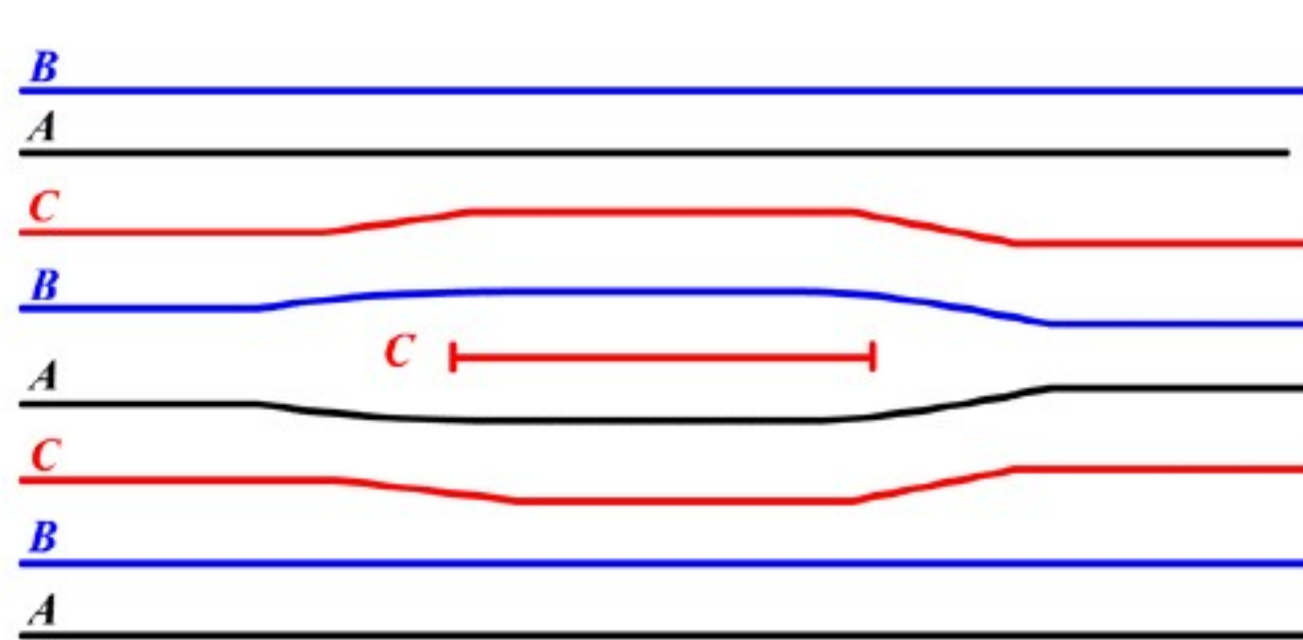


图 正弗兰克不全位错

弗兰克不全位错：如果在 $\{111\}$ 面抽出或插入形成的层错面与完整晶体的交界即形成弗兰克不全位错。

§ 1.3.2 线缺陷

◆ 弗兰克不全位错的特点：

① $b = \frac{a}{3} \langle 111 \rangle$ ；

② $b \perp$ 层错面 $\{111\}$ ；

③ Frank 不全位错不能滑移——固定位错——可以攀移。

§ 1.3.2 线缺陷

(4) 位错反应

- 位错反应：位错合并与分解。
- 实现位错反应必须满足以下条件：
 - 1) 几何条件：反应前各位错的柏氏矢量之和应等于反应后的柏氏矢量之和。

$$\sum b_{\text{前}} = \sum b_{\text{后}}$$

- 2) 能量条件：反应后各位错的总能量小于反应前的总能量。

$$\sum b_{\text{前}}^2 > \sum b_{\text{后}}^2$$

§ 1.3.2 线缺陷

○ 例：FCC晶体中

$$\frac{a}{6}[\bar{2}\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[121] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}10] \quad \text{判断能否进行?}$$

解：①几何条件：

$$\sum b_{\text{前}} = \frac{a}{6}[\bar{2}\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[121] = \frac{a}{6}[\bar{1}10] \quad \sum b_{\text{后}} = \frac{a}{6}[\bar{1}10]$$

$$\sum b_{\text{前}} = \sum b_{\text{后}}$$

②能量条件：

$$\sum b_{\text{前}}^2 = \left(\frac{\sqrt{6}a}{6}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{6}a}{6}\right)^2 = \frac{a^2}{3}$$

