



# 材料科学基础（一）

上海大学材料学院  
史文



# 晶体结构理论

第一章：晶体学基础

第二章：固体材料的结构

第三章：晶体的缺陷

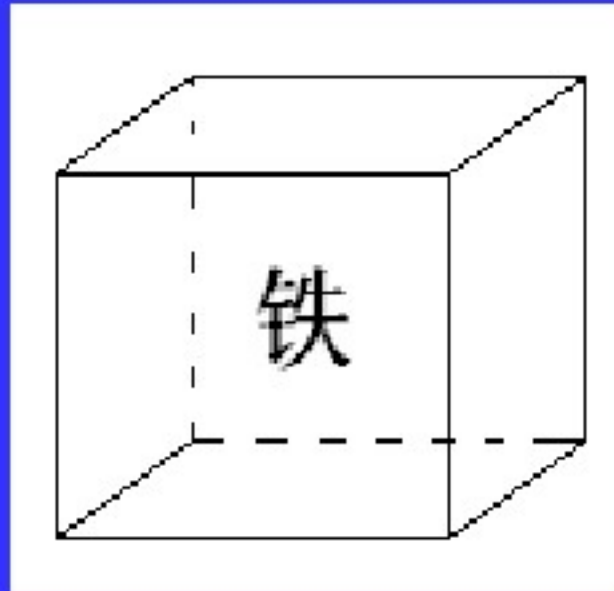
# 强度理论

第七章：晶体的塑性变形

第八章：回复与再结晶

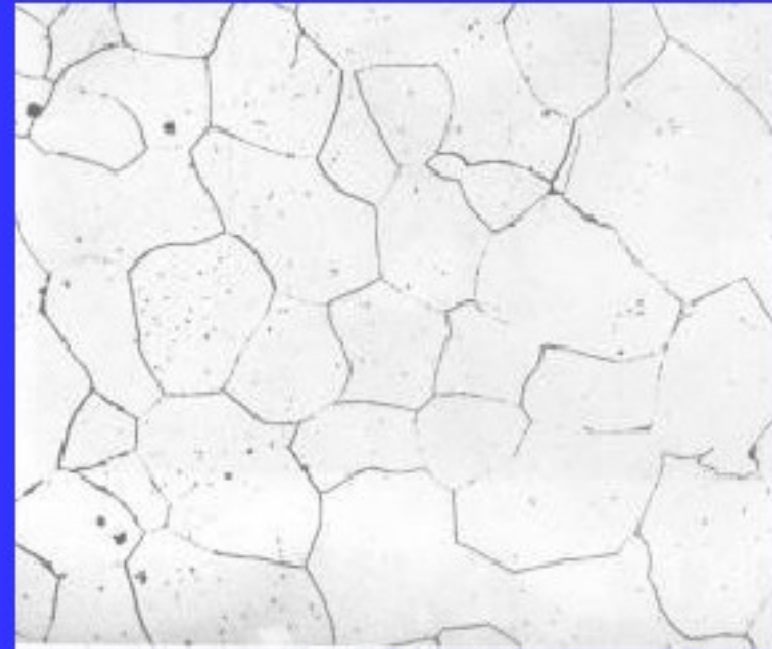
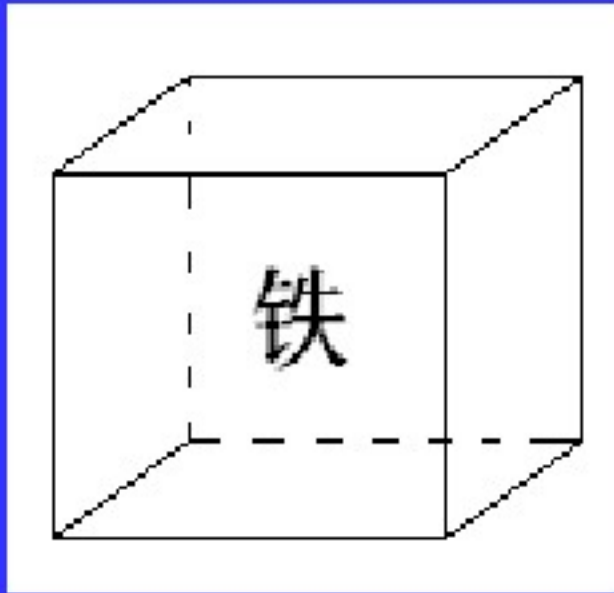


# • 晶体结构理论





# • 晶体结构理论

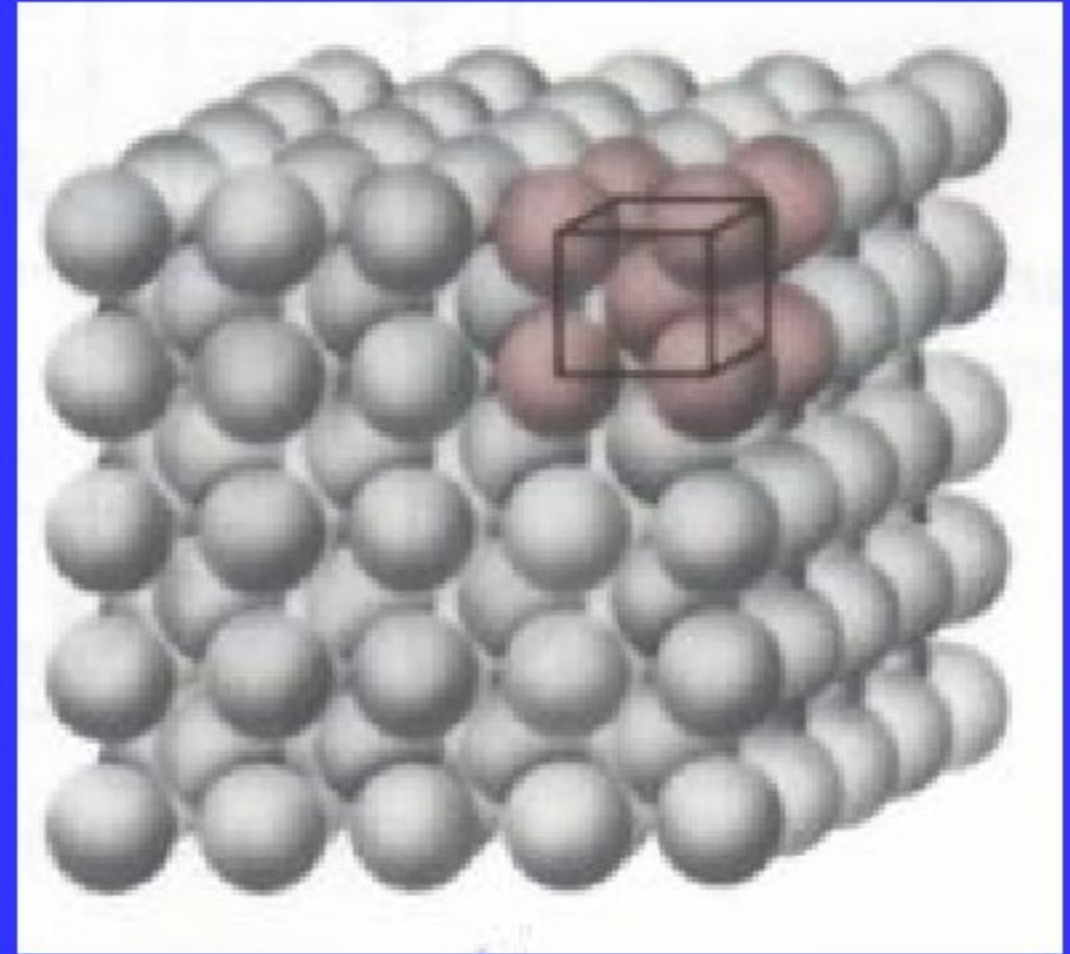
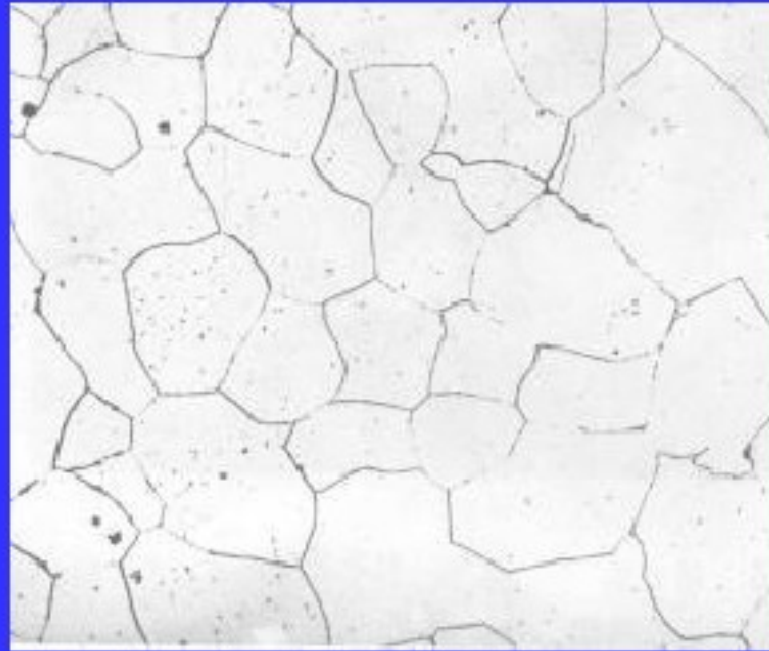
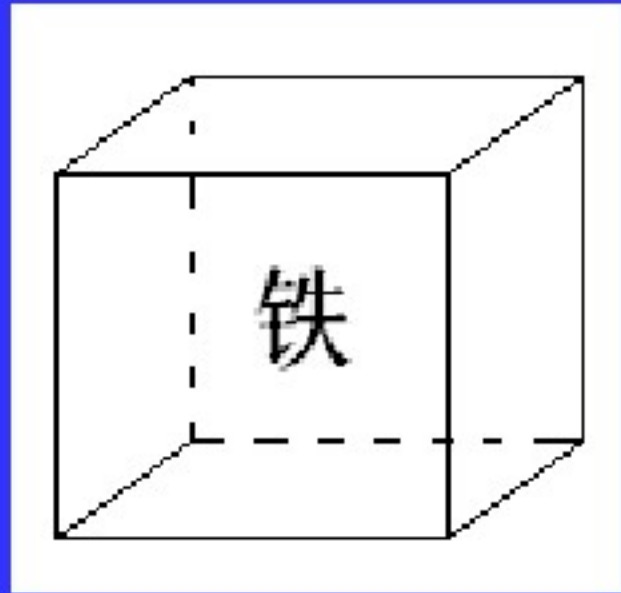


放大1000倍——组织





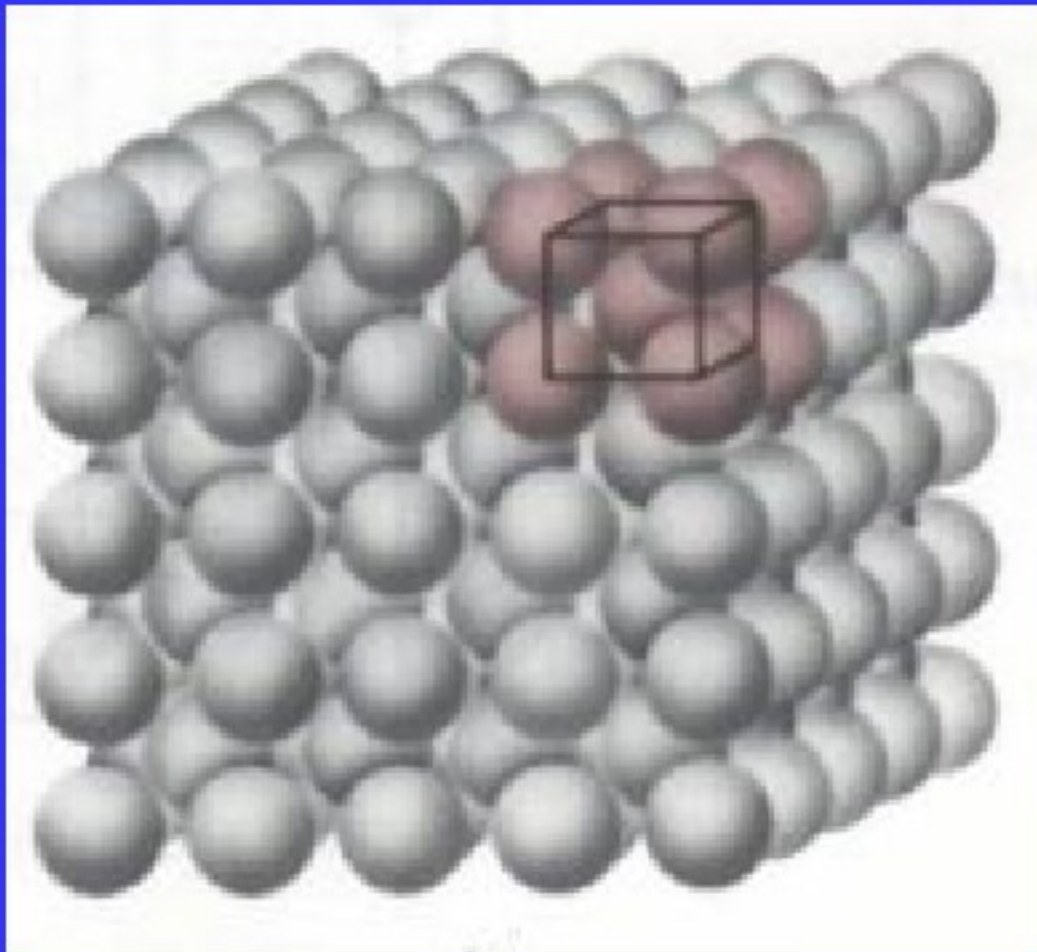
# • 晶体结构理论



再放大1000倍——结构（原子排列）



# • 晶体结构理论



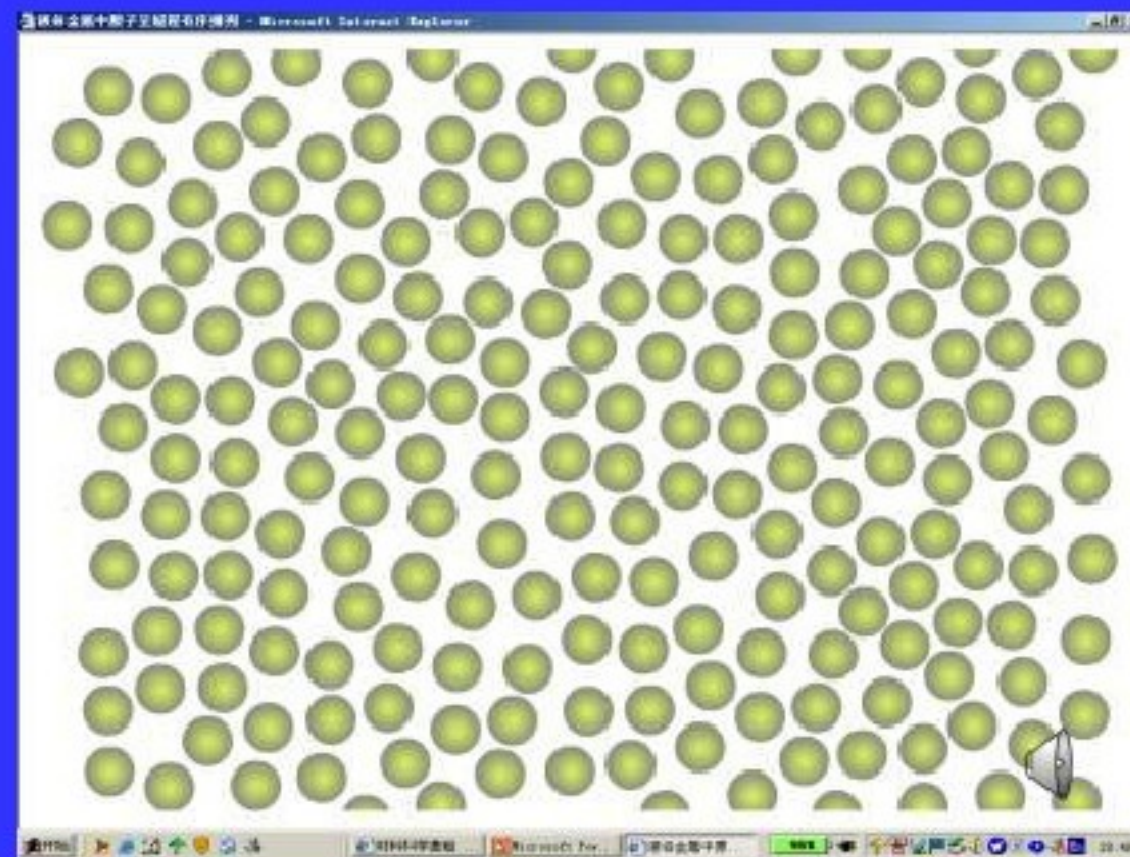
原子排列的规则性——晶体结构





# • 晶体结构理论

晶体与非晶体的差异：  
结构差异（原子排列）







# • 晶体结构理论

## 晶体与非晶体的差异

性能差异：各相异性/各相同性

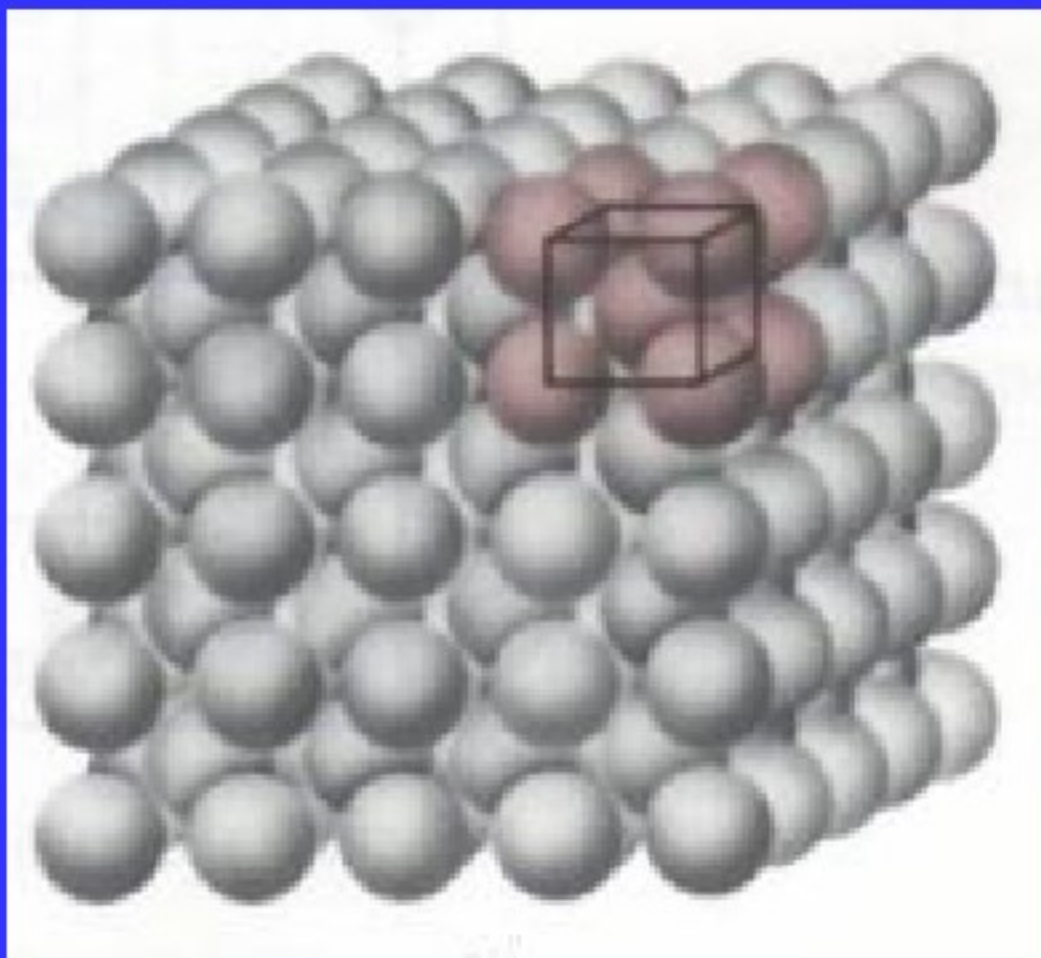
确定的熔点或凝固点

金属	最大弹性模量(MPa)	晶向	最小弹性模量(MPa)	晶向
Cu	190000	[111]	66700	[100]
Al	75500	[111]	62800	[100]
Ag	115000	[111]	43200	[100]
$\alpha$ -Fe	284000	[111]	132000	[100]
Au	112000	[111]	41200	[100]

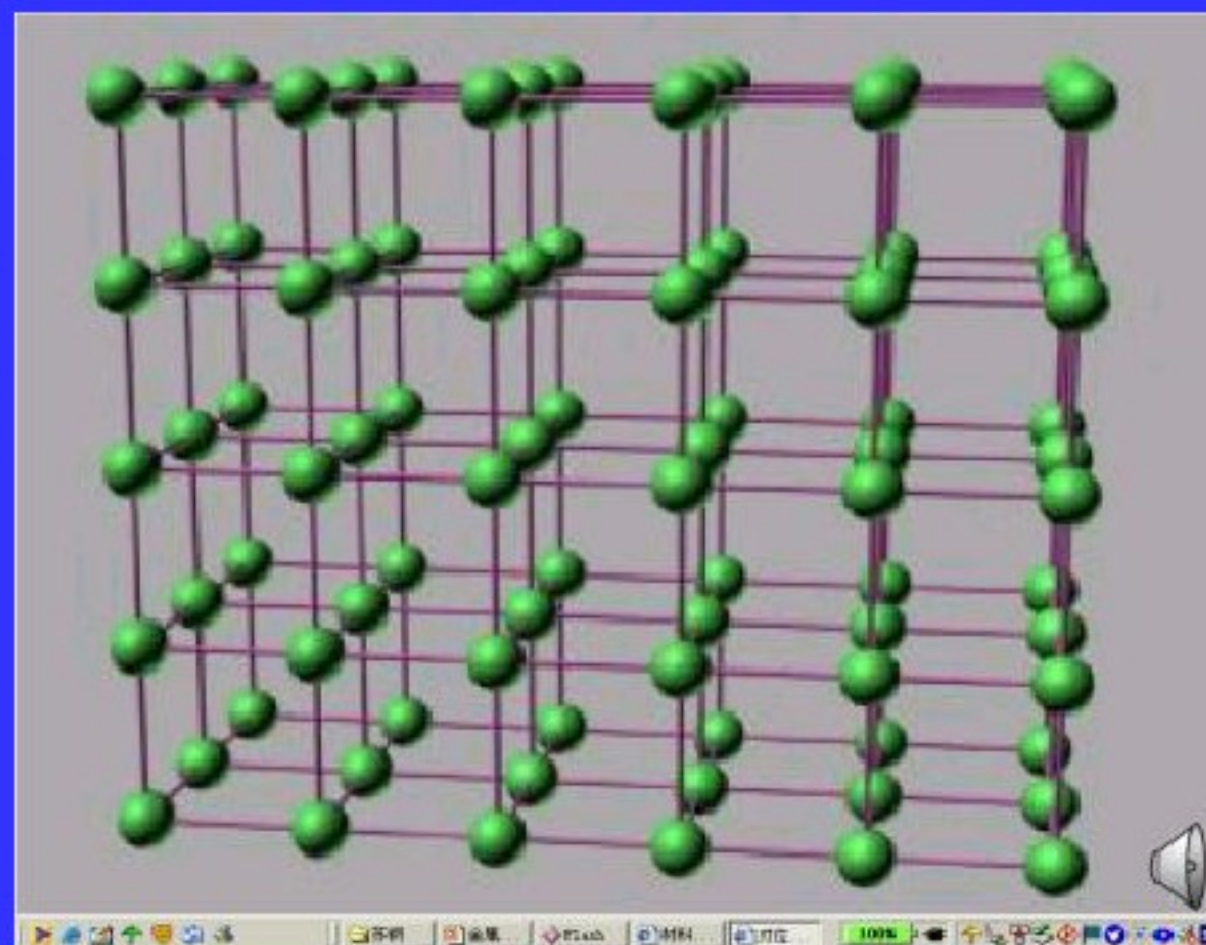


# • 晶体结构理论

## 晶体结构的几个基本概念



晶体结构

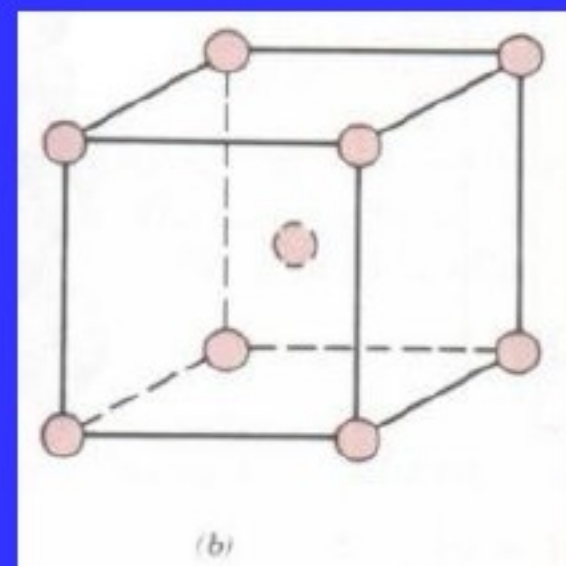
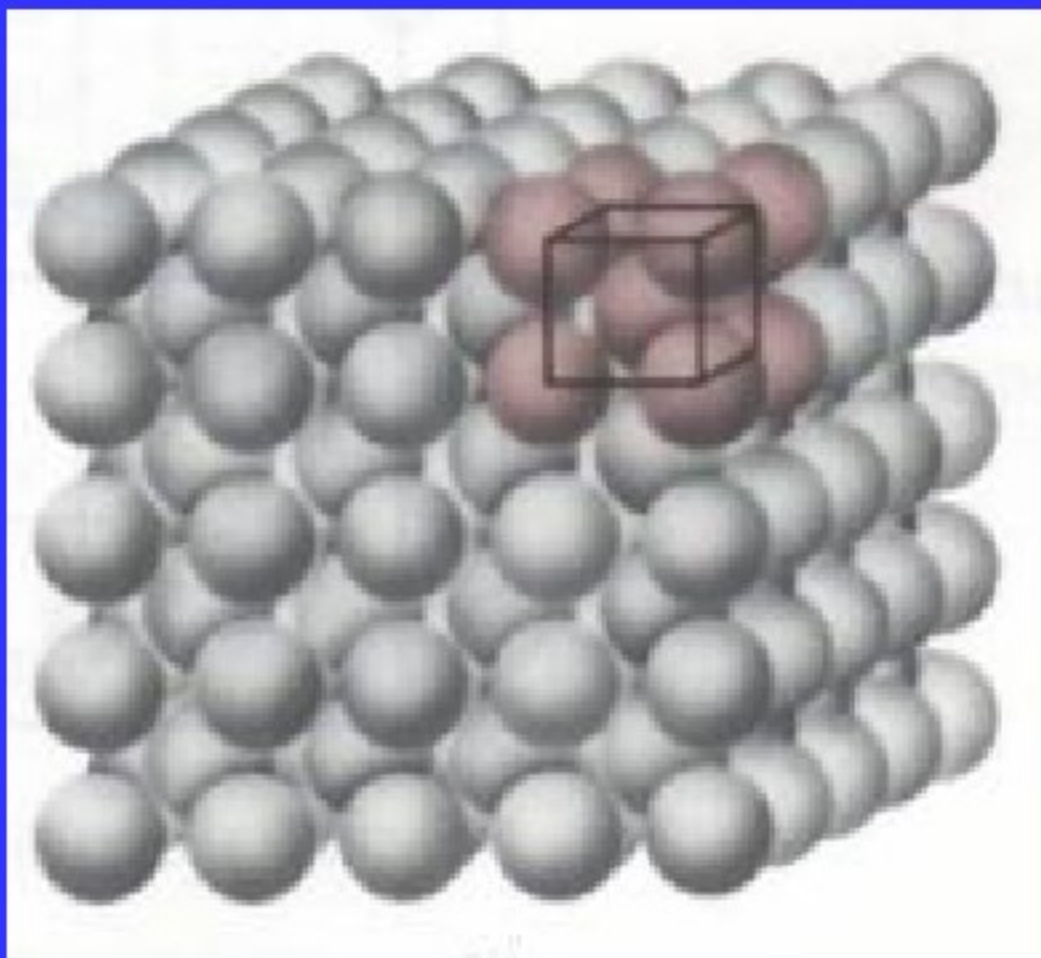


晶体点阵（晶格）





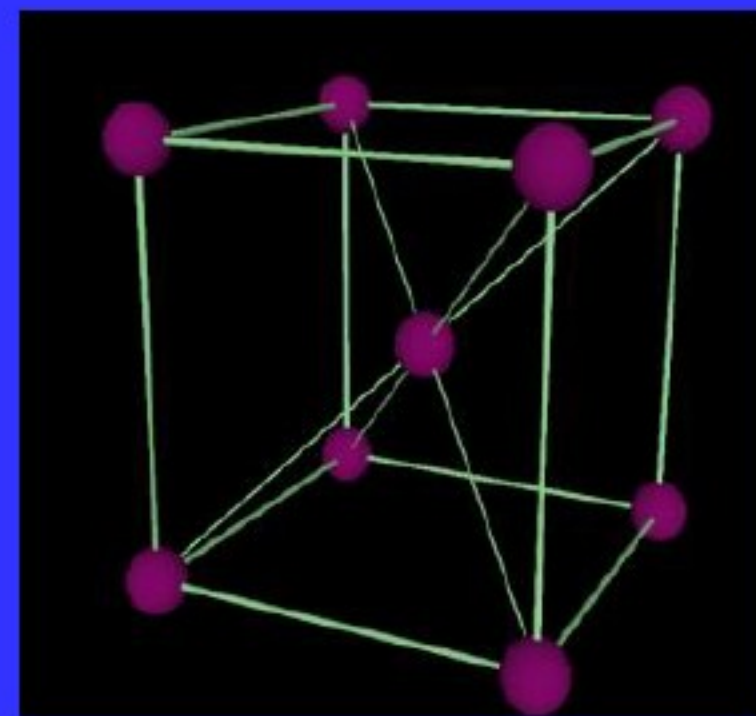
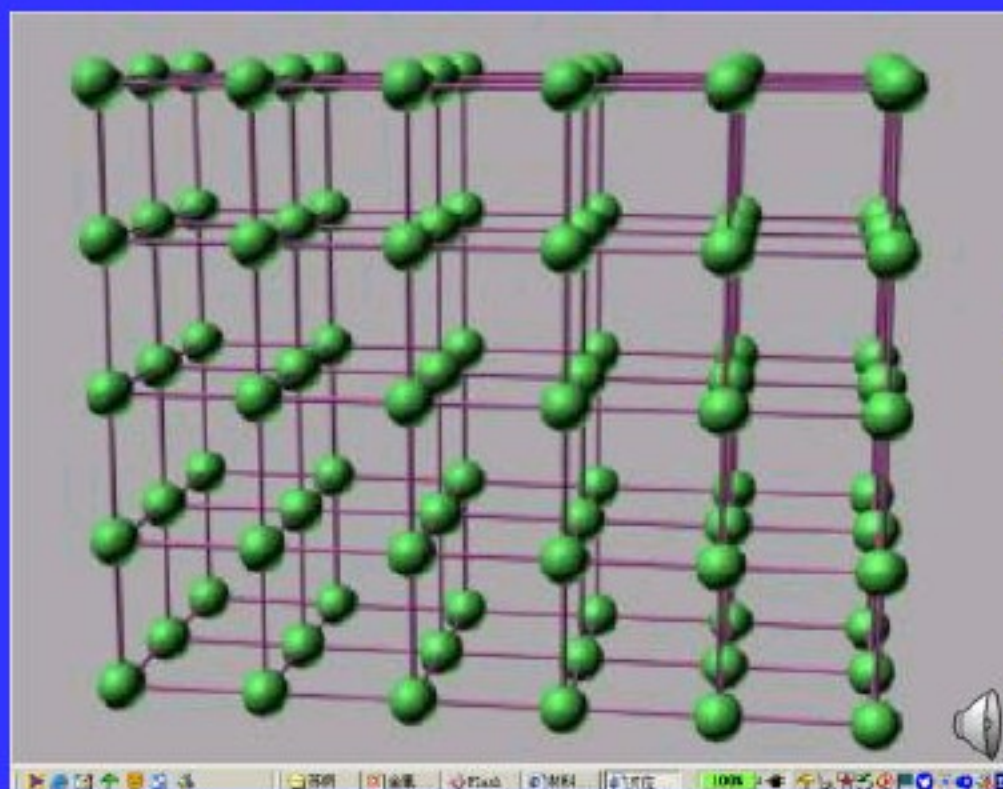
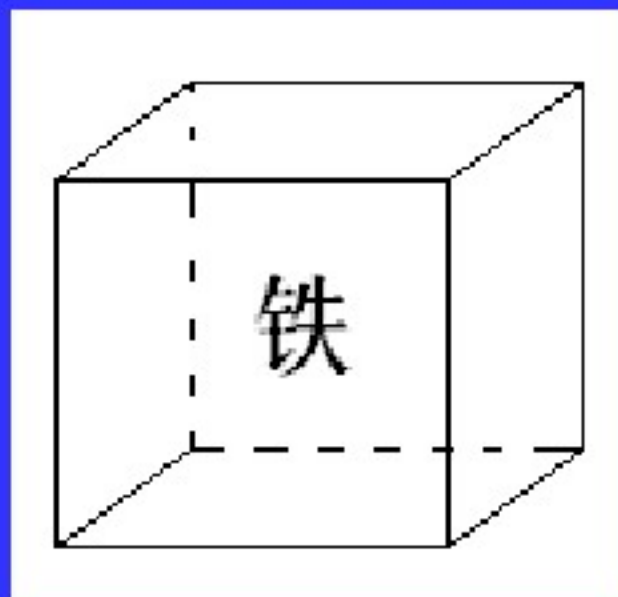
# • 晶体结构理论



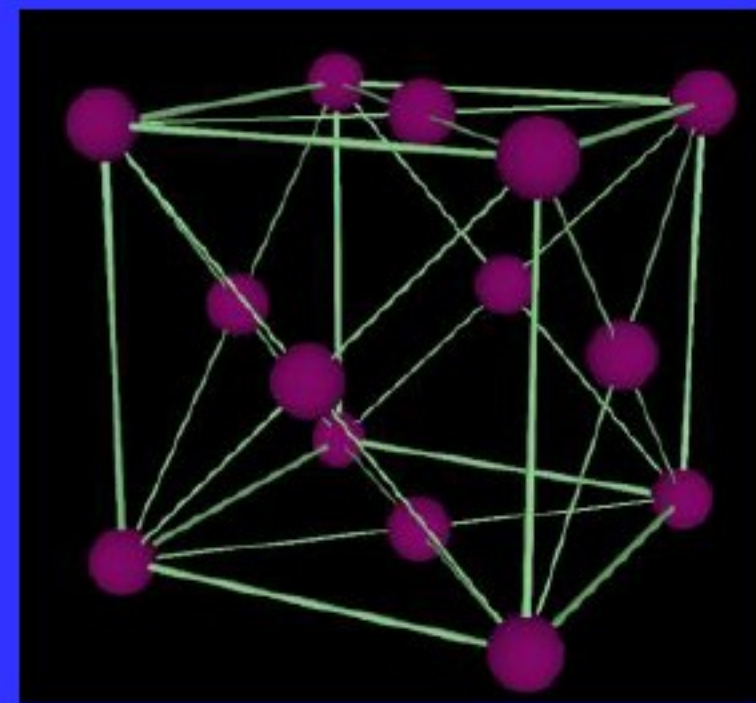
晶胞



# • 晶体结构理论



铁素体 (F或 $\alpha$ )



奥氏体 (A或 $\gamma$ )

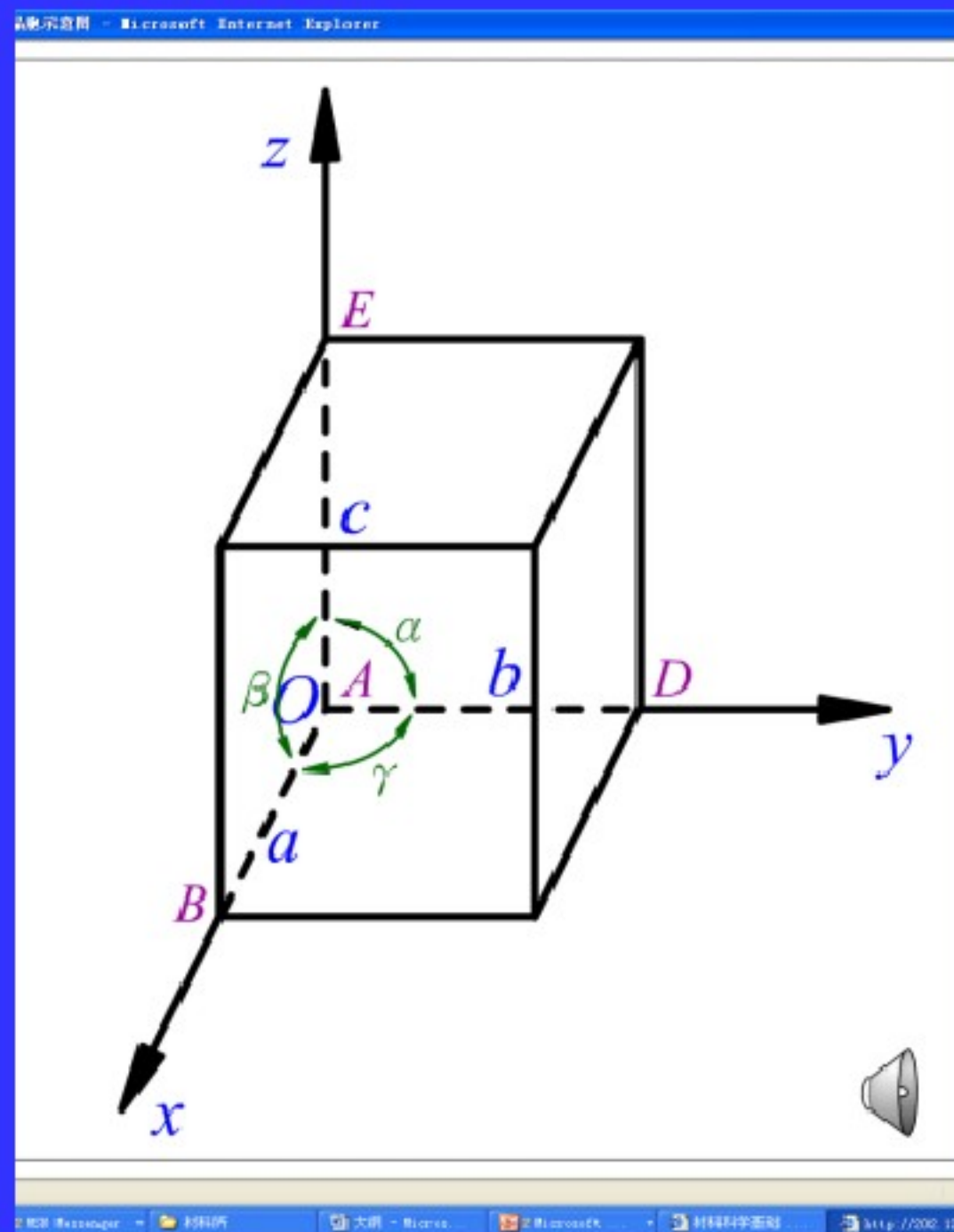


# • 晶体结构理论

## 晶格常数

棱长  $a$ 、 $b$ 、 $c$

棱间夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$

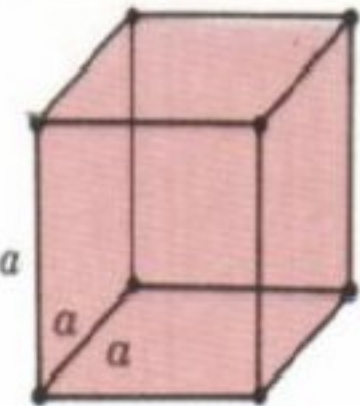
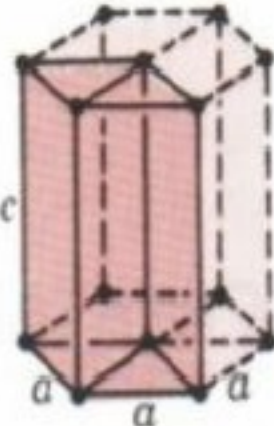






# • 晶体结构理论

## 七个晶系十四种布拉菲点阵

<i>Crystal System</i>	<i>Axial Relationships</i>	<i>Interaxial Angles</i>	<i>Unit Cell Geometry</i>
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	



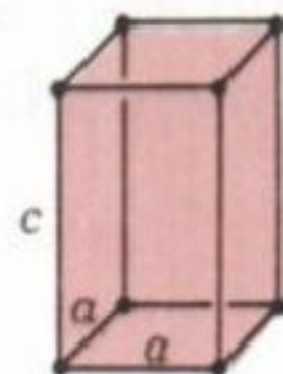
# • 晶体结构理论

## 七个晶系十四种布拉菲点阵

Tetragonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Rhombohedral

$$a = b = c$$

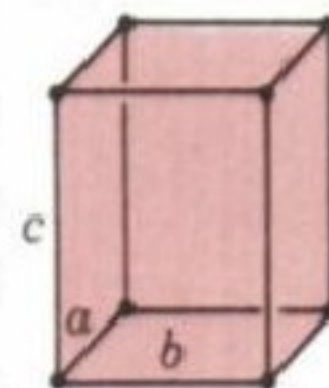
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



Orthorhombic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$







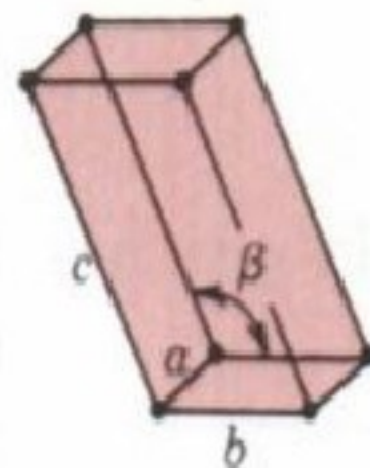
# • 晶体结构理论

## 七个晶系十四种布拉菲点阵

Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

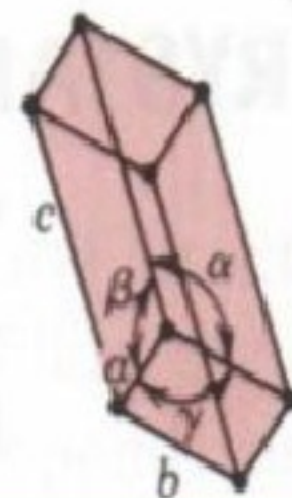
$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



Triclinic

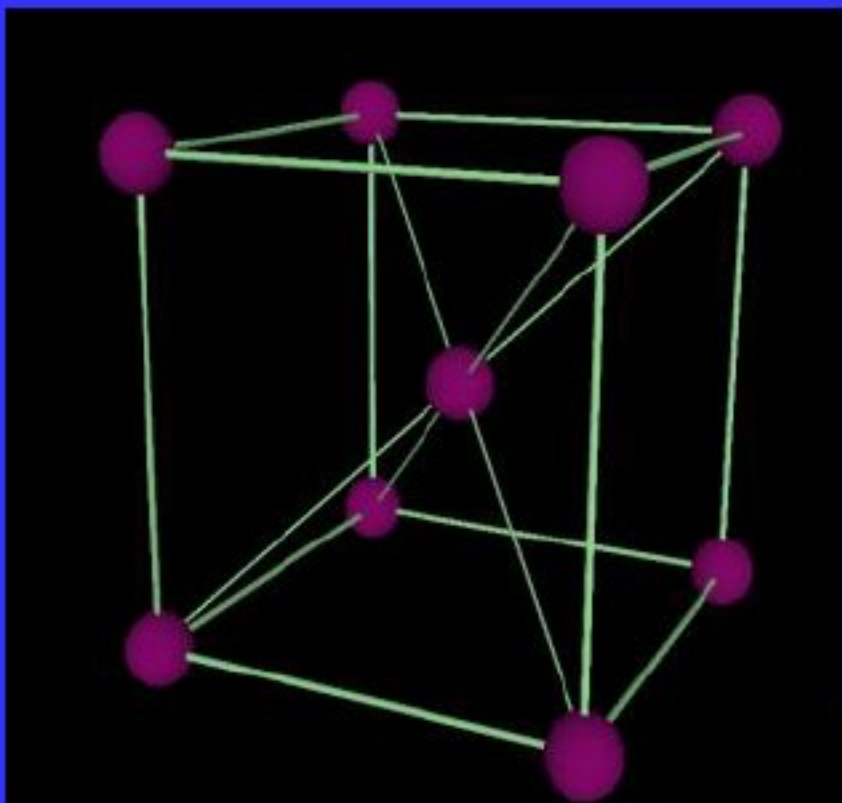
$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

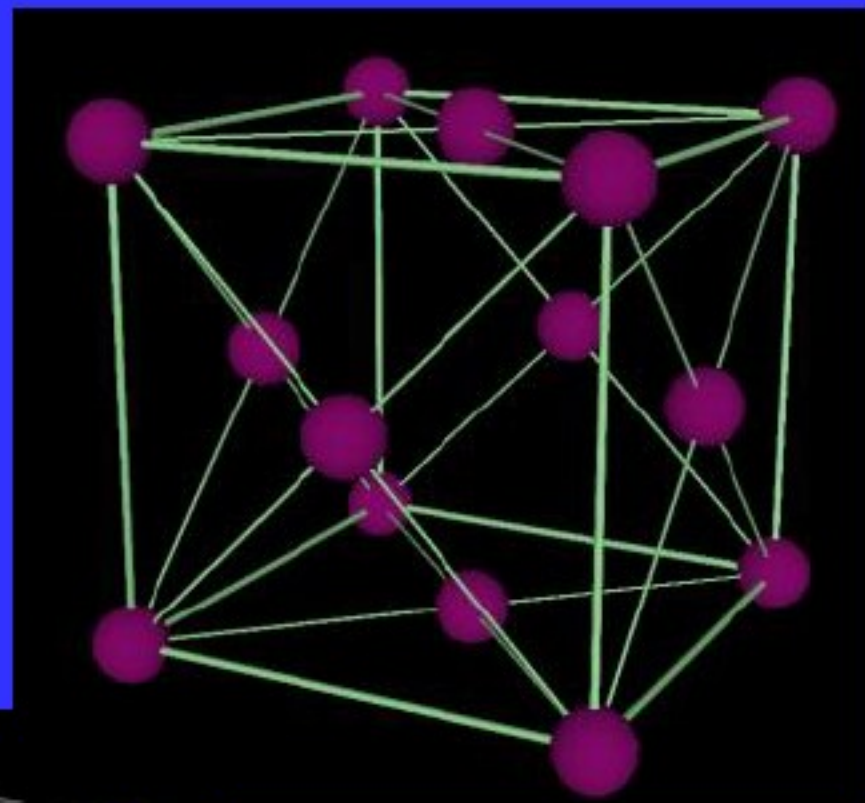




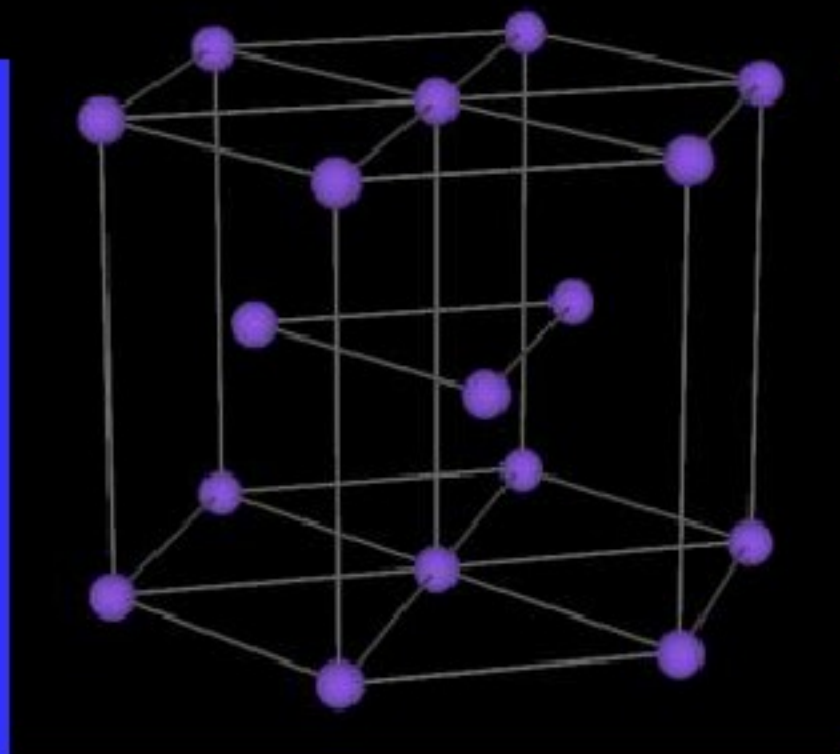
# • 晶体结构理论



体心立方



面心立方

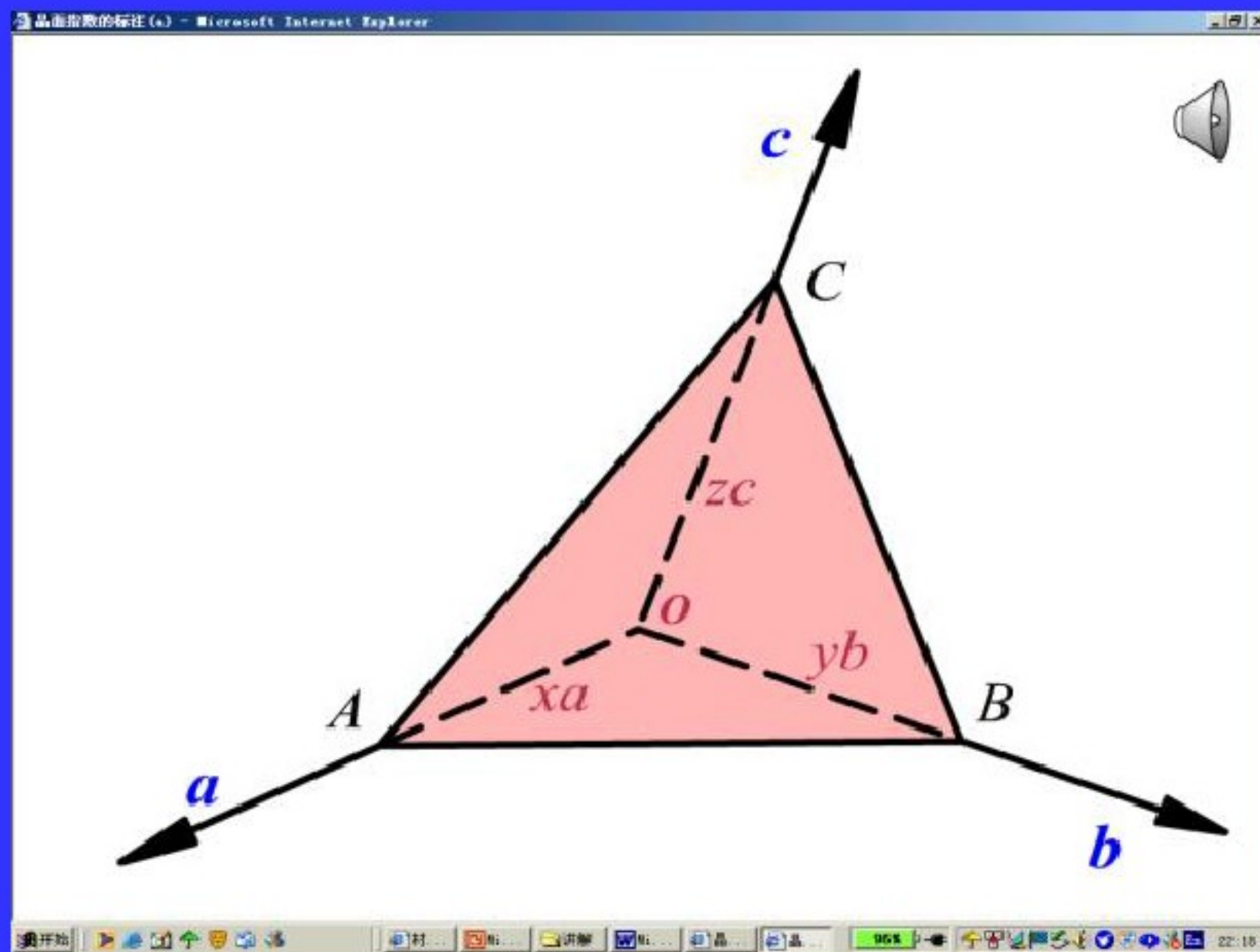


密排六方



# • 晶体结构理论

## 晶面指数 (h k l)



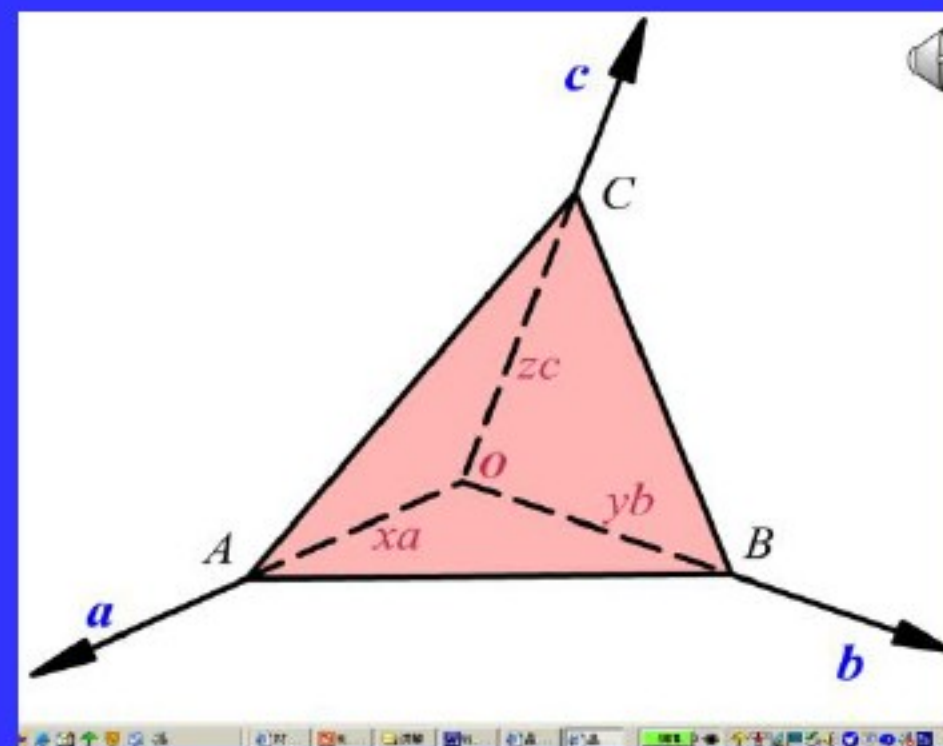




# • 晶体结构理论

## 晶面指数 ( $1/x$ $1/y$ $1/z$ )

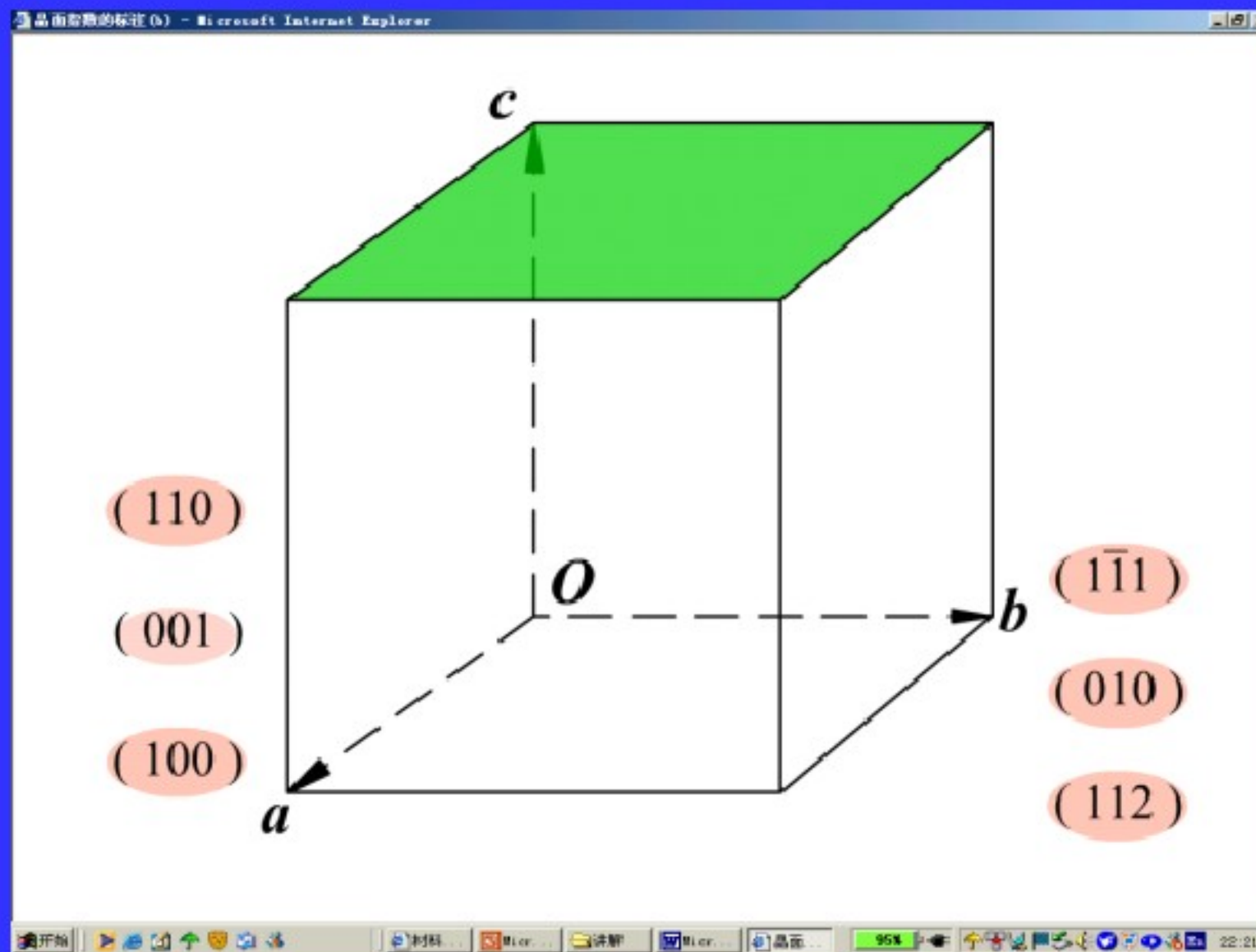
- 1) 建立一组以晶轴  $a$ ,  $b$ ,  $c$  为坐标轴的坐标系, 令坐标原点不在待标晶面上, 各轴上的坐标长度单位分别是晶胞边长  $a$ ,  $b$ ,  $c$ 。
- 2) 求出待标晶面在  $a$ ,  $b$ ,  $c$  轴上的截距  $xa$ ,  $yb$ ,  $zc$ 。  
如该晶面与某轴平行, 则截距为  $\infty$ 。
- 3) 取截距的倒数  $1/xa$ ,  $1/yb$ ,  $1/zc$ 。
- 4) 将这些倒数化成最小的简单整数比  $h$ ,  $k$ ,  $l$ , 使  $h:k:l = 1/xa:1/yb:1/zc$ 。
- 5) 将  $h$ ,  $k$ ,  $l$  置于圆括号内, 写成  $(hkl)$ , 则  $(hkl)$  就是待标晶面的晶面指数。





# • 晶体结构理论

## 晶面指数 (001)

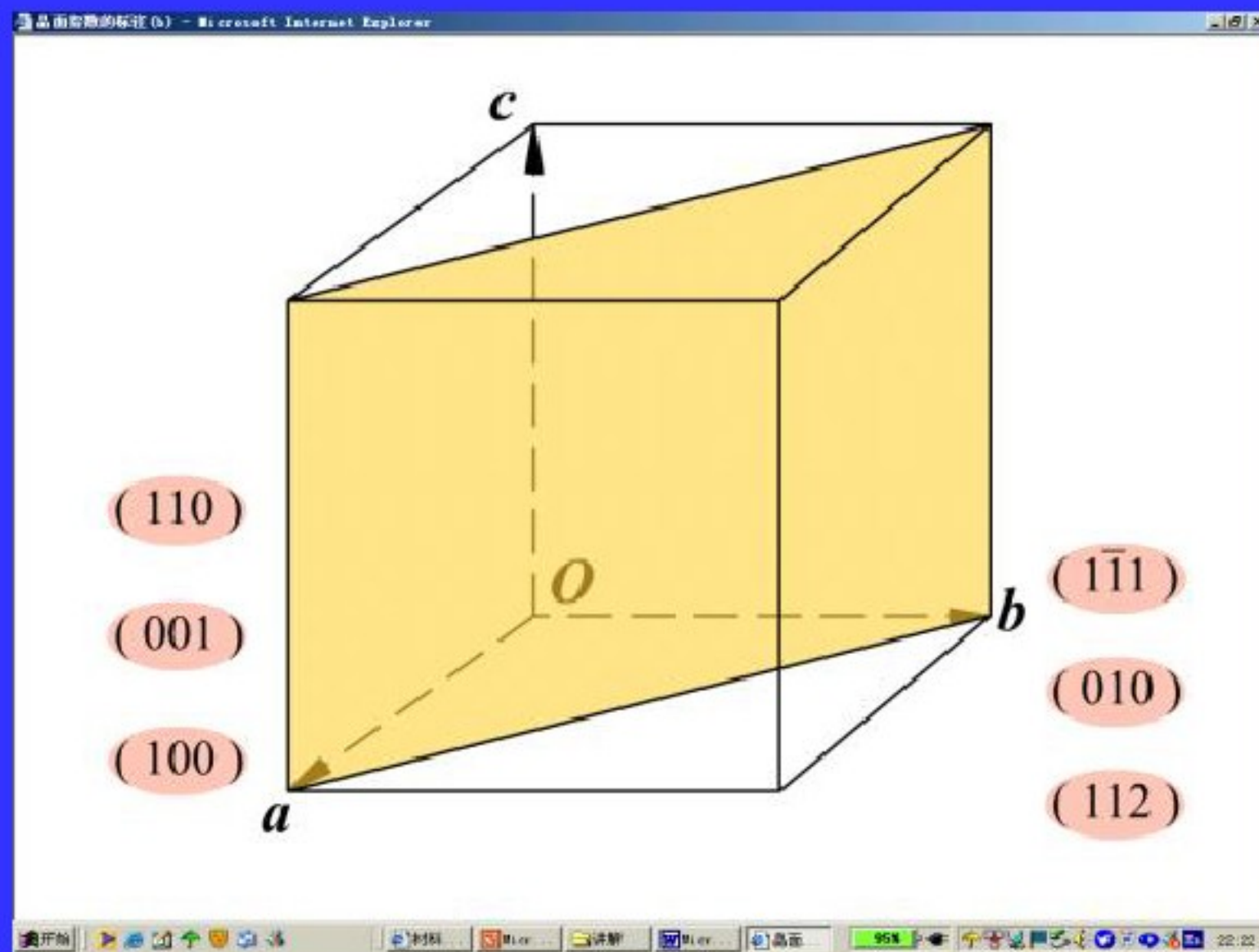






# • 晶体结构理论

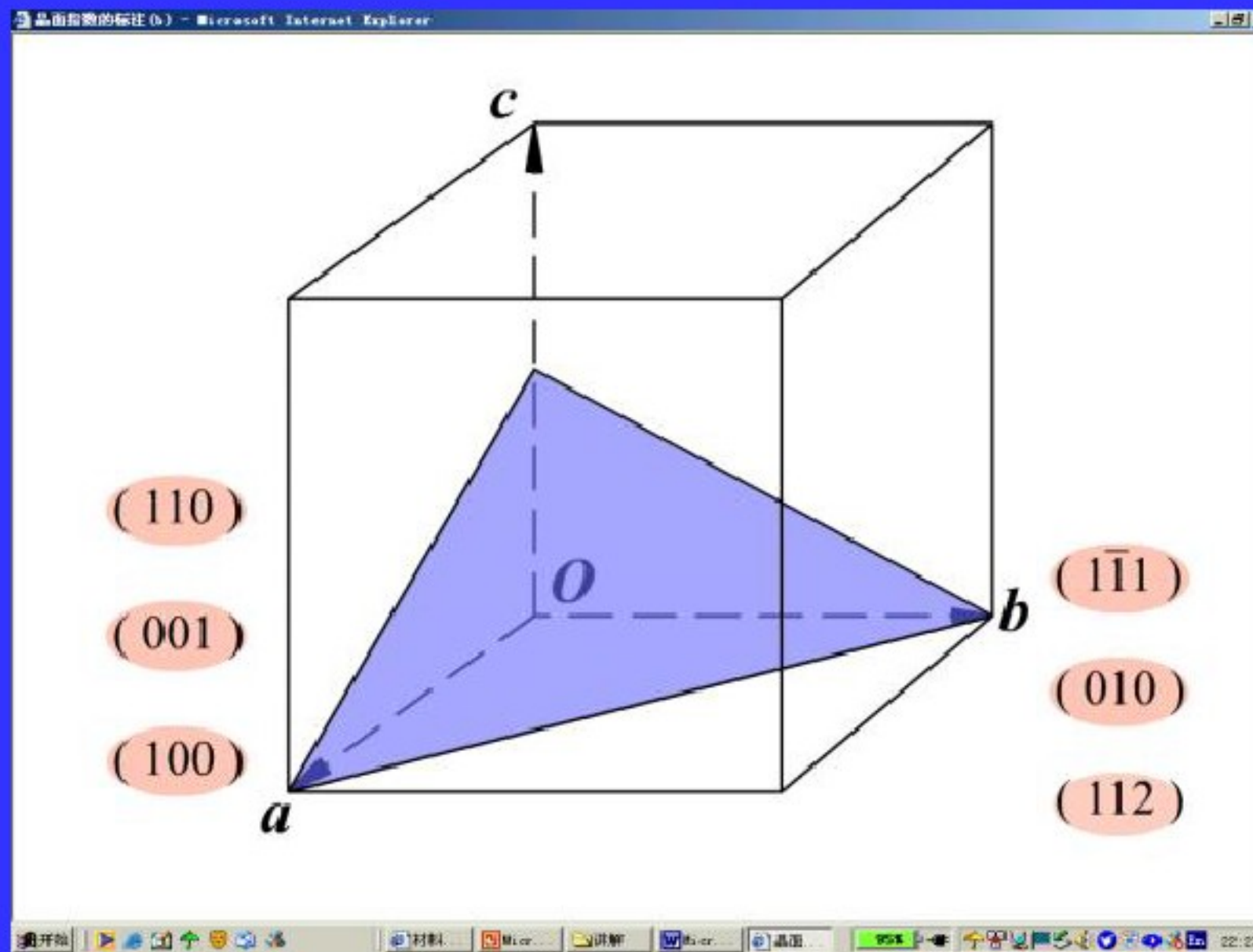
## 晶面指数 (110)





# • 晶体结构理论

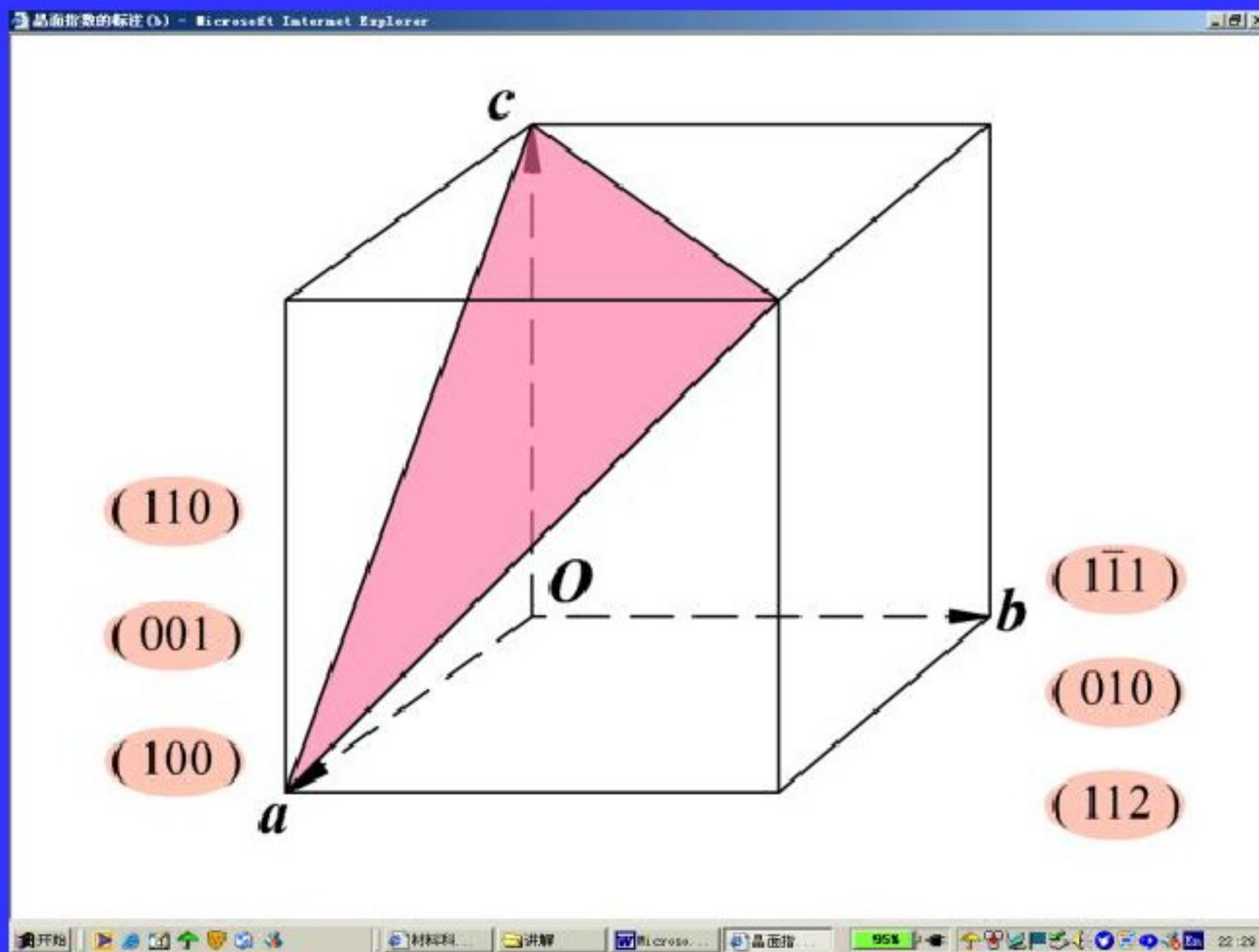
## 晶面指数 (112)





# • 晶体结构理论

## 晶面指数 (1-11)

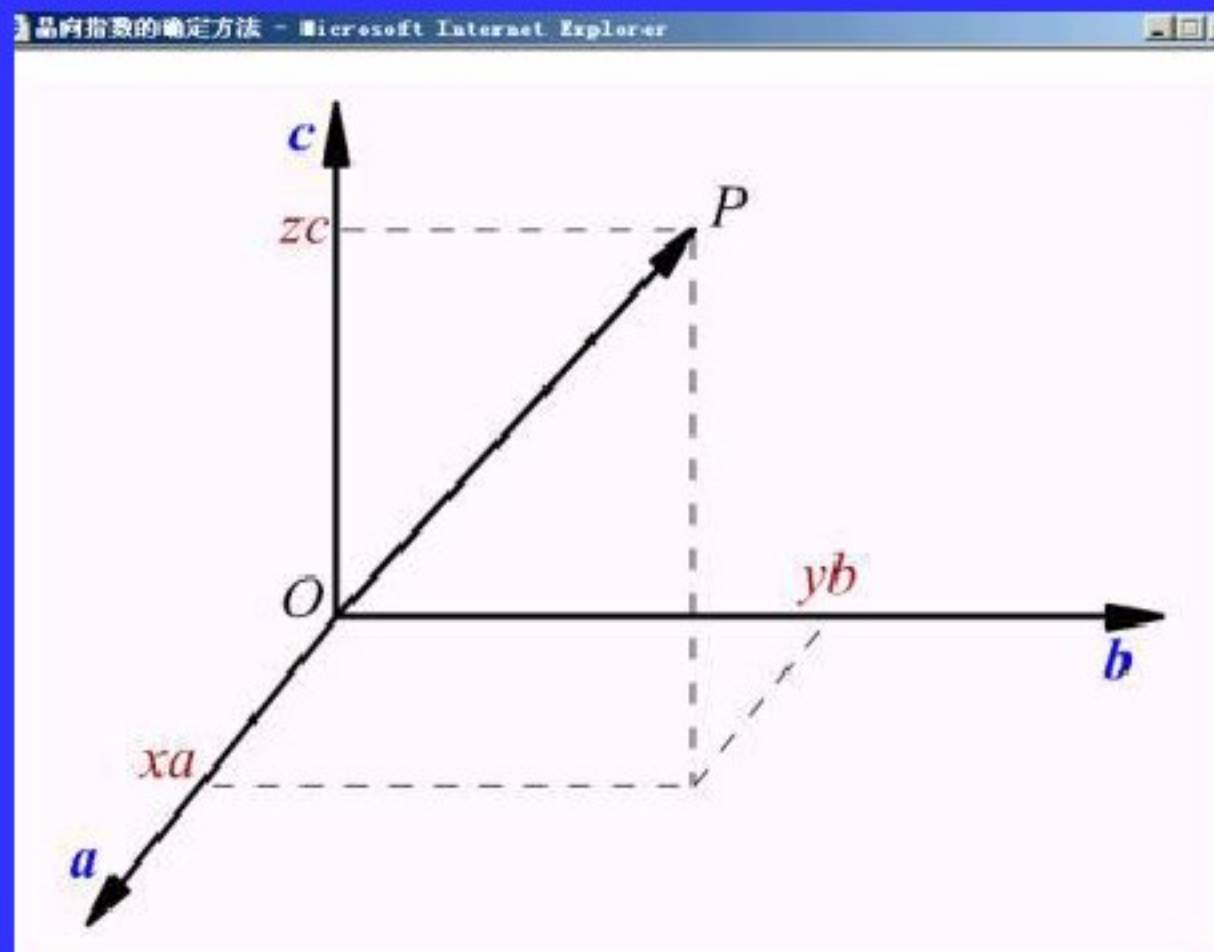






# • 晶体结构理论

## 晶向指数 $[u \ v \ w]$





# • 晶体结构理论

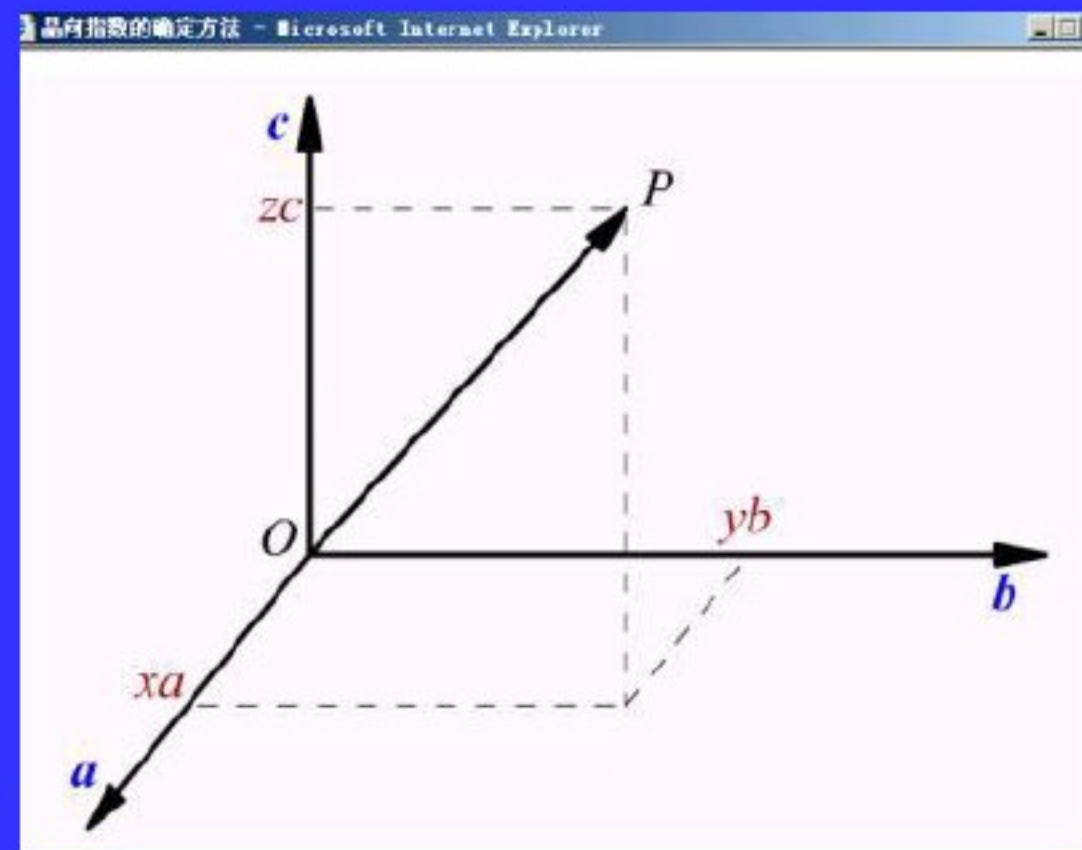
## 晶向指数 $[x\ y\ z]$

(1) 建立以晶轴  $a$ ,  $b$ ,  $c$  为坐标轴的坐标系, 各轴上的坐标长度单位分别是晶胞边长  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , 坐标原点在待标晶向上。

(2) 选取该晶向上原点以外的任一点  $P(xa, yb, zc)$ 。

(3) 将  $xa$ ,  $yb$ ,  $zc$  化成最小的简单整数比  $u$ ,  $v$ ,  $w$ , 且  $u : v : w = xa : yb : zc$ 。

(4) 将  $u$ ,  $v$ ,  $w$  三数置于方括号内就得到晶向指数  $[uvw]$ 。

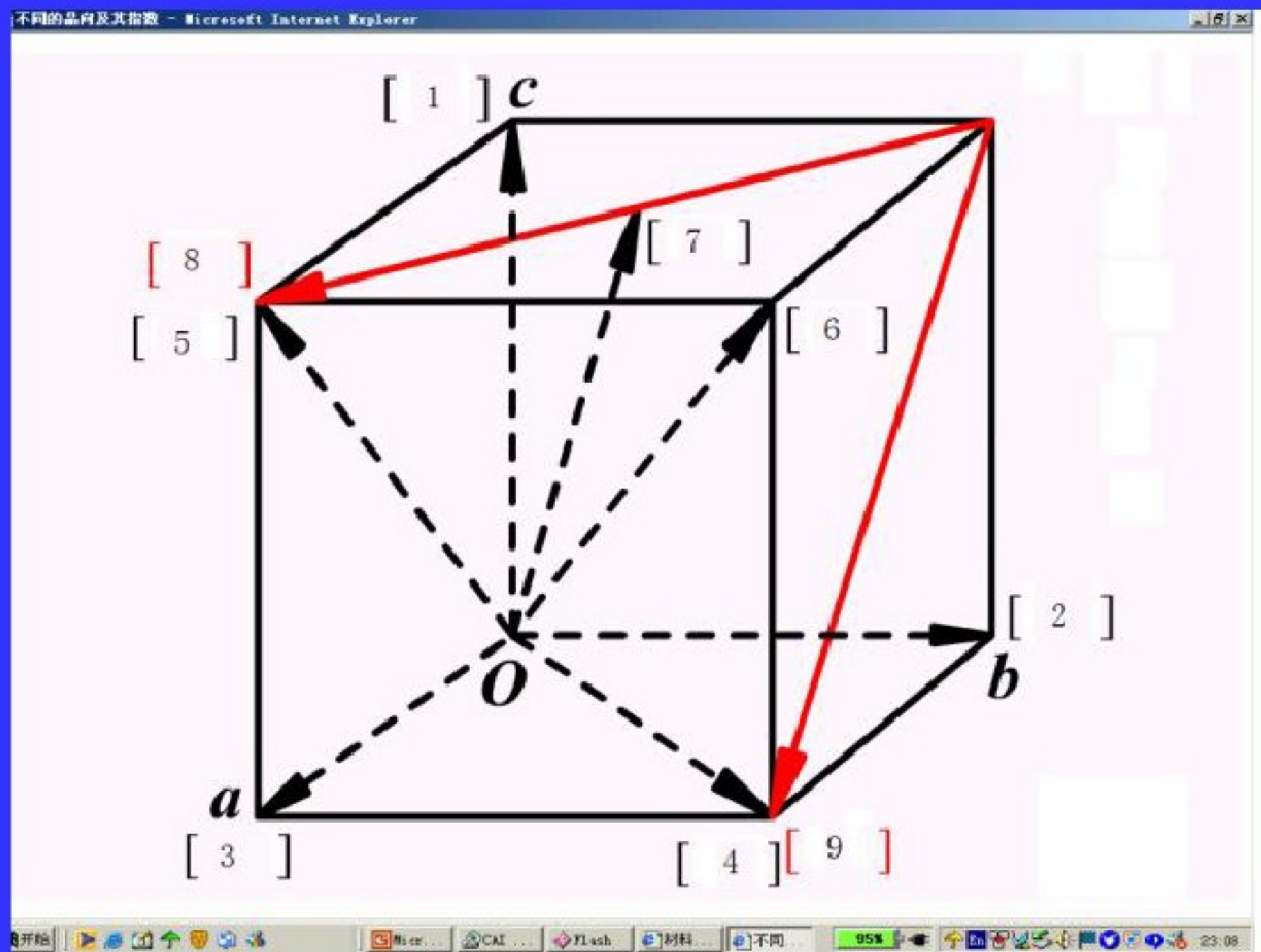






# • 晶体结构理论

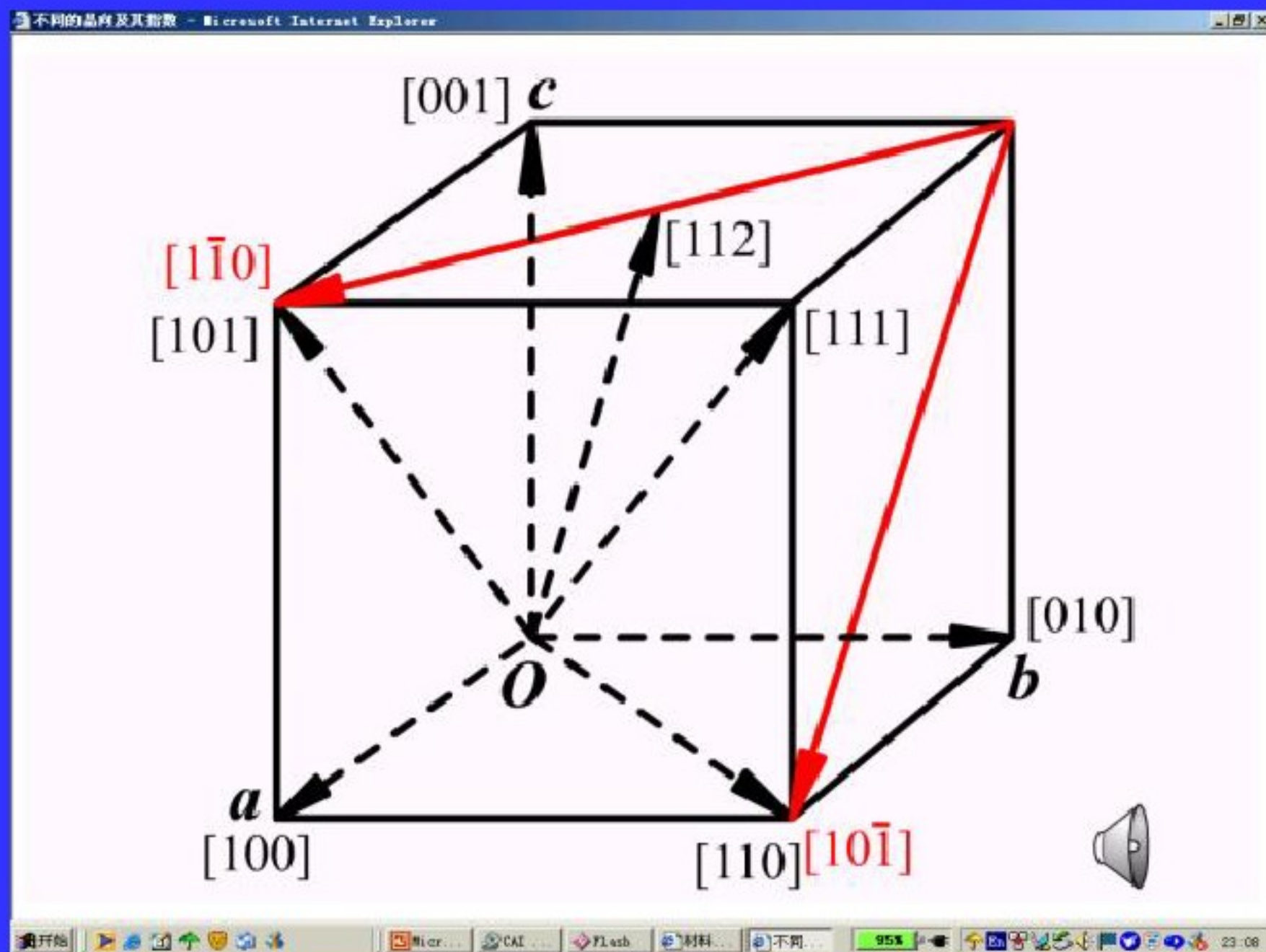
## 晶向指数 $[x\ y\ z]$





# • 晶体结构理论

## 晶向指数 $[x\ y\ z]$







# • 晶体结构理论

晶面（向）族  $\{h\ k\ l\}$   $\langle u\ v\ w\rangle$

$$\{100\} = (100) + (010) + (001) + (\bar{1}00) + (0\bar{1}0) + (00\bar{1})$$

$$\begin{aligned}\{110\} = & (110) + (\bar{1}10) + (101) + (\bar{1}01) + (011) + (0\bar{1}1) + \\ & (\bar{\bar{1}}\bar{1}0) + (\bar{1}\bar{1}0) + (\bar{1}0\bar{1}) + (10\bar{1}) + (0\bar{1}\bar{1}) + (01\bar{1})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\{111\} = & (111) + (\bar{1}11) + (1\bar{1}1) + (11\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}1) + (\bar{1}1\bar{1}) + \\ & (\bar{\bar{1}}\bar{1}\bar{1}) + (\bar{\bar{1}}\bar{1}1)\end{aligned}$$



# • 晶体结构理论

六方晶面指数 ( $h k i l$ )或( $h k l$ )

$$i = -(h + k)$$

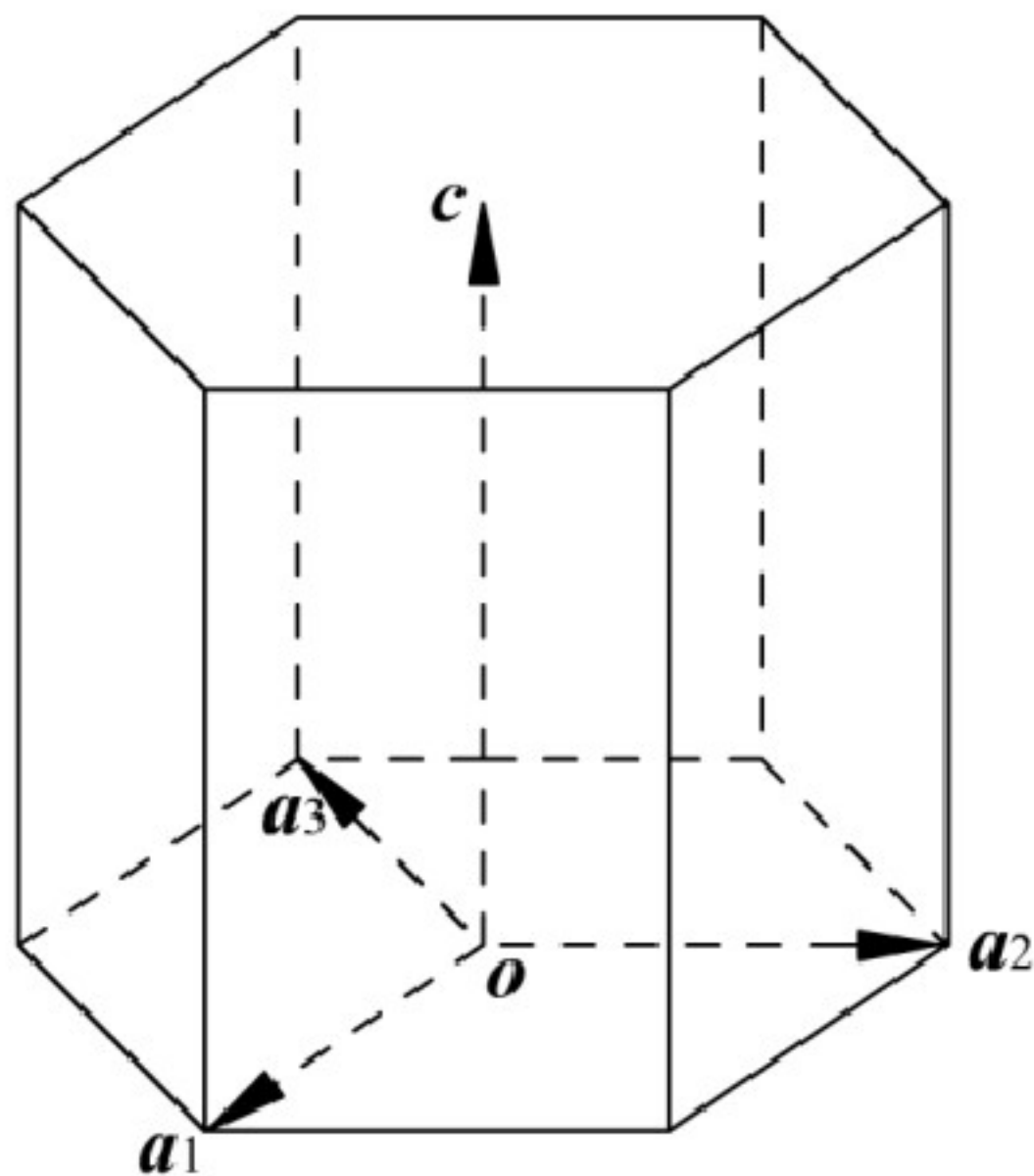


# • 晶体结构理论

六方晶面指数  $(h k i l)$  或  $(h k l)$

$$i = -(h + k)$$

$(11\bar{2}0)$   
 $(1\bar{1}00)$   
 $(\bar{1}012)$   
 $(10\bar{1}2)$   
 $(01\bar{1}0)$