$$\sum b_{\text{后}}^2 = \left(\frac{\sqrt{2}a}{6}\right)^2 = \frac{a^2}{18}$$

$$\sum b_{\text{前}}^2 > \sum b_{\text{后}}^2$$

同时满足几何条件和能量条件，所以反应可以进行。



§ 1.3.2 线缺陷

(5) 离子晶体中的位错

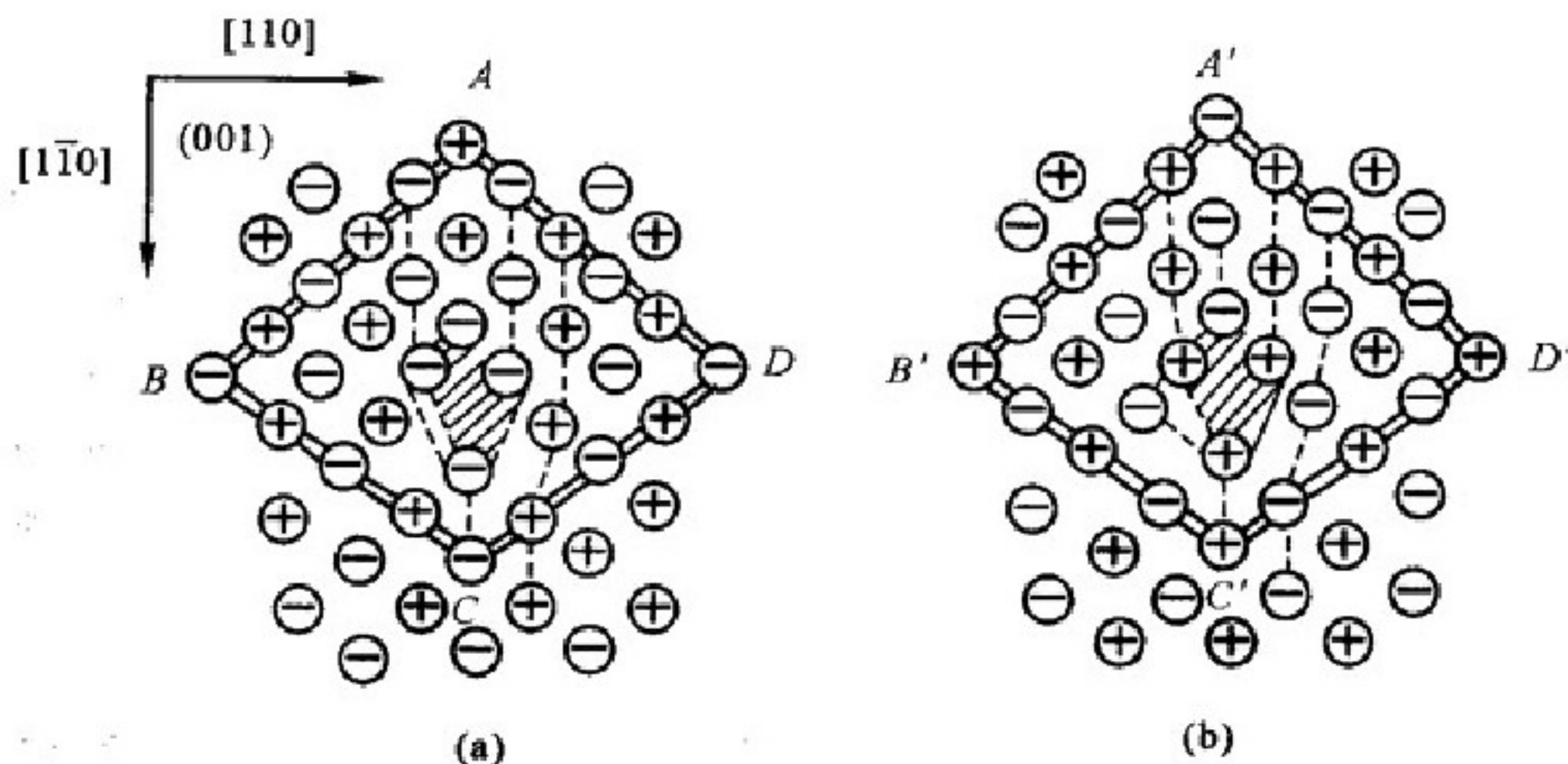


图 1-61 NaCl 中的刃型位错

Na⁺ 和 Cl⁻ 离子分别用 ⊕ 和 ⊖ 表示

(a) 初始的表面离子组态； (b) 去掉表面层后下一层（次表面层）的离子组态

§ 1.3.2 线缺陷

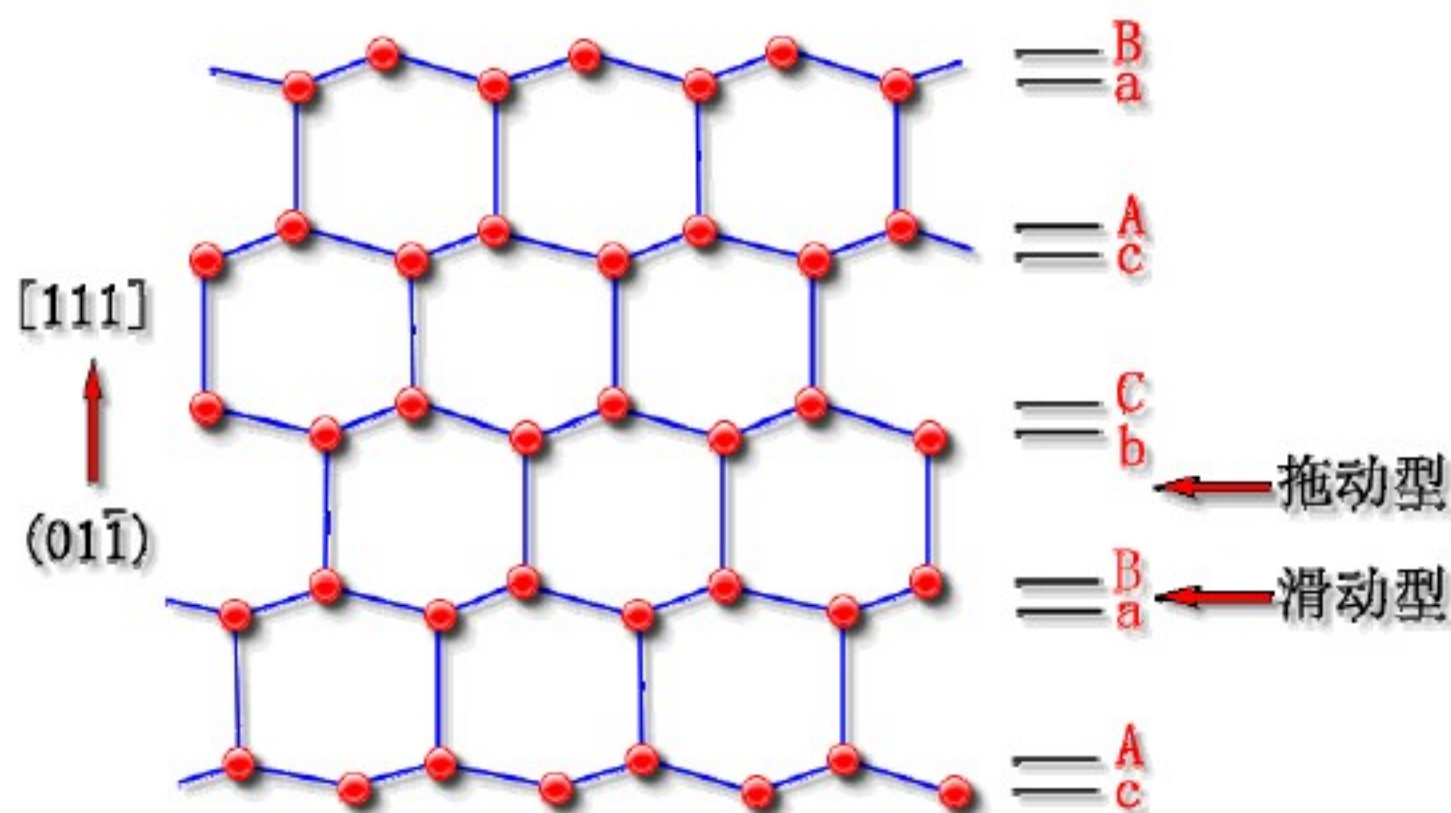
➤ 离子晶体中的位错的特点：

- 1) 滑移面未必是最密排面, 柏氏矢量仍为最短的点阵矢量;
- 2) 刃型位错附加半原子面是包括两个互补的附加半原子面;
- 3) 刃型位错在滑移面上滑移时, 位错露头处的有效电荷不改变符号。

§ 1.3.2 线缺陷

(6) 共价晶体中的位错

共价键具有明显的方向性和饱和性，使晶体的微观对称性下降，对于位错的特性有较大影响。



金刚石的原子在(110)面上的投影

§ 1.3.3 面缺陷

面缺陷

外表面

内表面

晶界

亚晶界

孪晶界

相界

堆垛层错

小角度晶界

对称倾斜晶界

扭转晶界

大角度晶界

§ 1.3.3 面缺陷

晶体材料大多为多晶状态存在的，多晶体中位向不同的相邻晶粒之间的界面被称为晶界，不同组成相间的界面又称为相界。

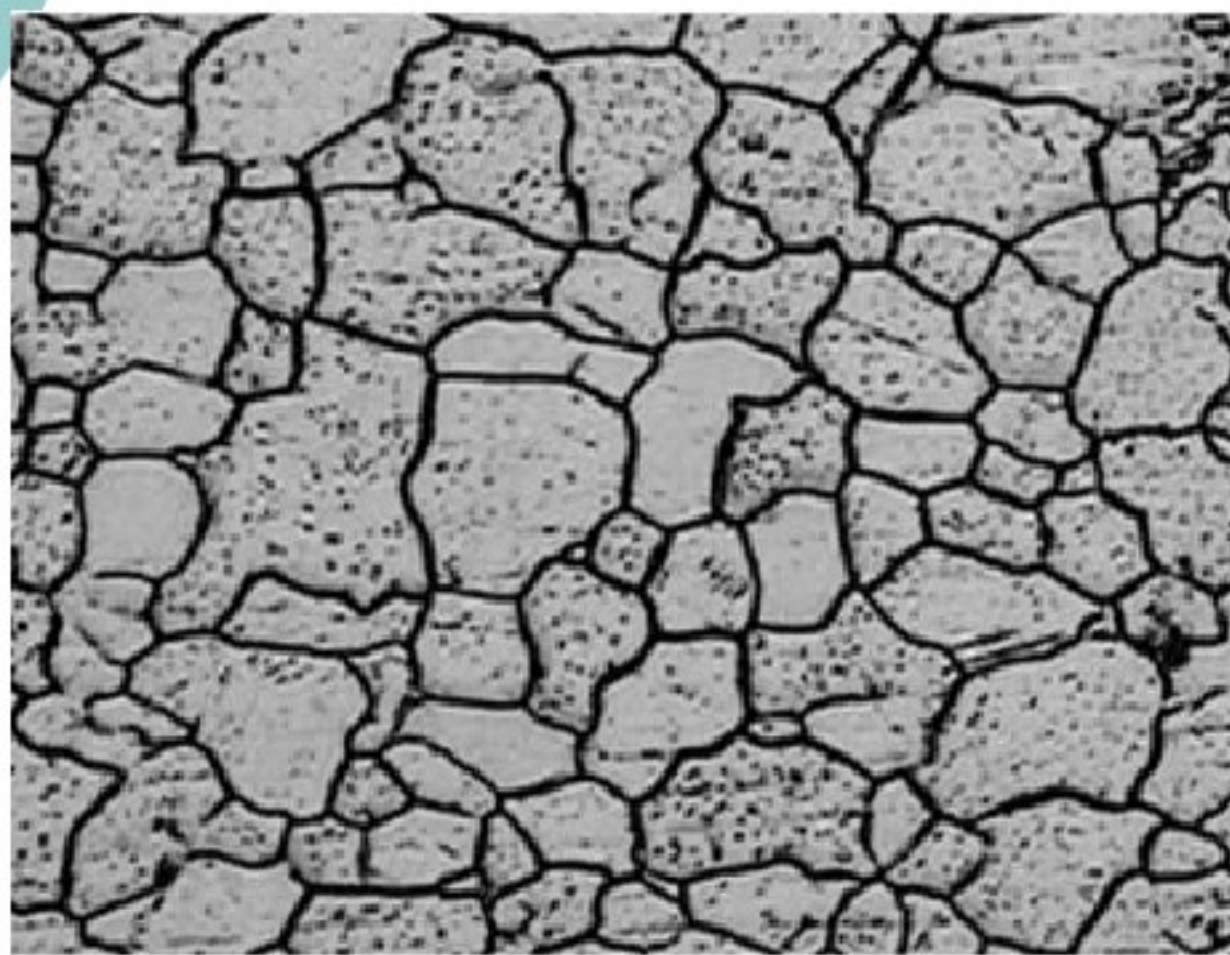


图 Mg-3Al-0.8Zn合金中的晶界

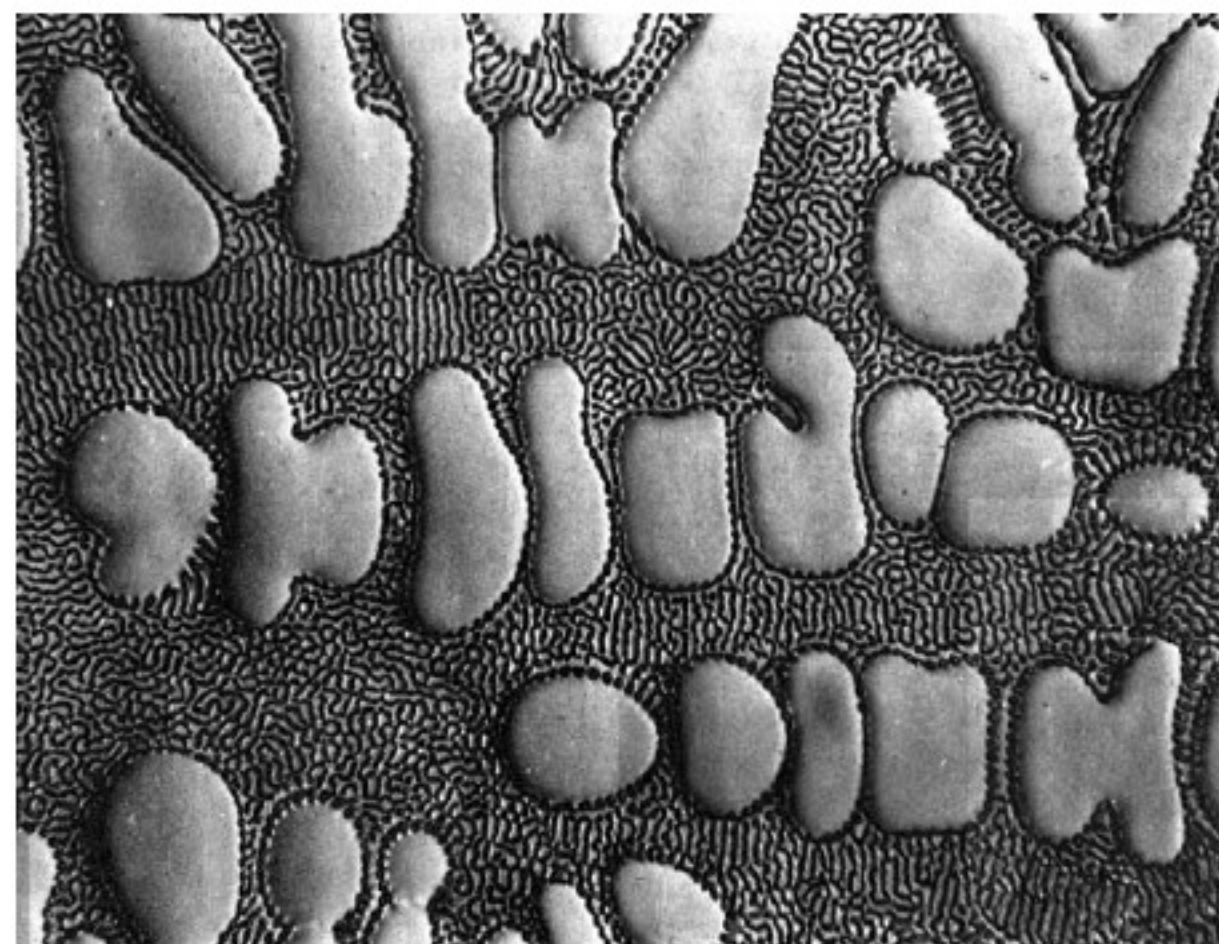


图 Pb-Sn合金中的相界

§ 1.3.3 面缺陷

1.3.3.1 晶界

类型：

①小角晶界： $\theta < 10^\circ$

②大角晶界： $\theta > 10^\circ$

(1) 小角晶界

- 亚晶界通常都属于小角晶界。
- 简单小角晶界通常有两种：
 - ①倾转晶界——由刃型位错构成
 - ②扭转晶界——由螺型位错构成

§ 1.3.3 面缺陷

1) 对称倾侧晶界

- 相邻晶粒各转 $\theta/2$,
- 由一系列垂直分布的同号刃型位错所组成。

➤ 位错间距 D 与柏氏矢量 b 之间的关系为：

$$D = |b| / 2 \sin(\theta/2)$$

当 θ 很小时, $\sin(\theta/2) \approx \theta/2$

因此该晶界上相邻的位错间距: $D = |b| / \theta$

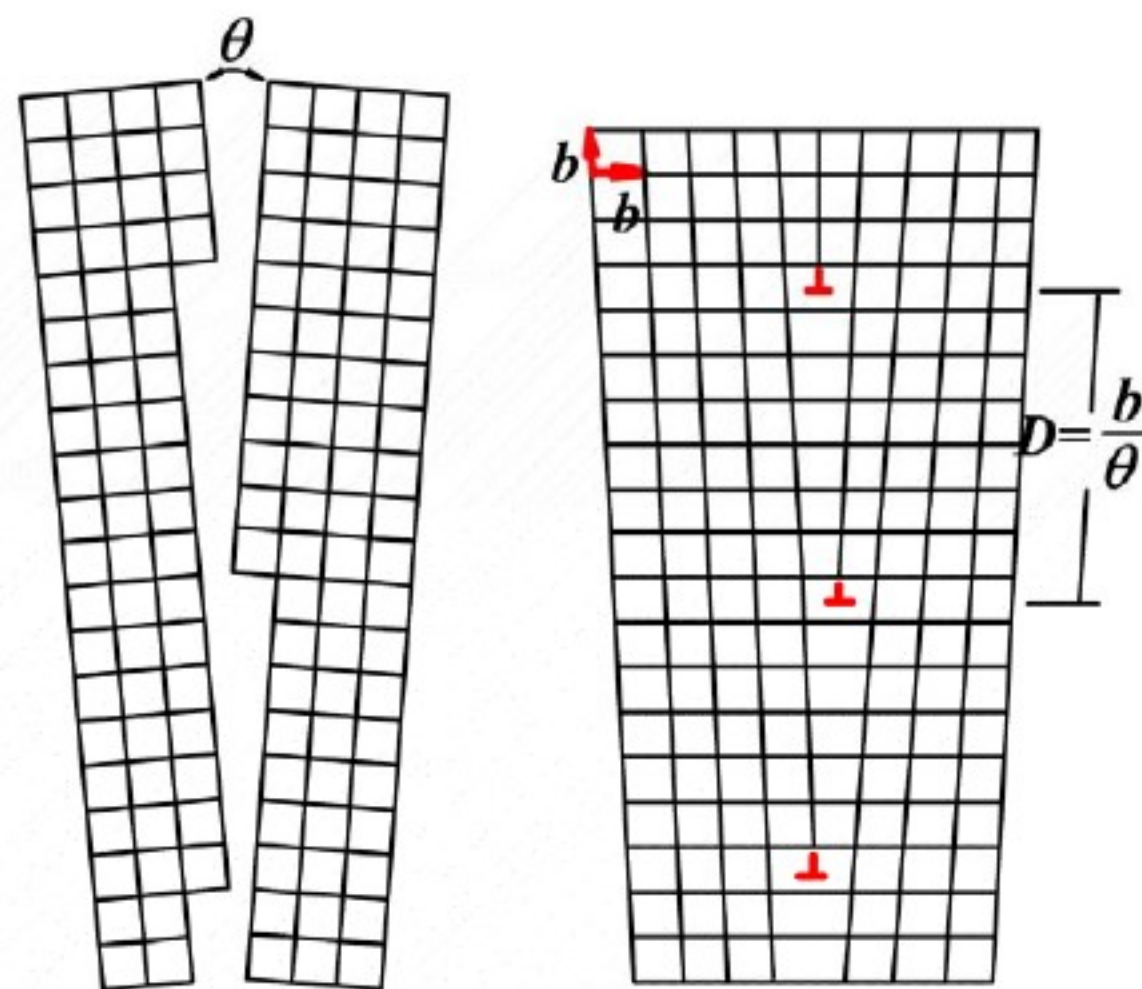


图 对称倾转晶界模型

§ 1.3.3 面缺陷

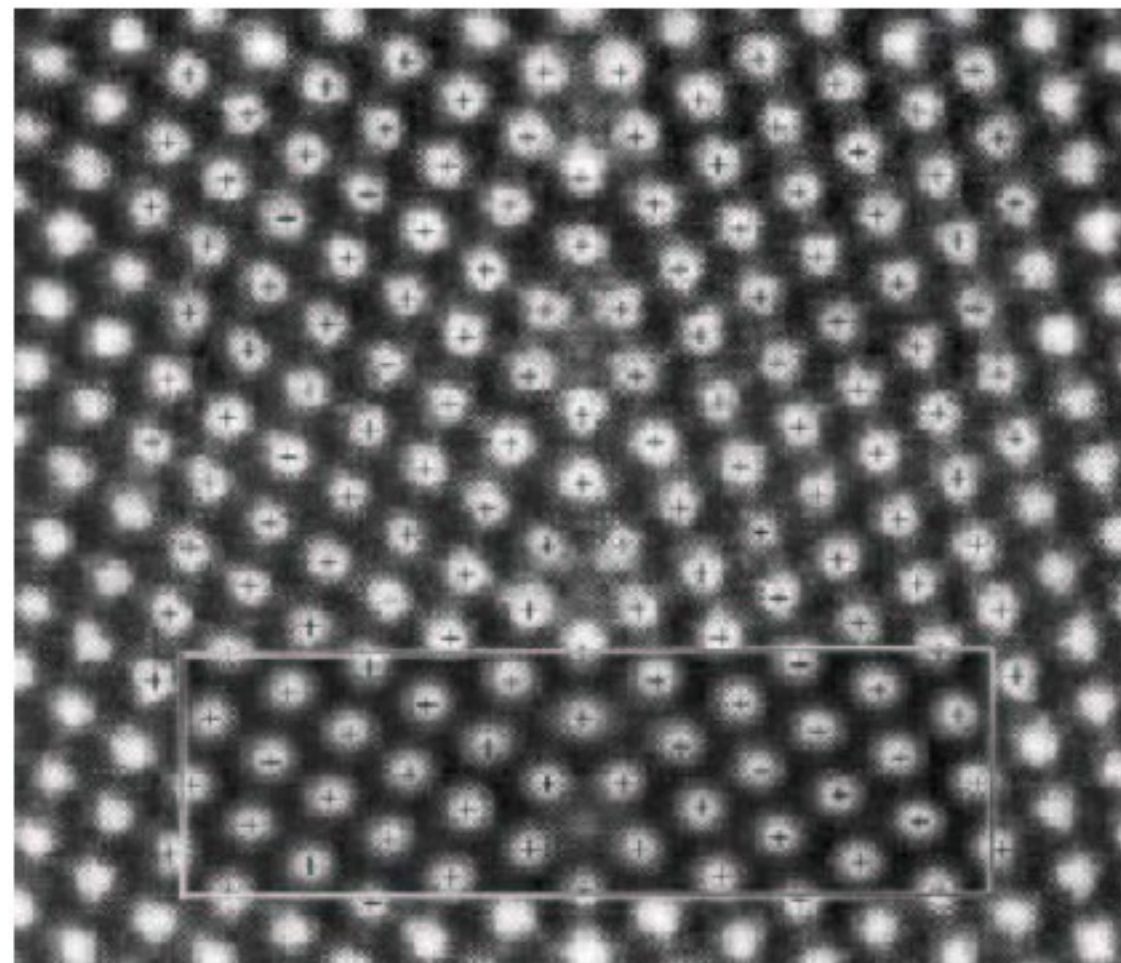
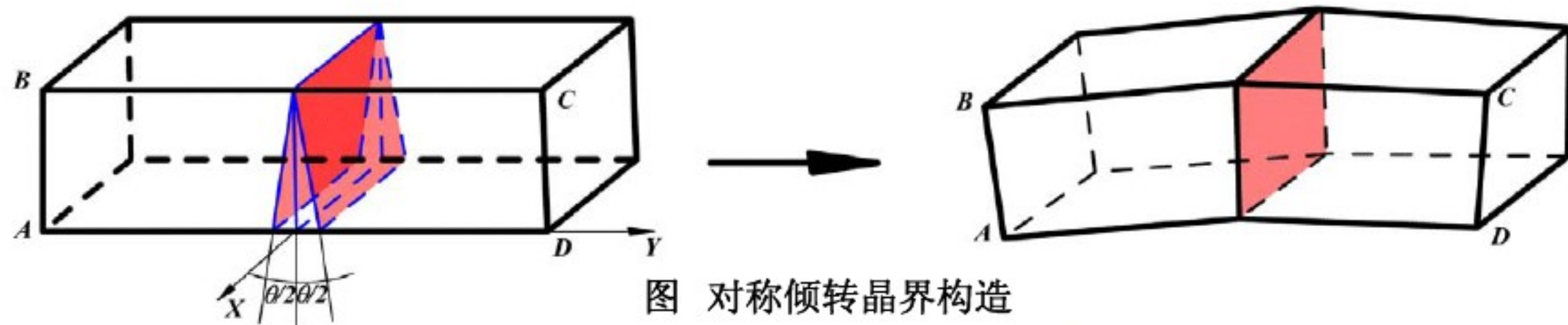