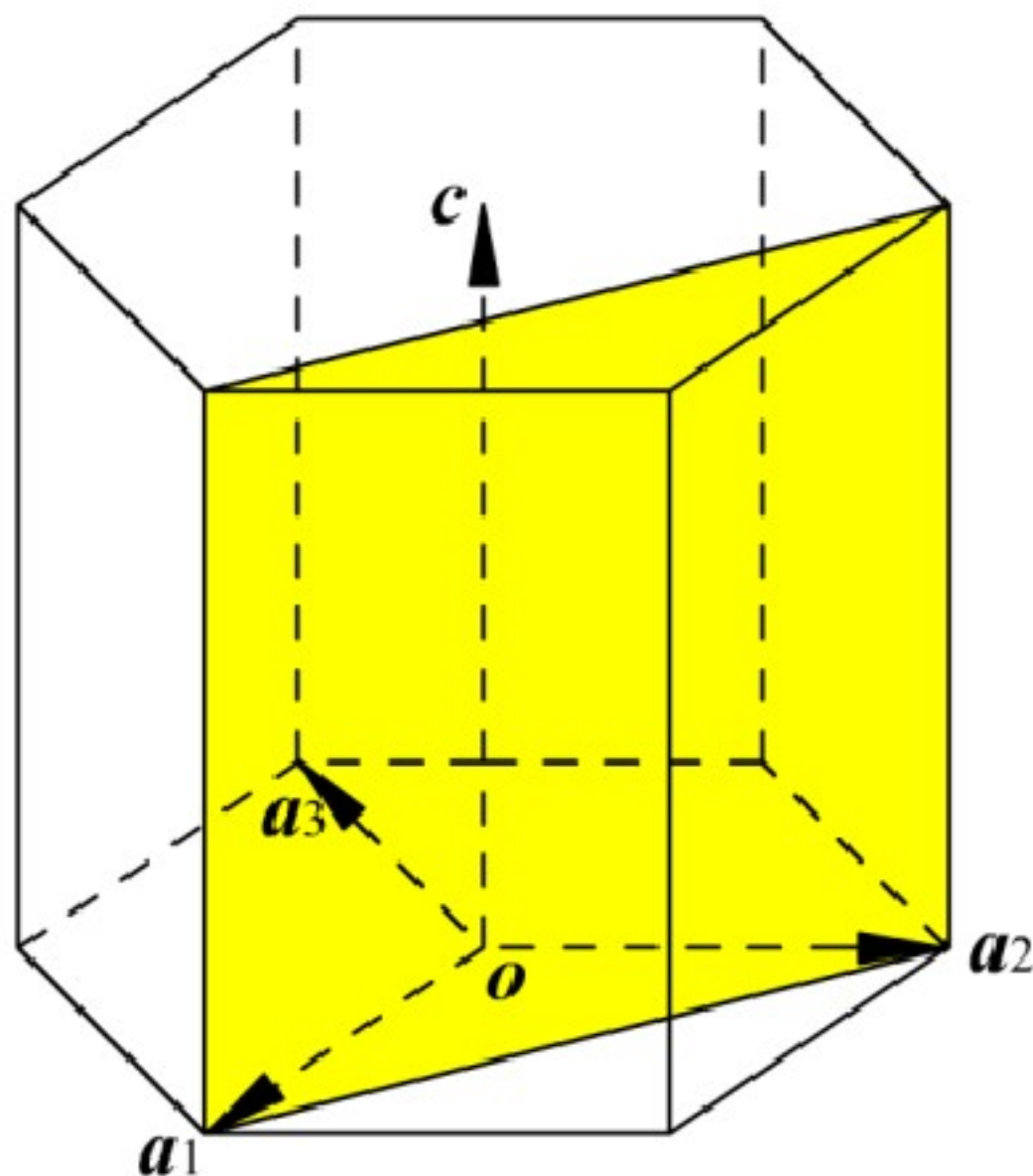


# • 晶体结构理论

六方晶面指数  $(h k i l)$  或  $(h k l)$

$$i = -(h + k)$$

$(11\bar{2}0)$   
 $(1\bar{1}00)$   
 $(\bar{1}012)$   
 $(10\bar{1}2)$   
 $(01\bar{1}0)$

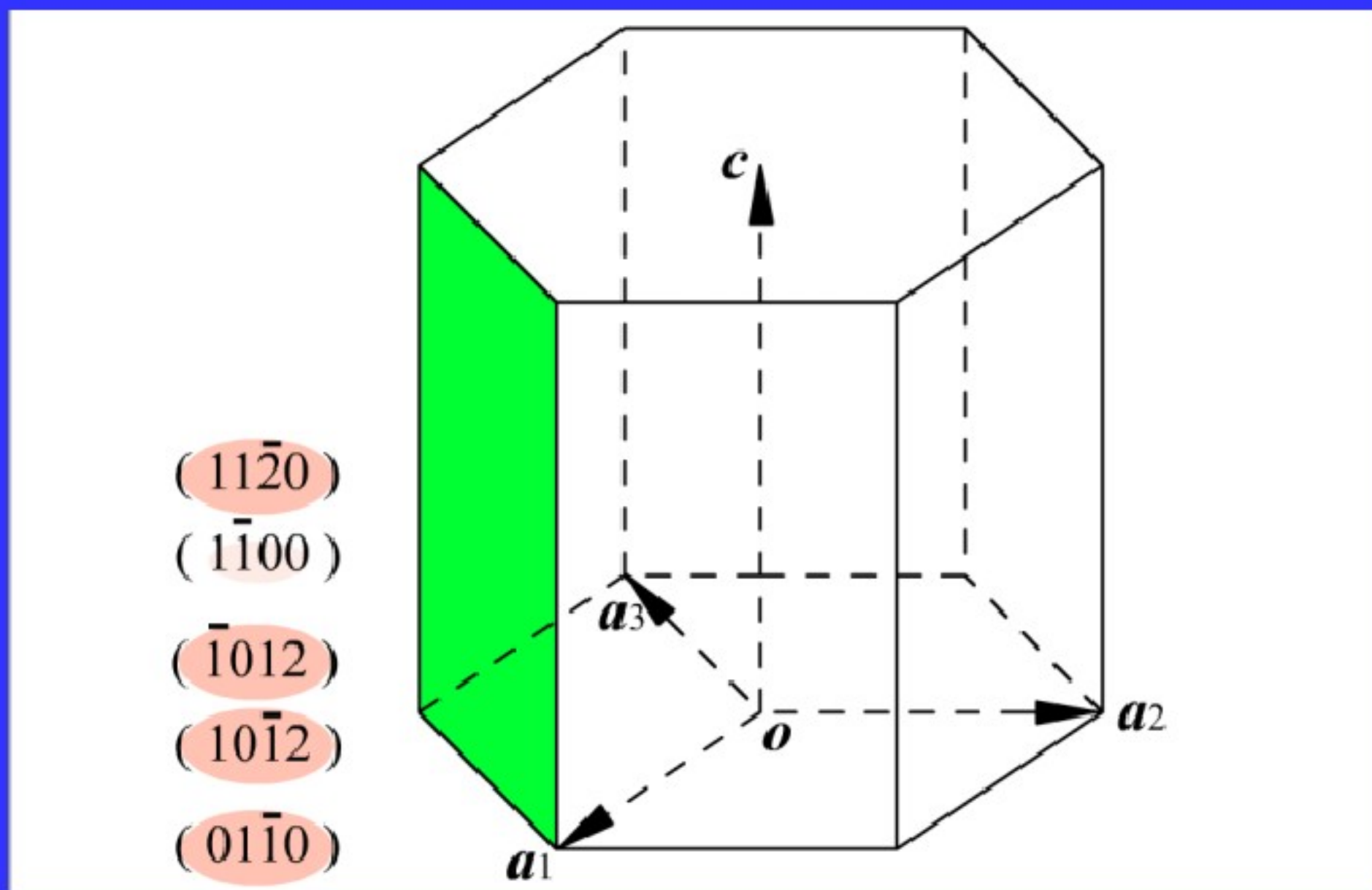




# • 晶体结构理论

六方晶面指数  $(h k i l)$  或  $(h k l)$

$$i = -(h + k)$$





# • 晶体结构理论

六方晶面指数  $(h k i l)$  或  $(h k l)$

$$i = -(h + k)$$

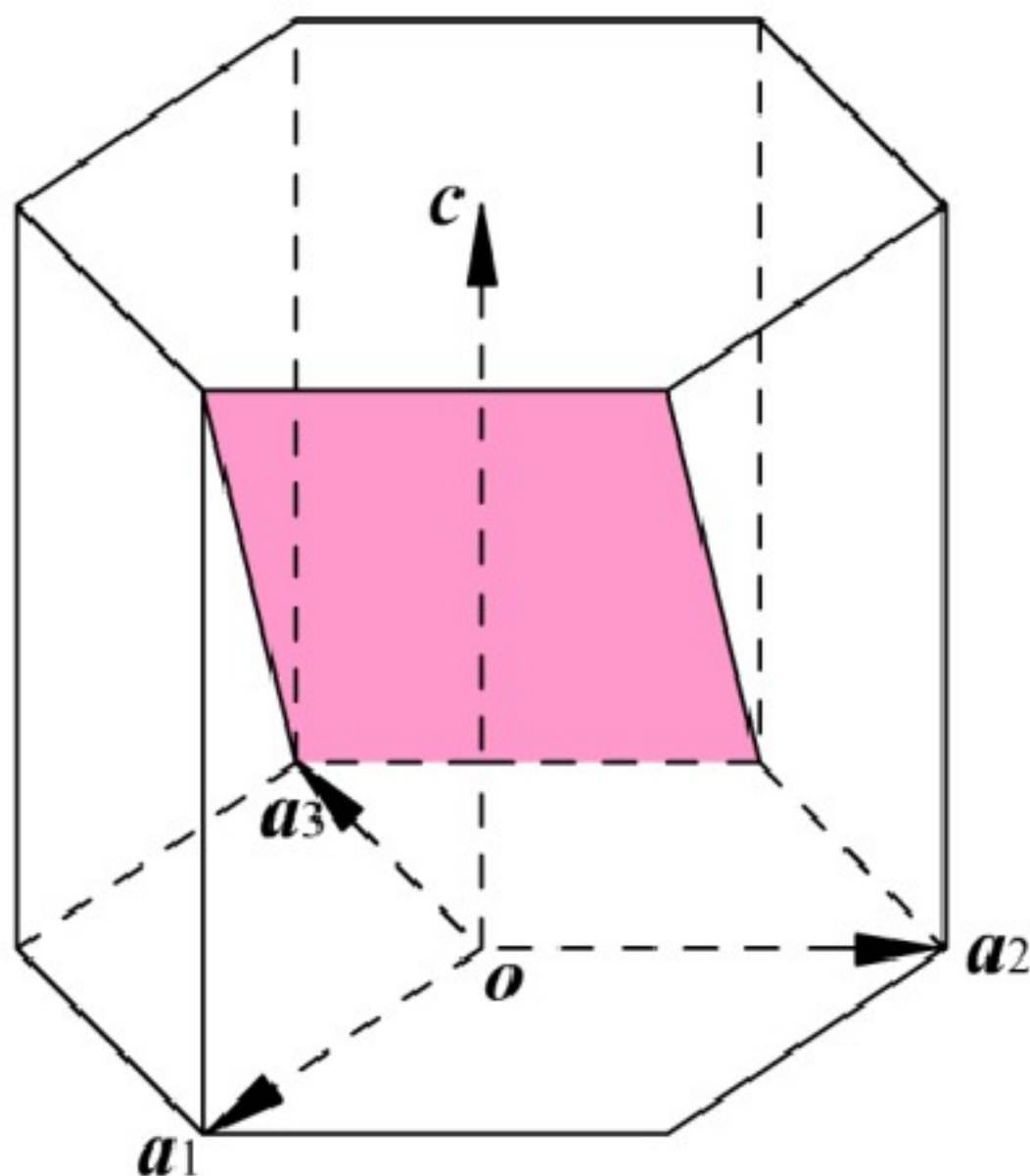
$(11\bar{2}0)$

$(1\bar{1}00)$

$(\bar{1}012)$

$(10\bar{1}2)$

$(01\bar{1}0)$



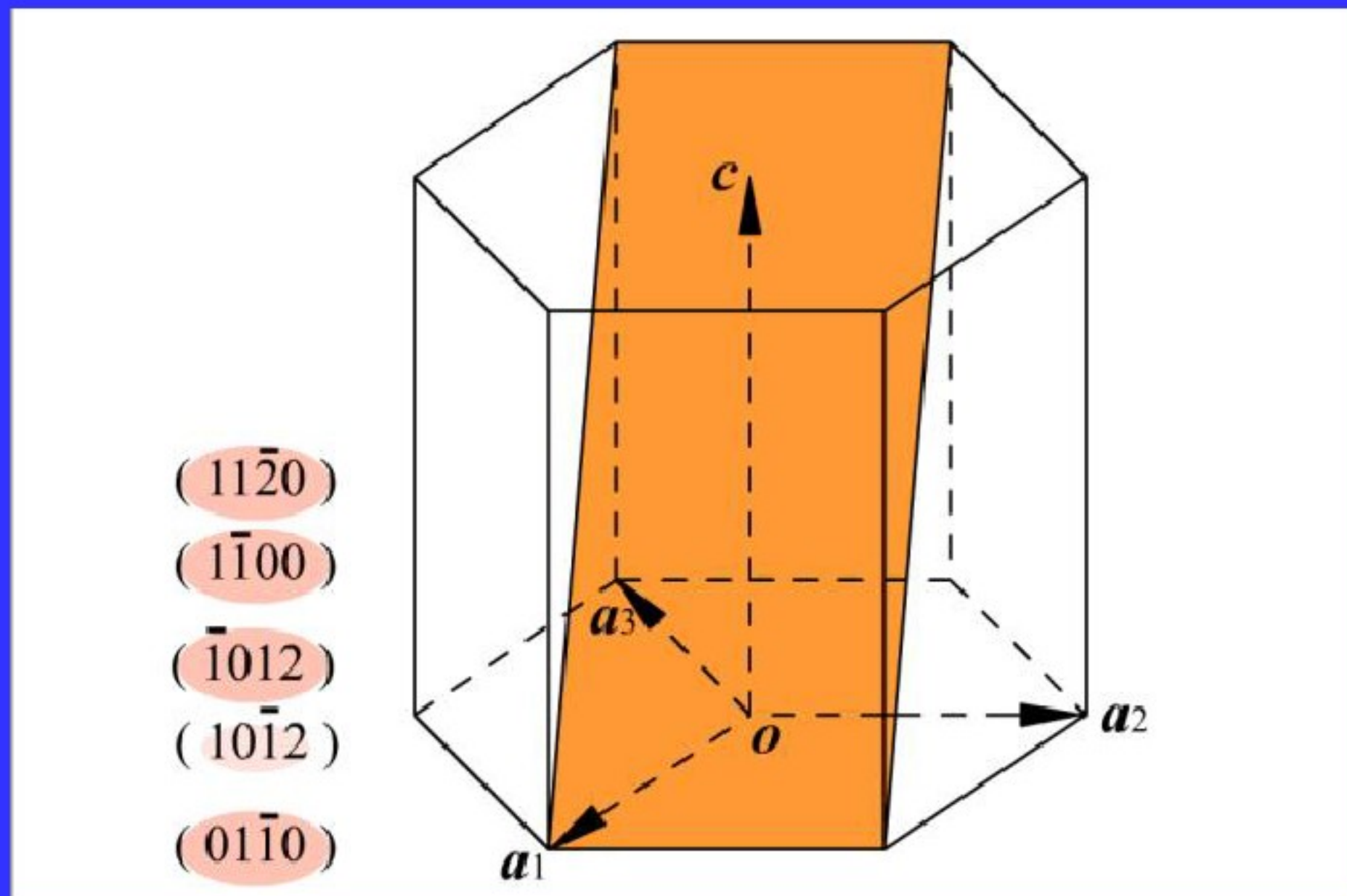




# • 晶体结构理论

六方晶面指数  $(h k i l)$  或  $(h k l)$

$$i = -(h + k)$$

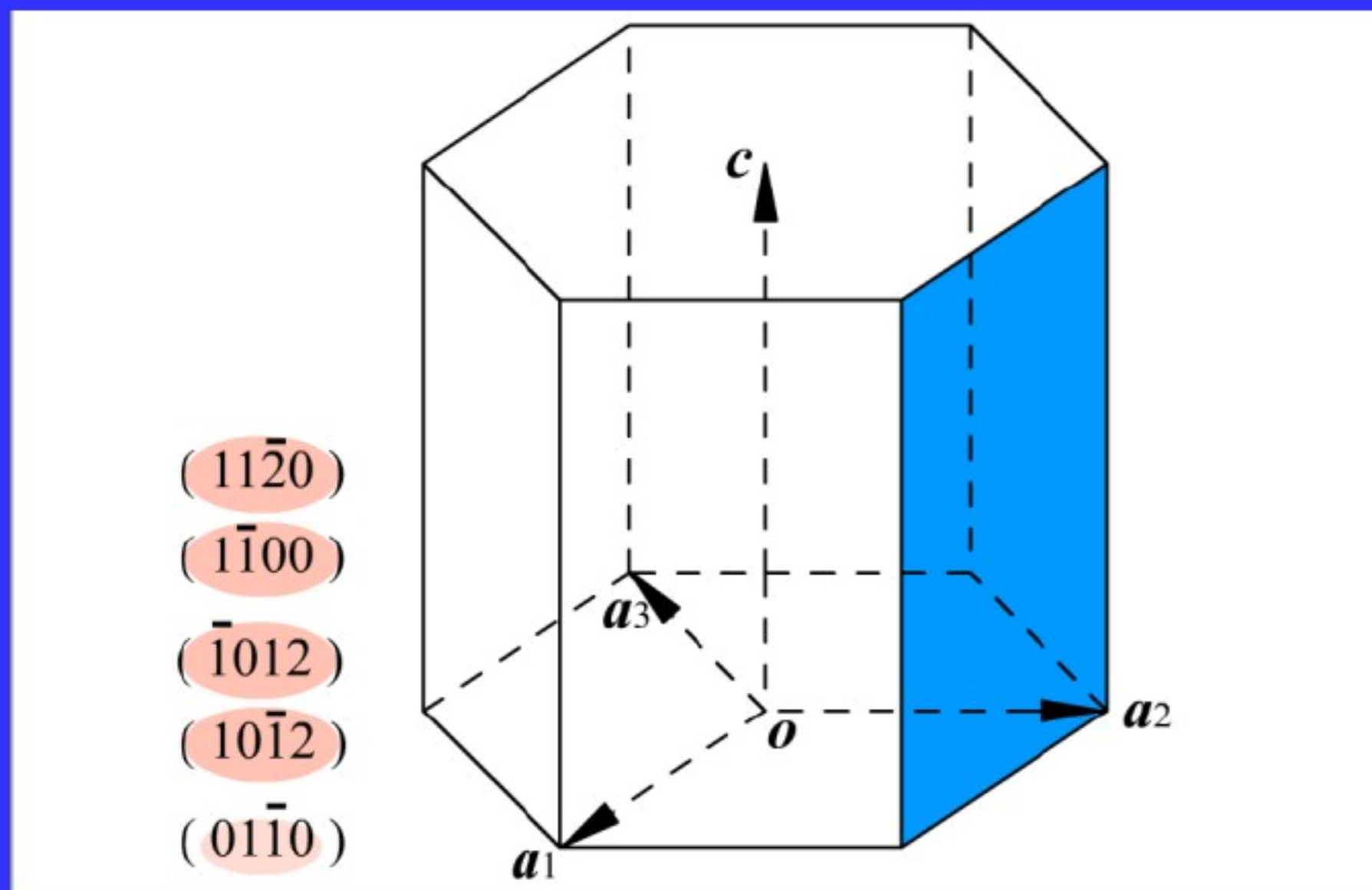




# • 晶体结构理论

六方晶面指数  $(h k i l)$  或  $(h k l)$

$$i = -(h + k)$$



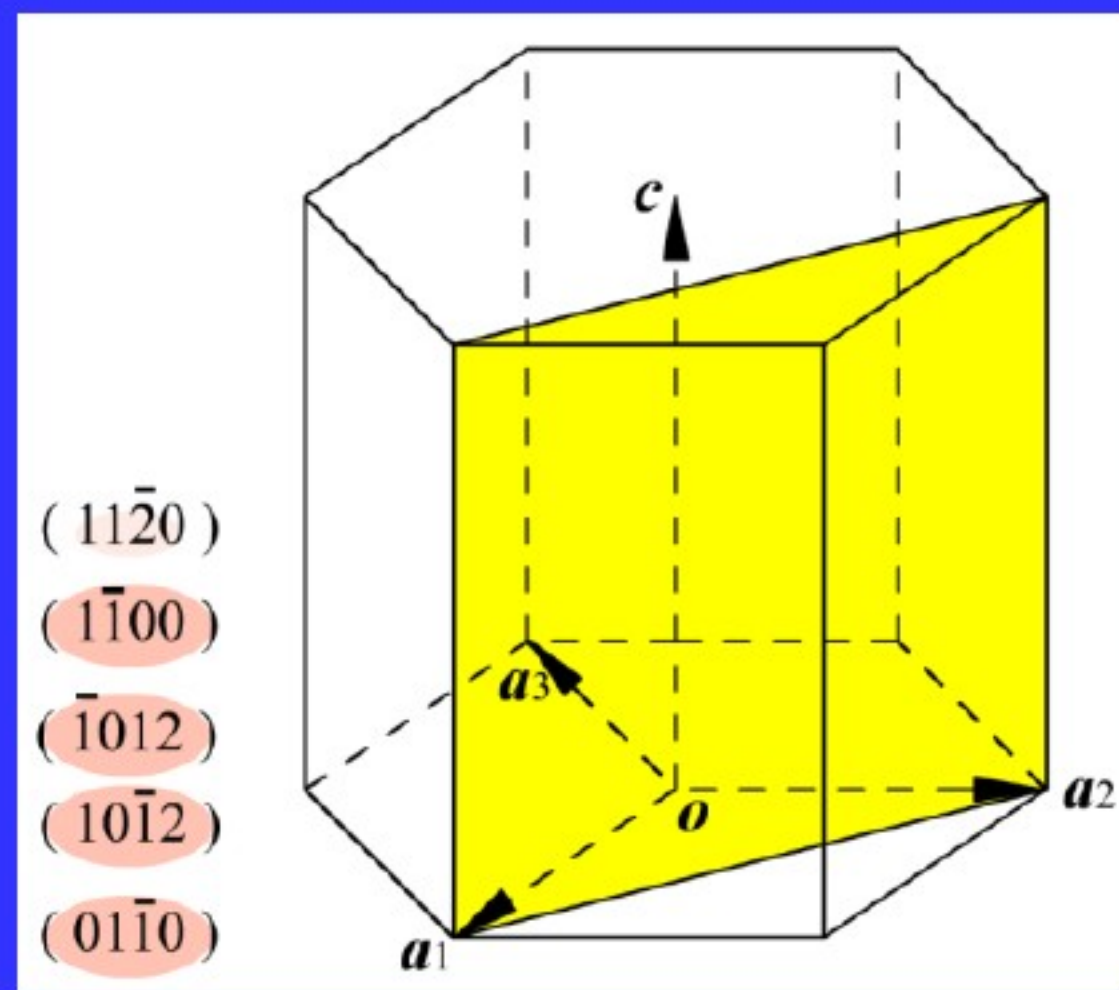
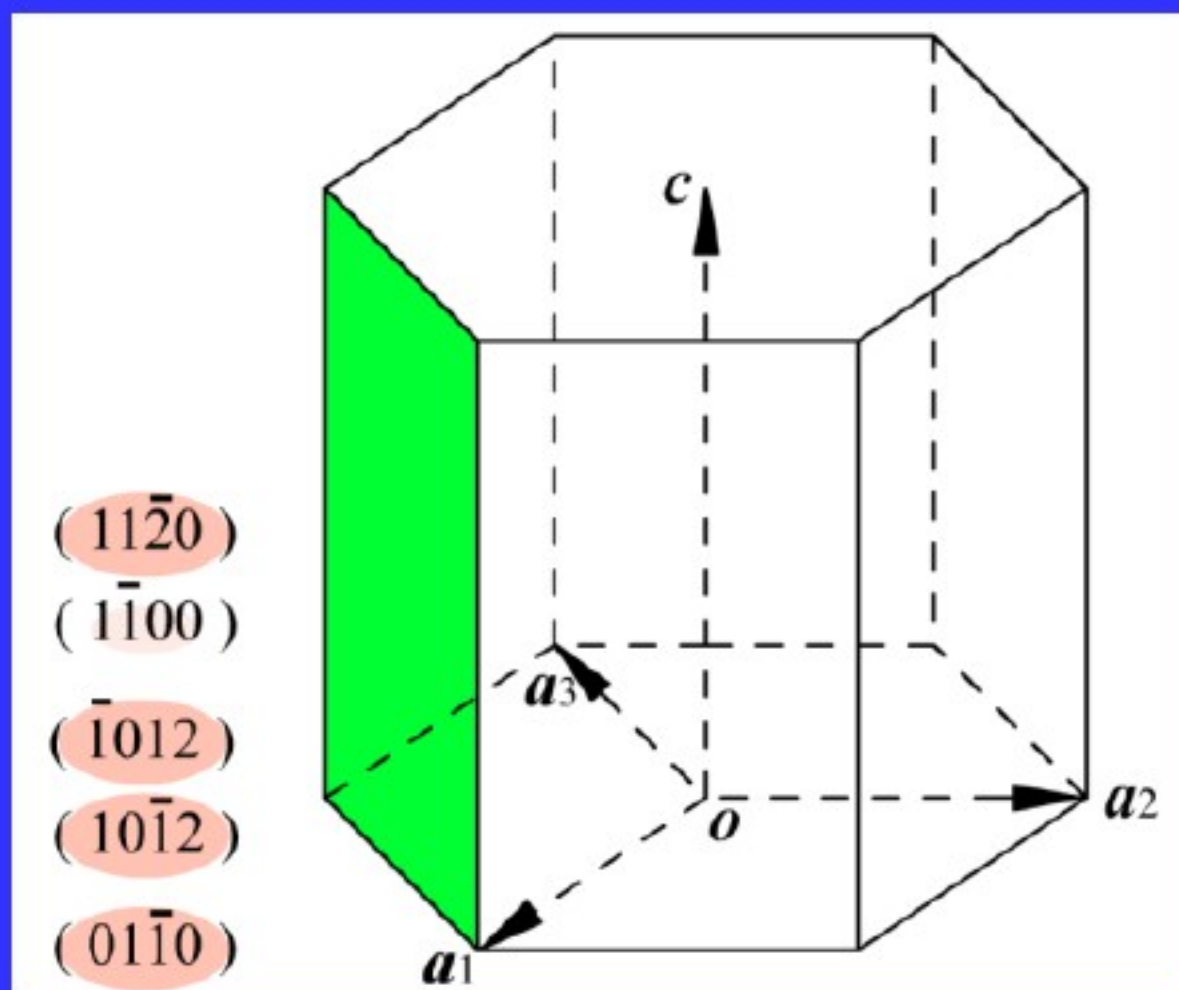


# • 晶体结构理论

## 六方晶面族 $\{h k i l\}$

$$\{10\bar{1}0\} = (10\bar{1}0) + (1100) + (01\bar{1}0) + (\bar{1}010) + (\bar{1}100) + (0\bar{1}10)$$

$$\{11\bar{2}0\} = (11\bar{2}0) + (12\bar{1}0) + (21\bar{1}0) + (\bar{1}\bar{1}20) + (\bar{1}210) + (2110)$$







# • 晶体结构理论

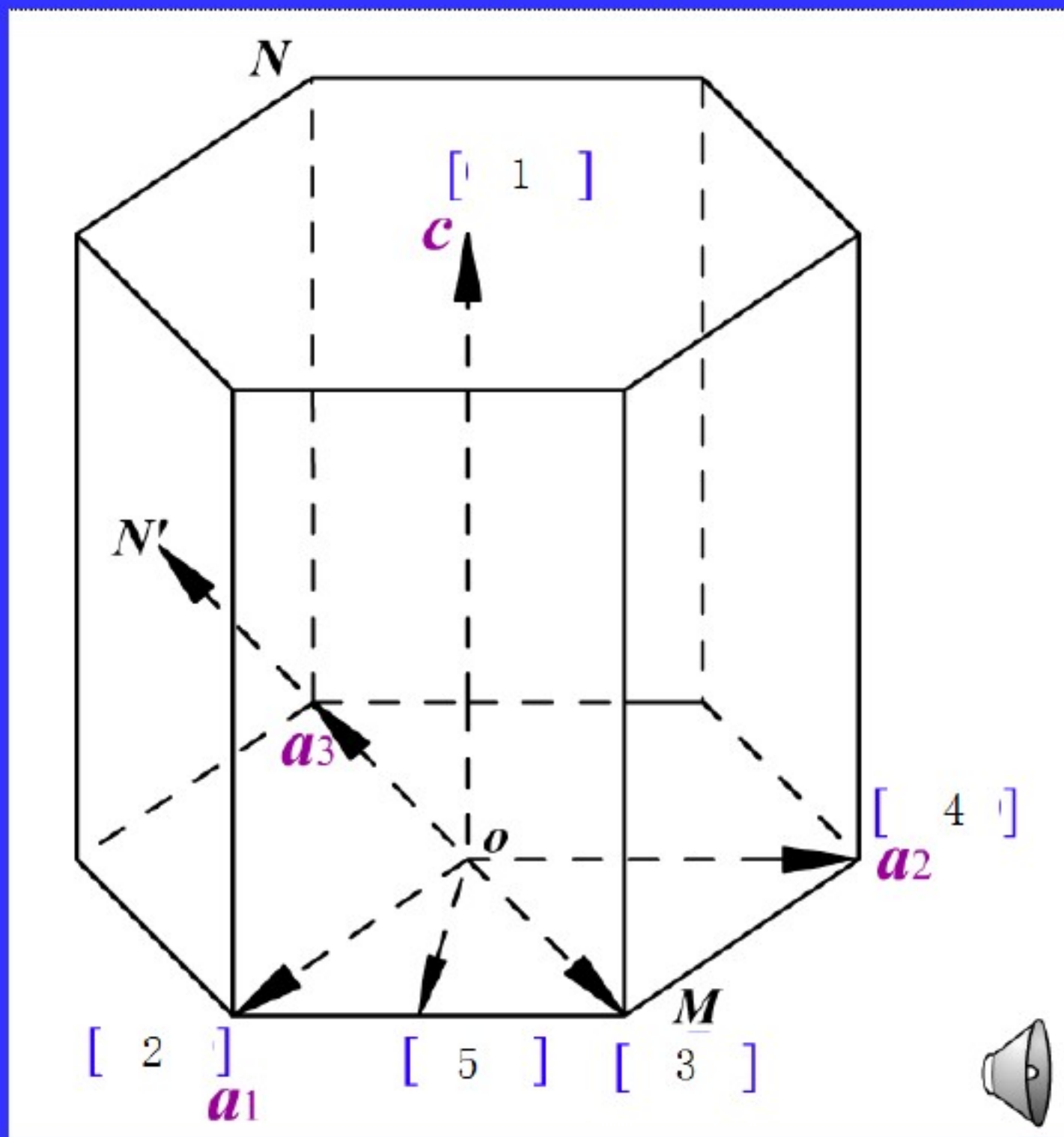
## 六方晶向指数 $(U V T W)$ 或 $(u v w)$

$$U = (2u - v)/3$$

$$V = (2v - u)/3$$

$$T = -(U + V)$$

$$W = w$$





## 六方晶向指数 $(U V T W)$ 或 $(u v w)$

$$U = (2u - v)/3$$

$$V = (2v - u)/3$$

$$T = -(U + V)$$

$$W = w$$





# • 晶体结构理论

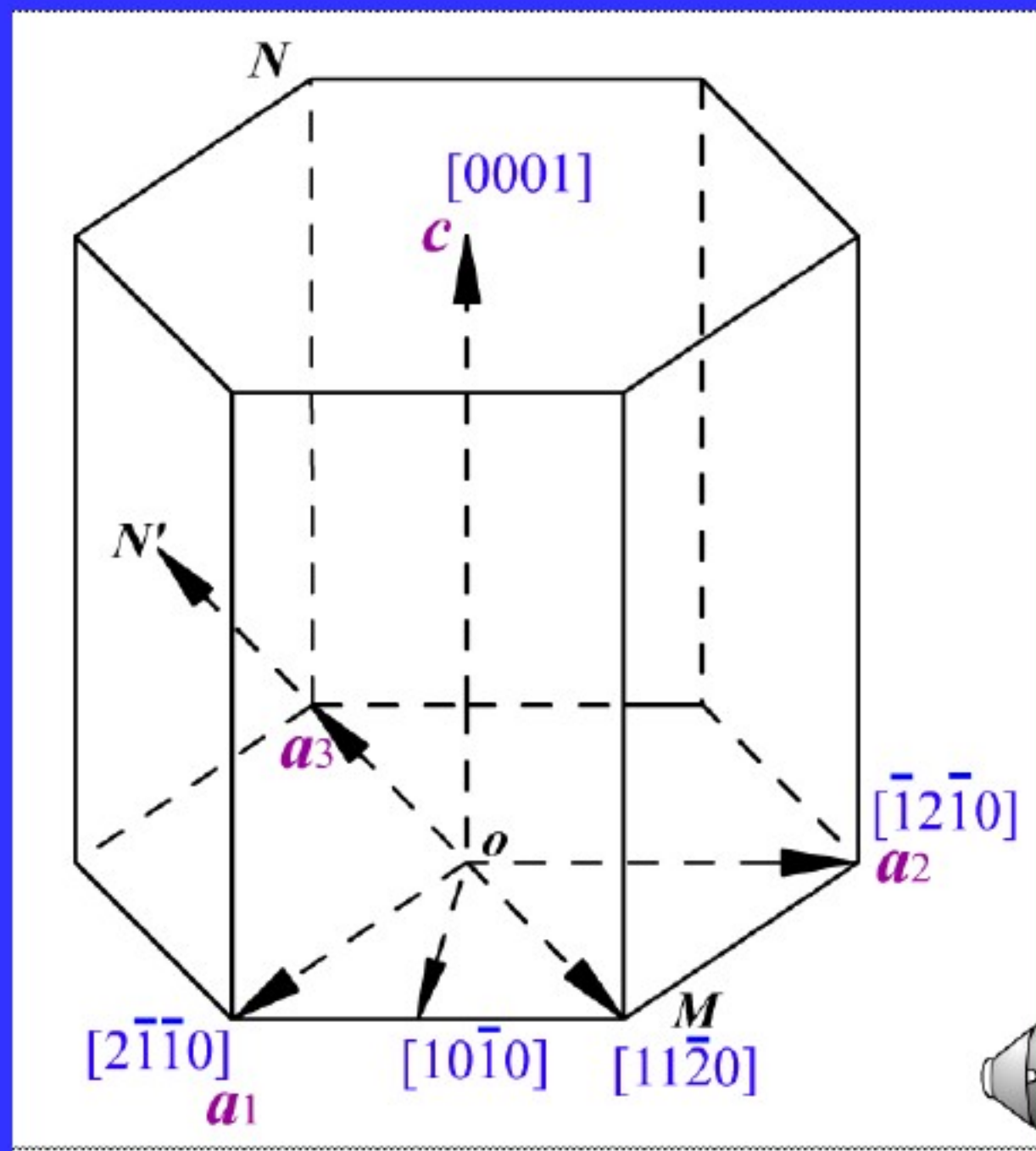
## 六方晶向指数 ( $UVTW$ )或( $uvw$ )

$$U = (2u - v)/3$$

$$V = (2v - u)/3$$

$$T = -(U + V)$$

$$W = w$$







# • 晶体结构理论

## 纯金属的晶体结构

### • 体心立方

• Nb, Ta, Cr, Mo, W,  $\alpha$ -Fe

### • 面心立方

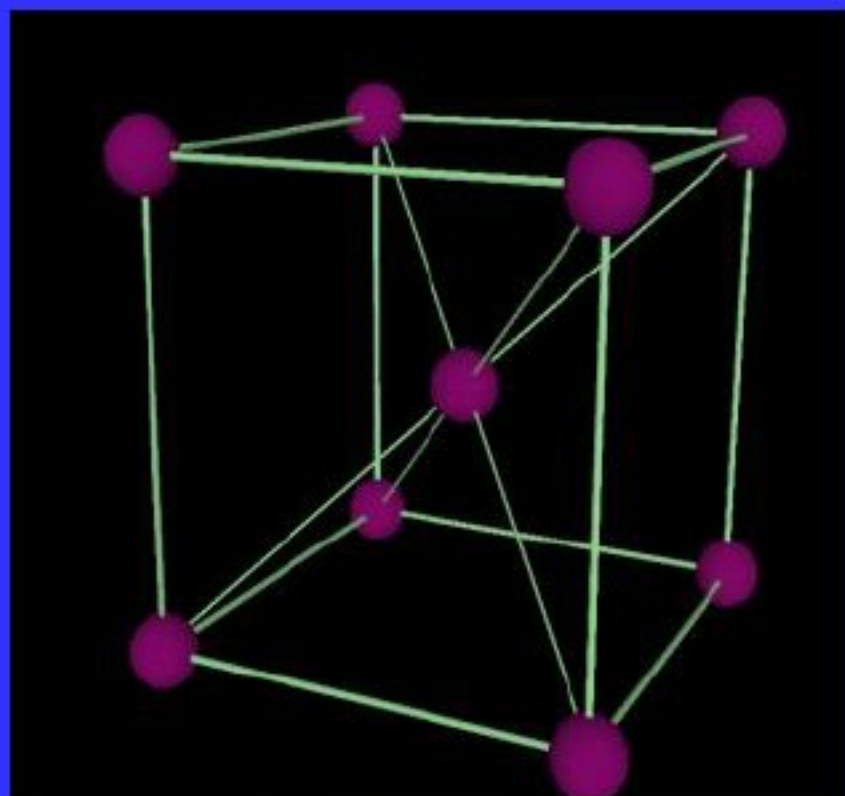
• Al,  $\gamma$ -Fe, Ni, Pb, Pd, Pt, 奥氏体不锈钢等

### • 密排六方

•  $\alpha$ -Ti,  $\alpha$ -Zr,  $\alpha$ -Hf,  $\alpha$ -Co, Mg, Zn,



# • 晶体结构理论



## 体心立方

点阵常数:  $a=b=c$

晶胞中原子数: 2

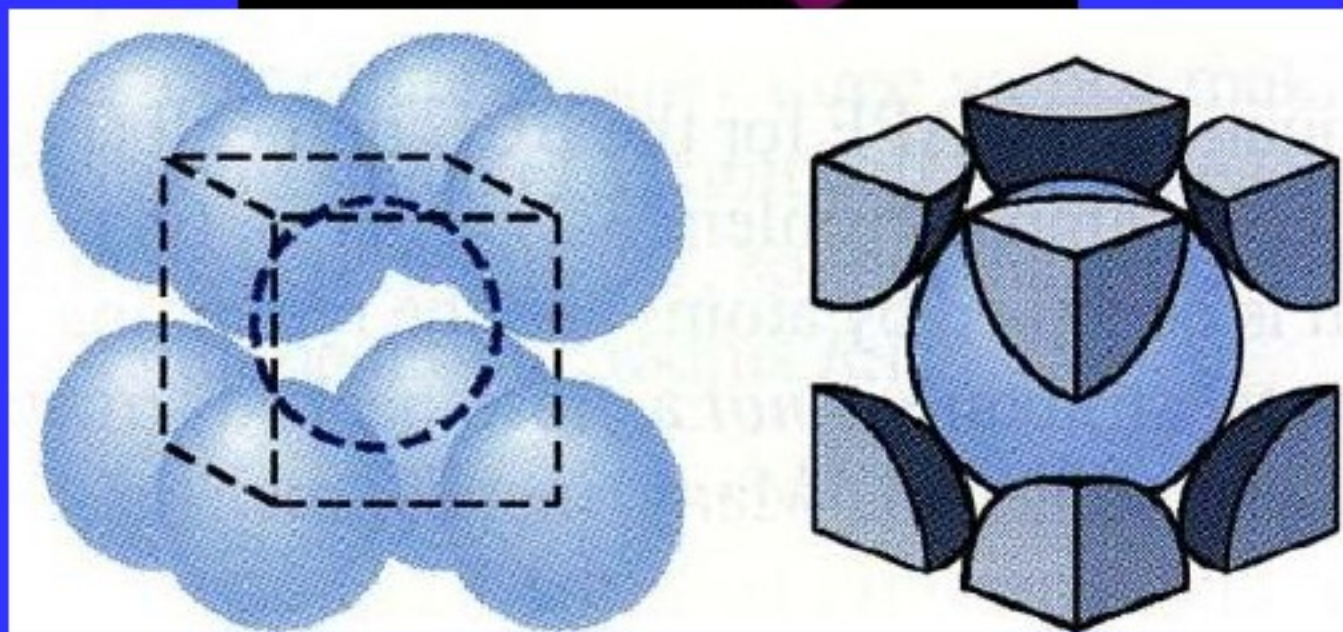
原子半径:  $\sqrt{3}a/4$

致密度: 0.68

配位数: 12

密排面 (110)

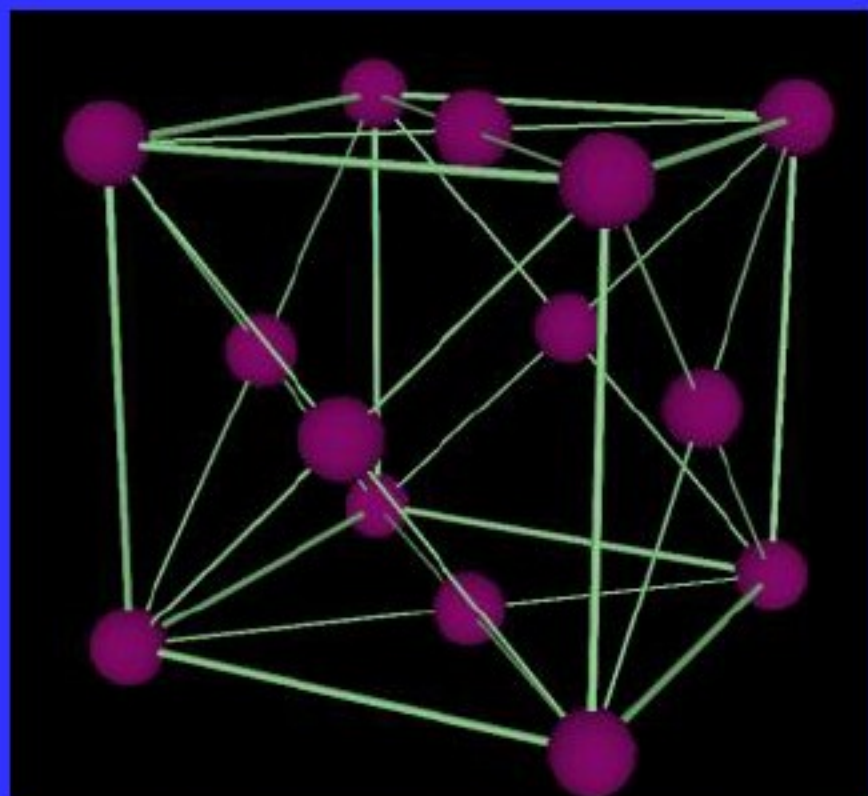
密排方向[111]