图 实验观察到的对称倾转晶界

§ 1.3.3 面缺陷

3) 扭转晶界

- 两晶粒以界面(图中(001)平面)为共同晶面, 但旋转了一定角度 θ ;
- 扭转界面是由两组交叉的螺旋位错线组成的, 一组是平行于[100]轴向, 另一组平行于[010]方向;
- 网格的间距D也满足关系式:

$$D = |b| / \theta$$

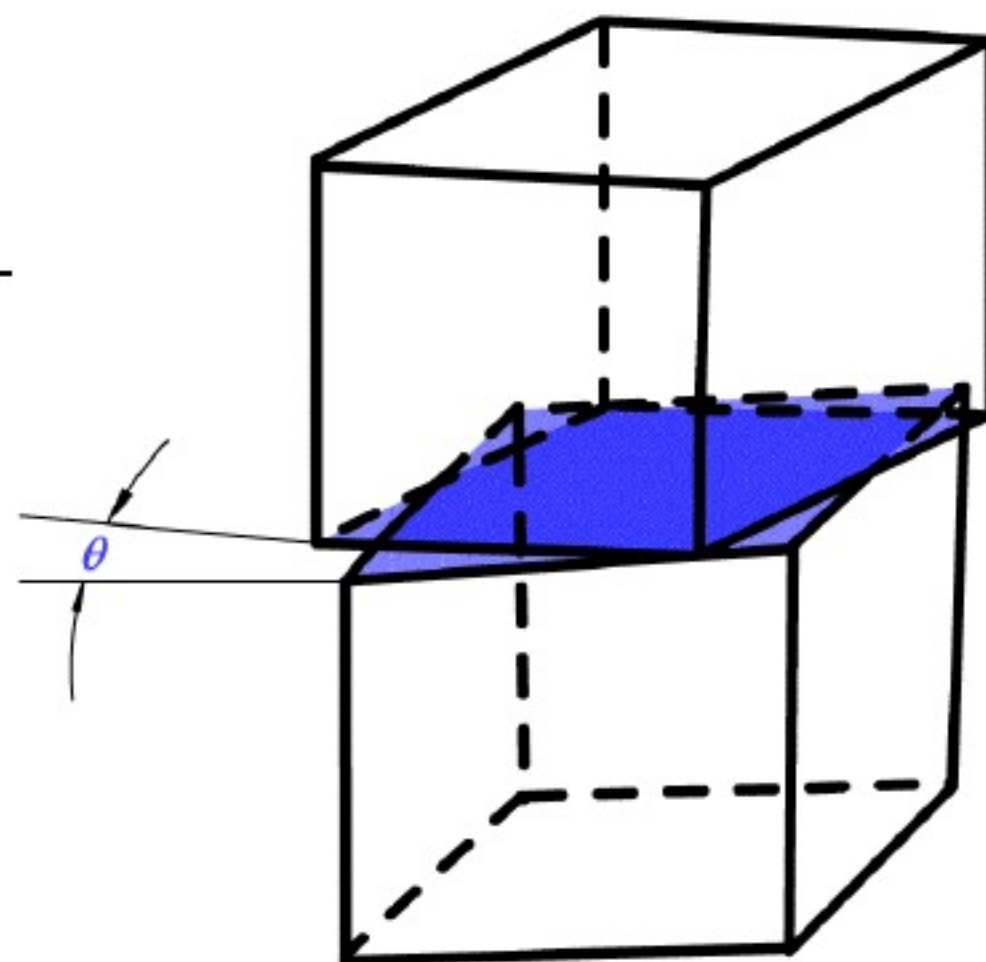


图 扭转晶界形成模型

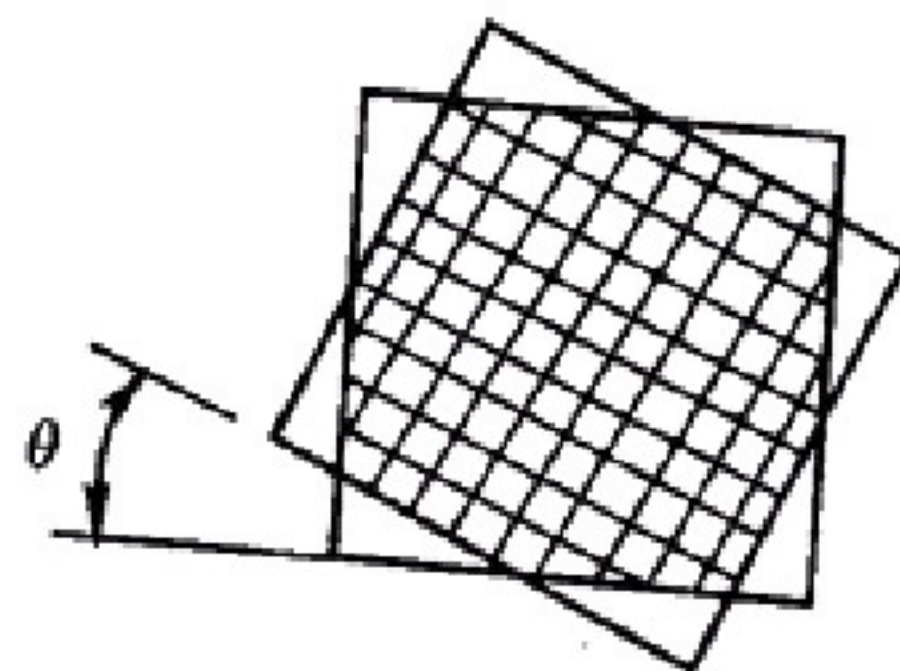


图 螺型位错交叉网络

§ 1.3.3 面缺陷

- 晶界两侧的原子位置在在位错位置不吻合，而其余部分仍然吻合。

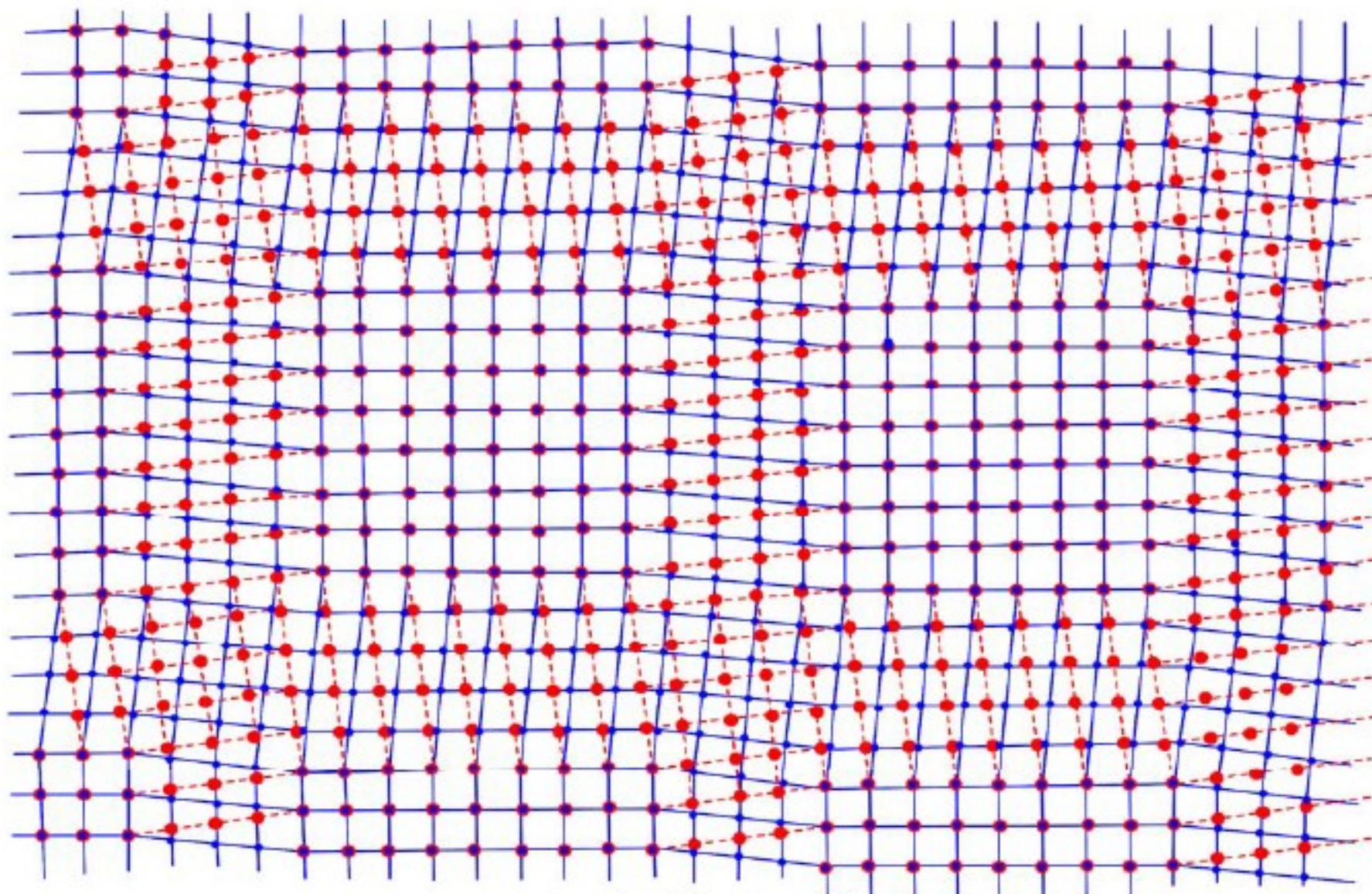


图 扭转晶界模型

图面为(100)面，●点代表晶界面下的原子，●点代表晶界面上的原子

§ 1.3.3 面缺陷

(2) 大角度晶界

➤ 大角晶界的模型比较复杂，原子排列不规则，不能用位错模型来描。

➤ 图表明取向不同的相邻晶粒的界面不是光滑的曲面，而是由不规则的台阶组成的。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。

➤ 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。

➤ 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。随着位向差的增大，晶界上原子紊乱程度增加。

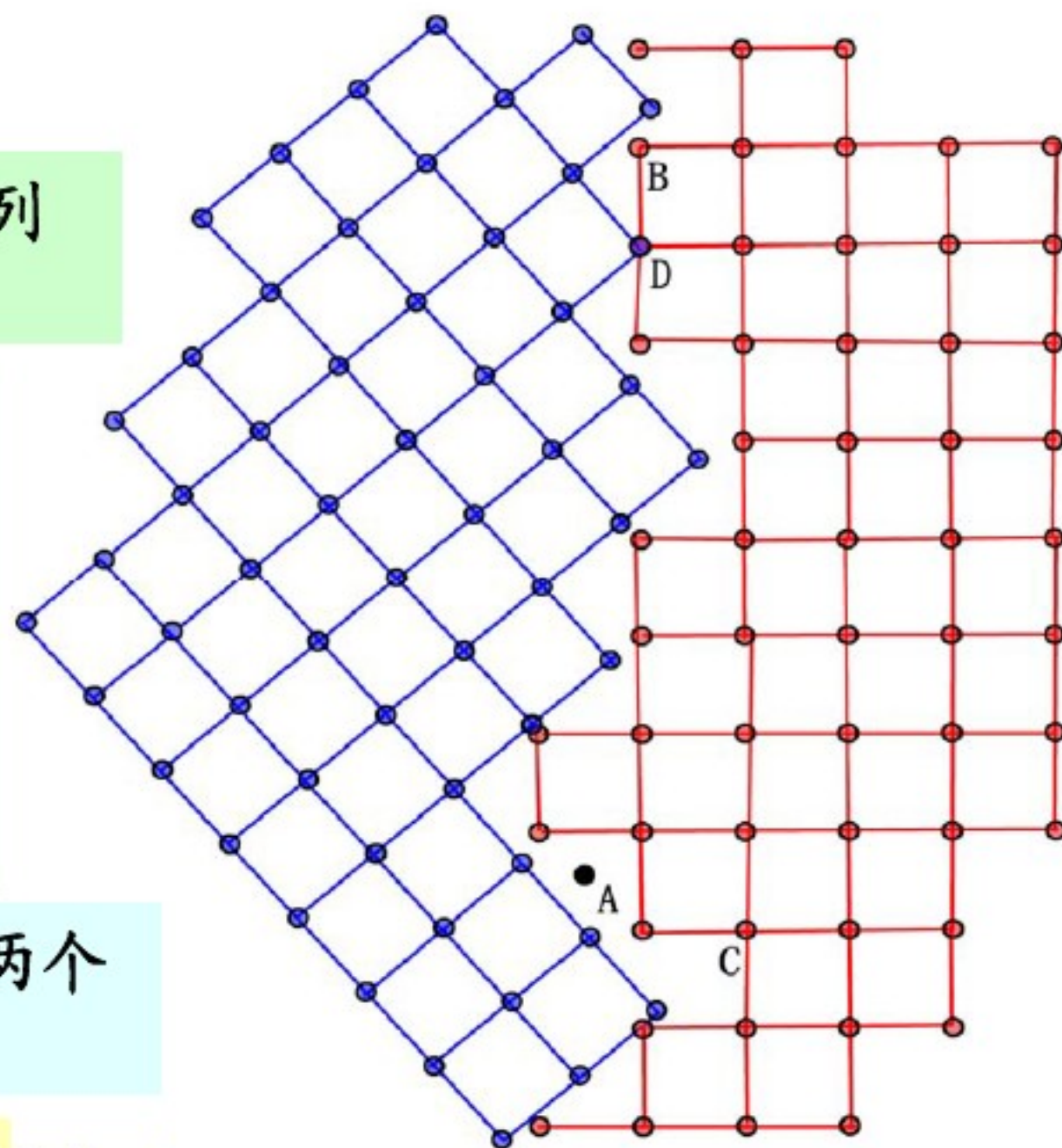


图 大角晶界模型

§ 1.3.3 面缺陷

◆ “重合位置点阵”模型

-----设想两晶粒的点阵彼此通过晶界向对方延伸，则其中一些原子将出现有规律的相互重合。这些原子重合位置组成了比原来晶体点阵大的新点阵。

➤ 图中，每17个原子即有一个是重合位置，故重合位置点阵密度为 $1/17$ 或称为 $1/17$ 重合位置点阵。

➤ 重合位置多少，取决于两个晶粒的位向差。

➤ 一方面晶界两侧晶粒趋向于获得高密度重合位置点阵的位向关系，另一方面晶界面趋向于与重合位置点阵的密排面相重合。

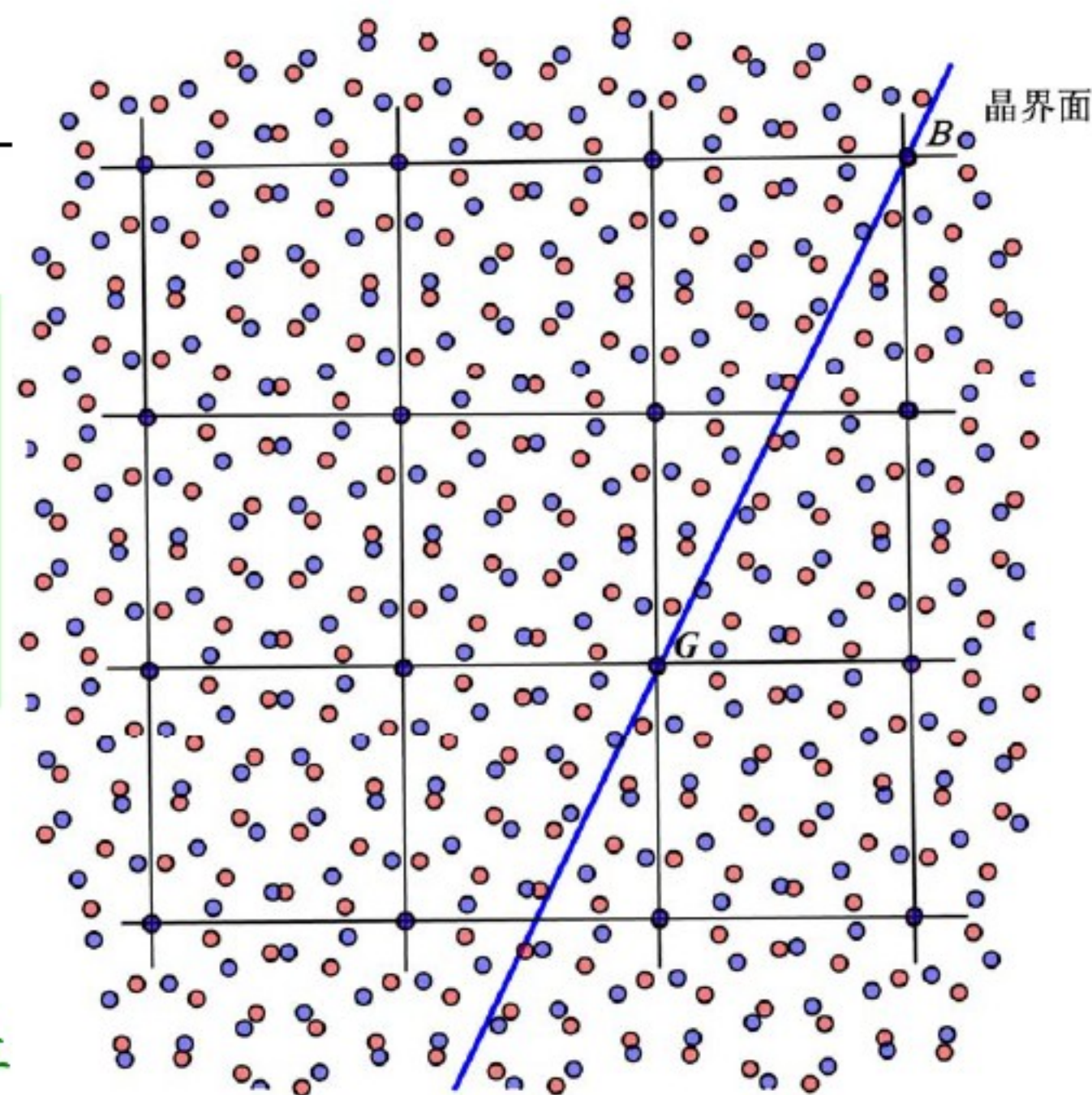


图 重合位置点阵示意图

§ 1.3.3 面缺陷

○ 小角度晶界特点

- $\theta < 10^\circ$
- 由位错构成
- 位错密度 \uparrow - 位向差 \uparrow - 晶格畸变 \uparrow - 晶界能 \uparrow
- 位错密度 - 决定位向差与晶界能
- 位错类型与排列方式 - 决定小角晶界的类型

○ 大角度晶界特点

- 10° 以上，一般在 $30^\circ \sim 40^\circ$

重合点阵模型

重合点阵+台阶模型

重合点阵+台阶+小角晶界模型

§ 1.3.3 面缺陷

(3) 界面能(晶界能)