# • 晶体结构理论



## 面心立方

点阵常数:  $a=b=c$

晶胞中原子数: 4

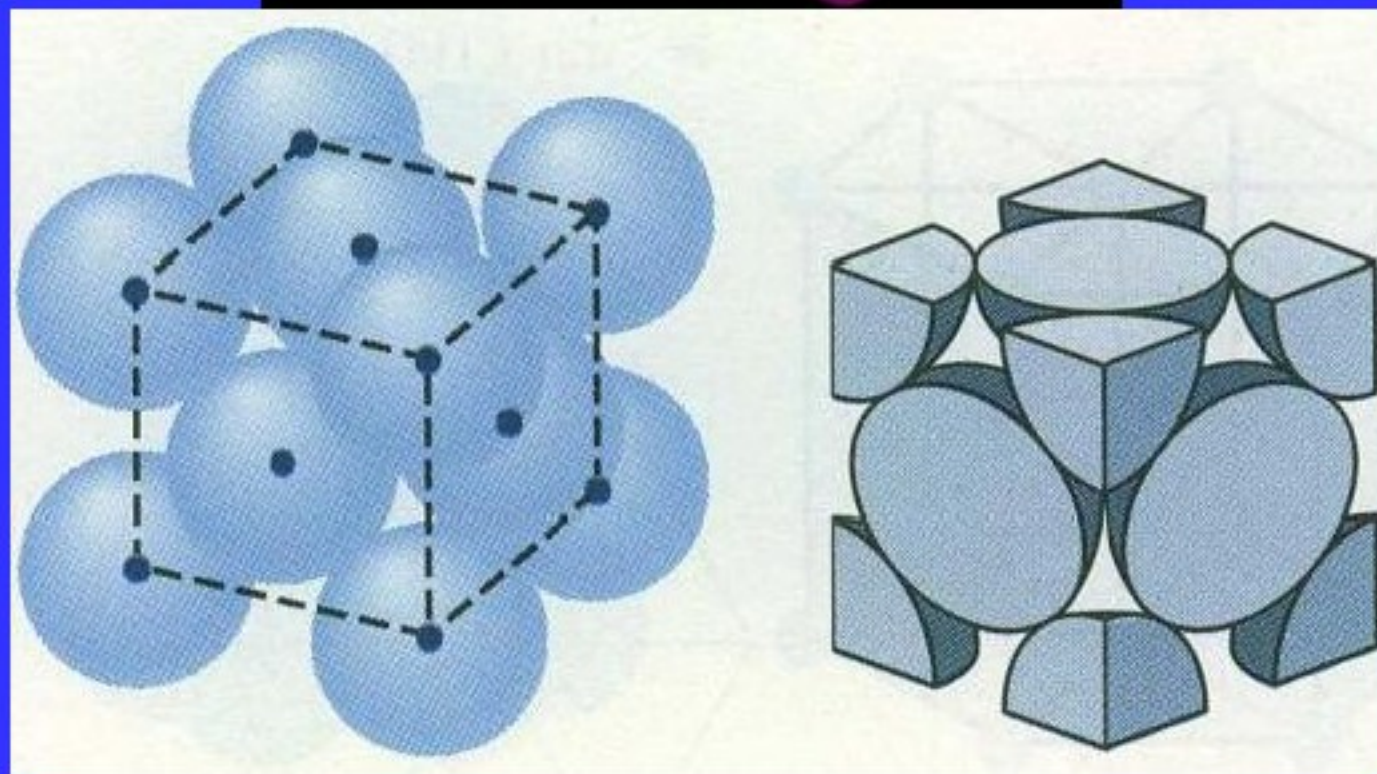
原子半径:  $\sqrt{2}a/4$

致密度: 0.74

配位数: 12

密排面 (111)

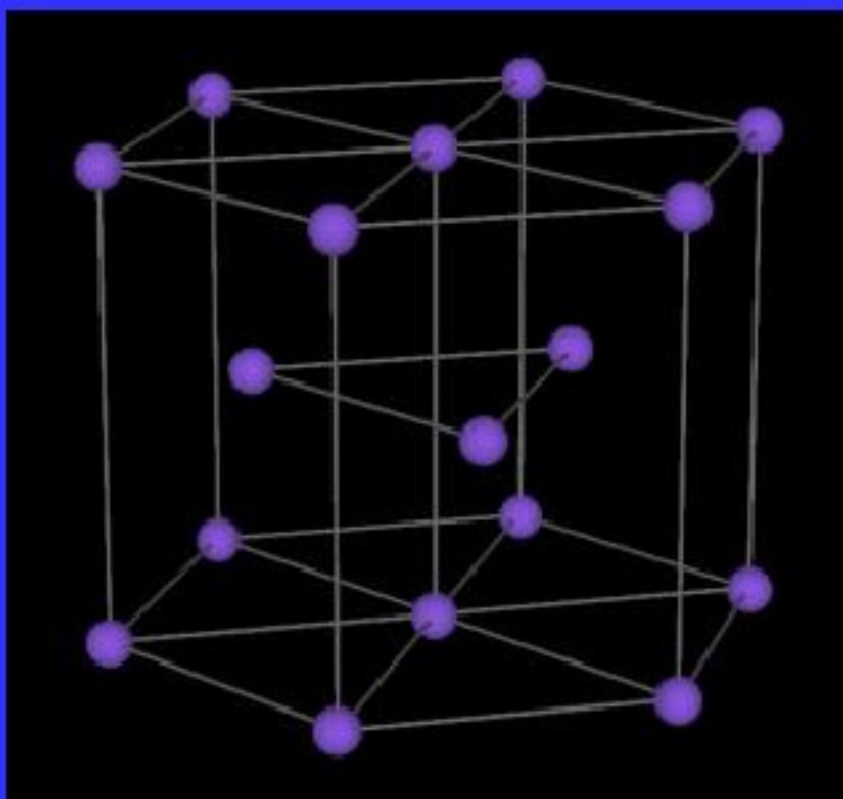
密排方向[110]







# • 晶体结构理论



## 密排六方

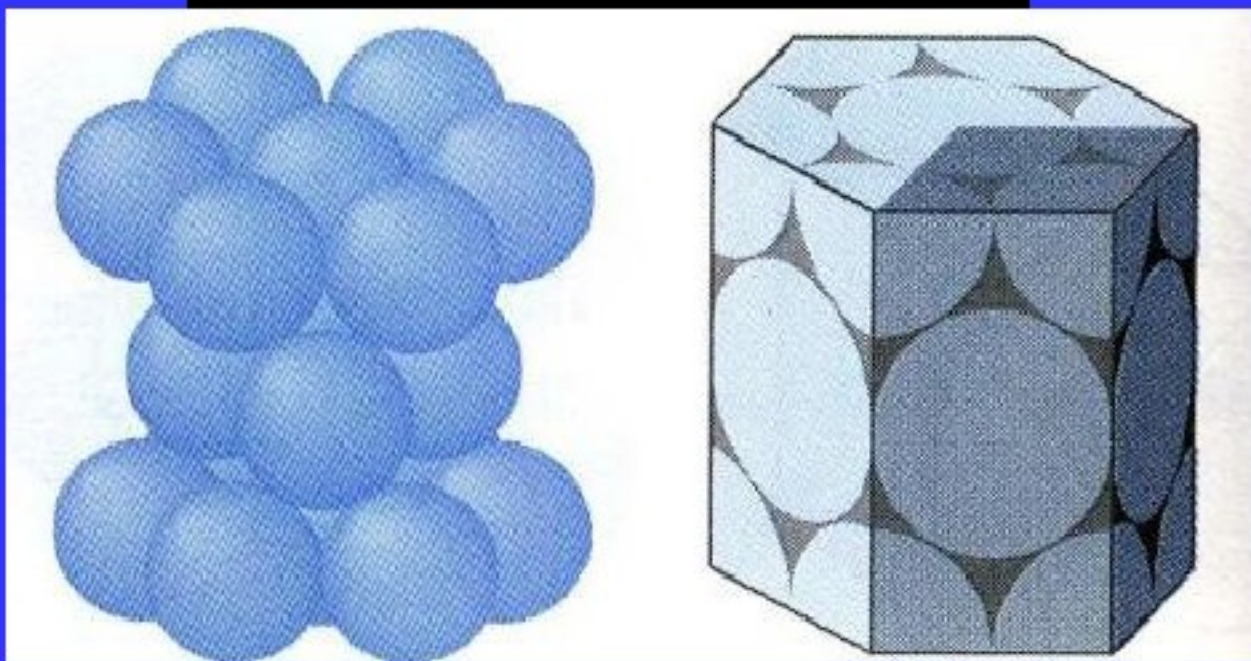
点阵常数:  $c/a=1.633$

晶胞中原子数: 6

原子半径:  $a/2$

致密度: 0.74

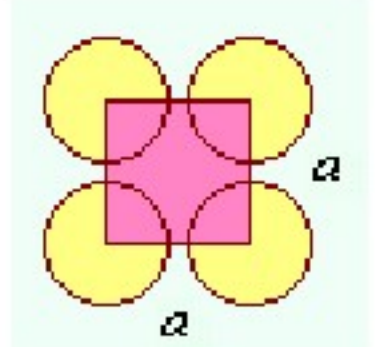
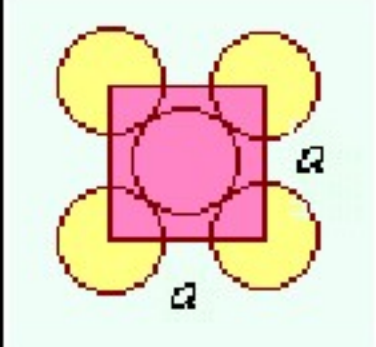
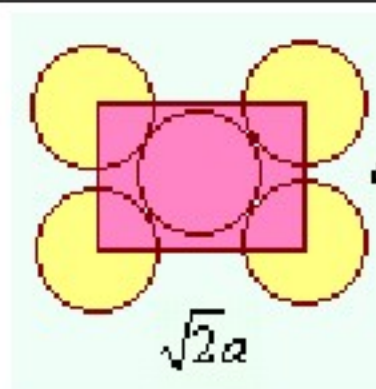
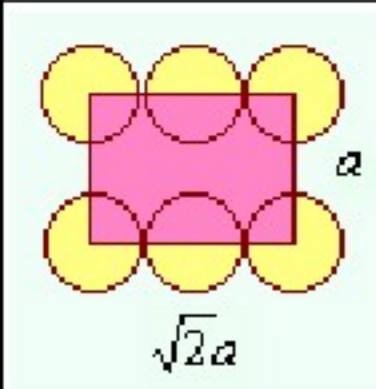
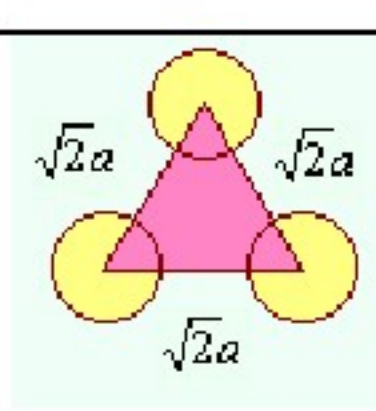
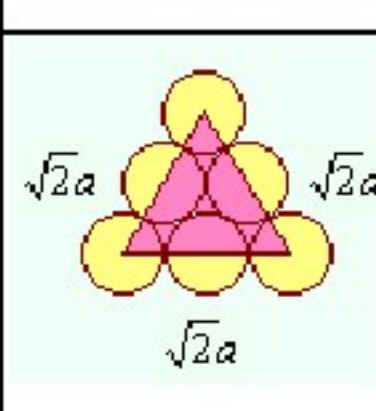
配位数: 12





# • 晶体结构理论

体心立方、面心立方晶格主要晶面的原子排列和密度

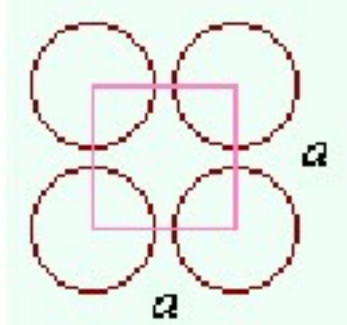
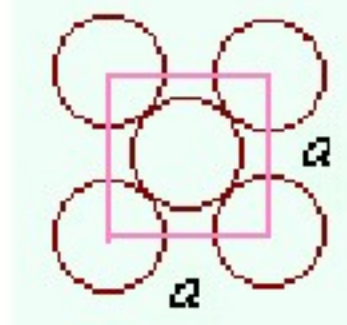
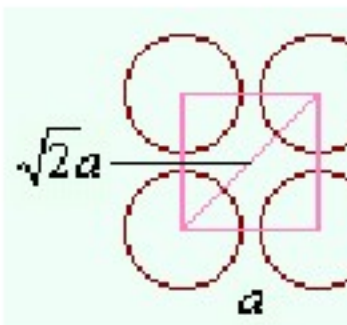
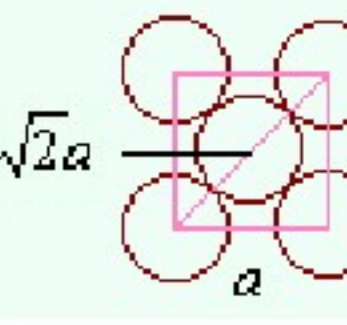
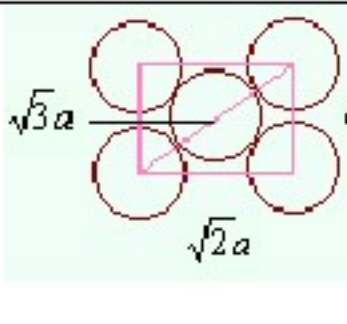
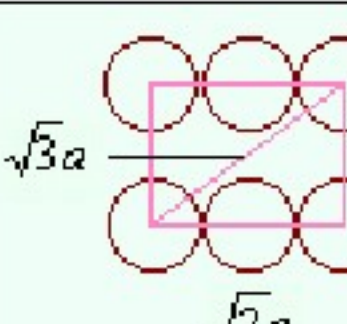
	体心立方晶格		面心立方晶格	
晶面指数	晶面原子排列示意图	晶面原子密度 (原子数/面积)	晶面原子排列示意图	晶面原子密度 (原子数/面积)
{100}		$\frac{4 \times \frac{1}{4}}{a^2} = \frac{1}{a^2}$		$\frac{4 \times \frac{1}{4} + 1}{a^2} = \frac{2}{a^2}$
{110}		$\frac{4 \times \frac{1}{4} + 1}{\sqrt{2}a^2} = \frac{1.5}{a^2}$		$\frac{4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{2}a^2} = \frac{2.5}{a^2}$
{111}		$\frac{3 \times \frac{1}{6}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{0.5}{a^2}$		$\frac{3 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{2}{a^2}$





# • 晶体结构理论

体心立方、面心立方晶格主要晶向的原子排列和密度

	体心立方晶格		面心立方晶格	
晶向指数	晶向原子排列示意图	晶向原子密度 (原子数/长度)	晶向原子排列示意图	晶向原子密度 (原子数/长度)
$\langle 100 \rangle$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$
$\langle 110 \rangle$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{2}a} = \frac{0.7}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2} + 1}{\sqrt{2}a} = \frac{1.4}{a}$
$\langle 111 \rangle$		$\frac{2 \times \frac{1}{2} + 1}{\sqrt{3}a} = \frac{1.16}{a}$		$\frac{2 \times \frac{1}{2}}{\sqrt{3}a} = \frac{0.58}{a}$





# • 晶体结构理论

铜为面心立方结构，X射线衍射测定  
 $a=0.3615\text{nm}$ ,

(1) 按刚球密堆模型计算最近邻原子中心距离是多少？以任一原子为中心，这样距离的原子数目是多少？

(2) 原子密排面和密排方向是什么？

(3) 原子密排面 $\{hkl\}$ 和密排方向 $\langle uvw \rangle$ 组成的 $\{hkl\}\langle uvw \rangle$ （注意： $[uvw]$ 须位于 $(hkl)$ 面上）共有多少组？





# • 晶体结构理论

**A1**（面心立方）和**A3**（密排六方）结构具有相同的紧密系数，为0.7404。数学家曾经证明，若将相同直径的硬球，在空间进行堆积，其最大的紧密系数就是0.7404。所以，**A1**和**A3**结构都是最紧密堆积的结构。

问题（1）请指出**A1**和**A3**堆积结构的差异。

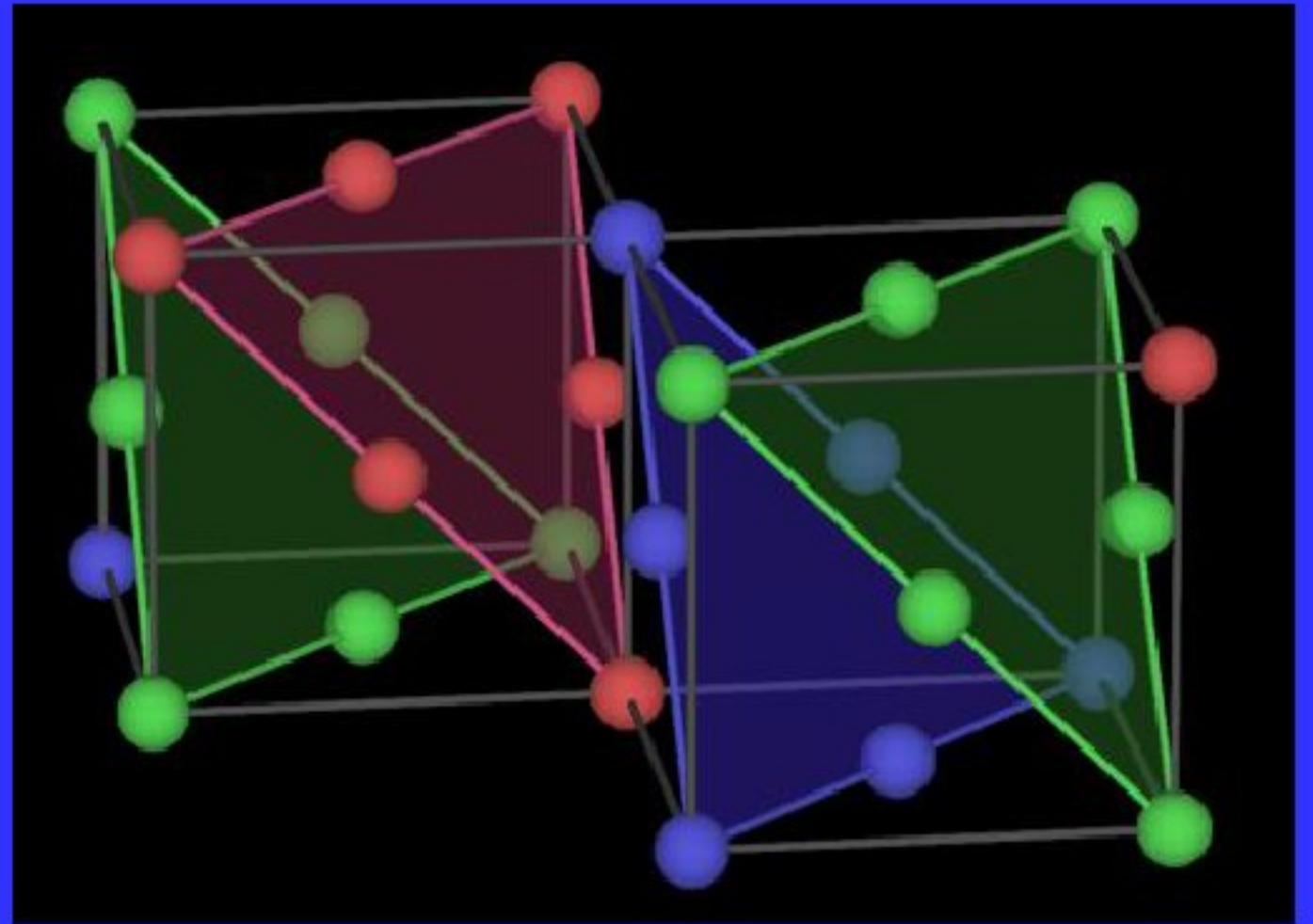
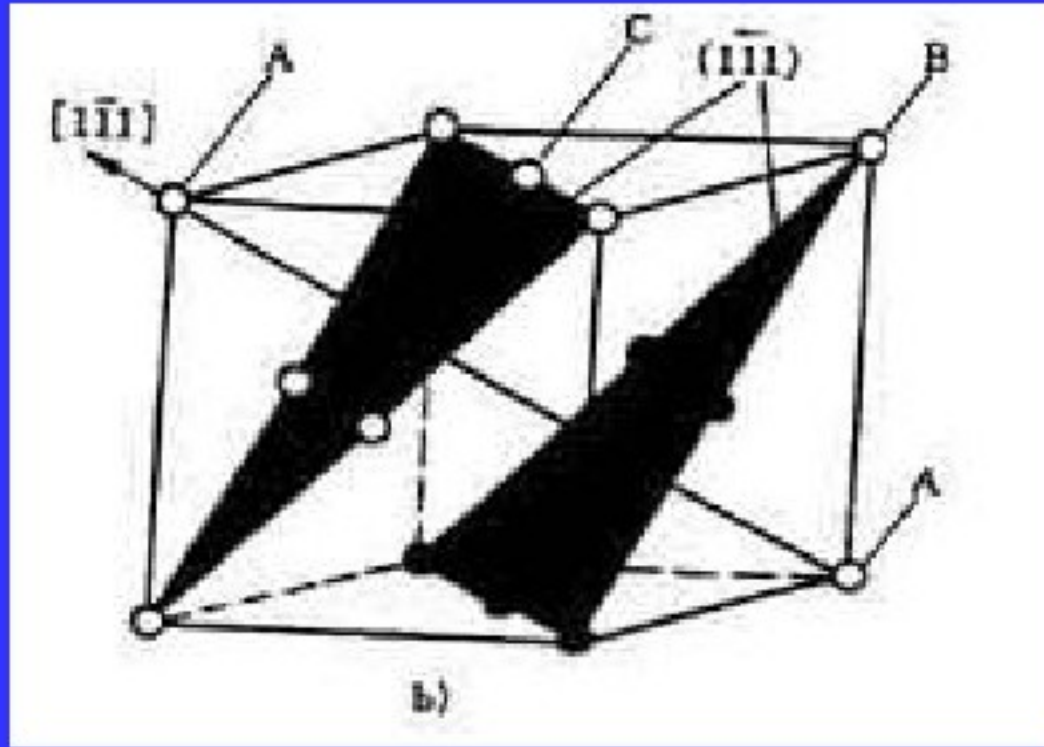
（提示：请先分析**A1**以（111）晶面进行的堆积，**A3**以（0001）晶面进行的堆积，再讨论两者之间的差异。）

问题（2）请指出，**A1**结构经过怎样的变化，可以变成**A3**结构。





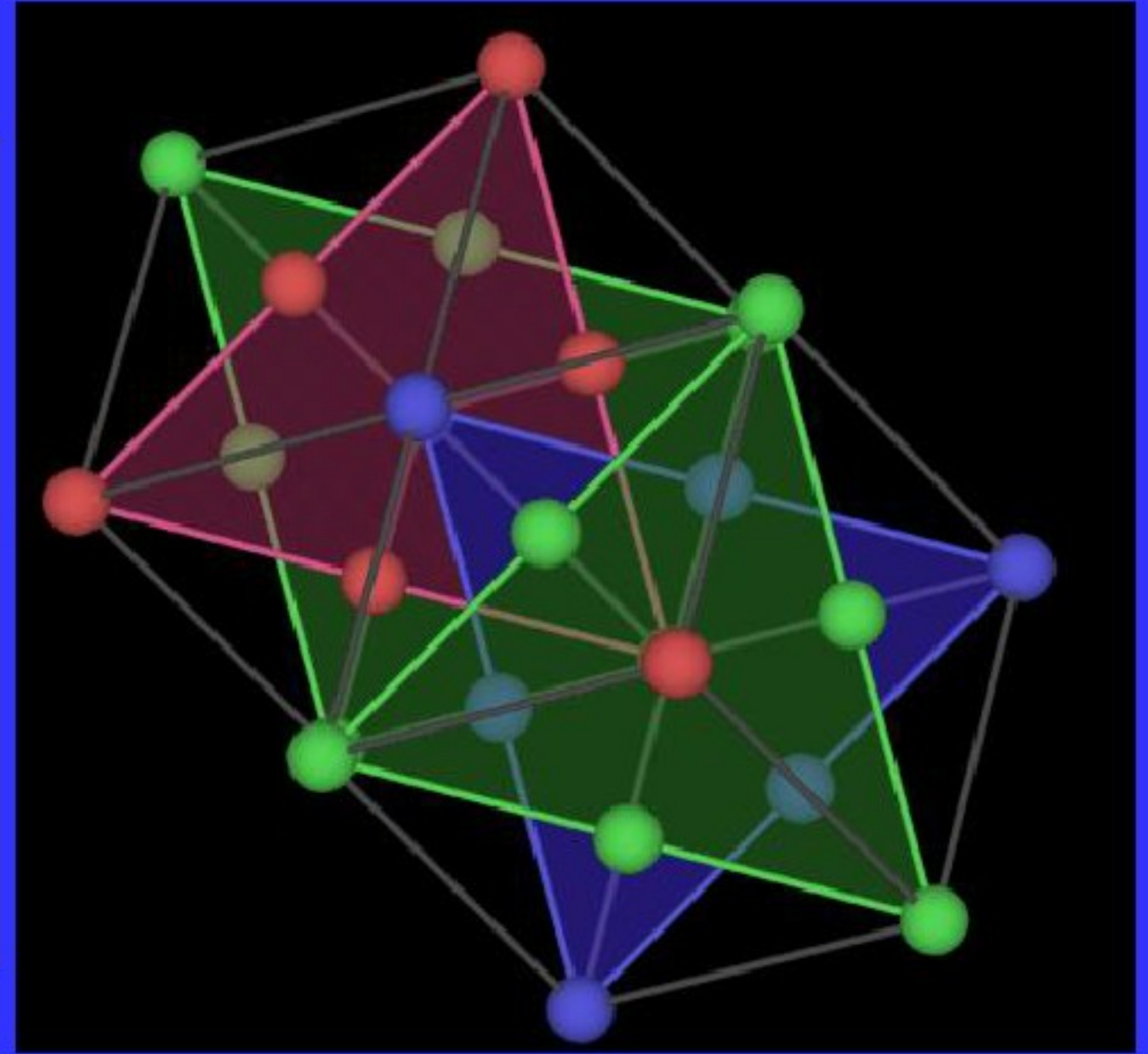
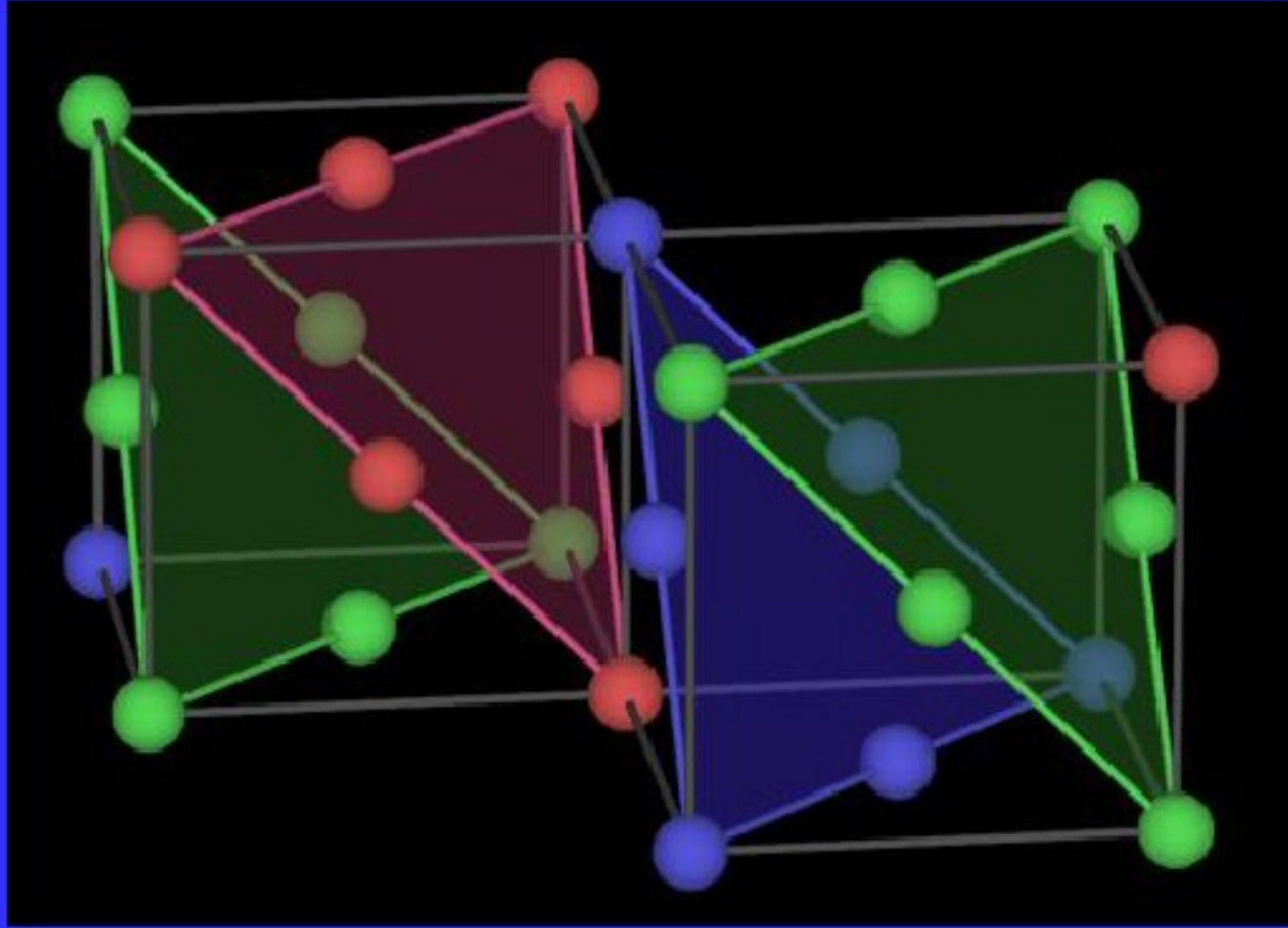
# • 晶体结构理论





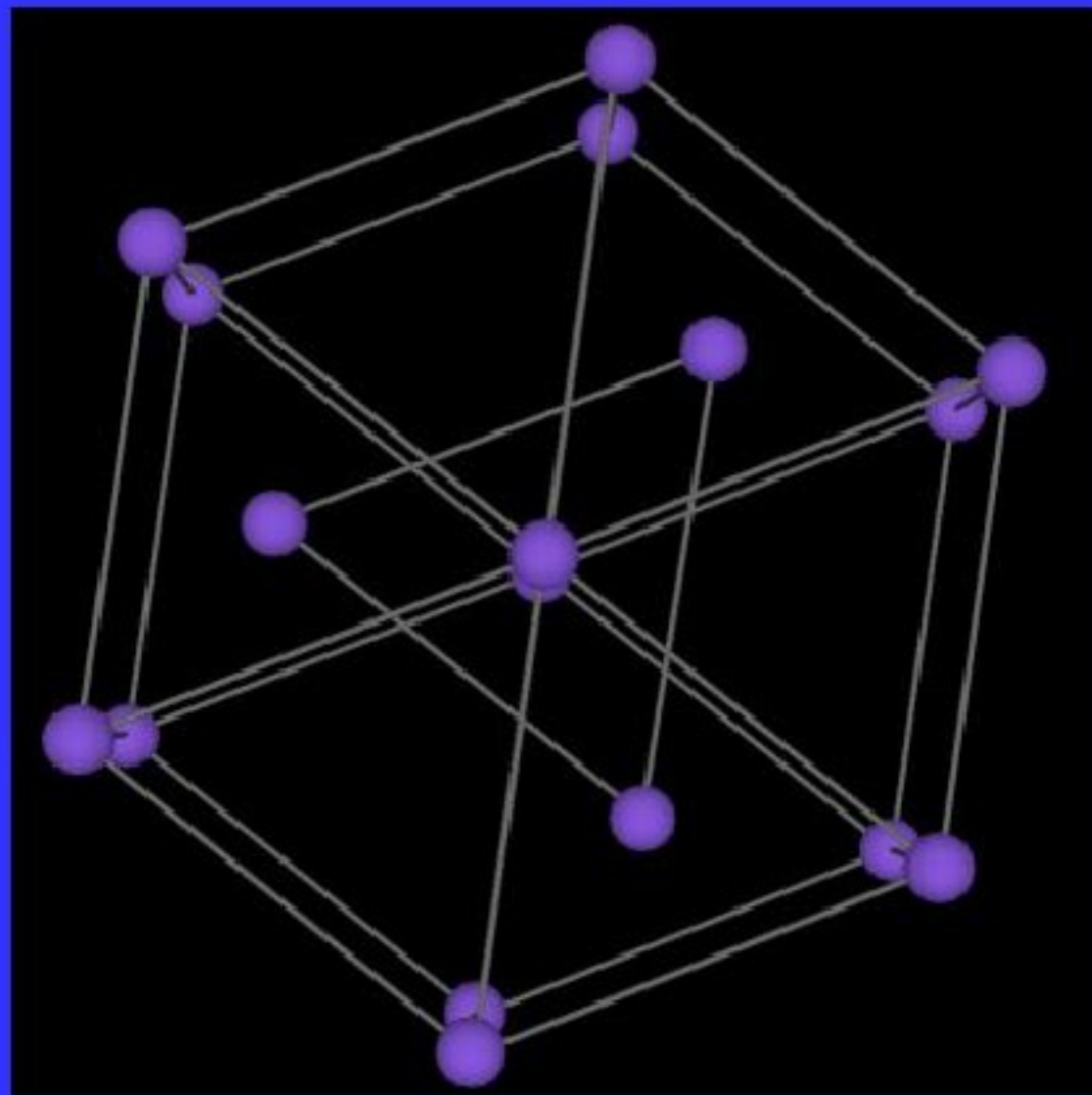
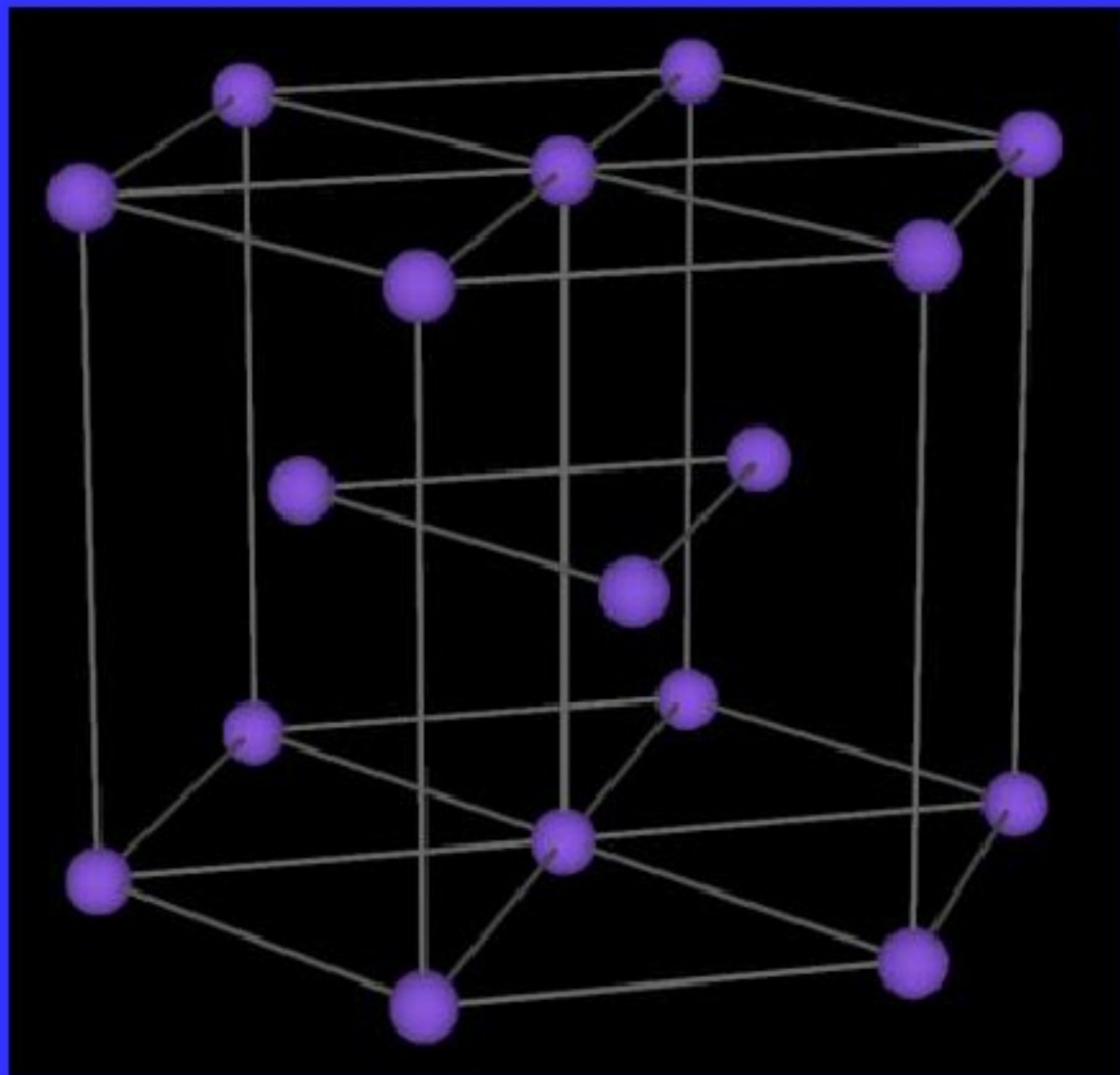


# • 晶体结构理论





# • 晶体结构理论







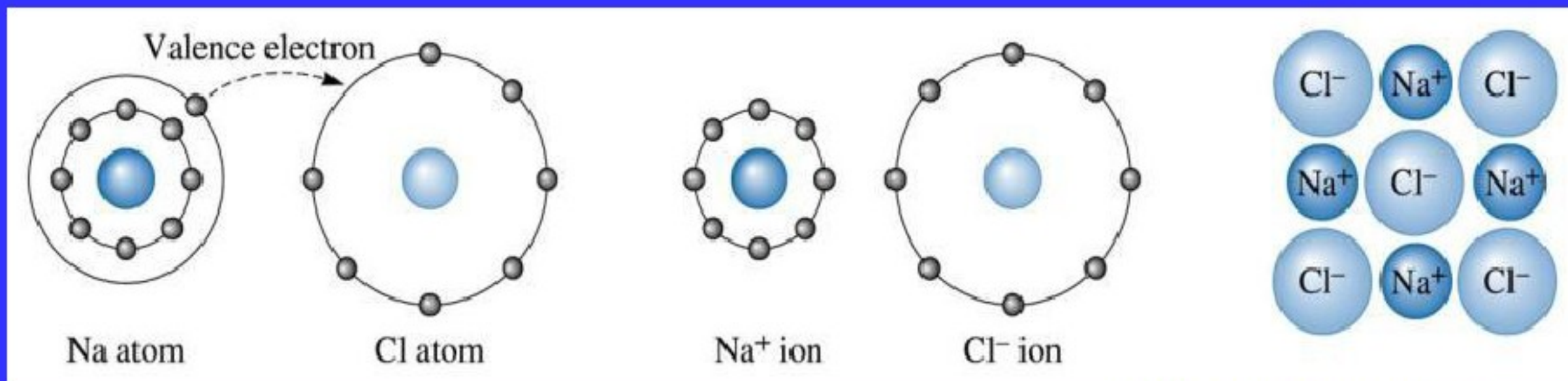
# • 晶体结构理论

## 原子结合键

### (1) 离子键与离子晶体

原子结合：电子转移，结合力大，无方向性和饱和性；

离子晶体：硬度高，脆性大，熔点高、导电性差。如氧化物陶瓷。





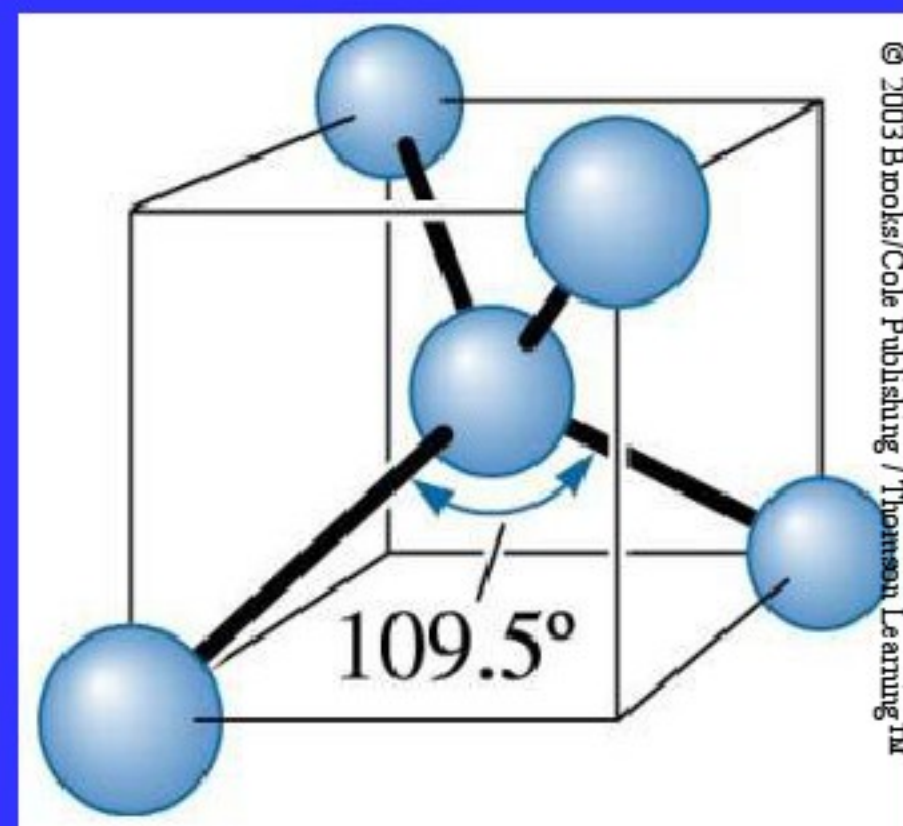
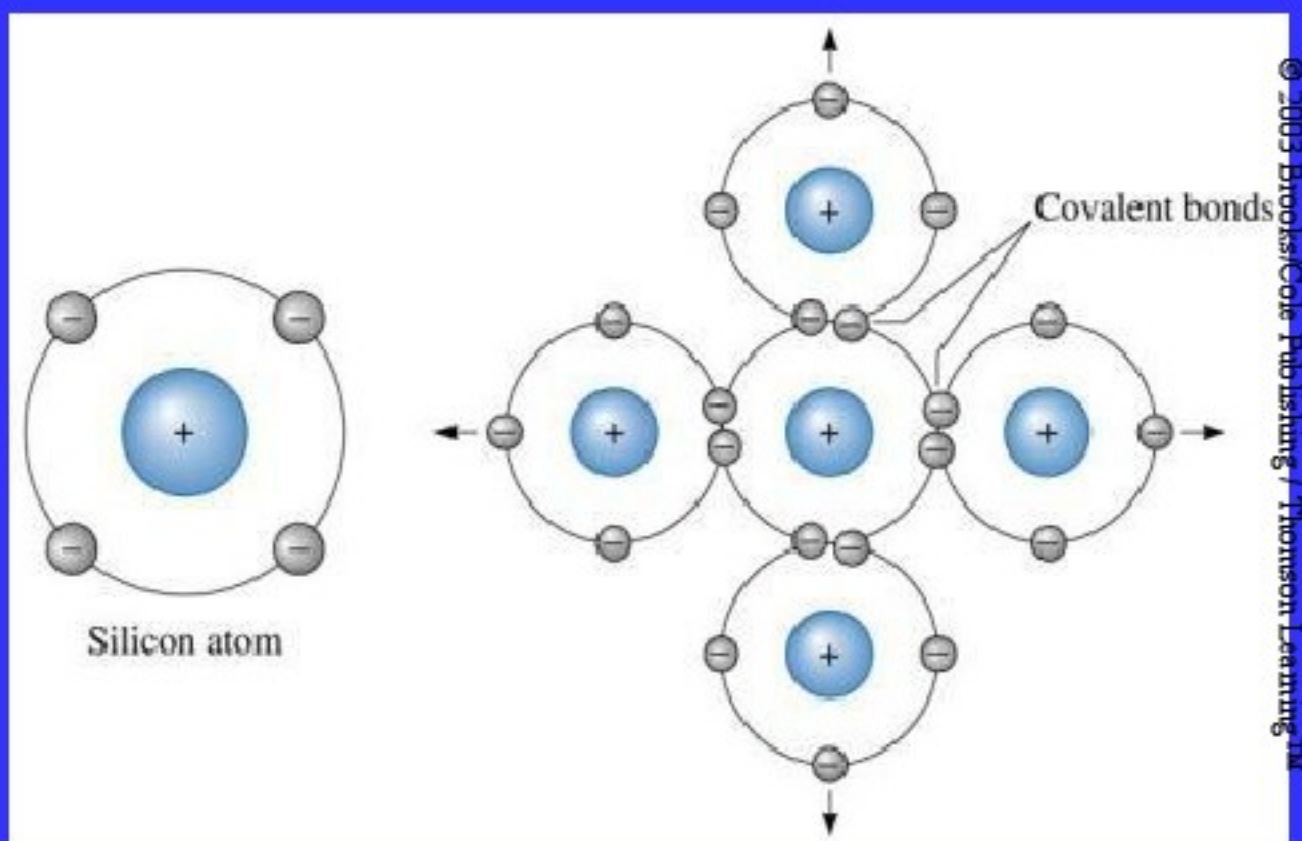


# • 晶体结构理论

## (2) 共价键与原子晶体

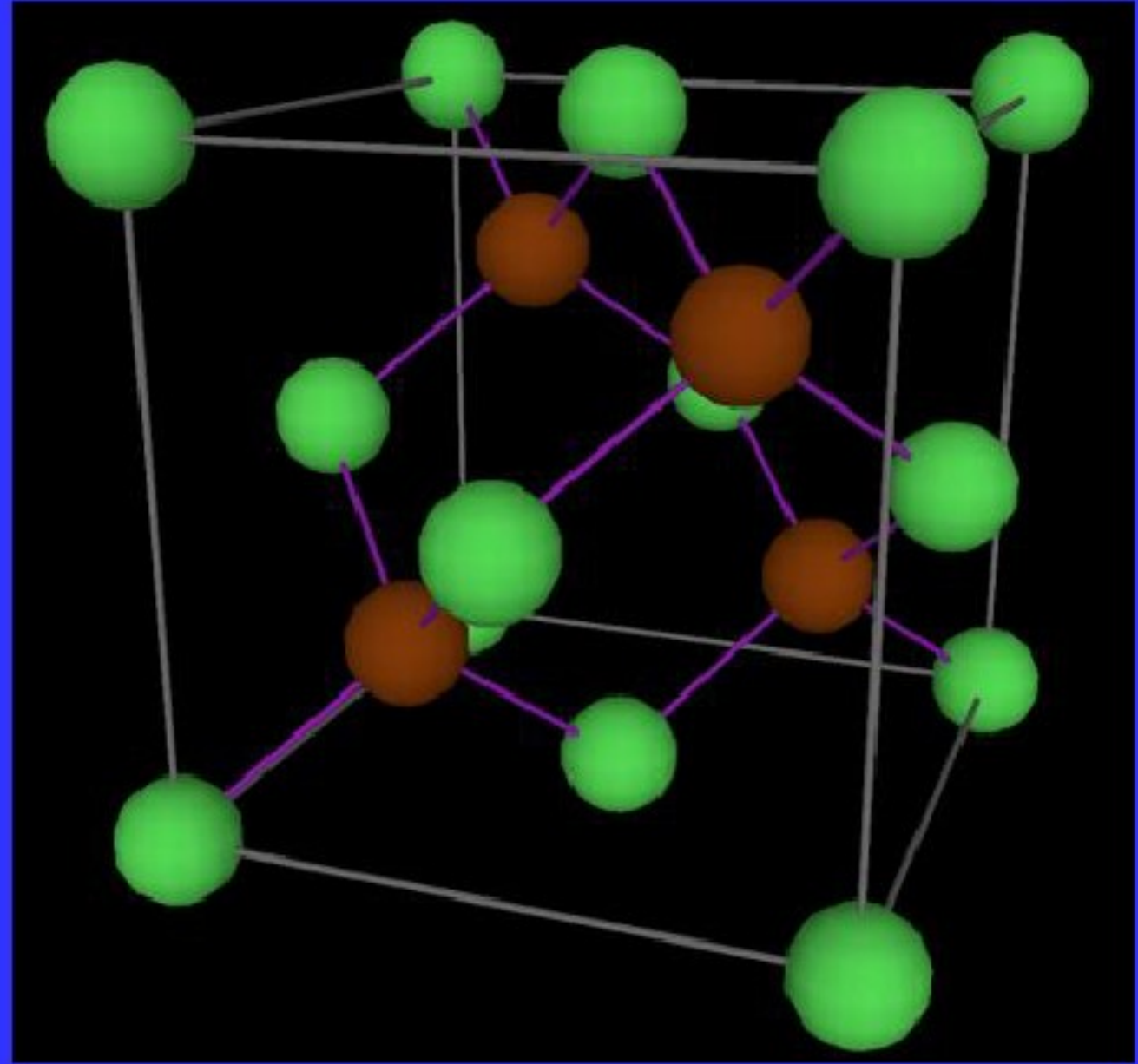
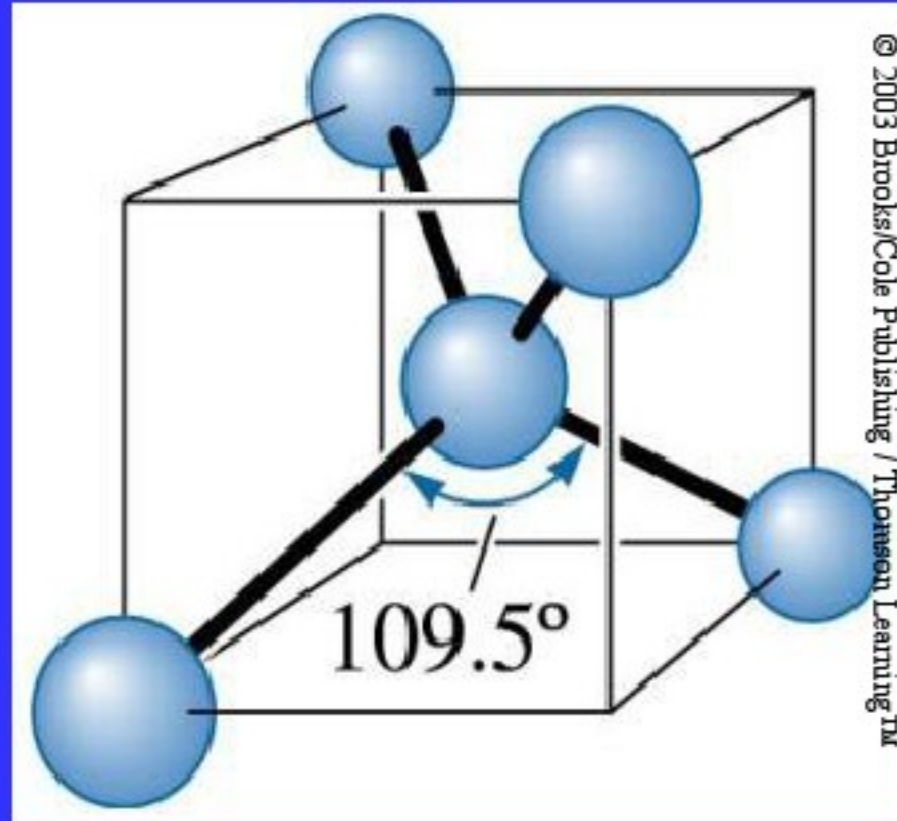
原子结合：电子共用，结合力大，有方向性和饱和性；

原子晶体：强度高、硬度高（金刚石）、熔点高、脆性大、导电性差。如高分子材料。





# • 晶体结构理论







# • 晶体结构理论

## (3) 金属键与金属晶体

原子结合：电子逸出共有，结合力较大，无方向性和饱和性；

金属晶体：导电性、导热性、延展性好，熔点较高。如金属。

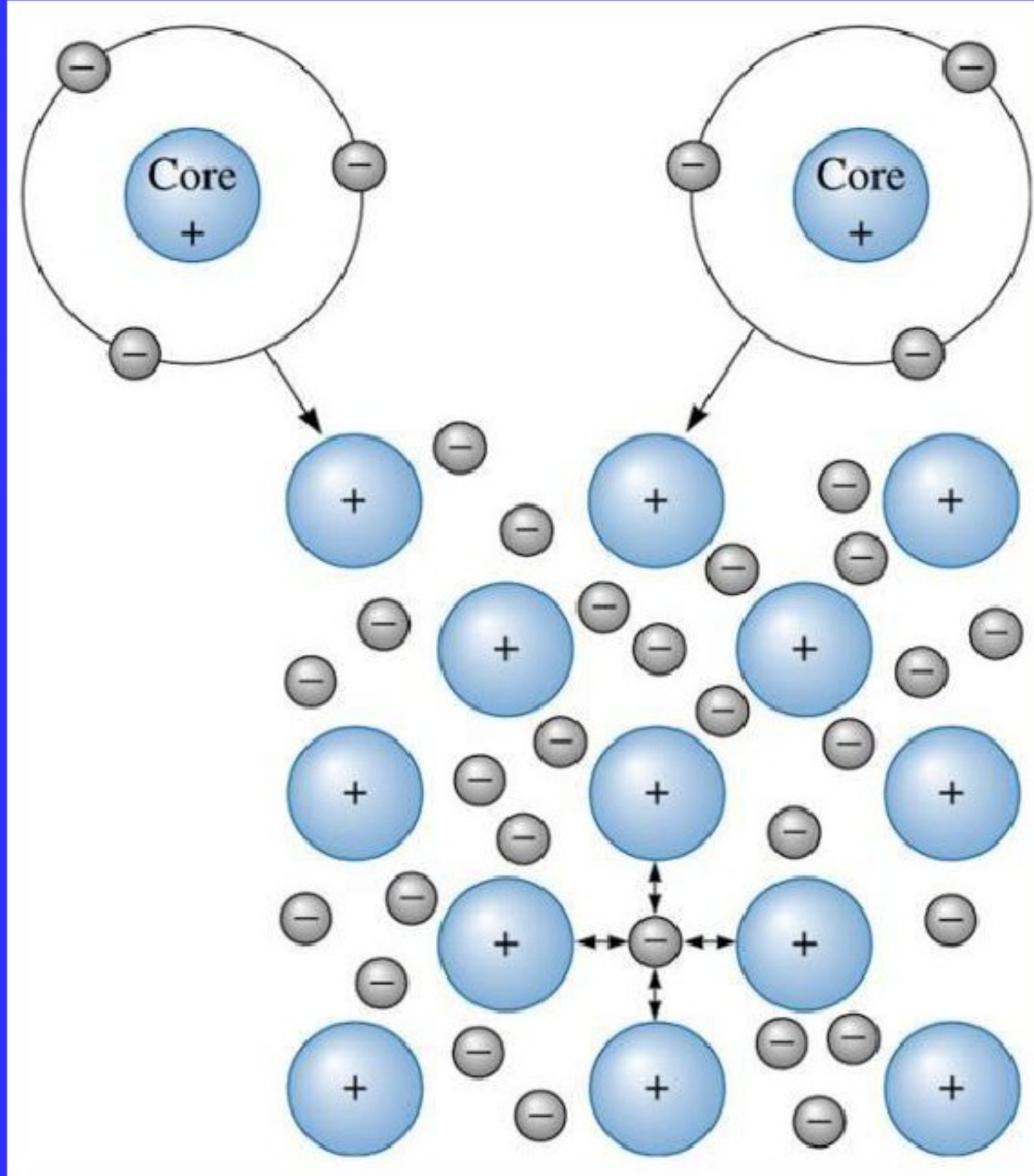
金属键：依靠正离子与构成电子气的自由电子之间的静电引力而使诸原子结合到一起的方式。





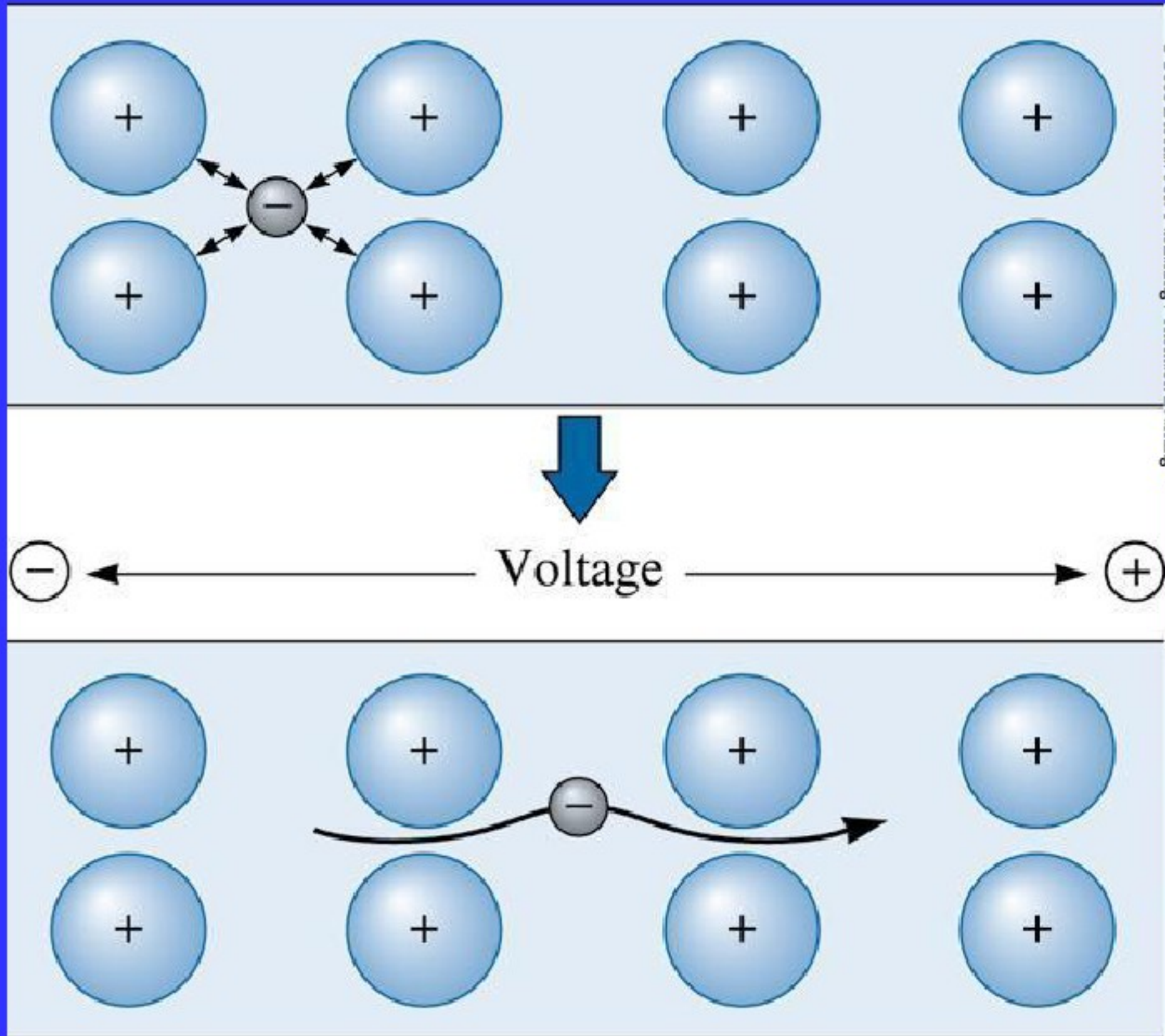
# • 晶体结构理论

© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™





# • 晶体结构理论





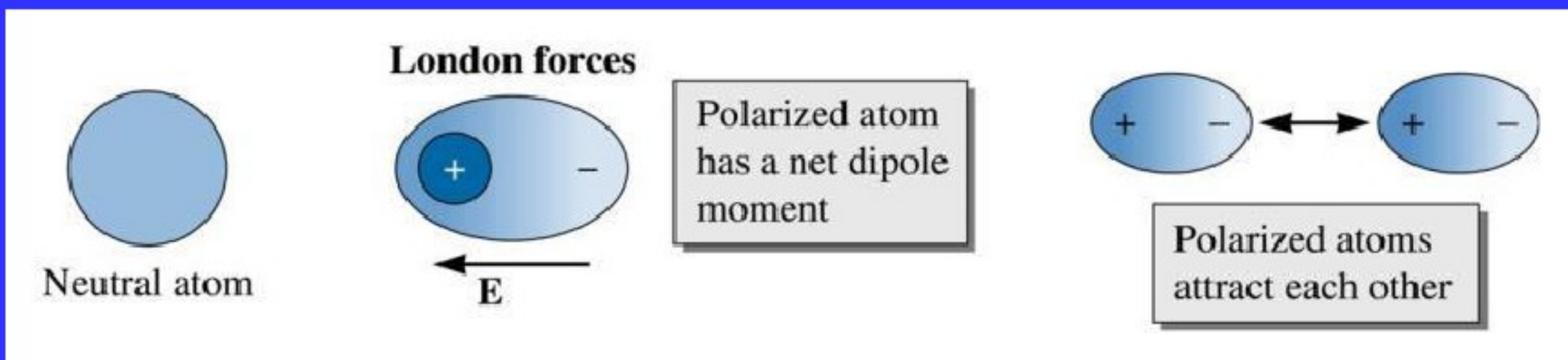


# • 晶体结构理论

## (4) 分子键与分子晶体

原子结合：电子云偏移，结合力很小，无方向性和饱和性。

分子晶体：熔点低，硬度低。如高分子材料。



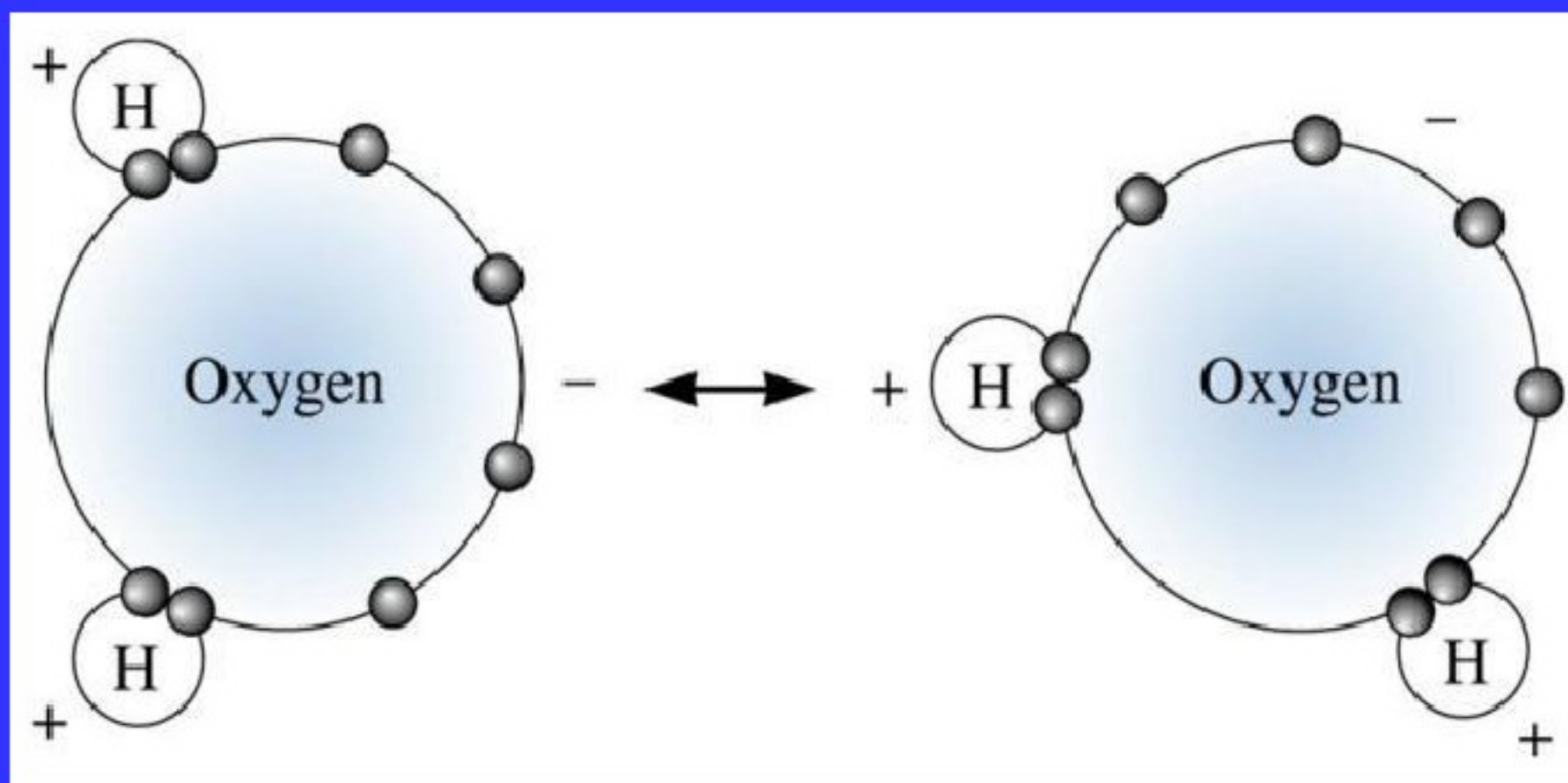




# • 晶体结构理论

## (4) 分子键与分子晶体

氢键：（离子结合） $X-H \cdots Y$ （氢键结合），有方向性，  
如  $O-H \cdots O$





# • 晶体结构理论

## 结合键分类

- (1) 一次键（化学键）：金属键、共价键、离子键。
- (2) 二次键（物理键）：分子键和氢键。





# • 晶体结构理论

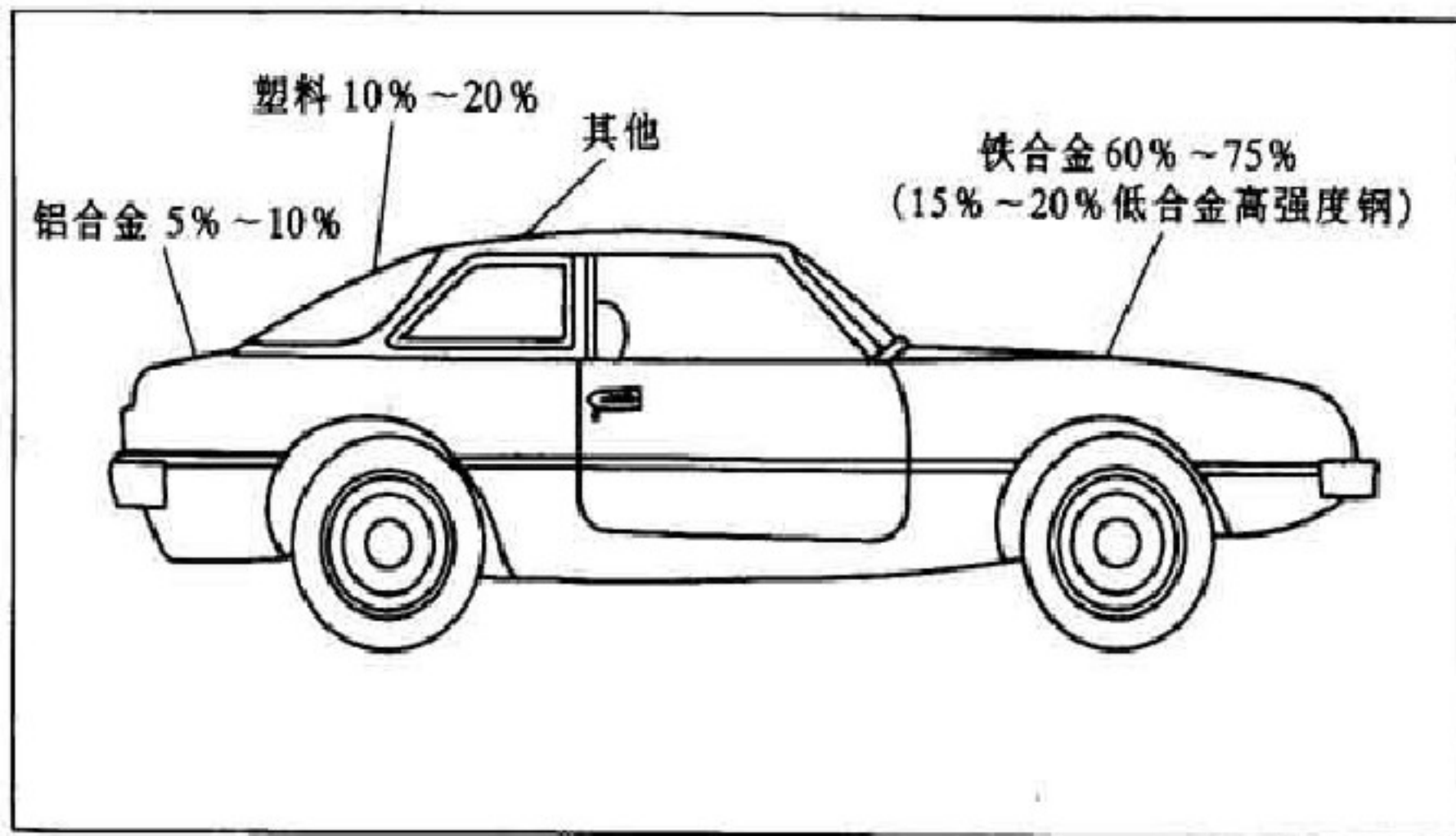


图 0-1 汽车中各种材料的大致比例



# • 晶体结构理论

## 合金的晶体结构

### • 什么是合金？

- 合金是由金属和其他一种或多种元素通过化学键键合而形成的材料
- 组成合金的每种元素称为组元





# • 晶体结构理论

## 合金的晶体结构

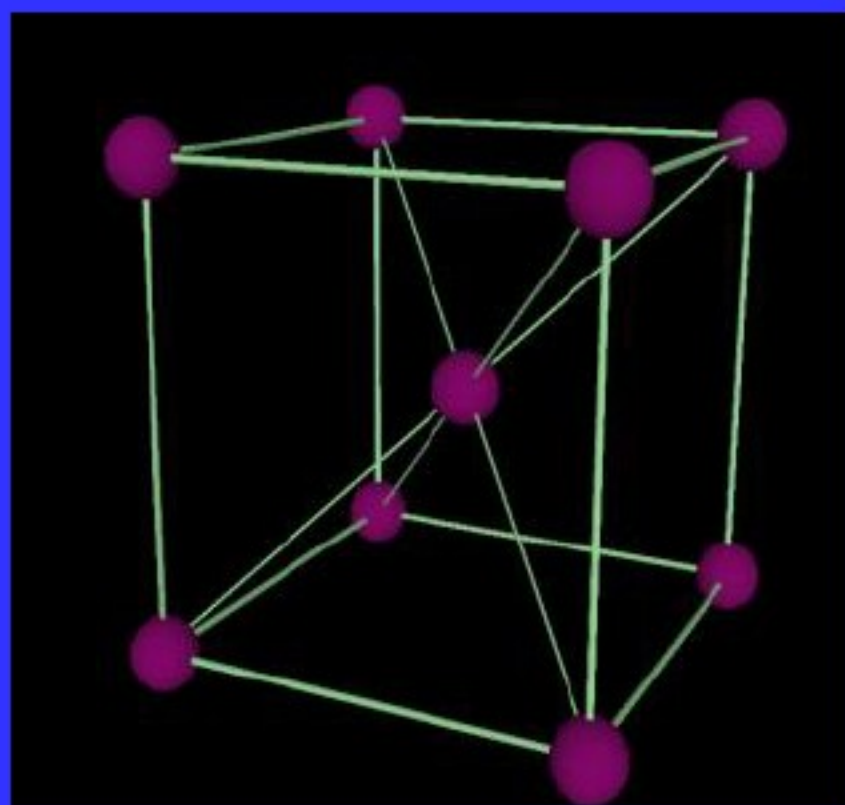
- 铁+碳：（碳）钢
- 铁+碳+其它（合金）元素：合金钢



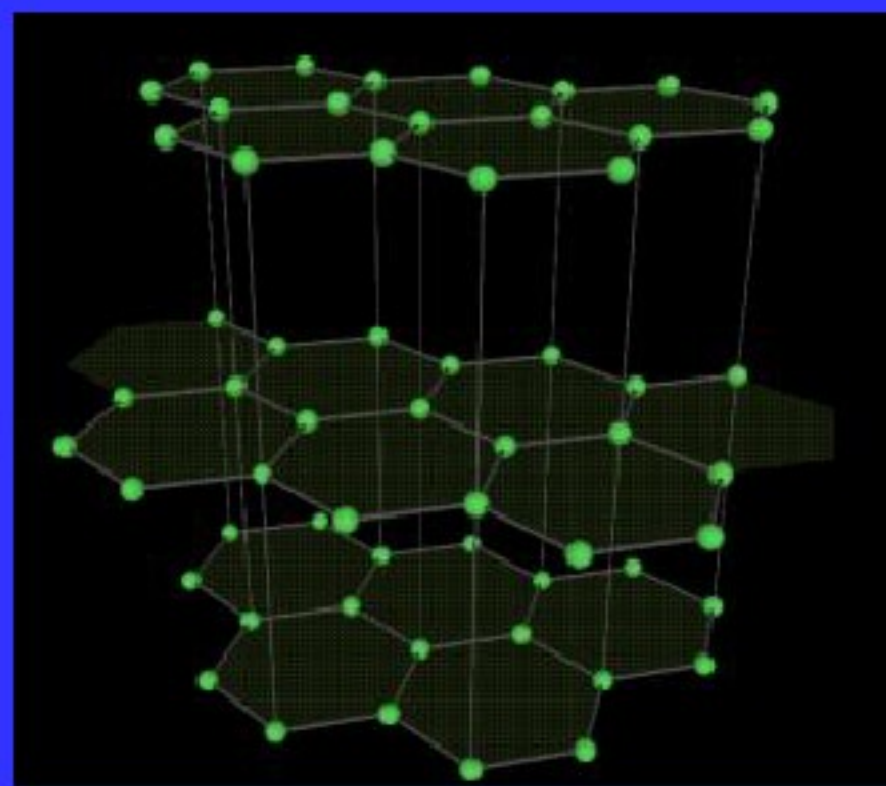
# • 晶体结构理论

## 合金的晶体结构

### • 铁+碳



铁：体心立方

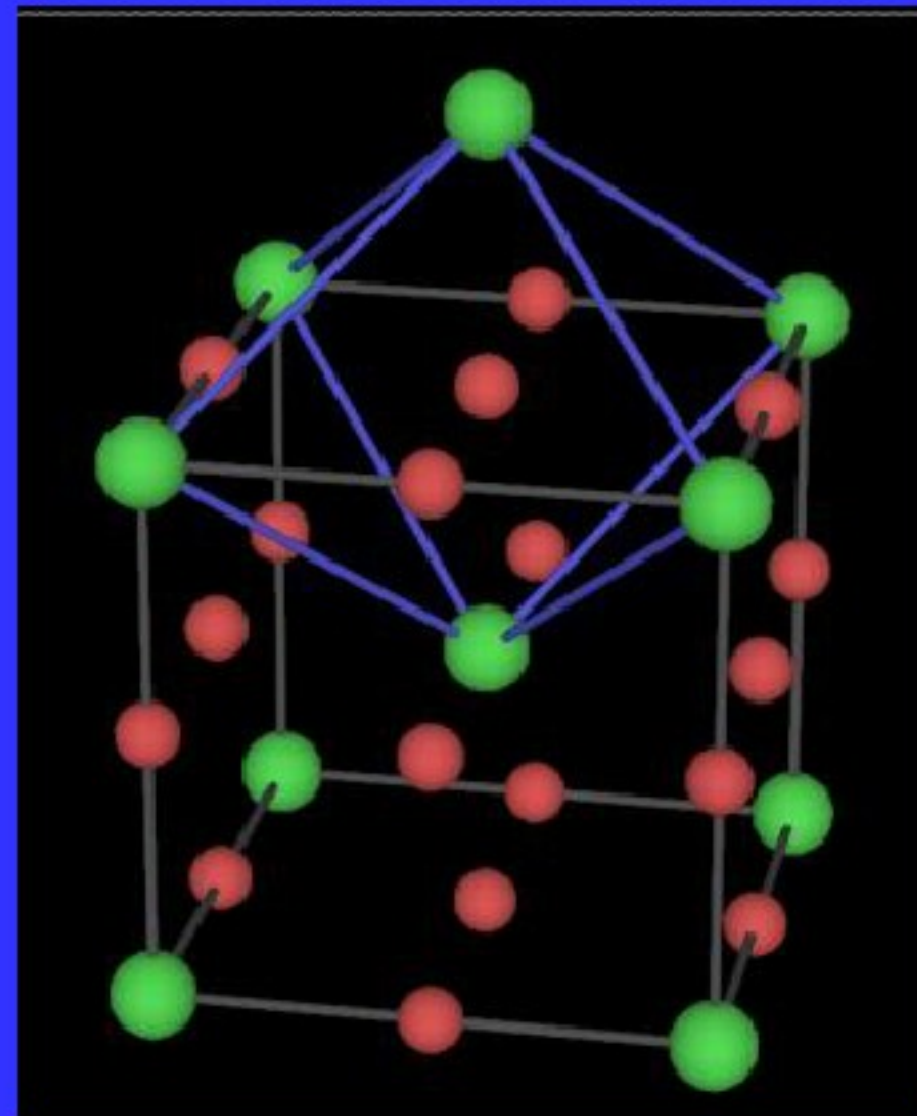
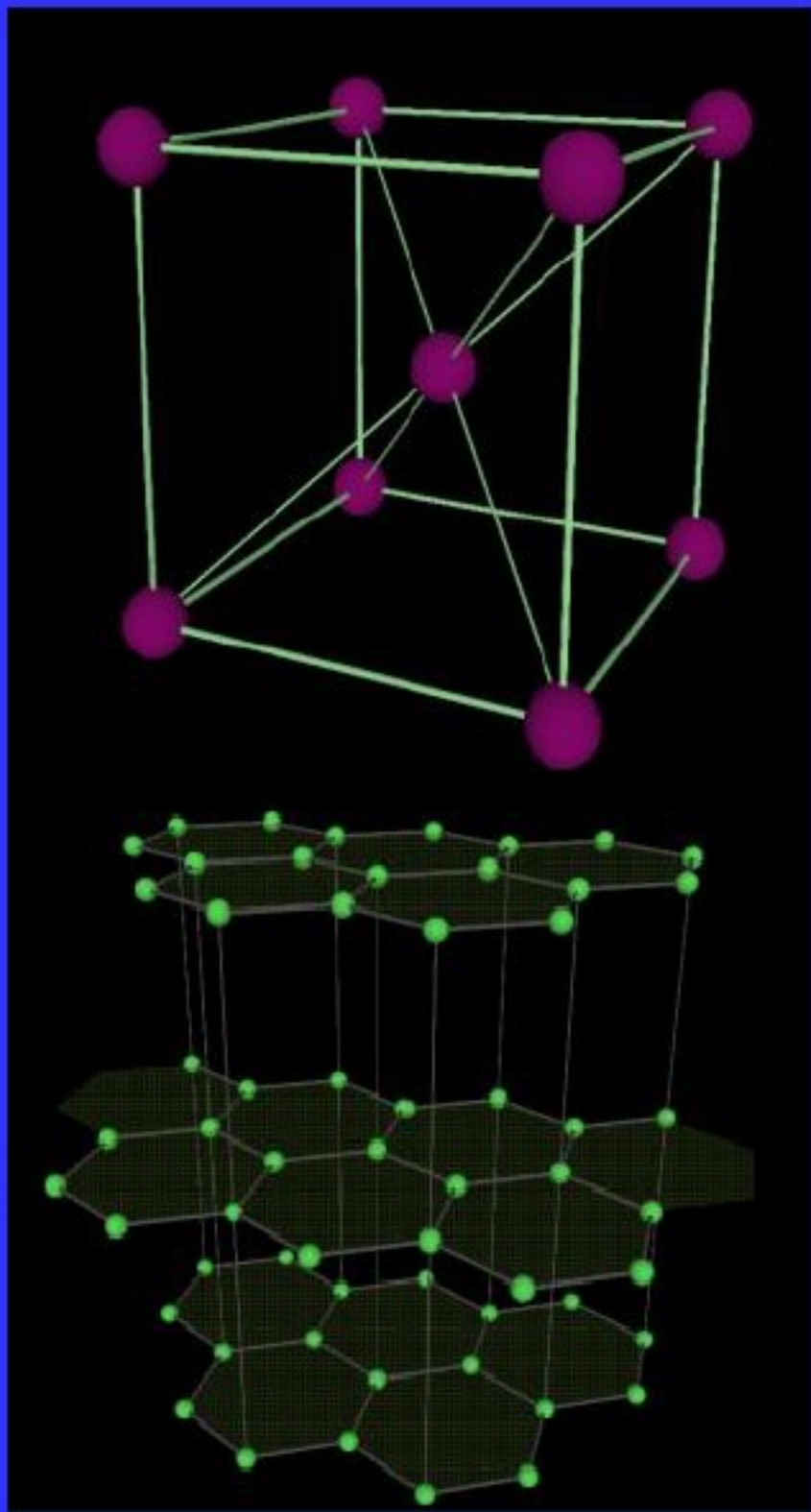


碳（石墨）：六方





# • 晶体结构理论

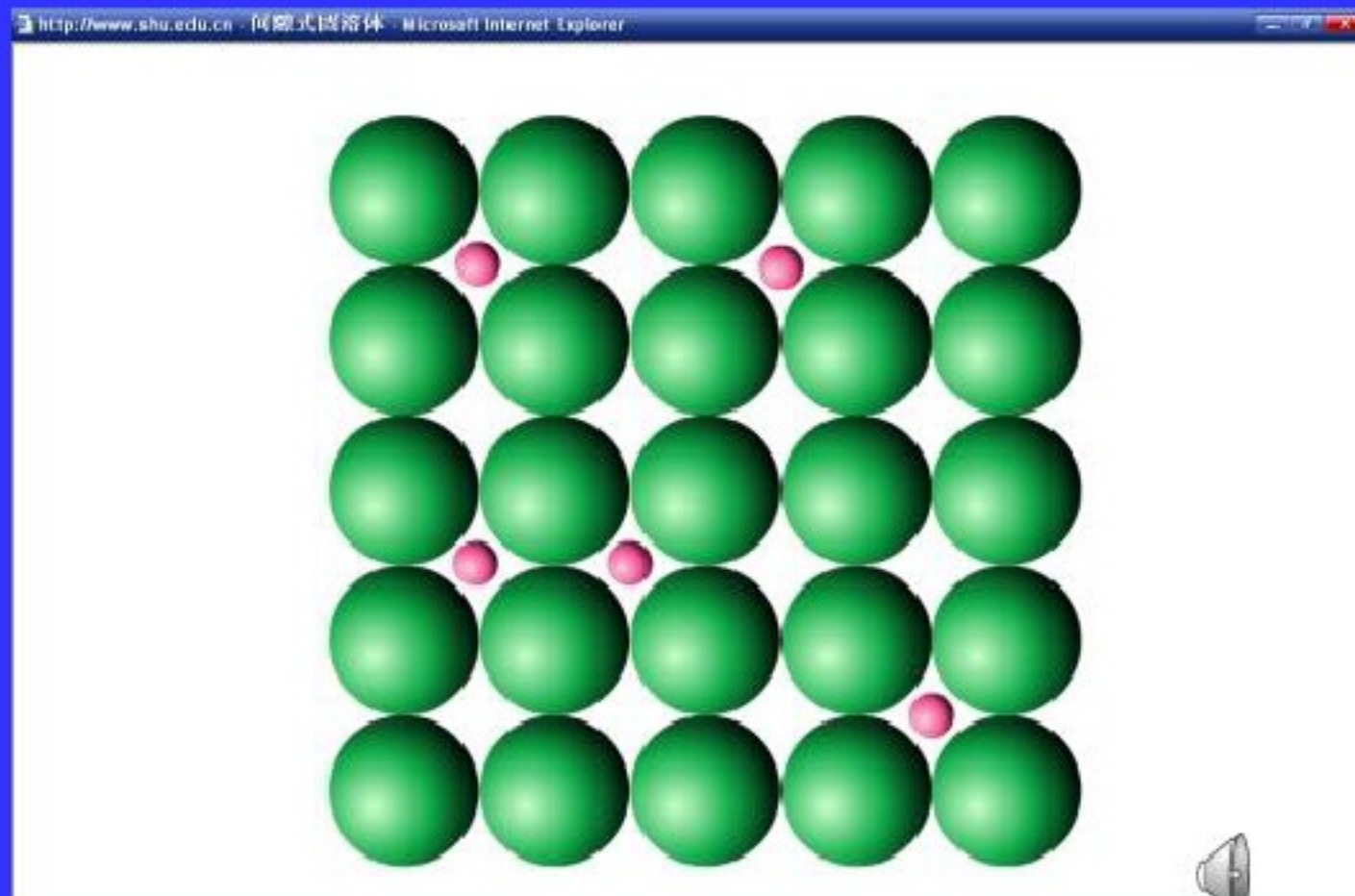


铁的间隙固溶体

• 体心立方



# • 晶体结构理论

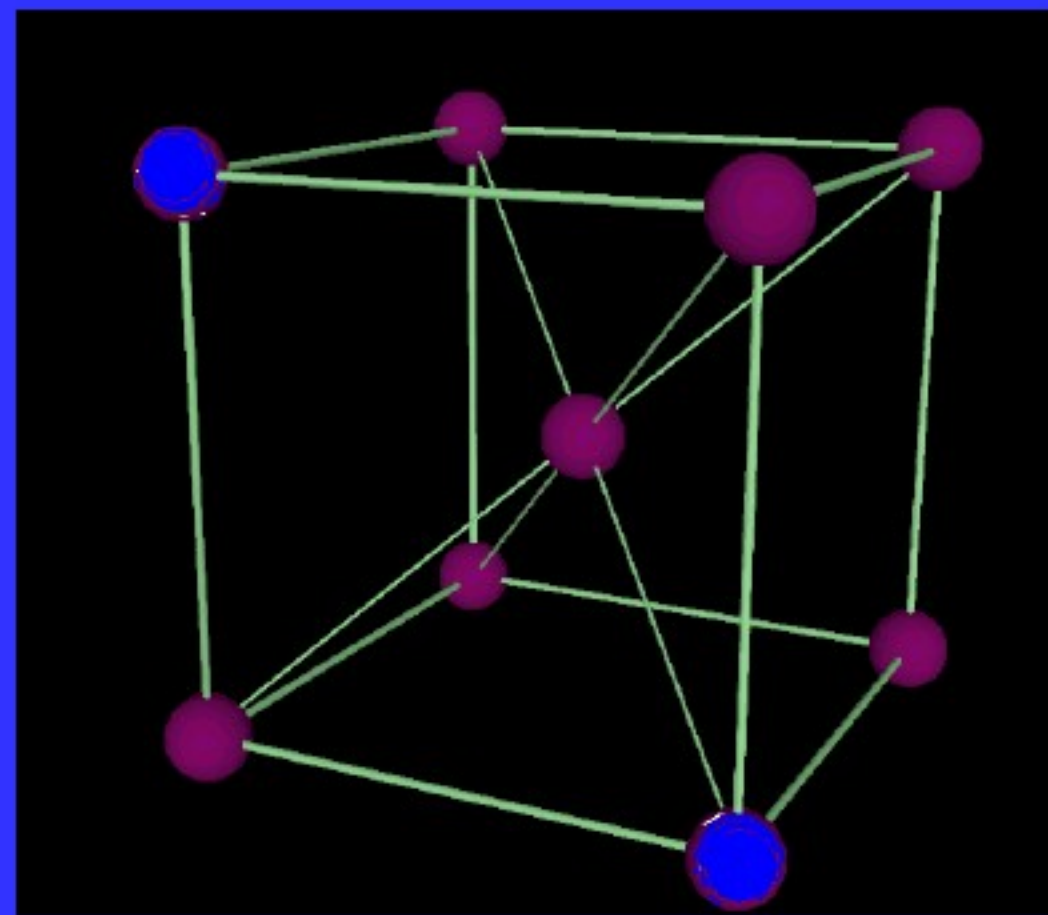
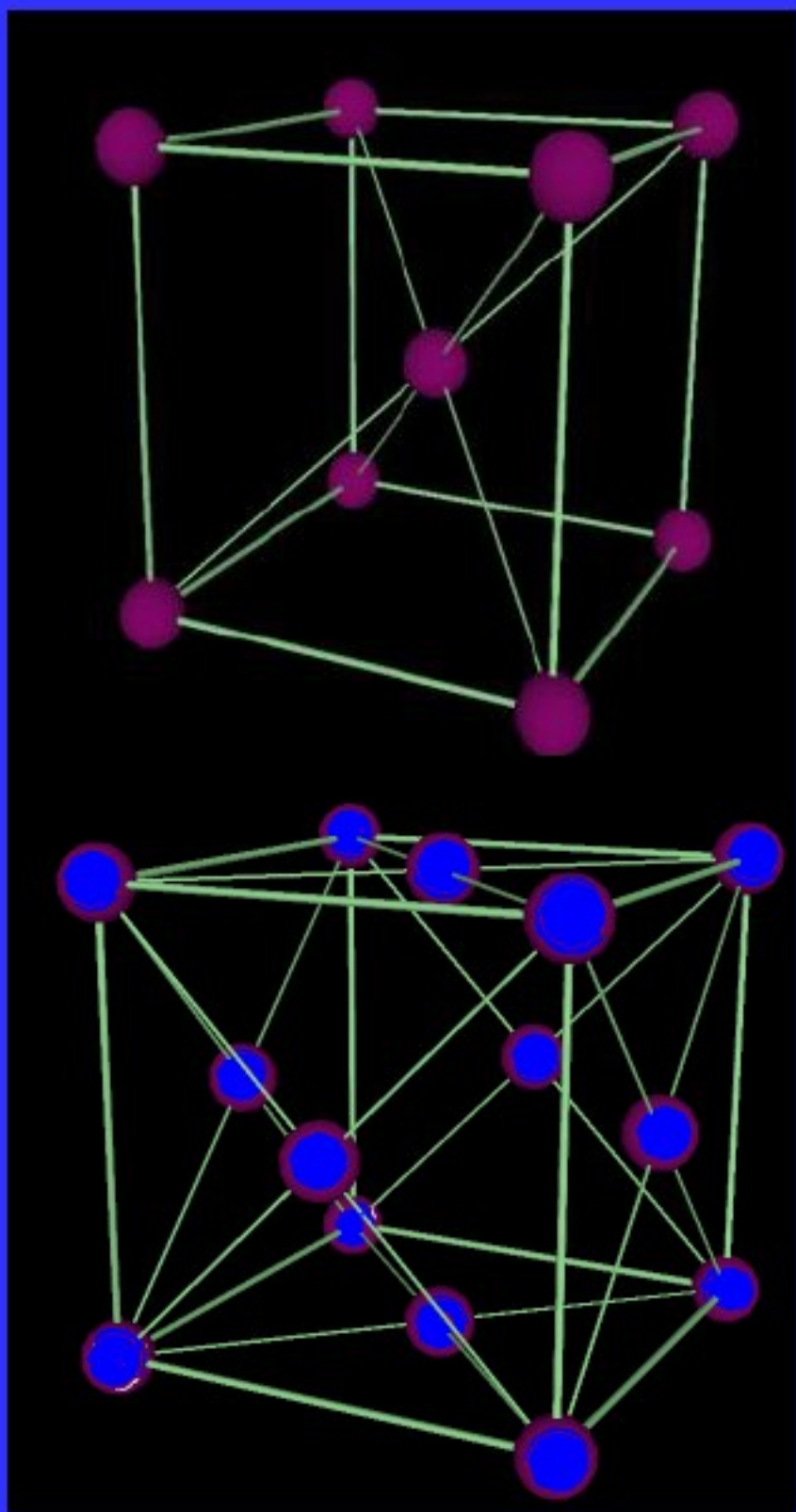