——形成单位面积晶界时所增加的能量。

➤ 小角晶界能与相邻两晶粒之间位向差有关,随着位向差的增大而提高。

$$\gamma = r_0 \theta (A - \ln \theta)$$

➤ 大角晶界能与晶粒之间位向差无关,大体为定值,约为0.25~1.0J/m²。

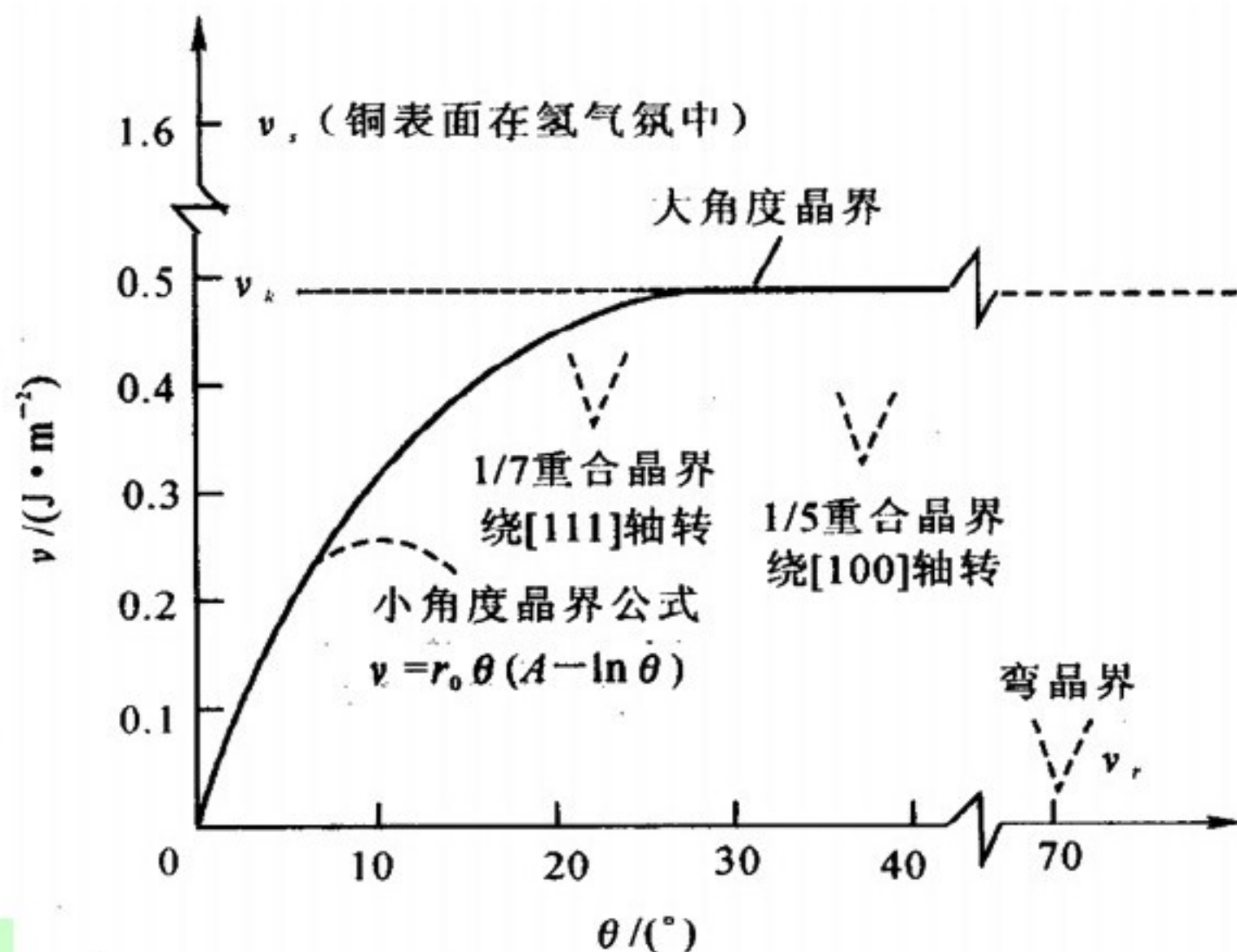
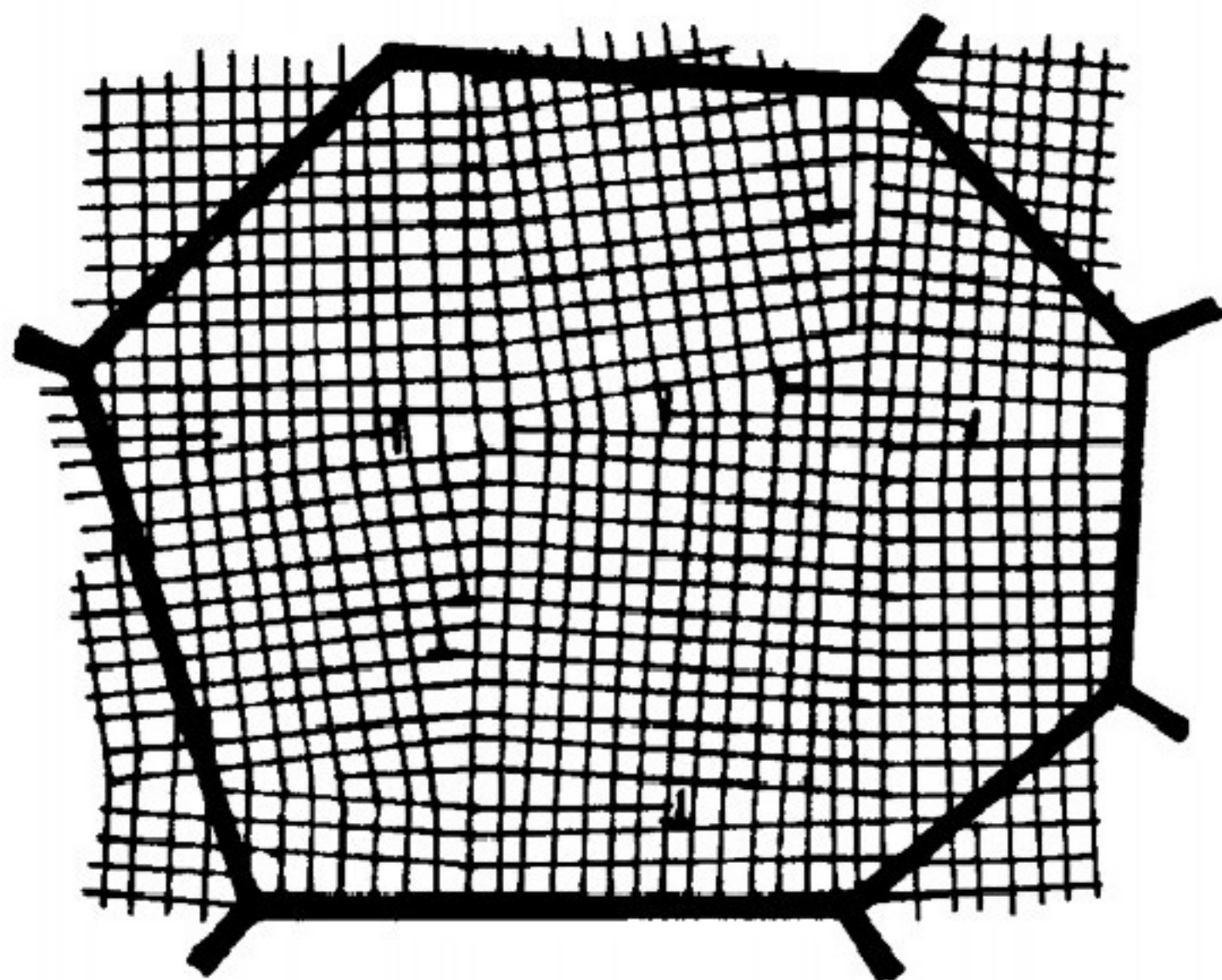


图 1-68 铜的不同类型界面的界面能

§ 1.3.3 面缺陷

1.3.3.2 亚晶界

- 在多晶体中或一个晶粒内，原子排列不规整，会出现位向差很小(通常小于 1°)的亚结构，如右图。
- 各亚结构之间的交界称为**亚晶界**，属于**小角晶界**。