铁的间隙固溶体——铁素体





# • 晶体结构理论

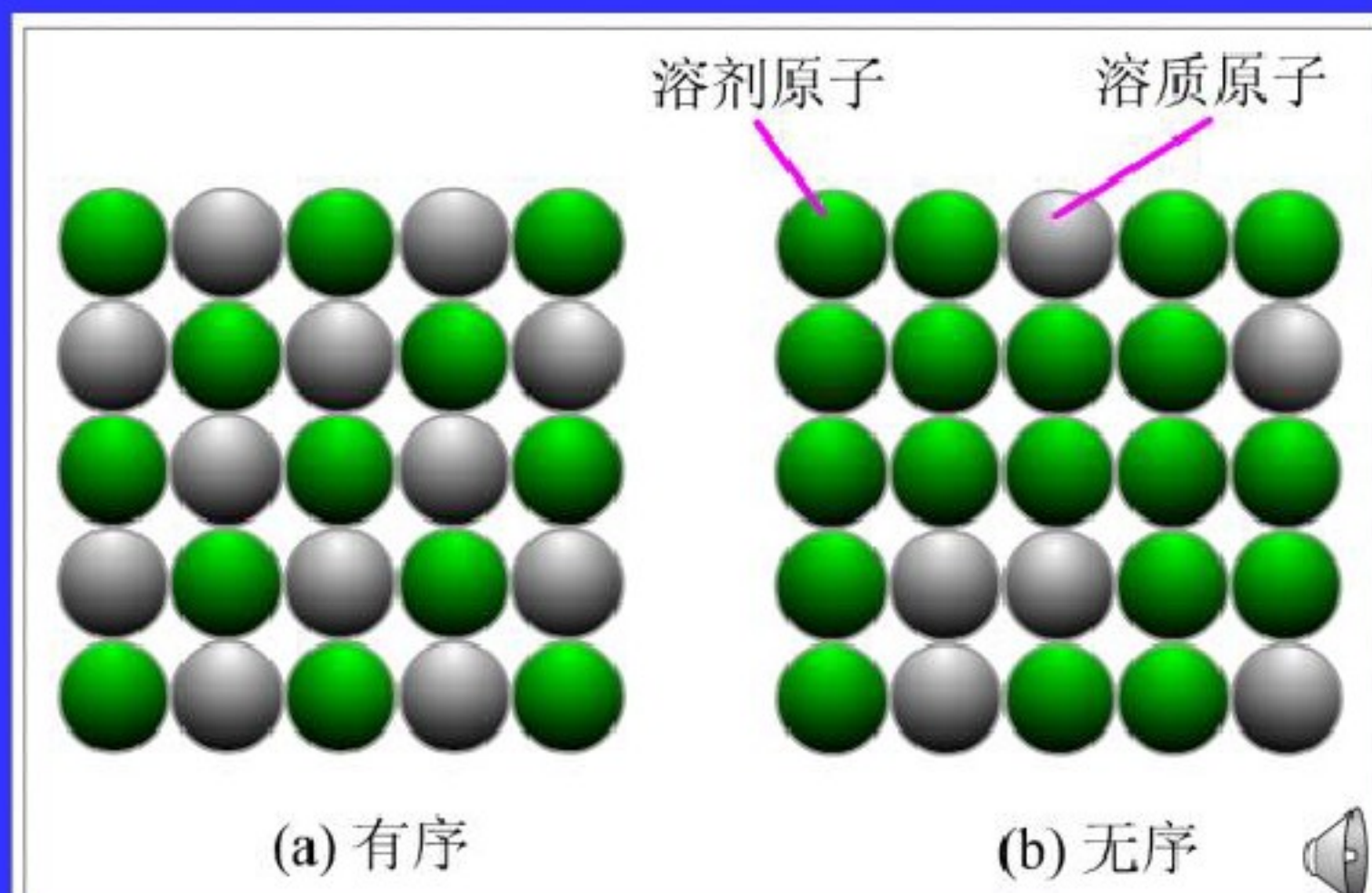


铁+锰

- 铁的置换固溶体
- 体心立方



# • 晶体结构理论

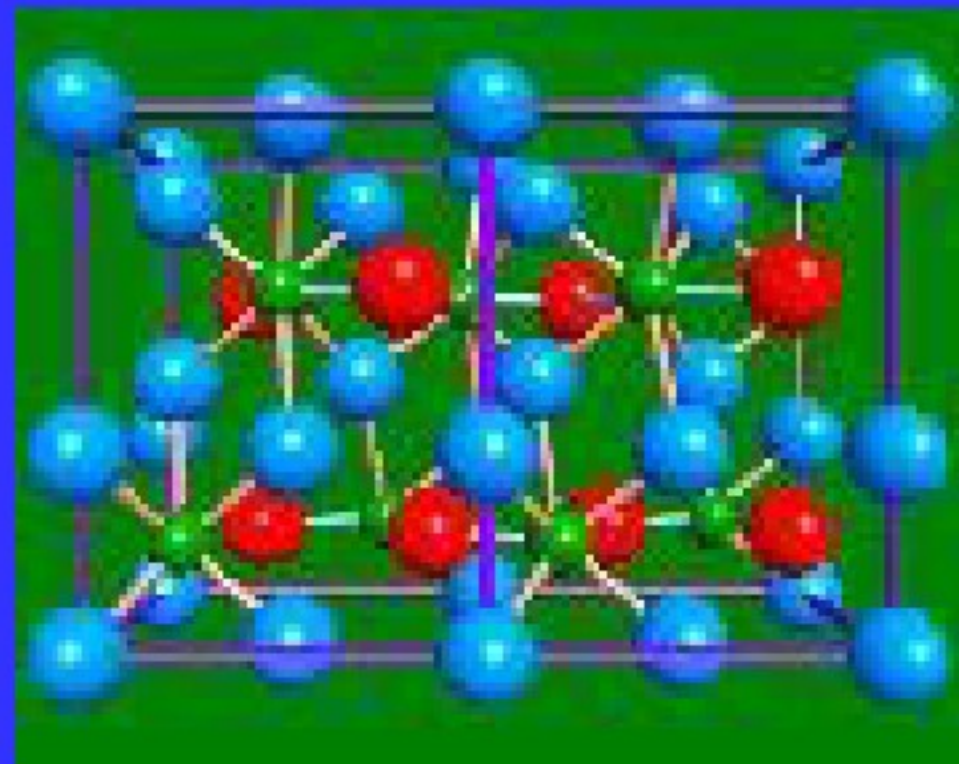
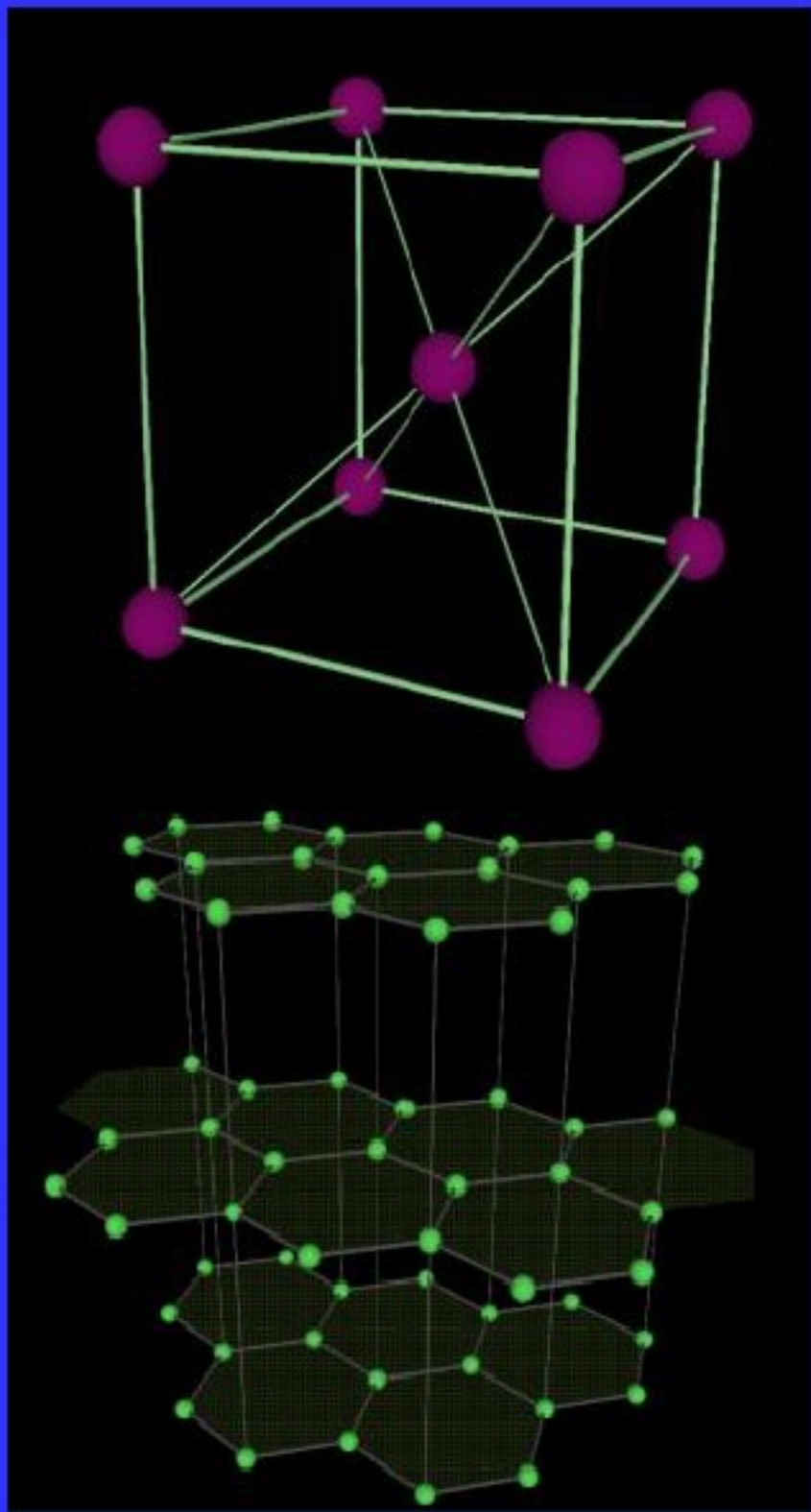


铁的置换固溶体





# • 晶体结构理论



## Fe<sub>3</sub>C 渗碳体

- 正交结构（新结构）
- 化合物



# • 晶体结构理论

## 纯金属的晶体结构

- 体心立方、面心立方、密排六方

## 合金的晶体结构

- 固溶体（间隙、置换）
- 化合物





# • 晶体结构理论

## 铁碳合金中常见结构（相）

- 铁+碳： 钢
- 钢+石墨： 铸铁

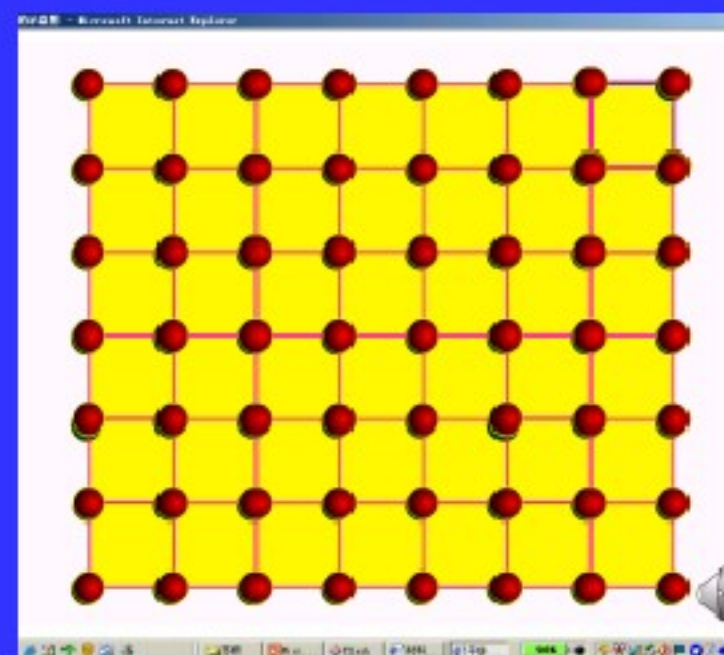
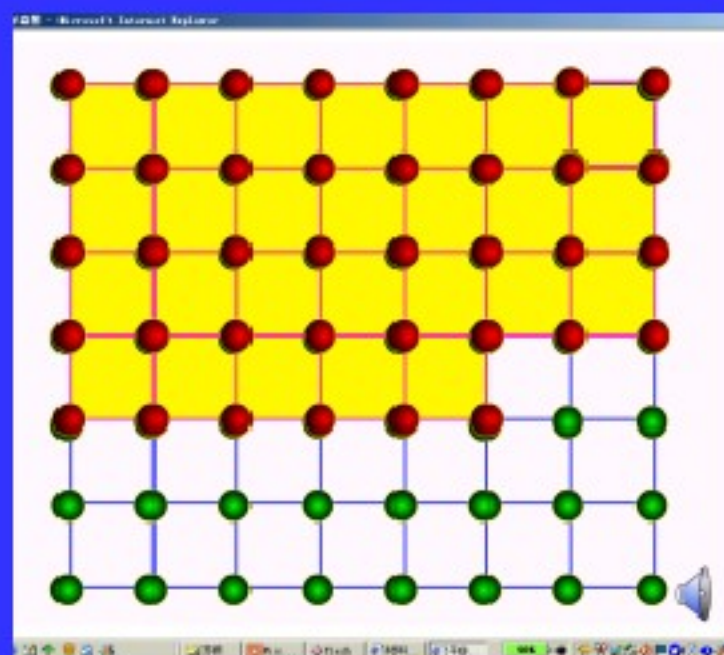
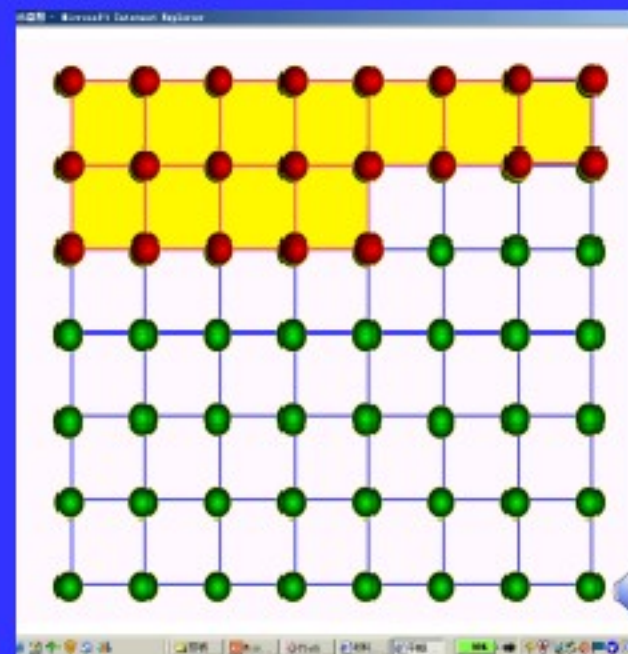
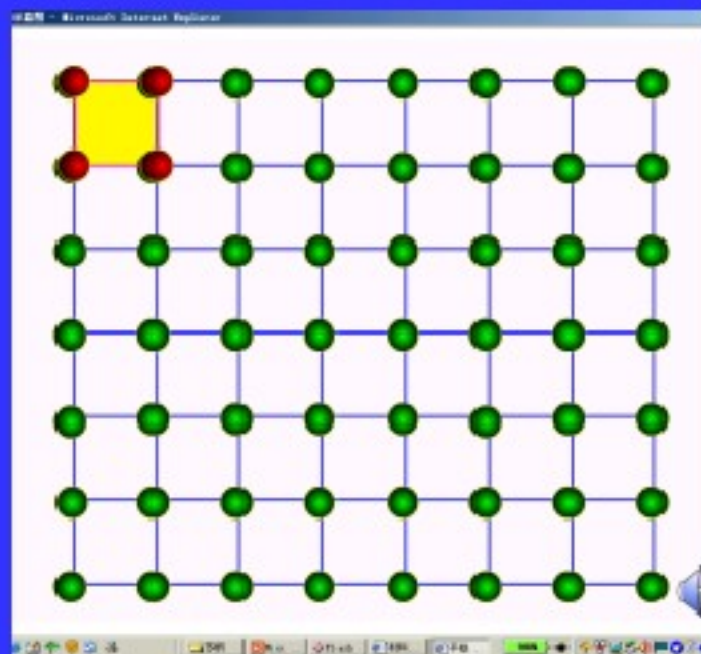
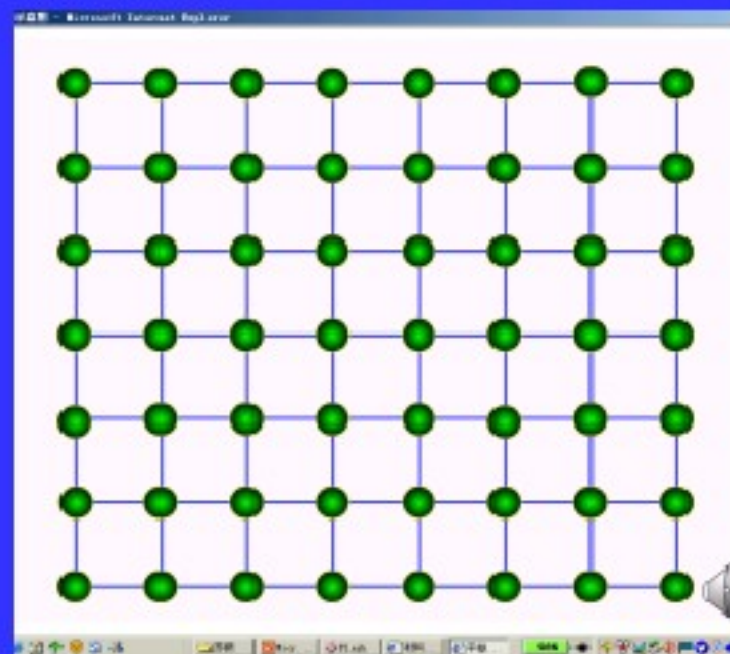
## 钢中结构（相）

- 固溶体（铁素体、奥氏体）
- 化合物（ $\text{Fe}_3\text{C}$ ）



# • 晶体结构理论

## 理想晶体结构——平移重复性

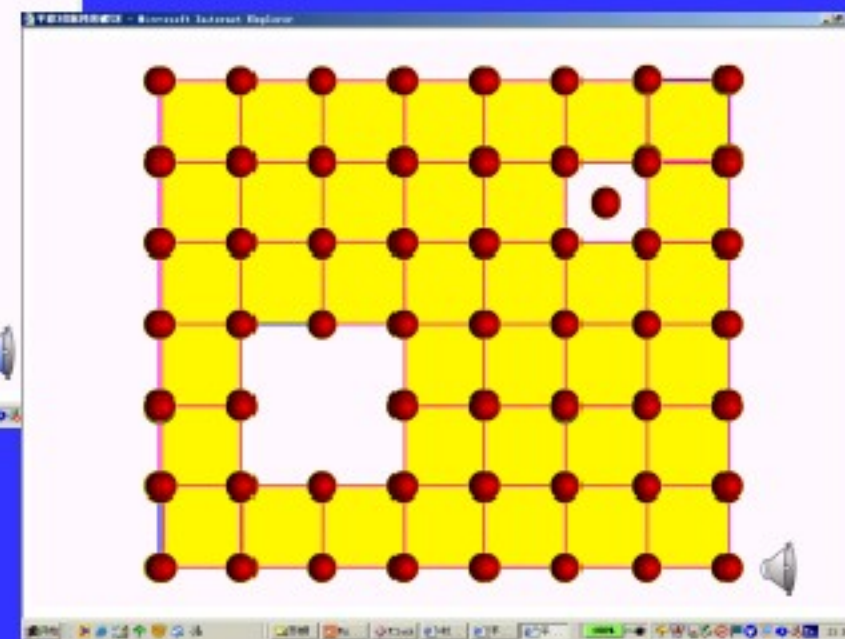
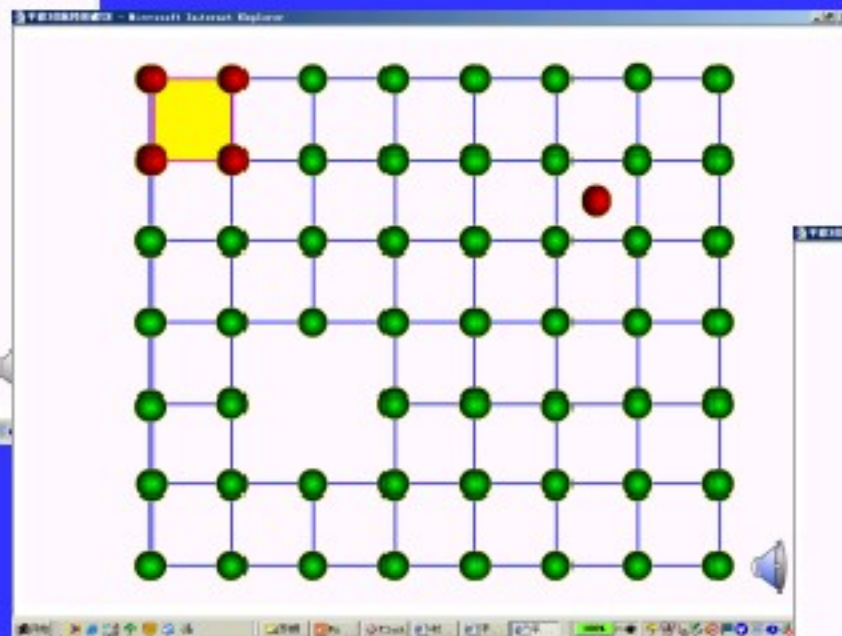
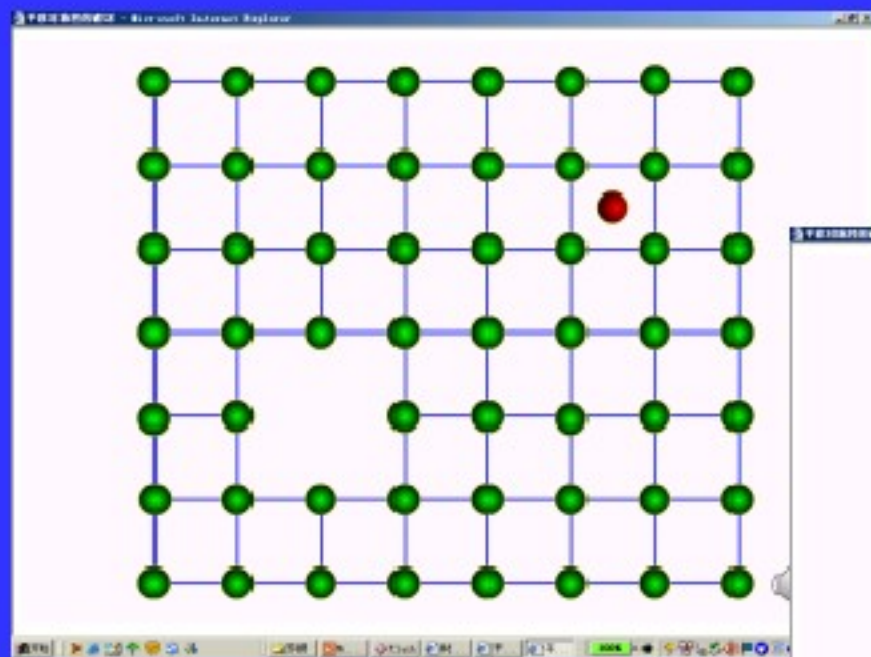






# • 晶体结构理论

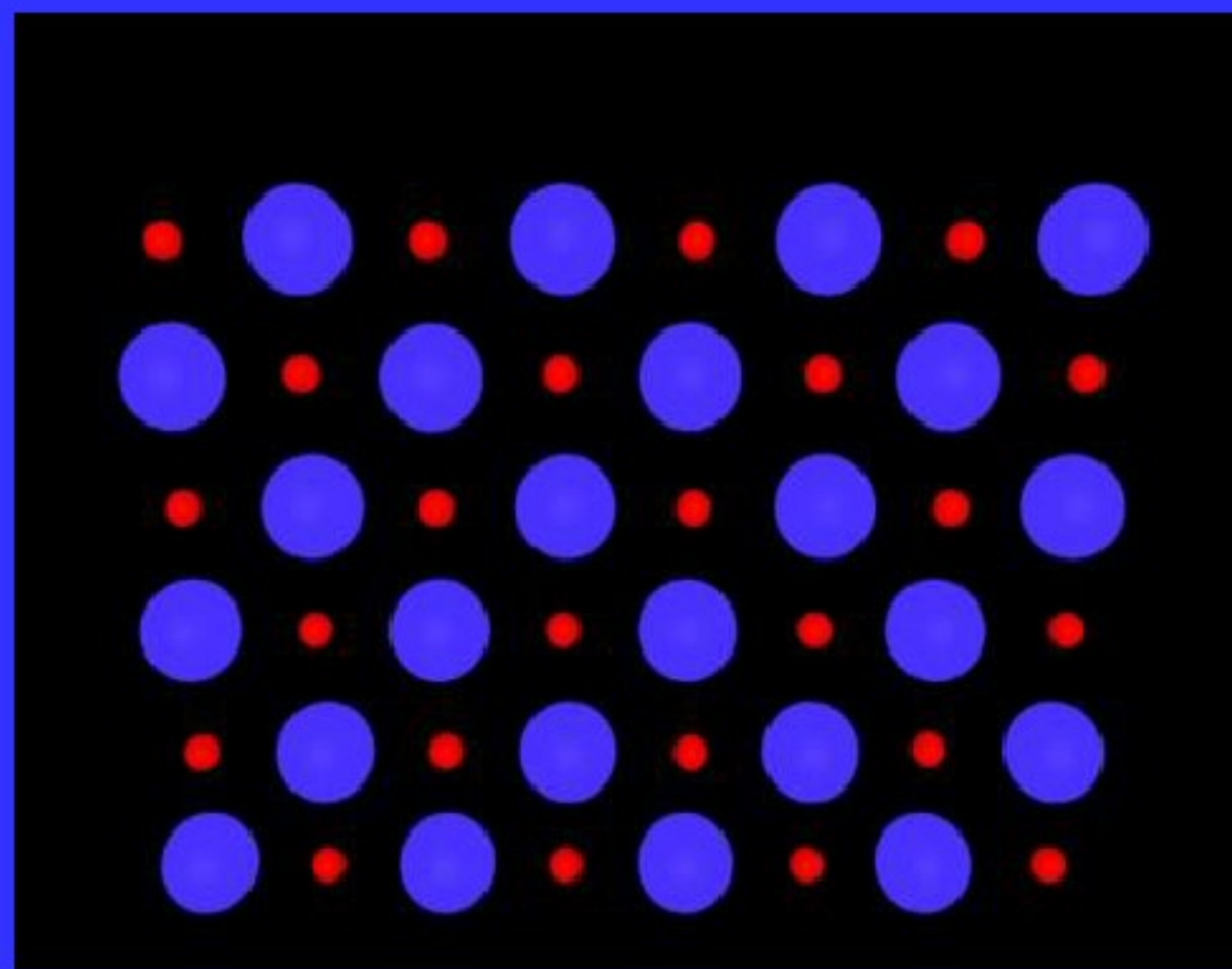
## 实际晶体结构——平移重复性破坏





# • 晶体结构理论

## 实际晶体结构——平移重复性破坏



维纳斯“无臂”之美更深入人心

晶体缺陷赋予材料丰富内容





# • 晶体结构理论

## 实际晶体结构——含有缺陷

- 数量相当少

- Cu的室温空位浓度:  $3.8 \times 10^{-17}$

- 充分退火Fe的位错密度:  $10^{12} \text{m}^{-2}$

- 作用相当大

- 影响晶体的生长、性能以及加工



# • 晶体结构理论

## 缺陷的种类

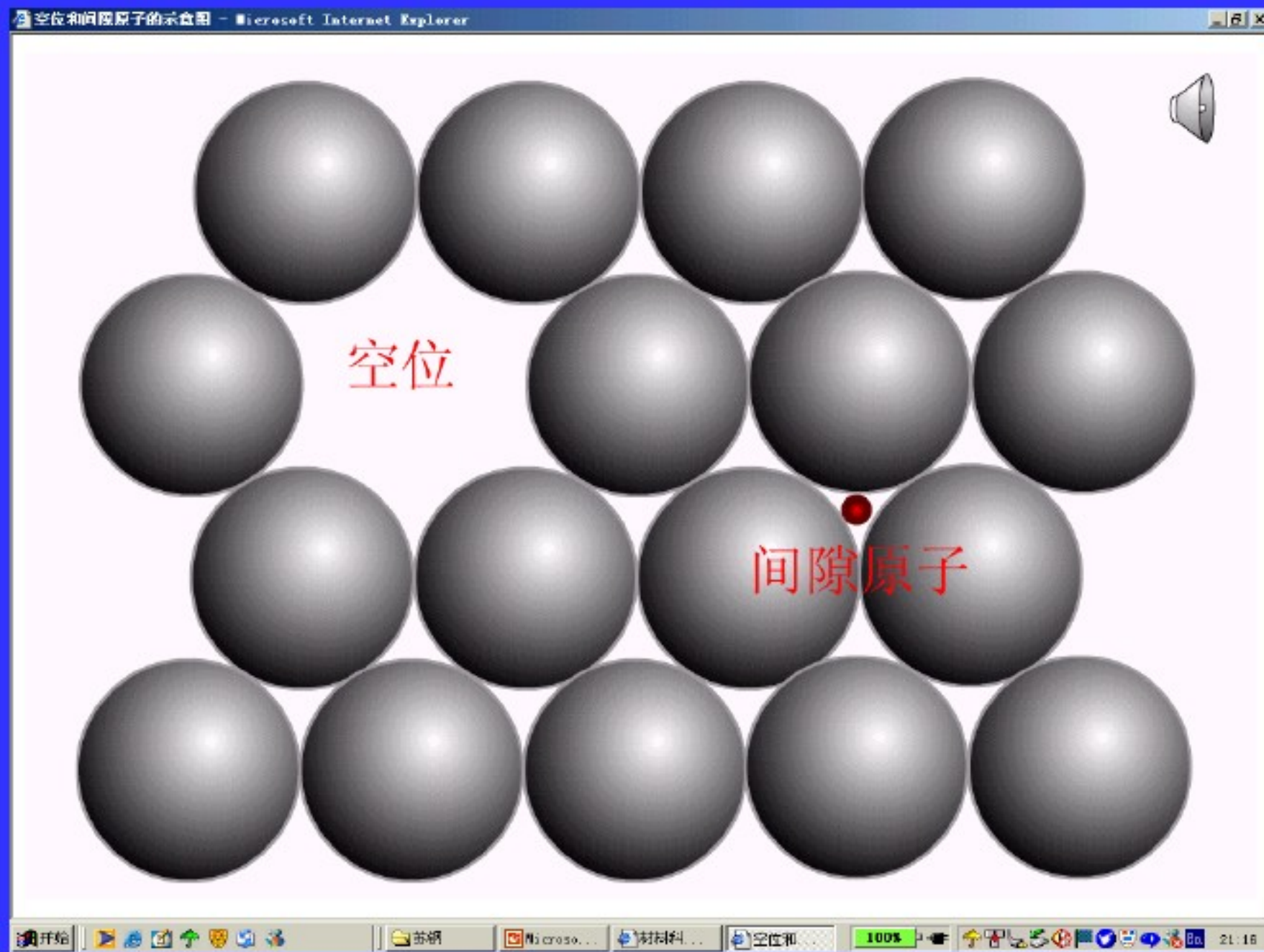
- 点缺陷
- 线缺陷
- 面缺陷
- 体缺陷





# • 晶体结构理论

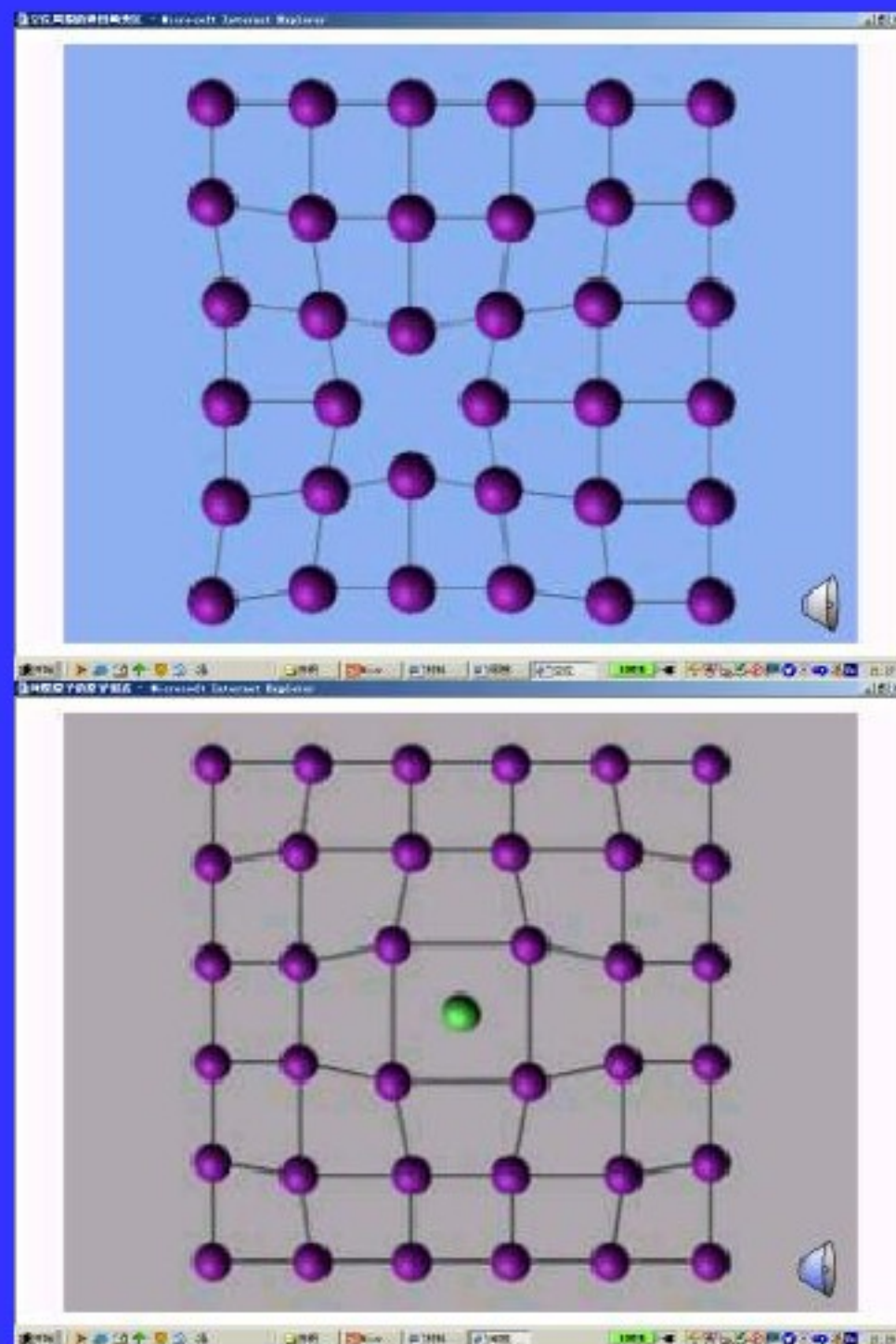
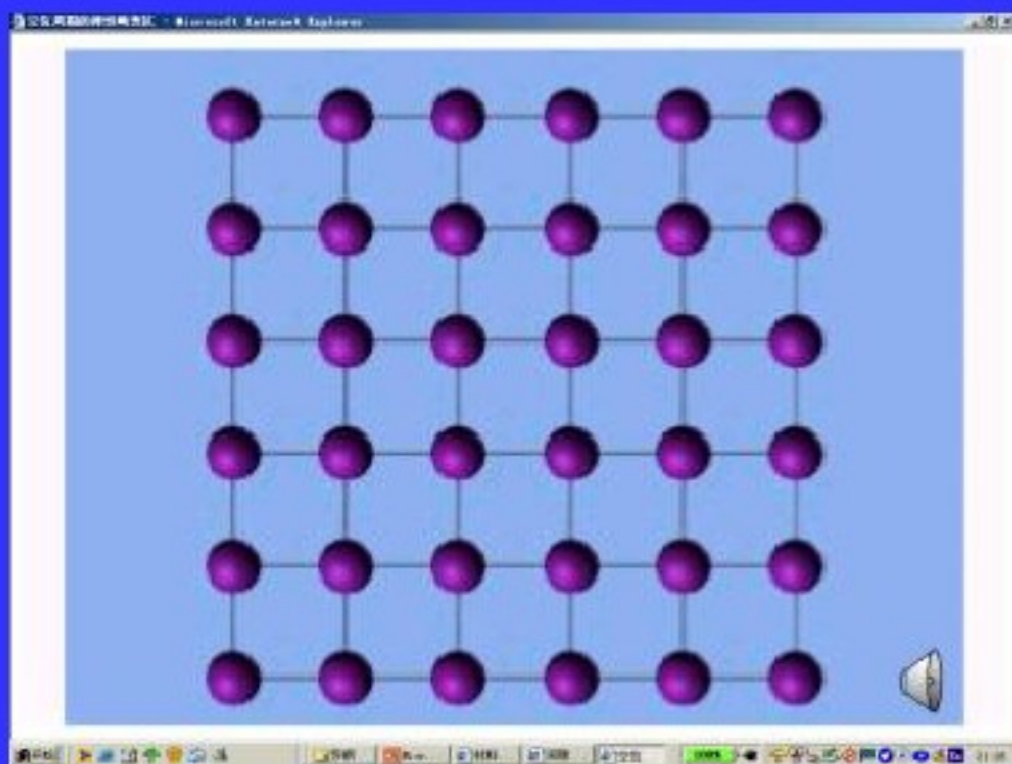
## 点缺陷





# • 晶体结构理论

点缺陷导致结构畸变（间隙原子>空位）







# • 晶体结构理论

## 点缺陷的形成——热振动（平衡浓度）

### 不同温度下的缺陷平衡浓度

缺陷类型	形成能 (eV)	不同温度下的缺陷平衡浓度		
		573℃	1073℃	1573℃
空位	≈1	$10^{-17}$	$10^{-7}$	$10^{-4}$
间隙原子	≈4	$10^{-67}$	$10^{-25}$	$10^{-15}$

$$C_v = n/N = \exp[-(E_v - TS_v) / kT] = A \exp(-E_v / kT)$$



# • 晶体结构理论

## 点缺陷的平衡浓度

$$C_v = n/N = A \exp(-E_v / kT)$$

$C_v$ : 点缺陷平衡浓度

$E_v$ : 点缺陷形成能

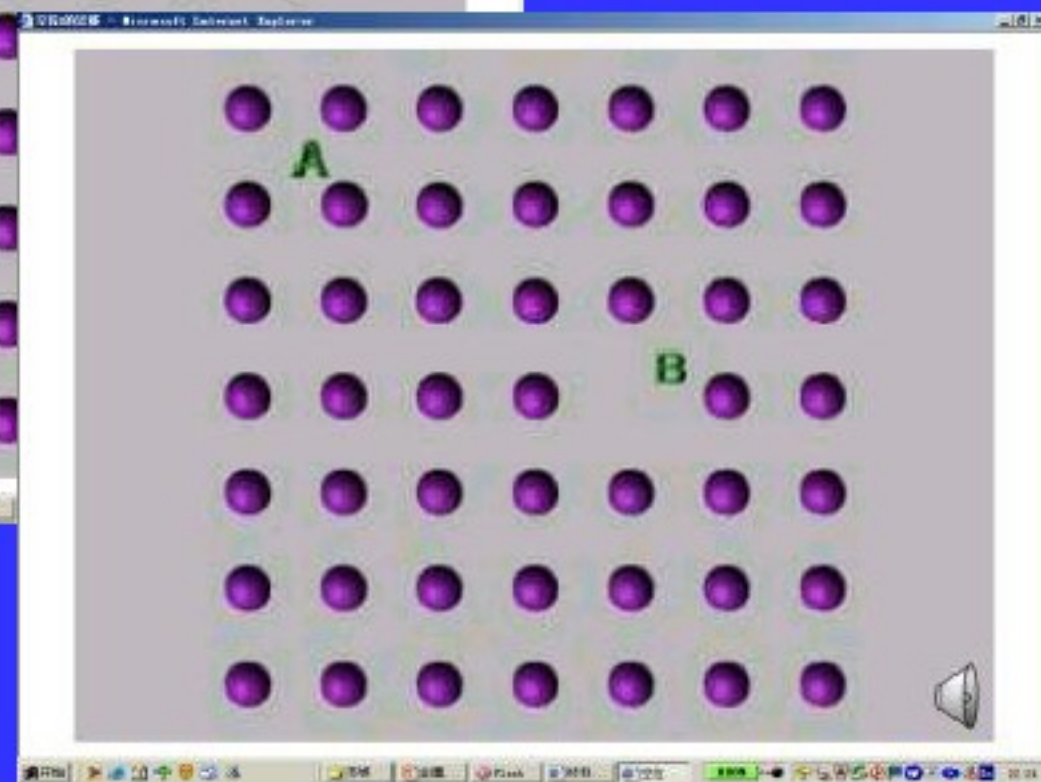
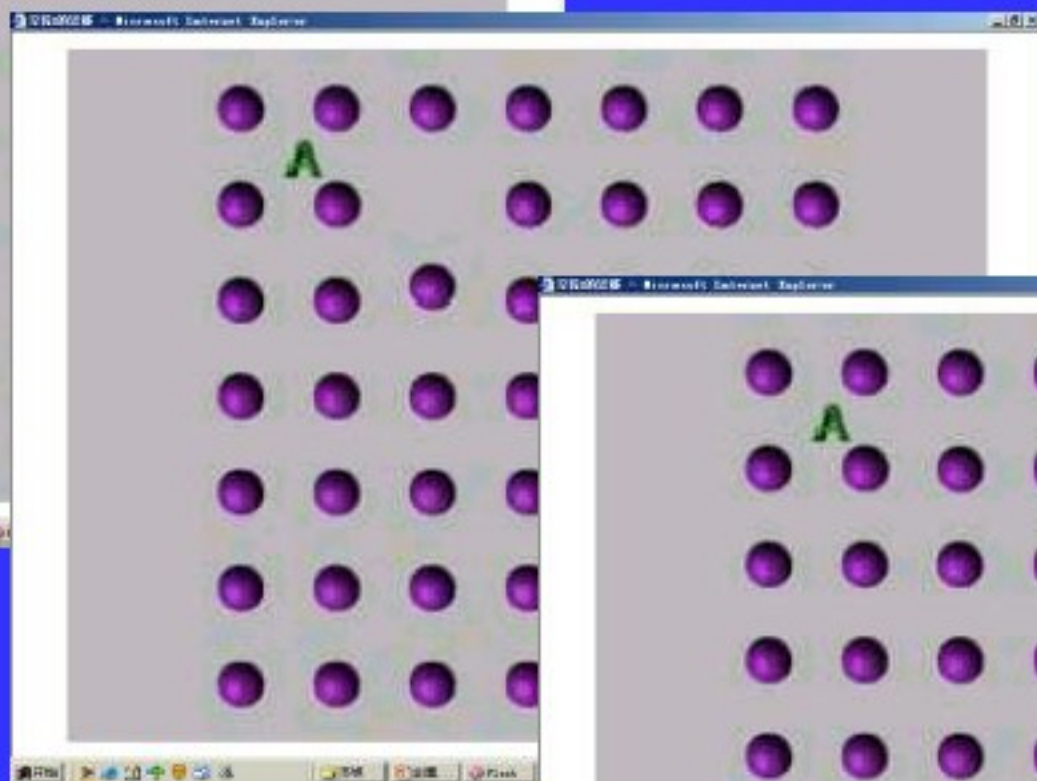
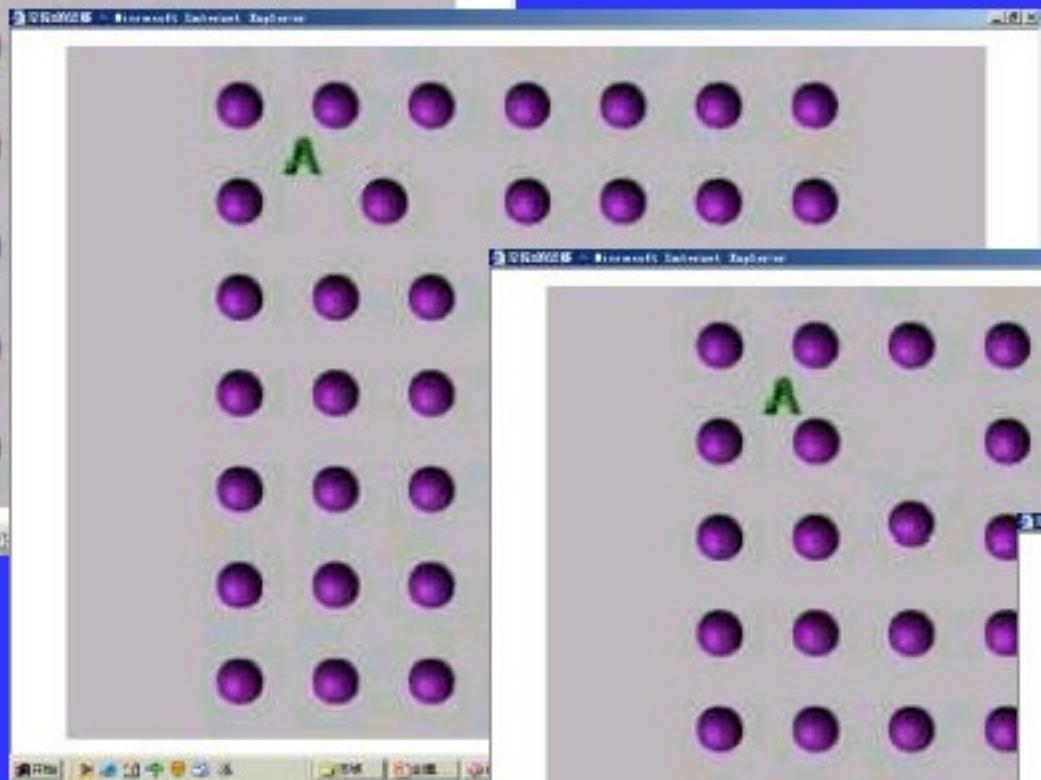
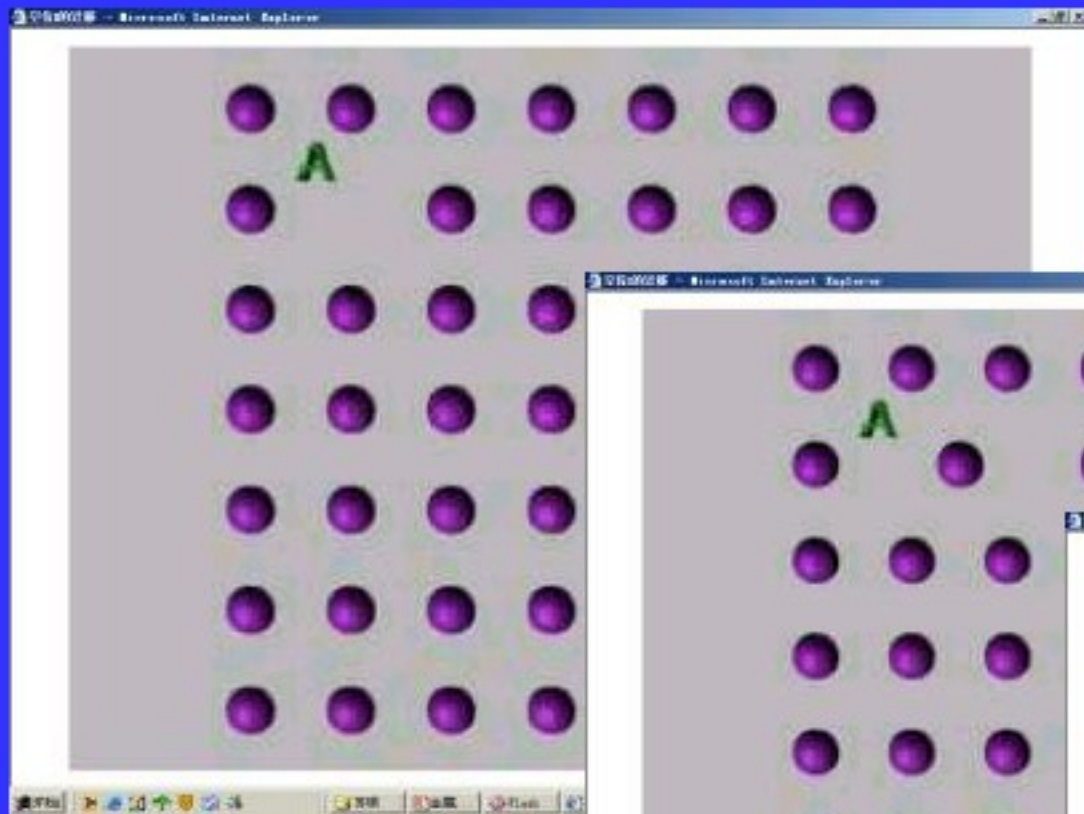
$T$ : 温度





# • 晶体结构理论

## 点缺陷的运动





# • 晶体结构理论

## 点缺陷对性能的影响

### 固溶强化

- 通过形成固溶体使金属强度和硬度提高的现象
- 纯铜:  $\sigma_b = 220 \text{ MPa}$ , 硬度 = 40 HB, 断面收缩率  $\psi = 70\%$
- 纯铜+1%镍 (形成单相固溶体): 强度 = 390 MPa, 硬度 = 70 HB, 断面收缩率 = 50%。





# • 晶体结构理论

## 点缺陷对性能的影响

铁在不同温度淬火后测量的电阻率

淬火温度 $T(^{\circ}\text{C})$	300	500	700	1000	1500
电阻率 $\rho$ ( $\times 10^{-10}\Omega\cdot\text{m}$ )	12.29	12.54	12.68	12.81	12.96

由:  $\rho = D \exp(-E_v / kT)$  或  $\ln\rho = \ln D + (E_v / kT)$  可求  $E_v$



# • 晶体结构理论

## 点缺陷对其他性能的影响

- 影响密度
- 影响比热
- 影响扩散
- 影响屈服





# • 晶体结构理论

## 线缺陷



# • 晶体结构理论

## 线缺陷（位错）

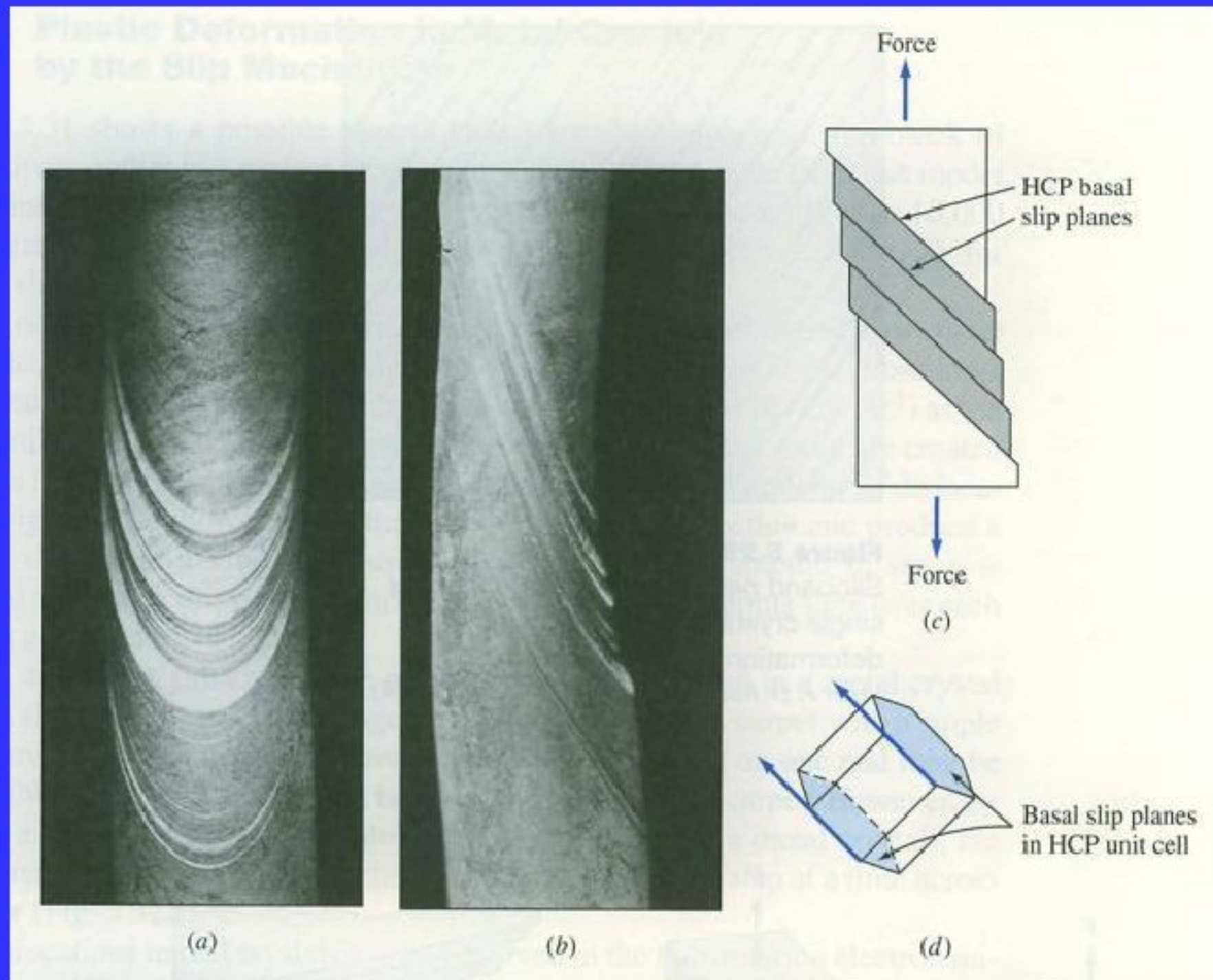






# • 晶体结构理论

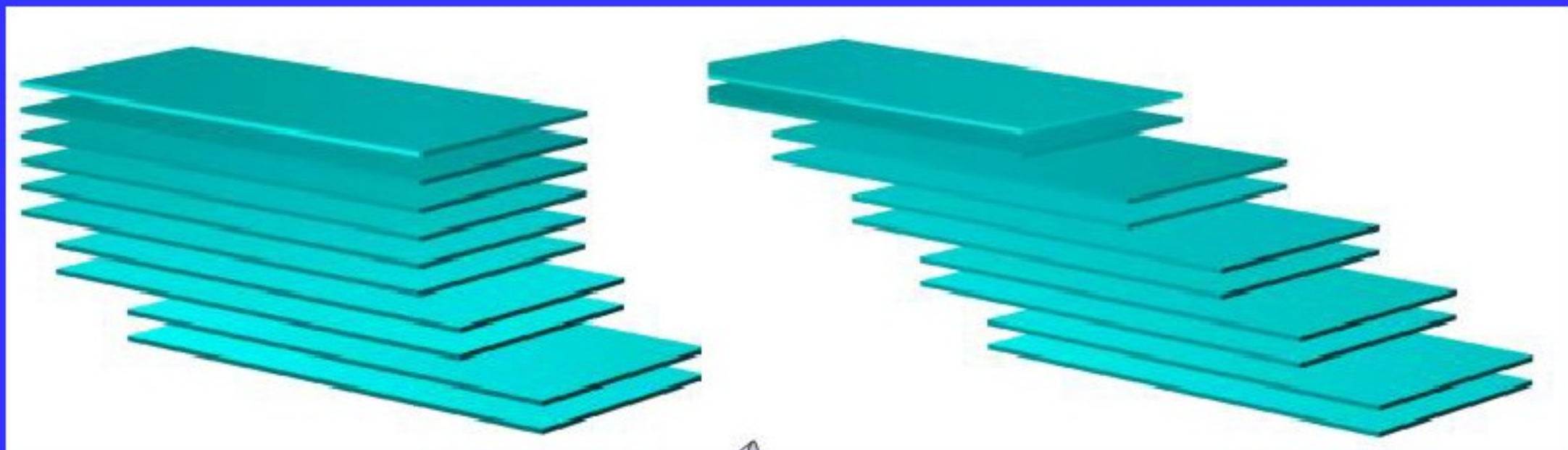
## 位错的提出





# • 晶体结构理论

## 位错的提出

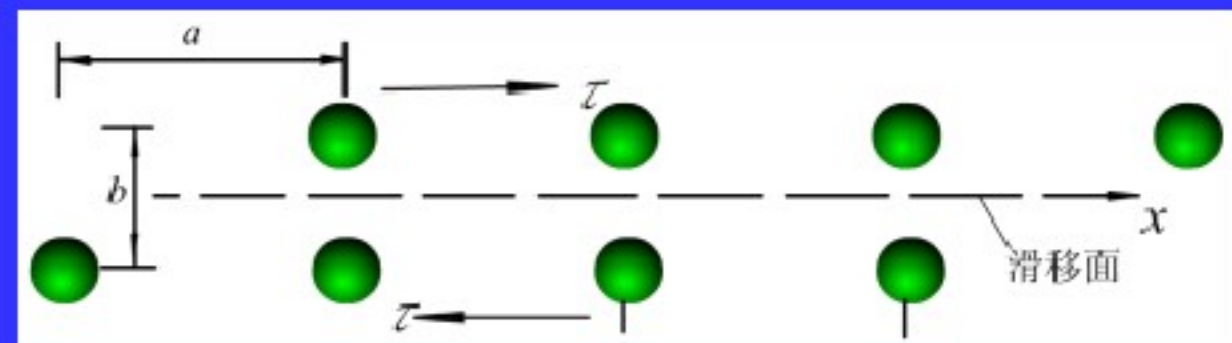
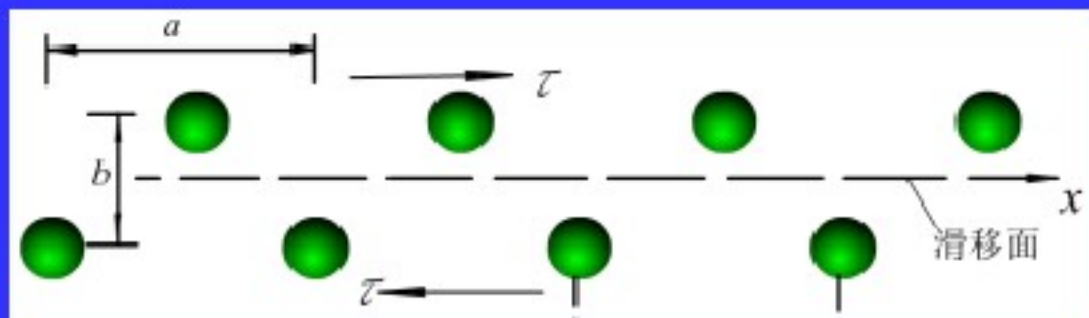
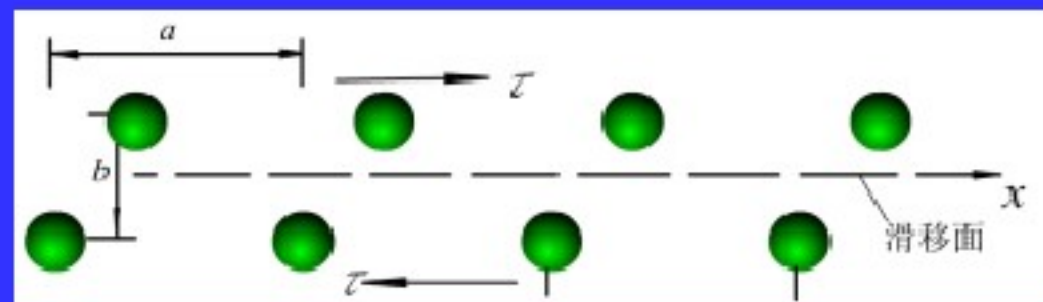
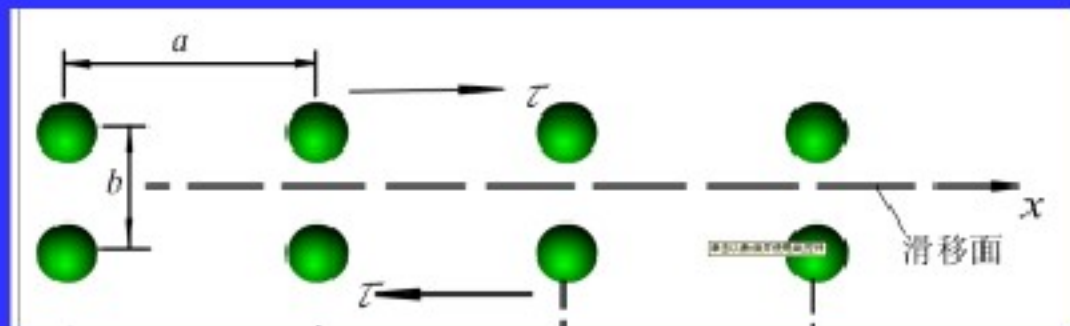






# • 晶体结构理论

## 位错的提出





# • 晶体结构理论

## 位错的提出

晶体的理论切应力与实验值的比较（单位：MPa）

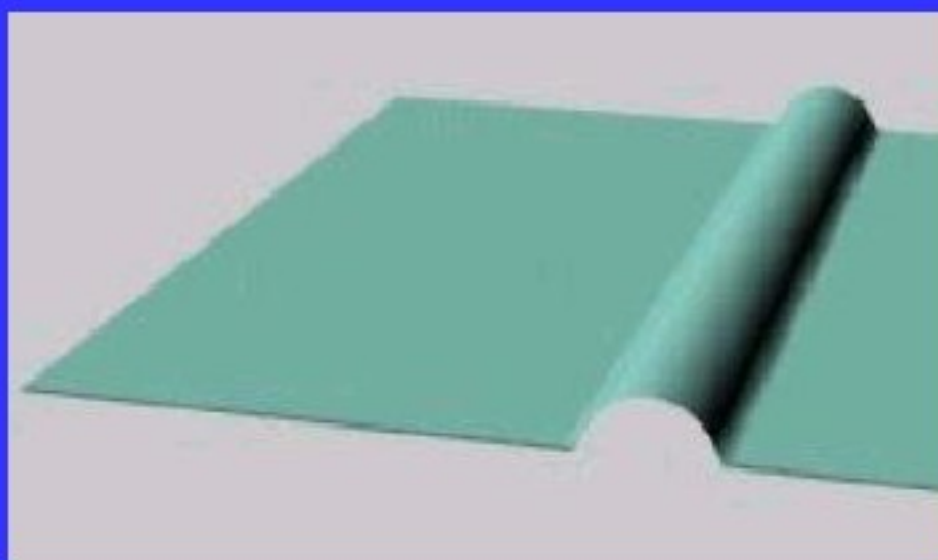
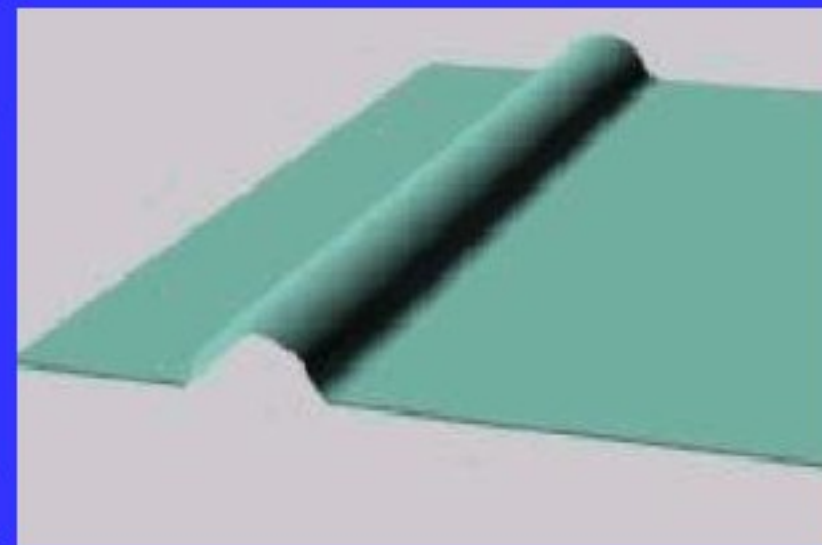
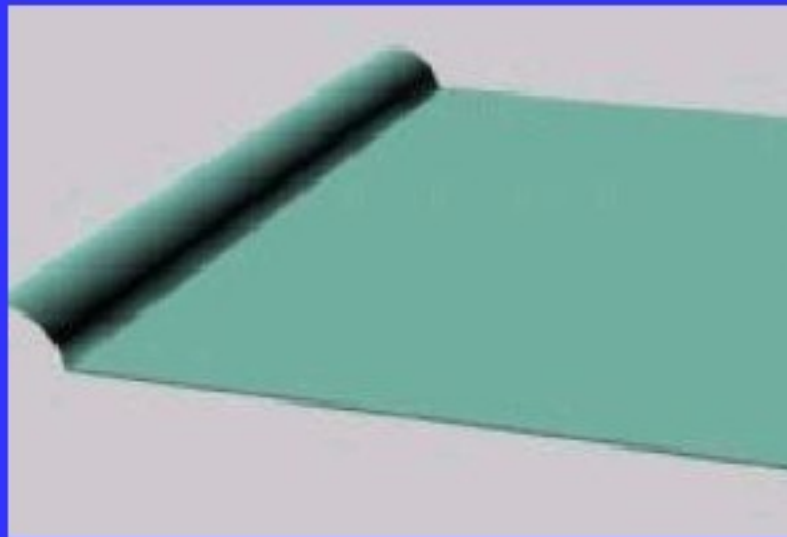
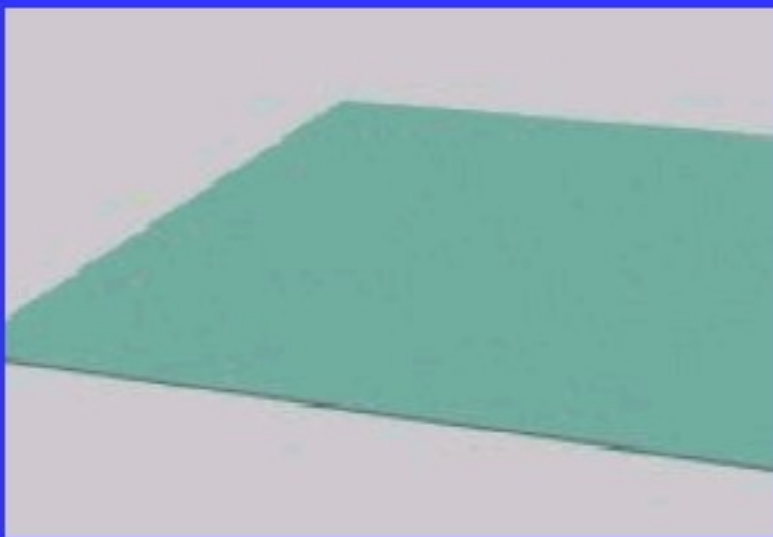
金属	理论切应力	实验值	切变模量
Al	3830	0.786	24400
Ag	3980	0.372	25000
Cu	6480	0.490	40700
$\alpha$ -Fe	11000	2.75	68950
Mg	2630	0.393	16400





# • 晶体结构理论

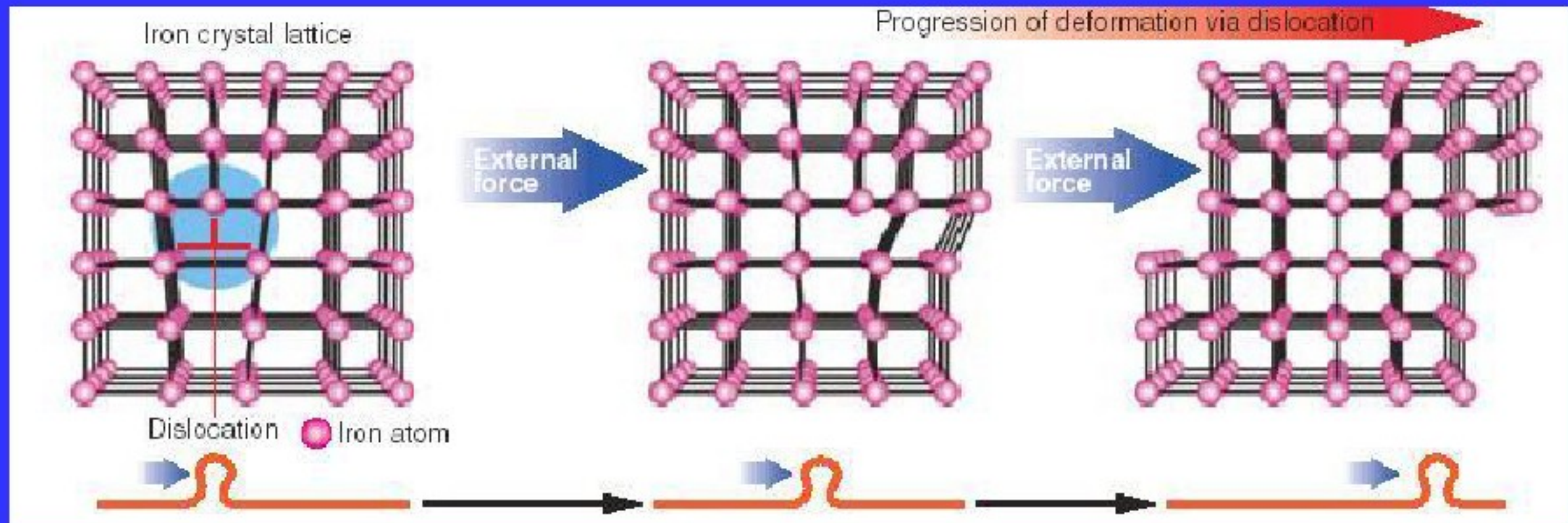
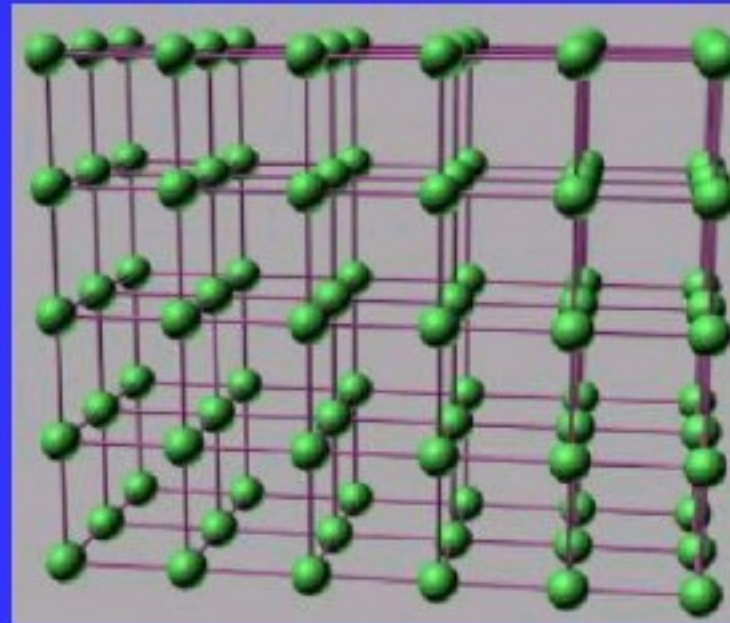
## 位错的提出





# • 晶体结构理论

## 位错的提出

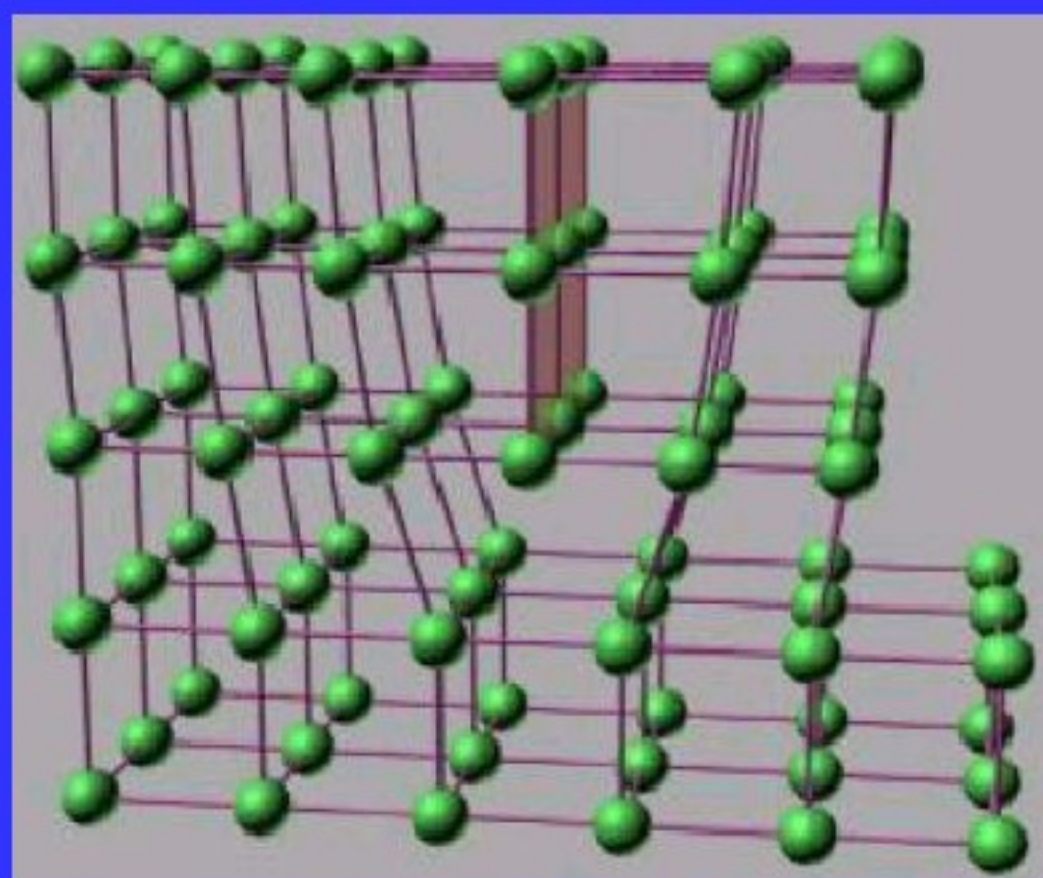
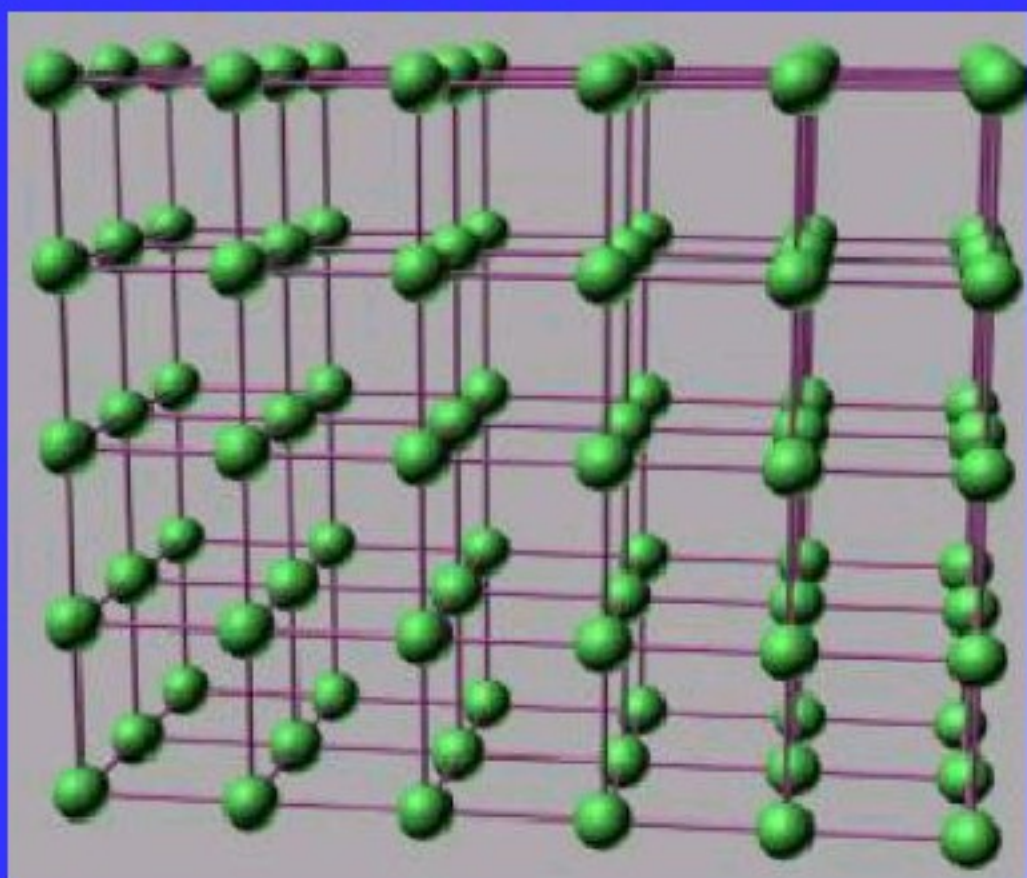






# • 晶体结构理论

## 位错组态（形成及其点阵畸变）



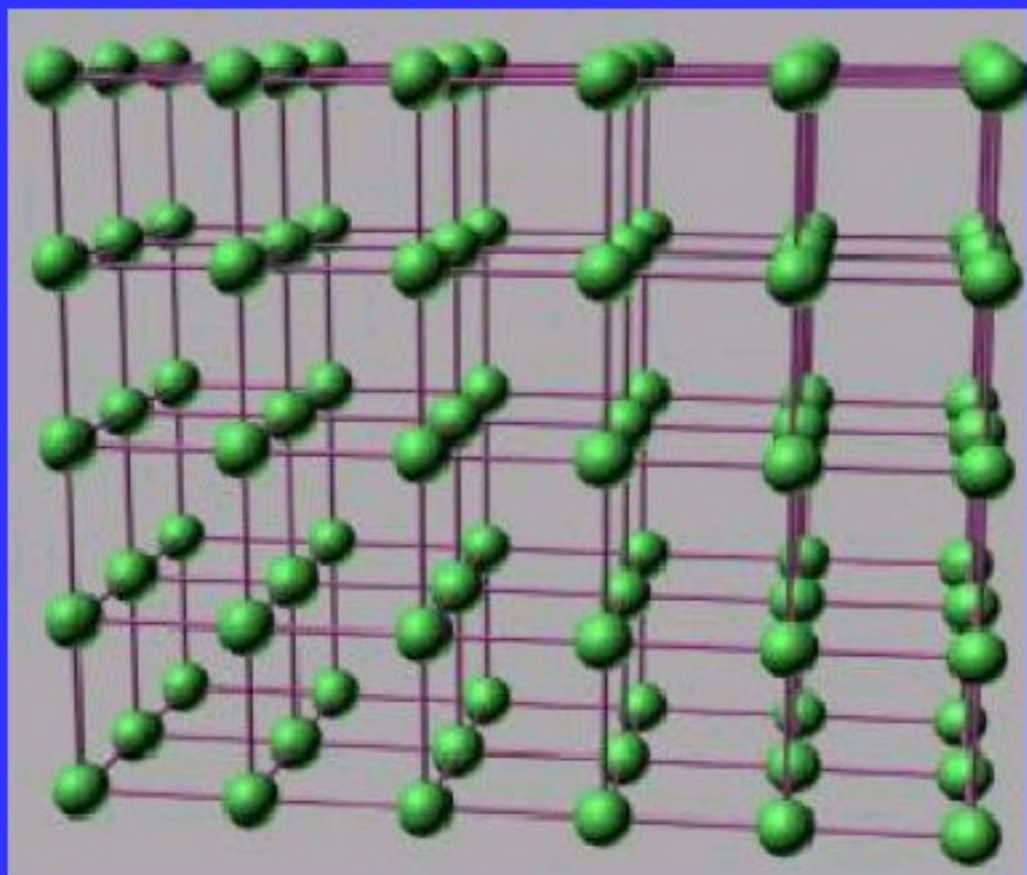
刃型位错



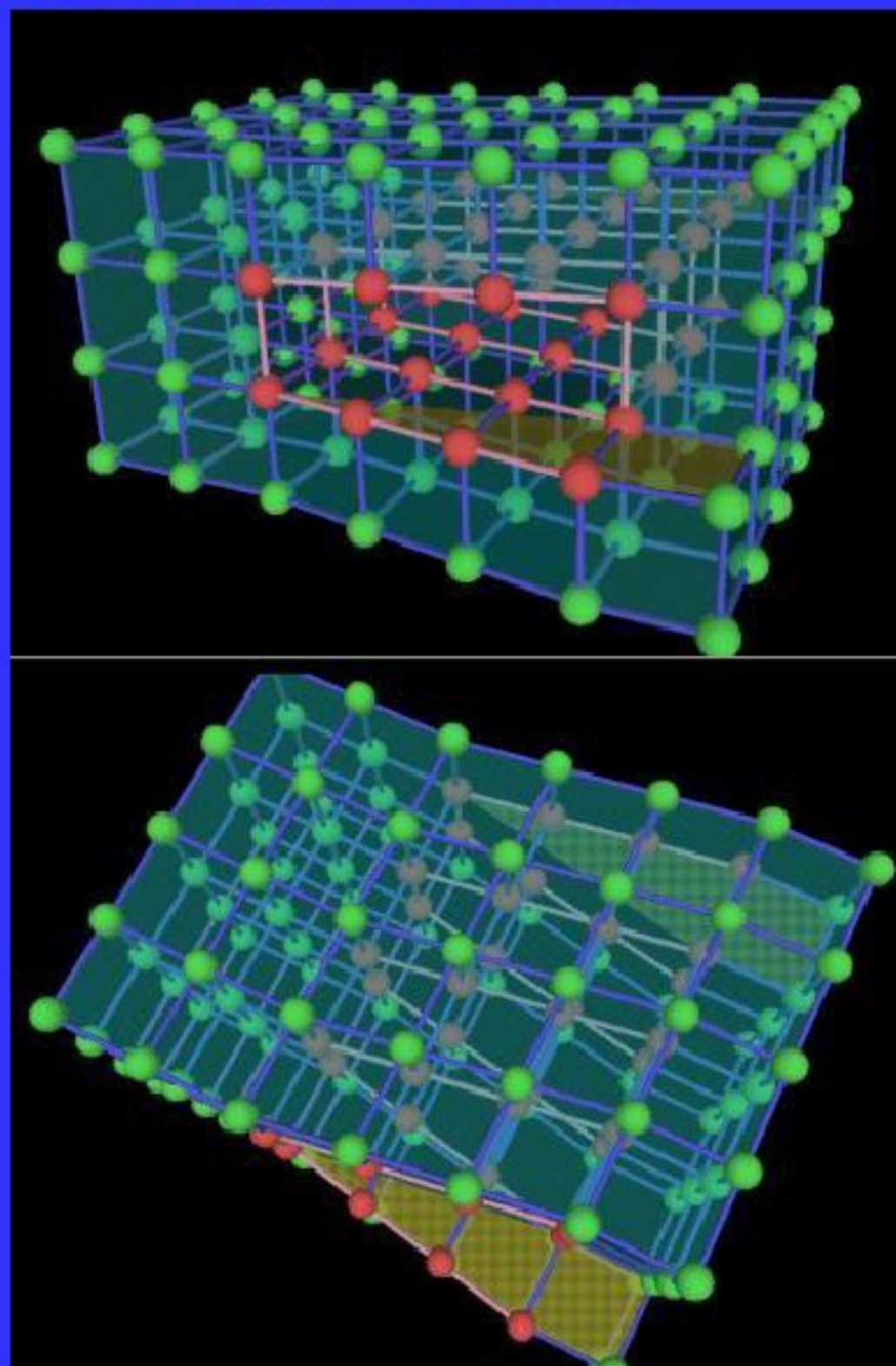


# • 晶体结构理论

## 位错组态（形成及其点阵畸变）



螺型位错

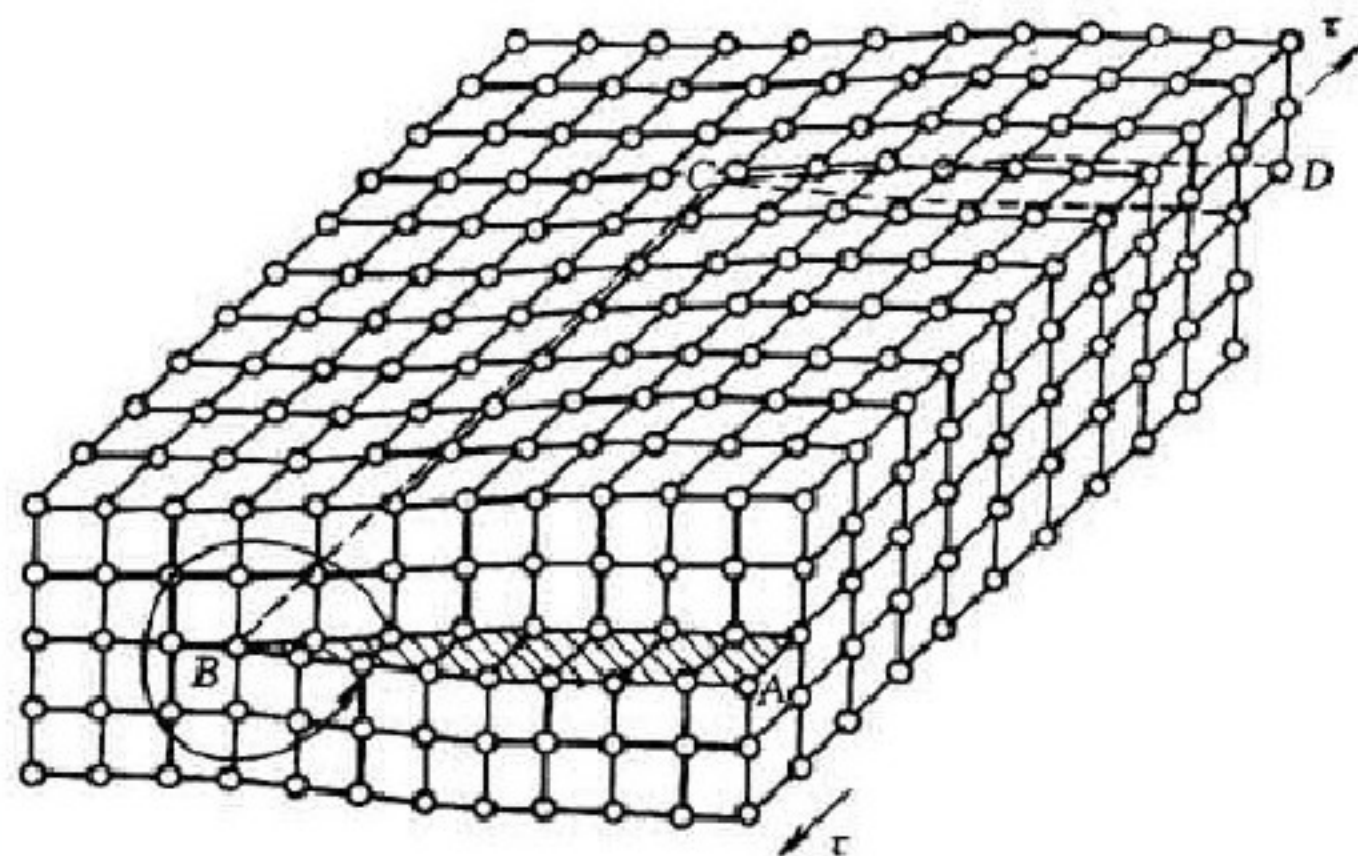




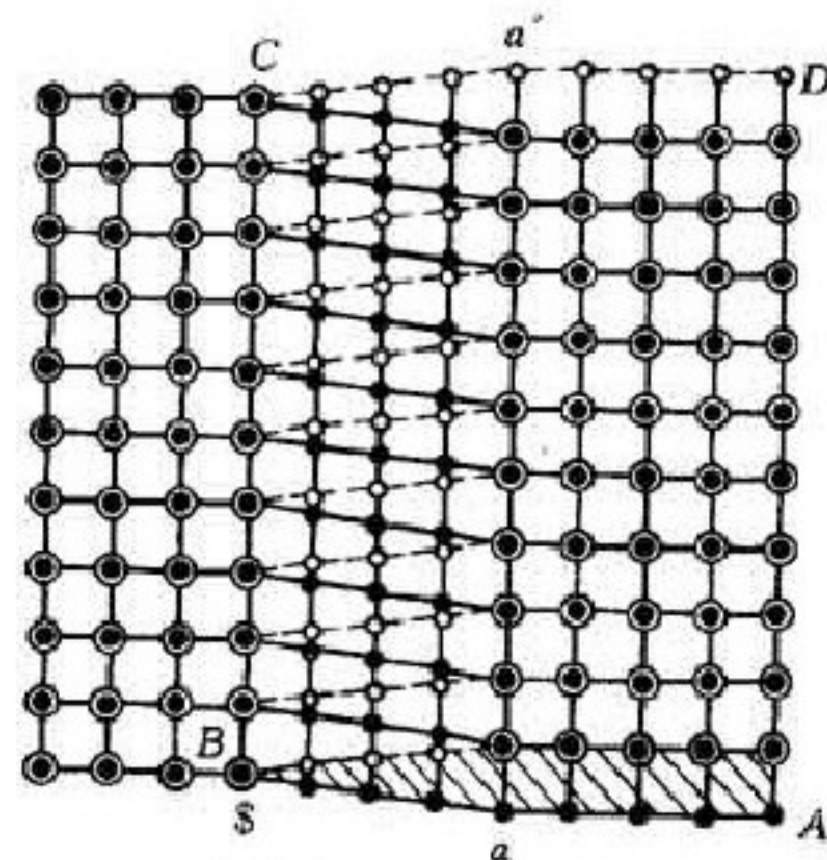


# • 晶体结构理论

## 位错组态（形成及其点阵畸变）



a)