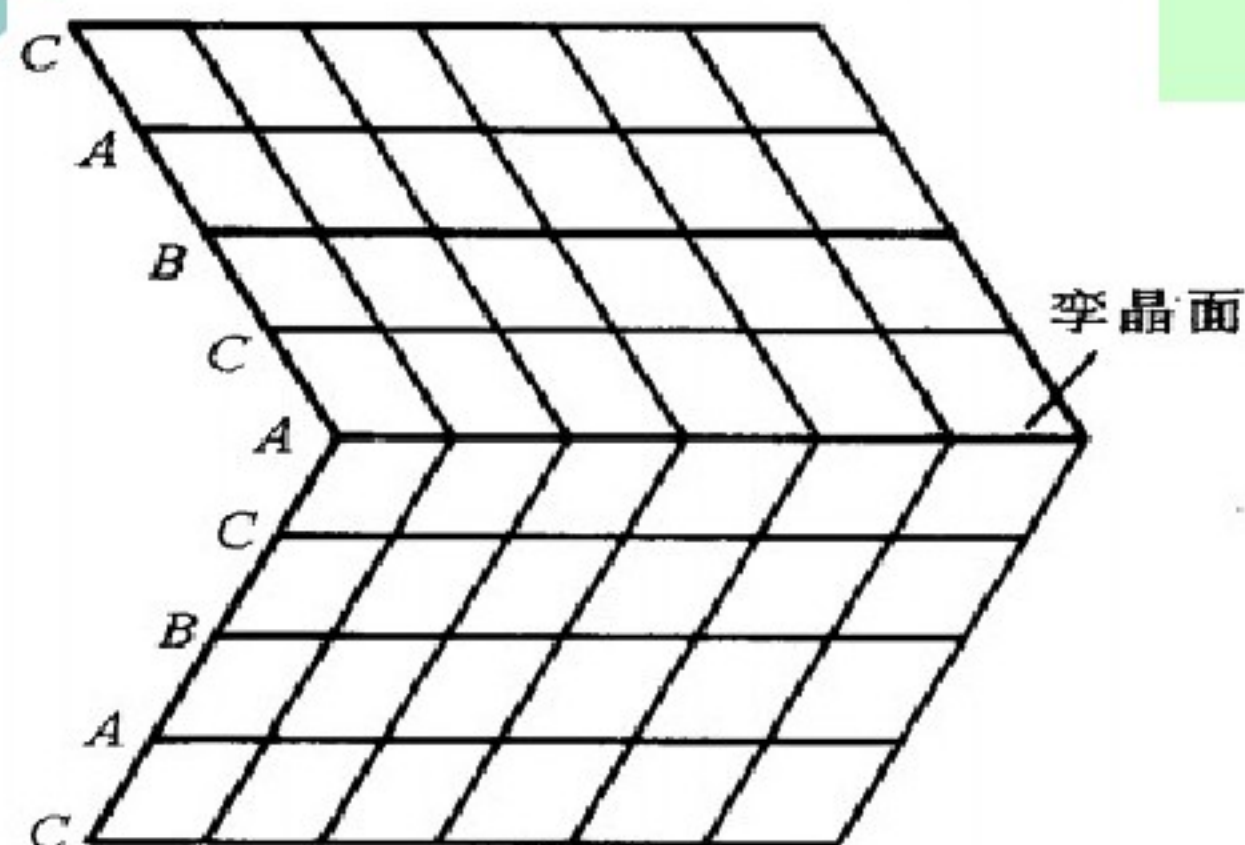
金属晶粒内的结构示意图

§ 1.3.3 面缺陷

1.3.3.3 孪晶界和相界

(1) 孪晶界

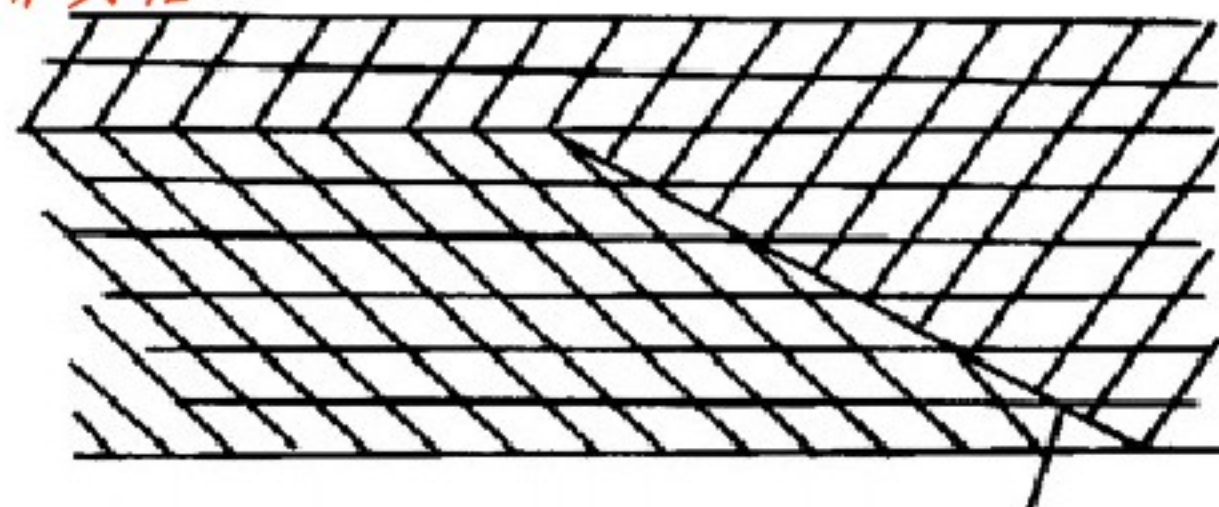
- 两晶粒沿公共晶面形成镜面对称关系
- 孪晶：



(a)

孪晶界点阵完全重合 - **共格**

孪晶界点阵完全不重合 - **非共格**



非共格晶界

(b)

图 1-70 孪晶界

(a) 共格孪晶界； (b) 非共格孪晶界

§ 1.3.3 面缺陷

(2) 相界

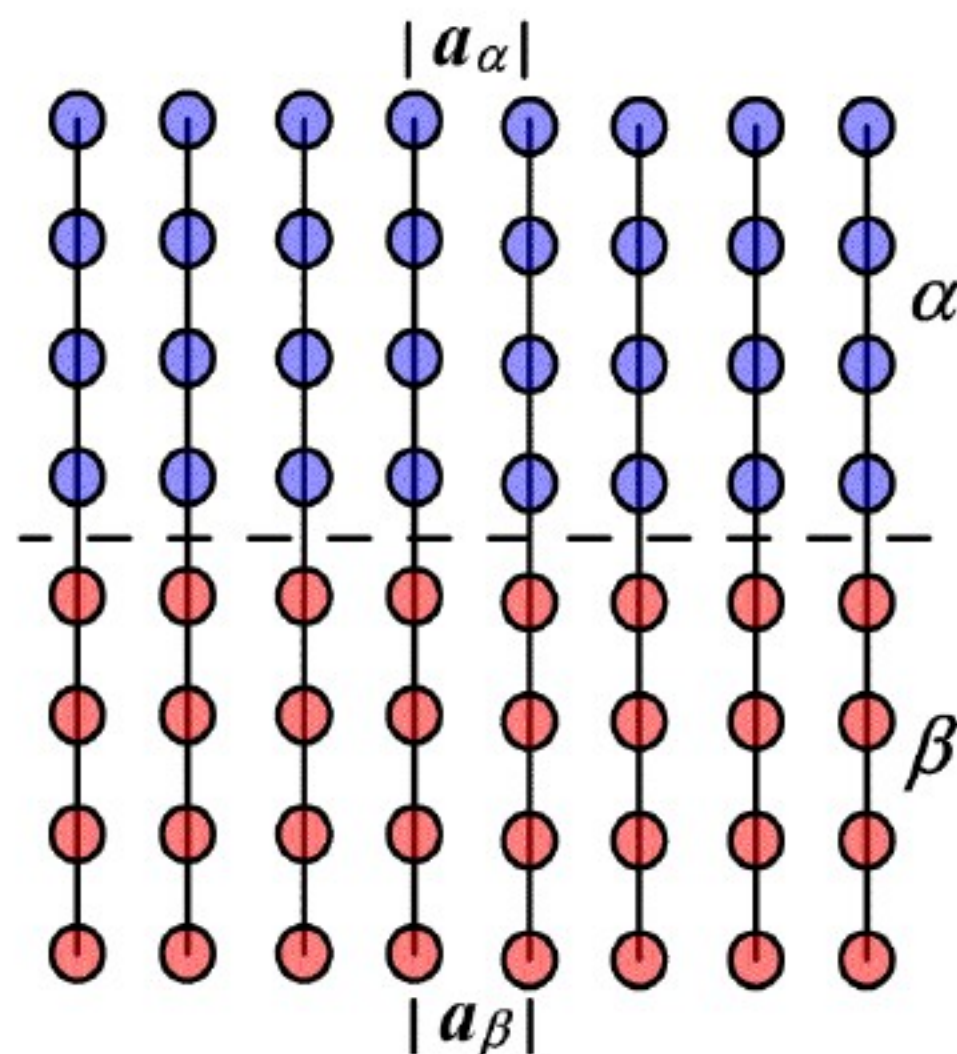
➤ 相邻两相之间的界面

➤ 分类

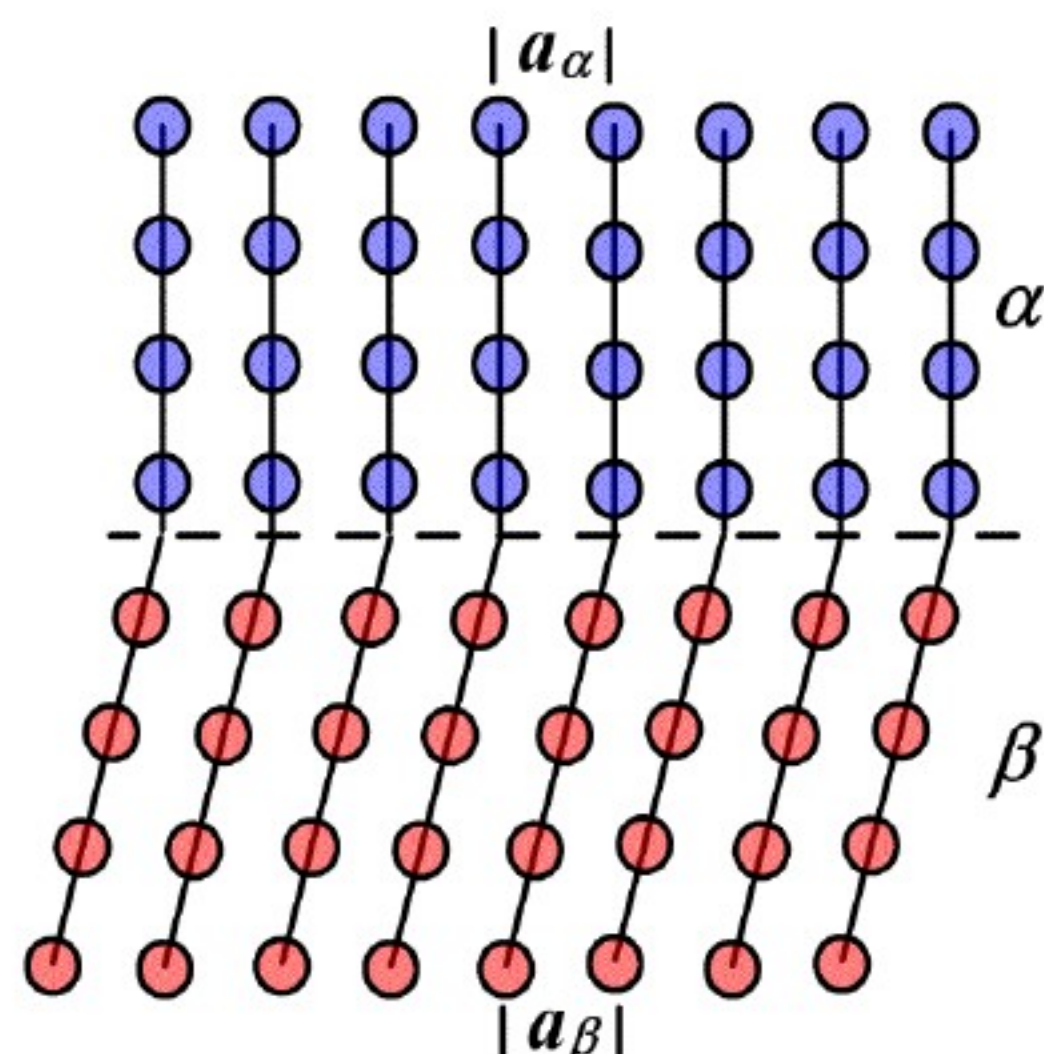
共格—
相界点阵完全重合。

半共格—
相界点阵基本重合—
部分共格+位错。

非共格—
相界点阵完全不重合。



a. 两相晶体结构相同



b. 两相晶体结构不同

图 无应变的共格相界

§ 1.3.3 面缺陷

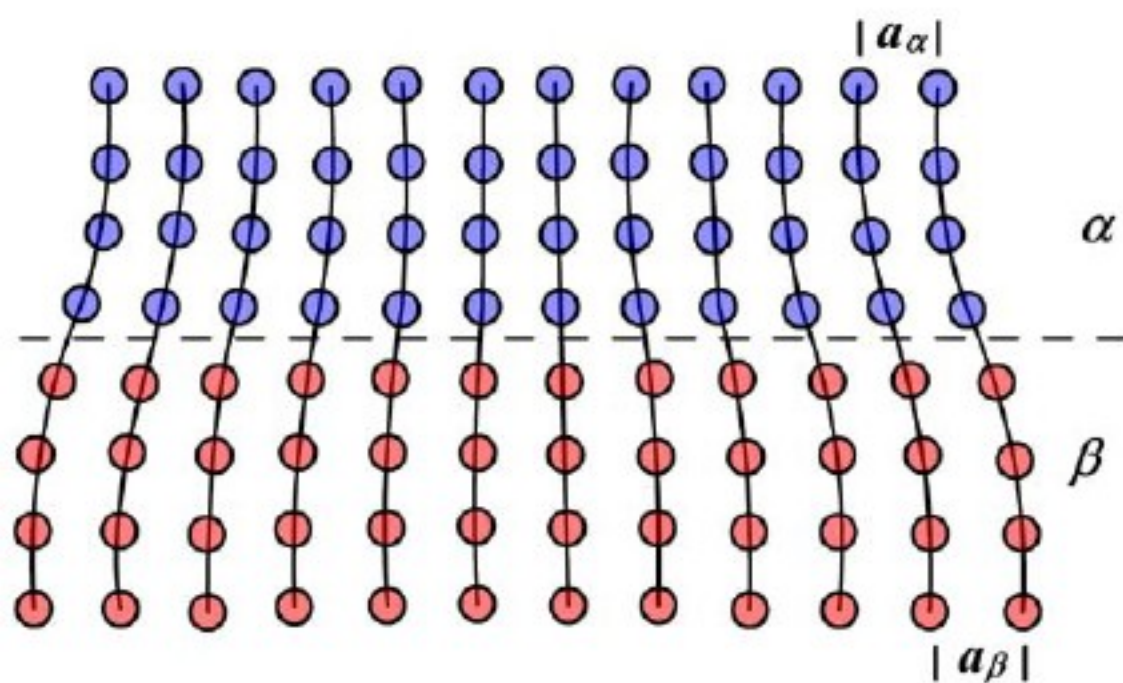


图 有应变的共格相界

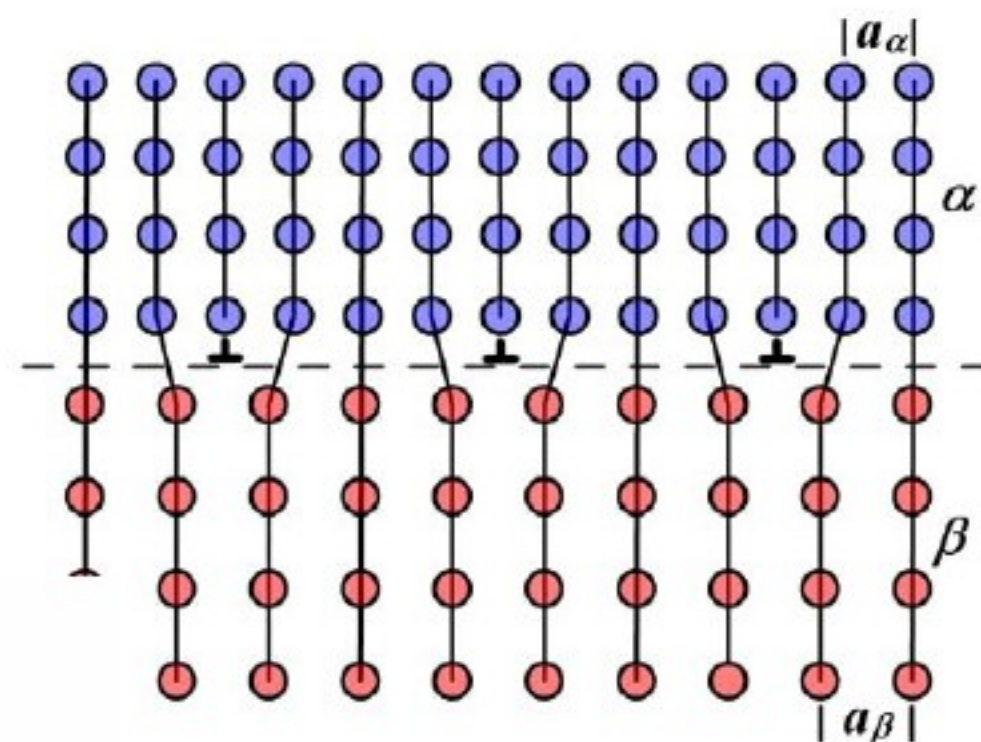


图 半共格相界

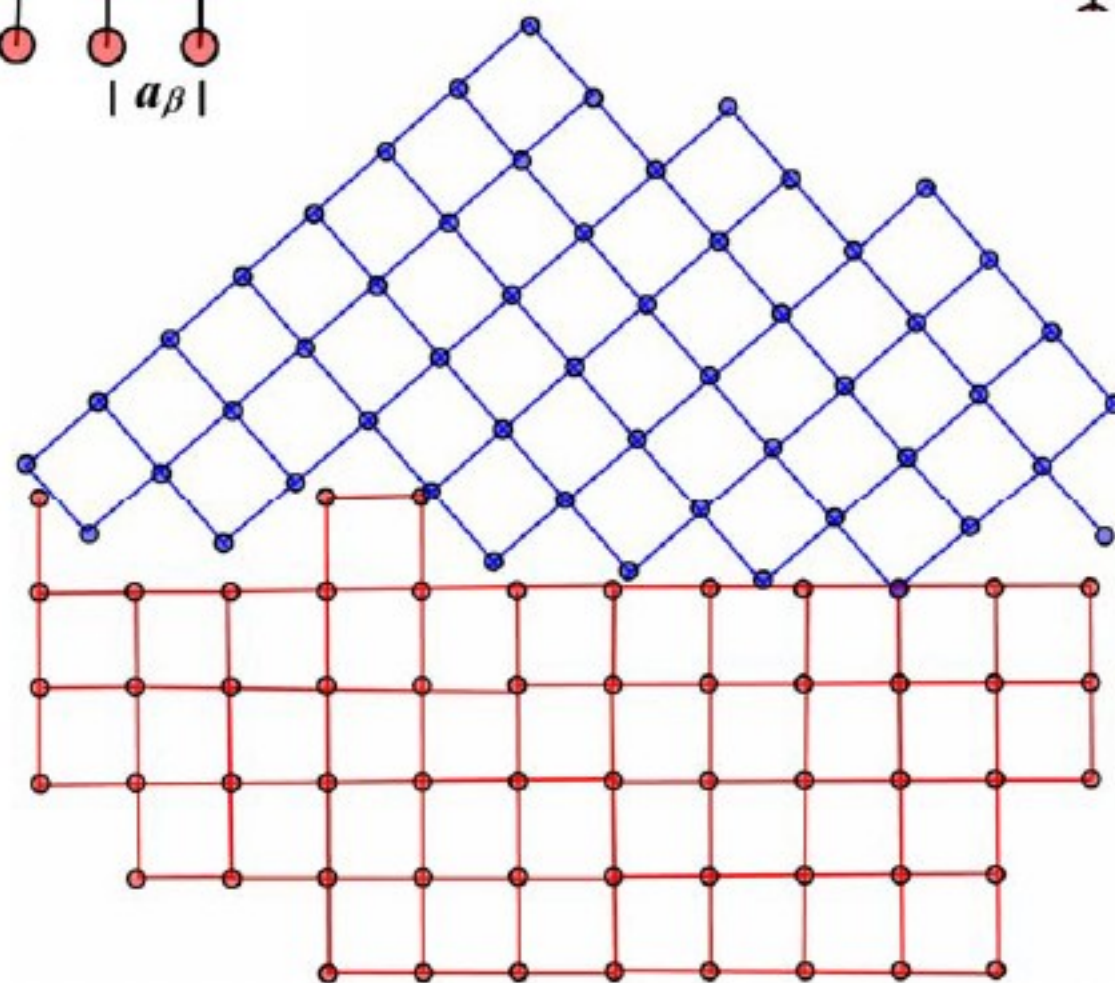


图 非共格界面

§ 1.3.3 面缺陷

◆ 晶界特点

- 1. 晶界 - 畸变 - 晶界能 - 向低能量状态转化 - 晶粒长大、晶界变直 - 晶界面积减小
- 2. 阻碍位错运动 - $\sigma_b \uparrow$ - 细晶强化
- 3. 位错、空位等缺陷多 - 晶界扩散速度高
- 4. 晶界能量高、结构复杂 - 容易满足固态相变的条件 - 固态相变首先发生地
- 5. 化学稳定性差 - 晶界容易受腐蚀
- 6. 微量元素、杂质富集