○ 上层原子      ● 下层原子

b)

图 4-10 螺型位错

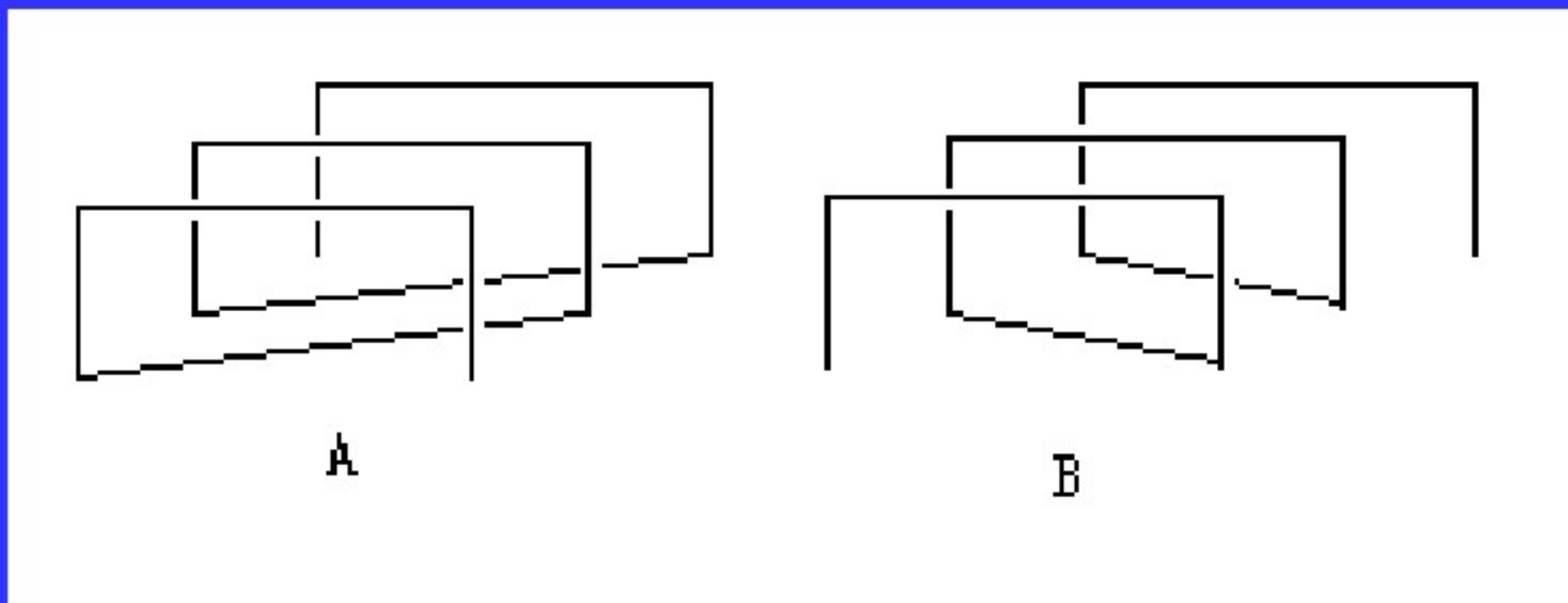
a) 晶体的局部滑移    b) 螺型位错的原子组态

### 螺型位错



# • 晶体结构理论

## 位错组态（形成及其点阵畸变）







# • 晶体结构理论

## 位错组态（形成及其点阵畸变）

### 位错的性质

(1) 形状：不一定是直线，位错及其畸变区是一条管道。

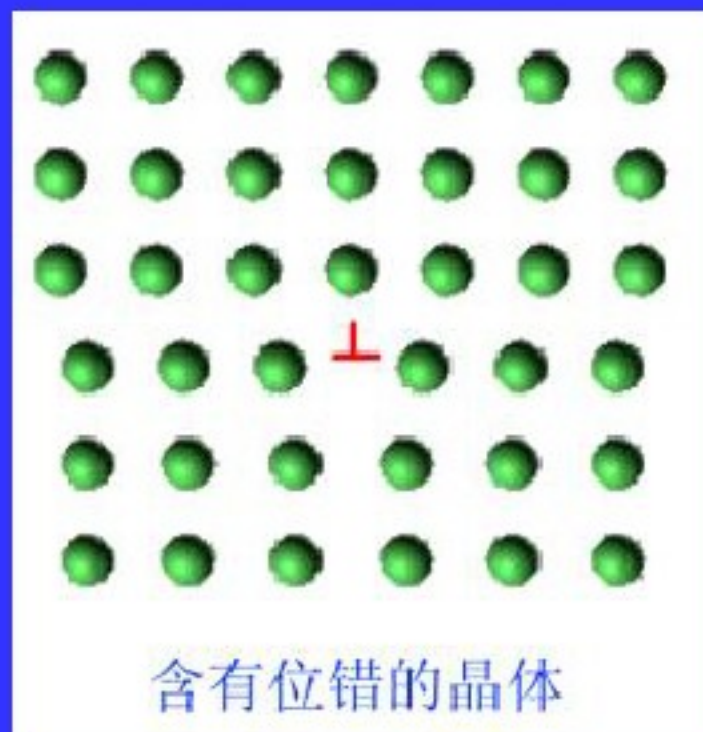
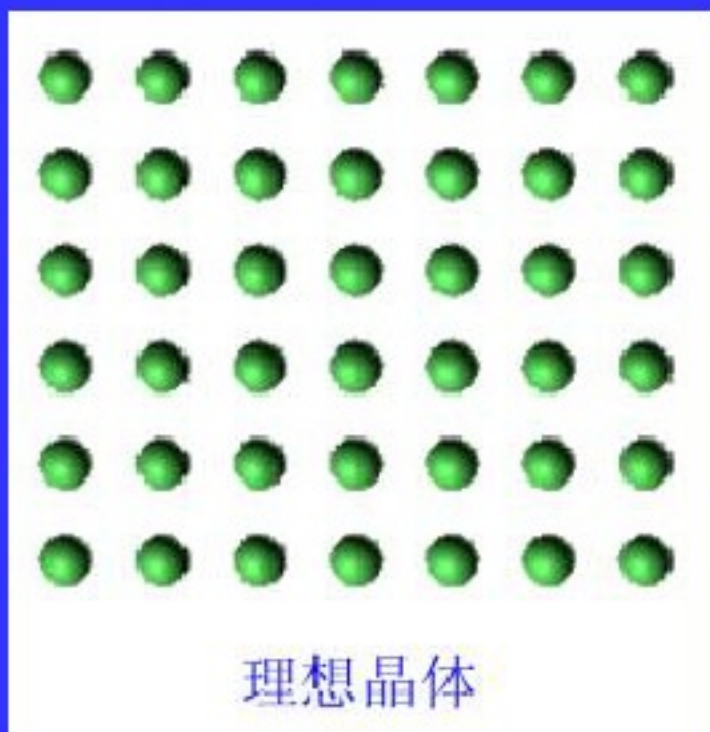
(2) 是已滑移区和未滑移区的边界。

(3) 不能中断于晶体内部。可在表面露头，或终止于晶界和相界，或其它位错相交，或自行封闭成环。



# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

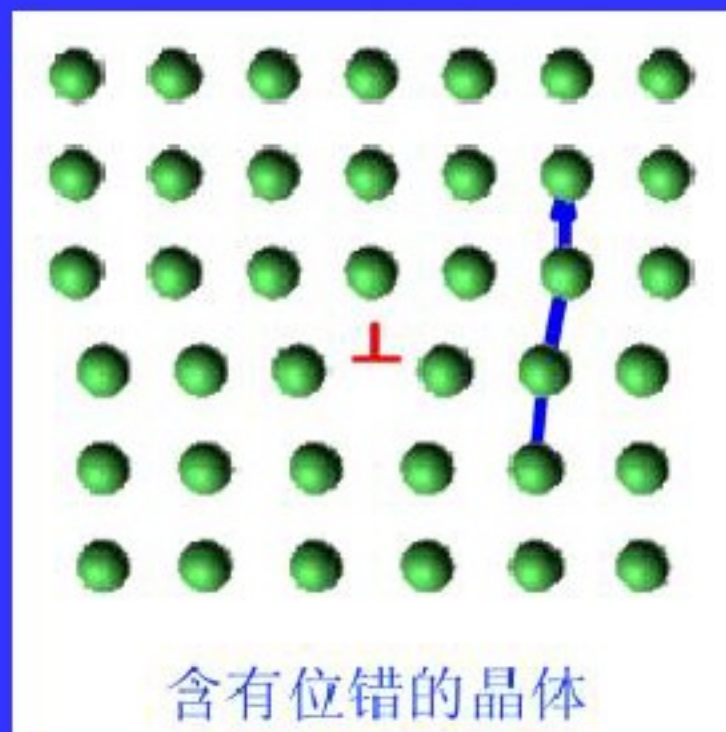
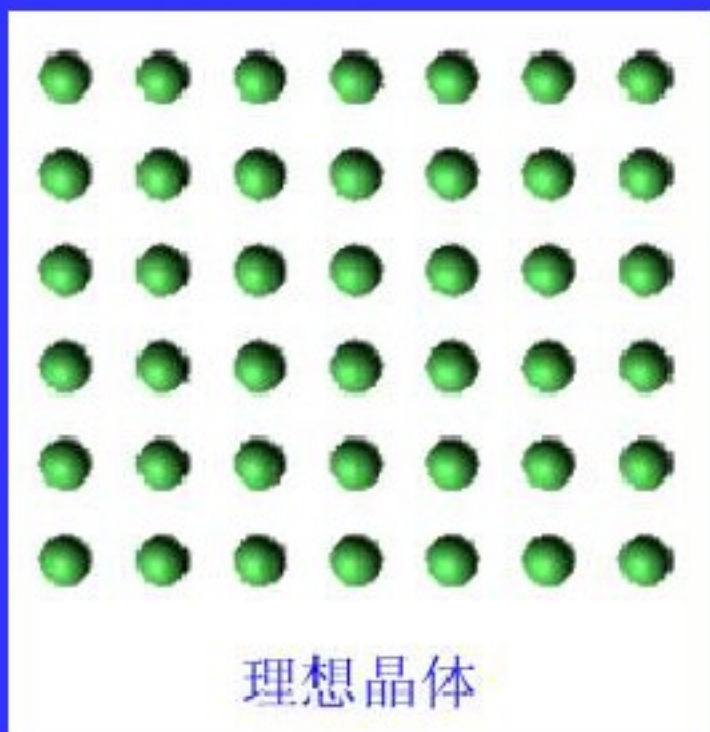






# • 晶体结构理论

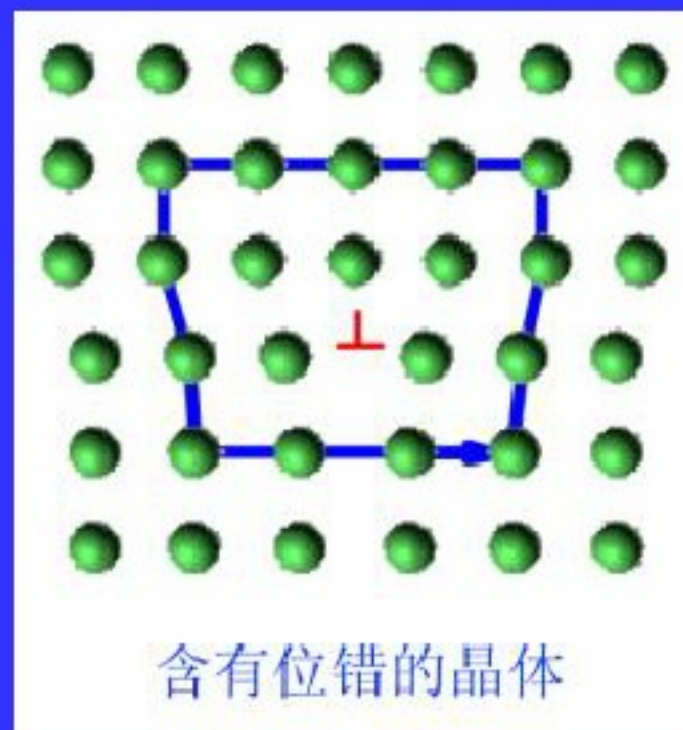
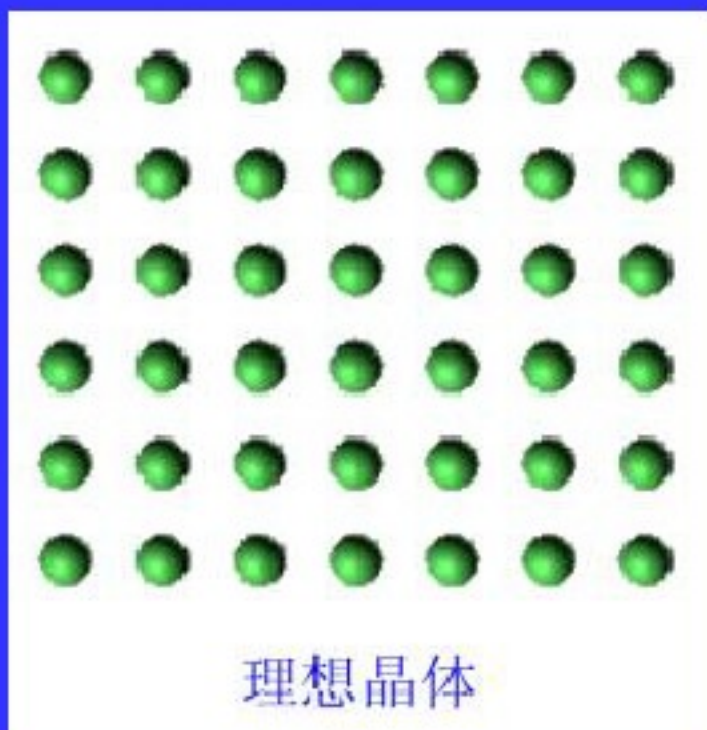
## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）





# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

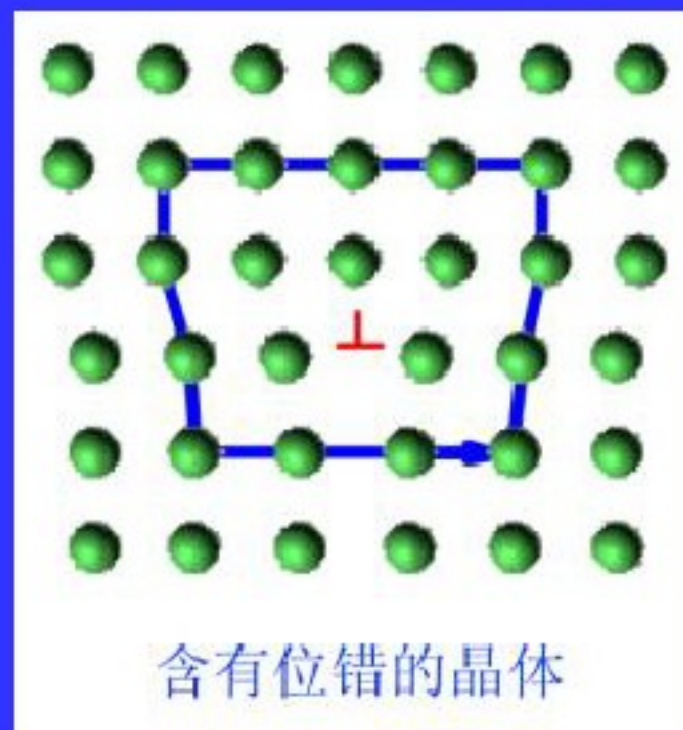
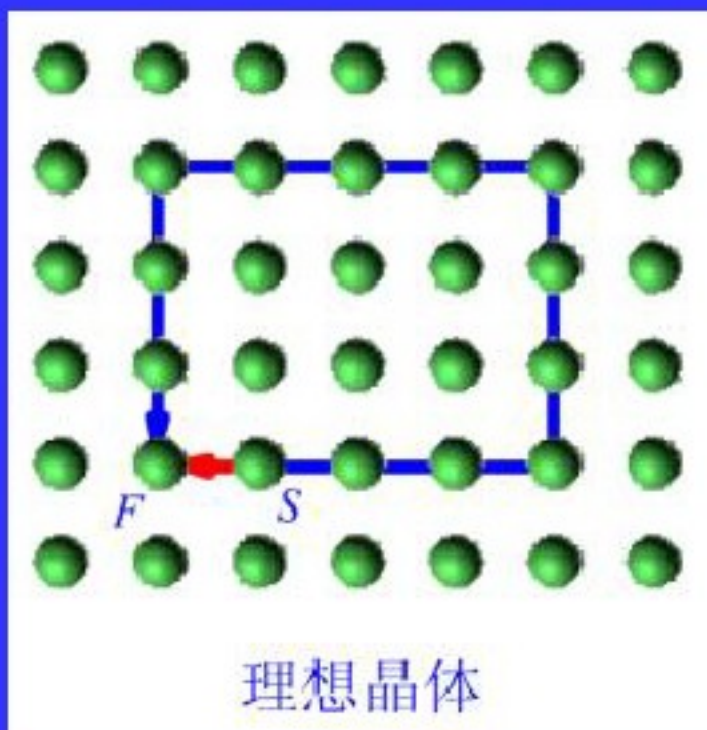






# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）



连接 $F$ 点与 $S$ 点的矢量 $b$ 即为柏氏矢量

$$b = a/n [u \ v \ w]$$

$$|b| = a (u^2 + v^2 + w^2)^{1/2} / n$$



# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

### 柏氏矢量的物理意义

柏氏矢量是对位错周围晶体点阵畸变的叠加

$b$ 越大，位错引起的晶体弹性能越高

$\xi$ 平行于 $b$ ——螺位错

$\xi \cdot b < 0$ ，左螺； $\xi \cdot b > 0$ ，右螺

$\xi$ 垂直于 $b$ ——刃位错

$(\xi \times b)$ 总指向多余半原子面方向





# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

柏氏矢量具有如下的守恒性：

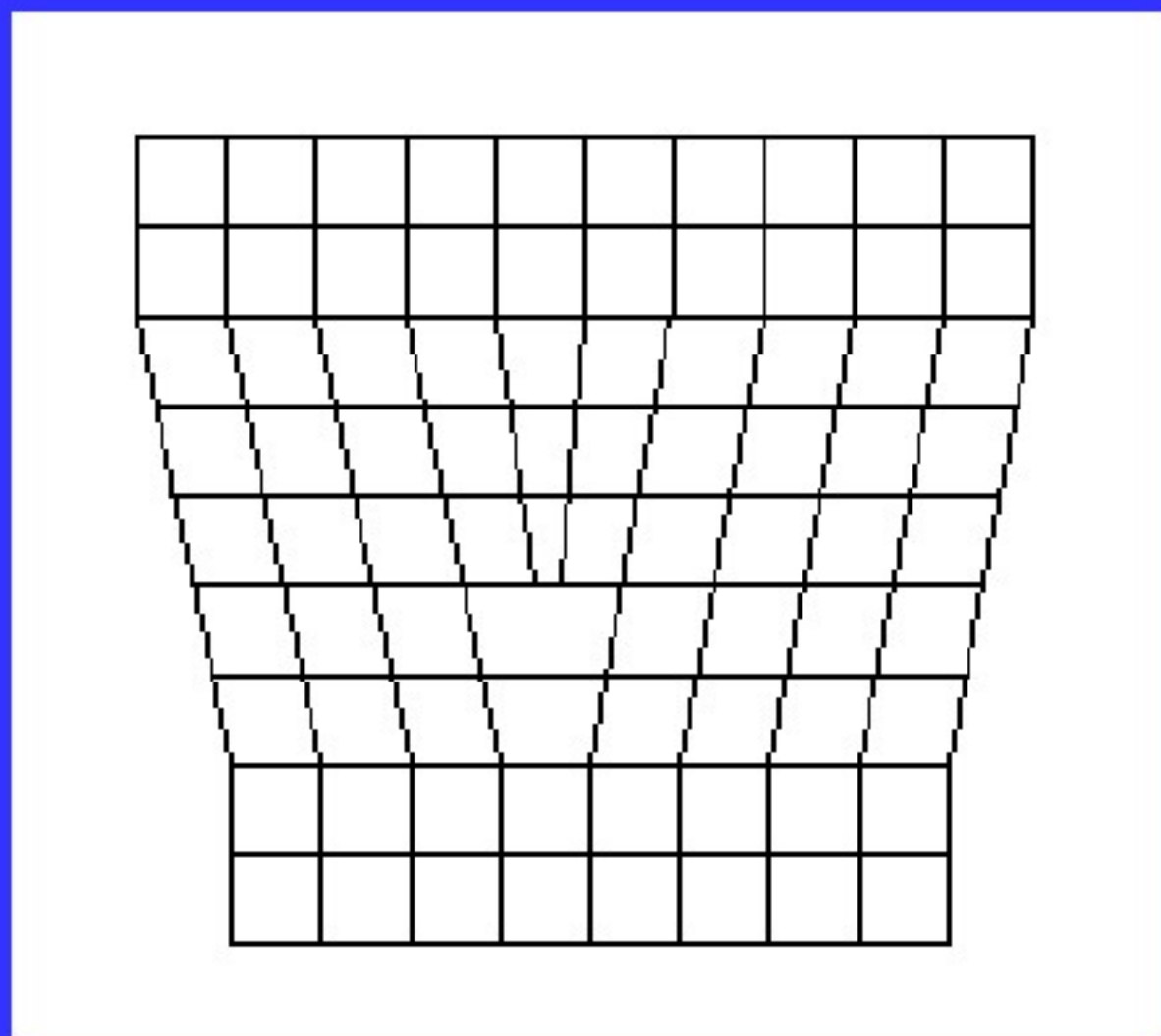
(1) 一条不分岔的位错线只有一个柏氏矢量；因为柏氏矢量与柏氏回路的路径无关，只要柏氏回路不与其它位错线相交，从一条位错线的任意一点出发所作的柏氏回路总会绘出同一柏氏矢量。由此可以推出：柏氏矢量与位错线之间具有唯一性，即一条位错只有一个柏氏矢量。

(2) 如果数条位错线交于一节点，则流入节点的各位错线的柏氏矢量和等于流出节点的各位错线柏氏矢量之和。即： $\sum b_i = 0$



# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

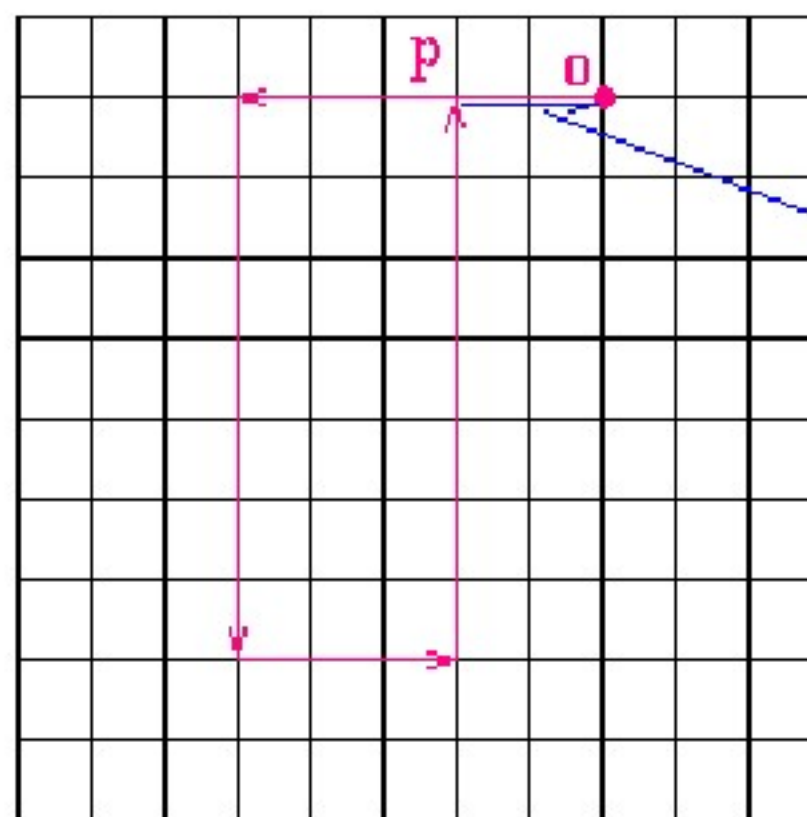
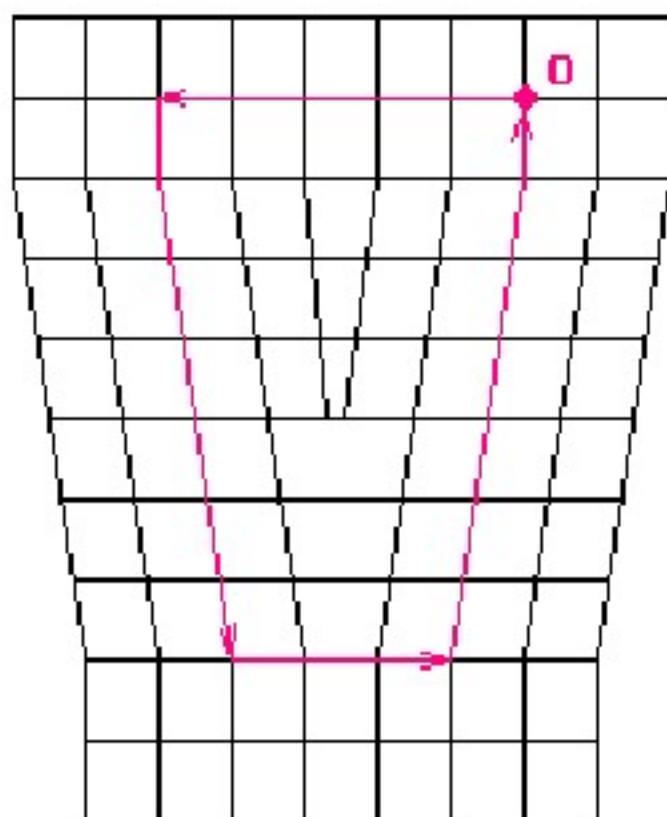






# • 晶体结构理论

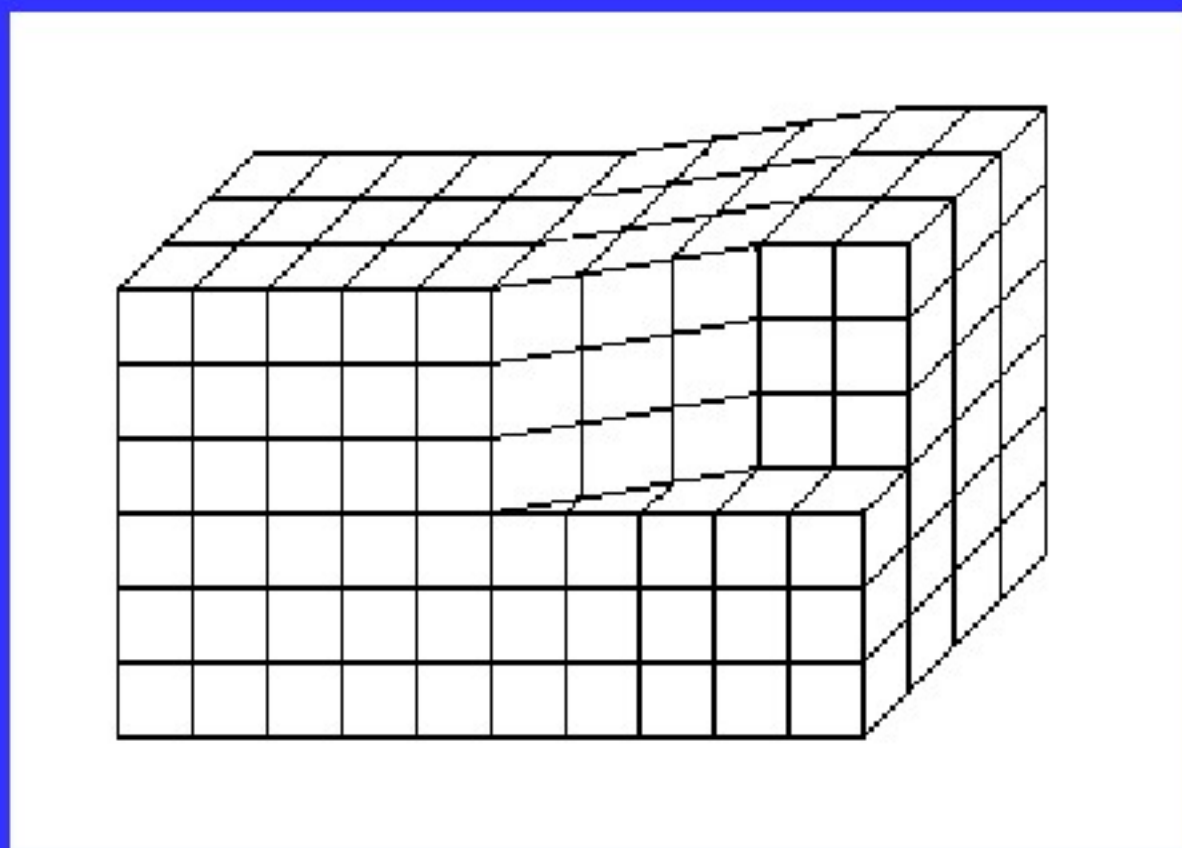
## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）





# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

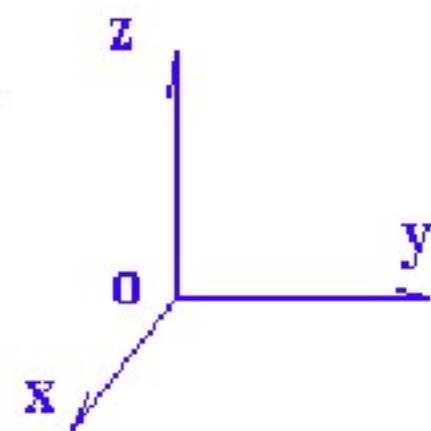
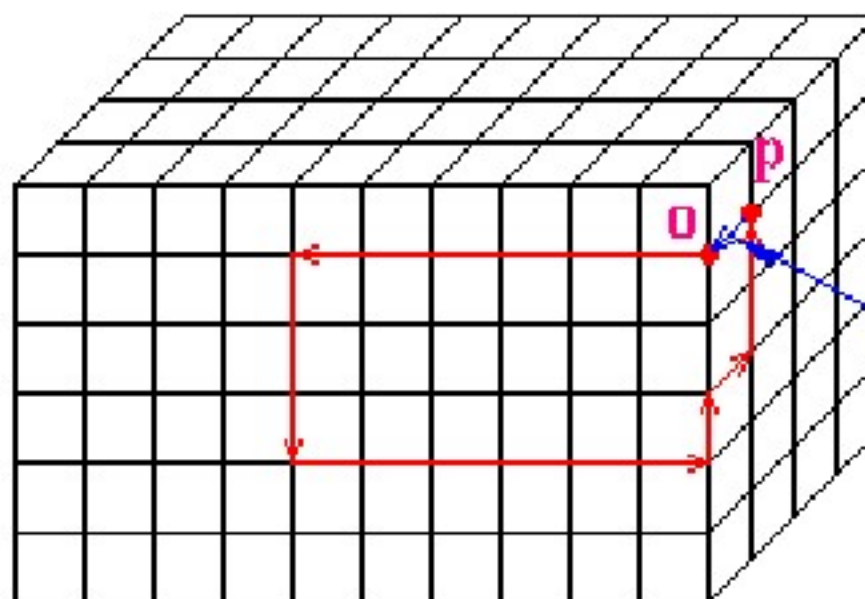
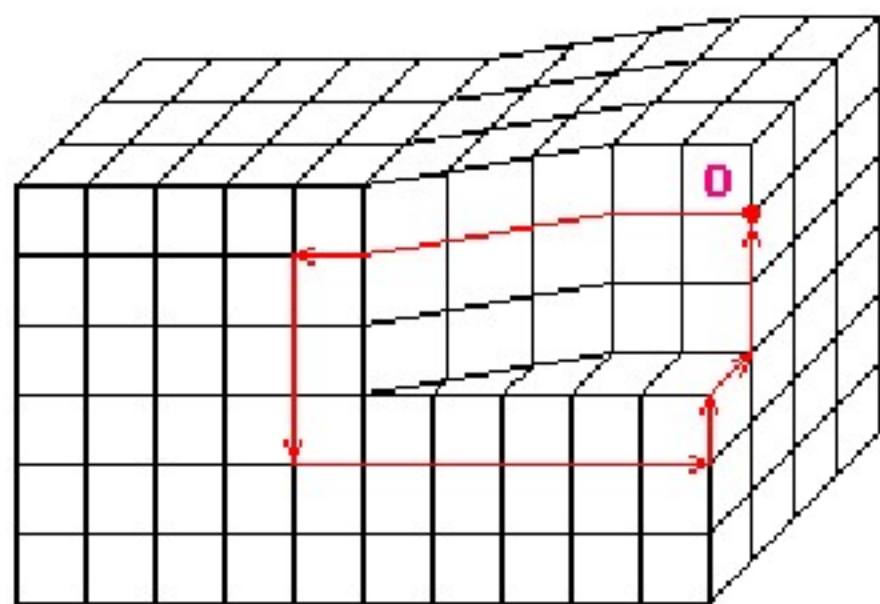






# • 晶体结构理论

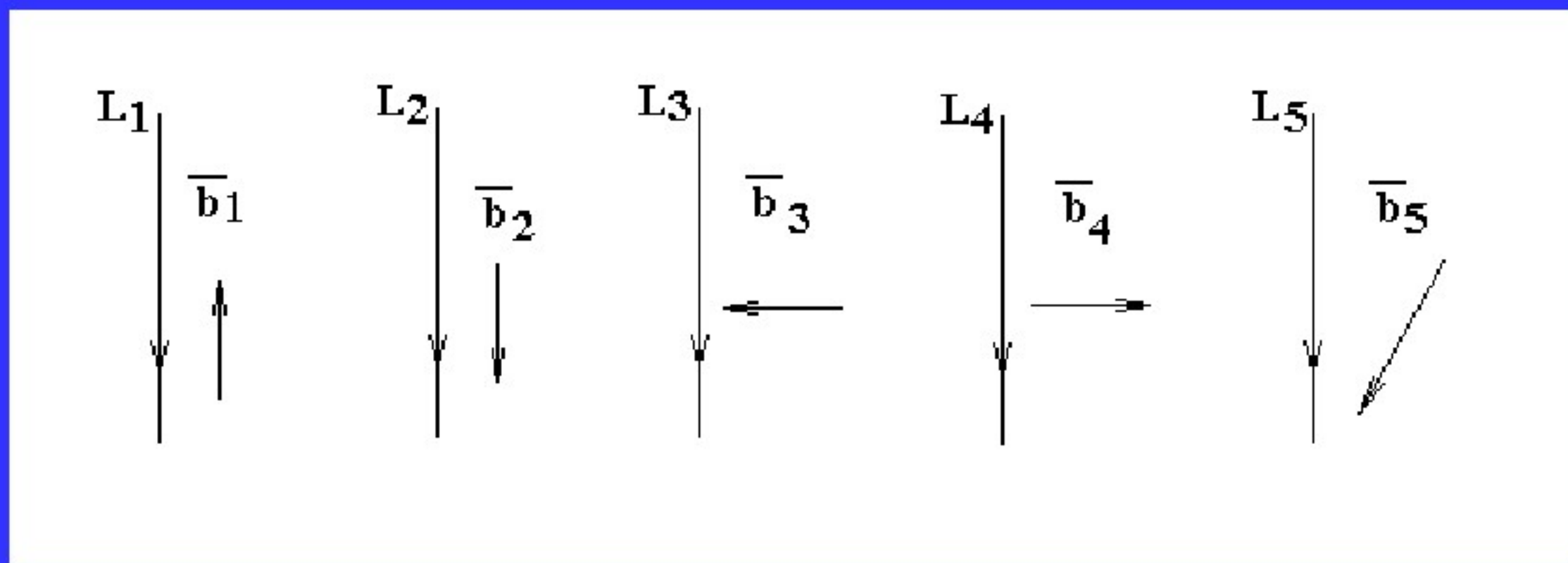
## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）





# • 晶体结构理论

## 位错组态 (柏氏矢量和柏氏回路)







# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

在简单立方晶体中

假定有一刃型位错**A**，其柏氏矢量为 $\mathbf{b}_1 = a[0-10]$ ，沿着**(100)**晶面滑移

假如还有一个螺型位错**B**，柏氏矢量为 $\mathbf{b}_2 = a[100]$ ，并在**(001)**晶面上滑动

请在三维晶格图中画出位错**A**和**B**

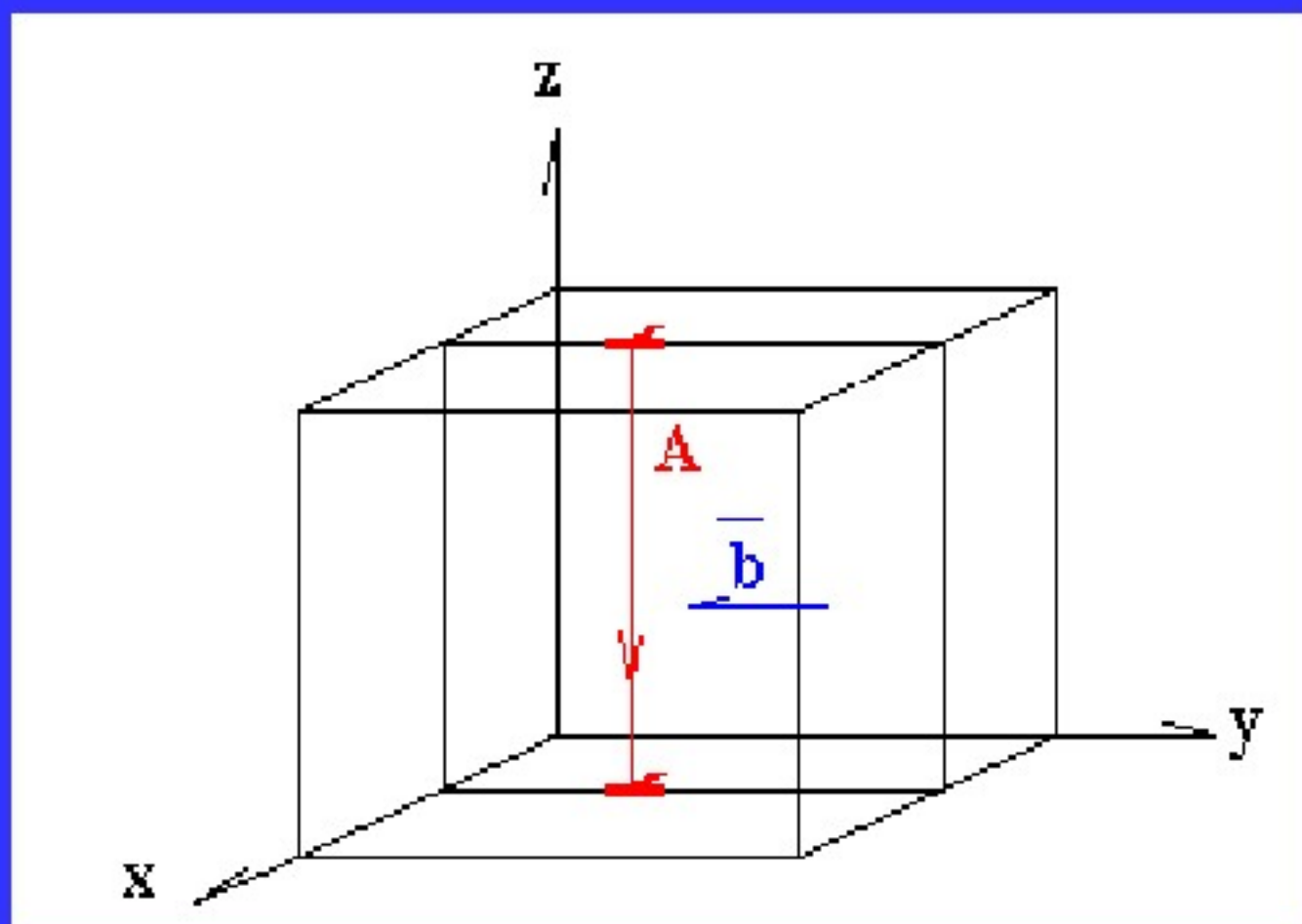


# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

简单立方晶体中

刃型位错A，柏氏矢量 $\mathbf{b}_1 = a[0-10]$ ，沿 $(100)$ 晶面滑移





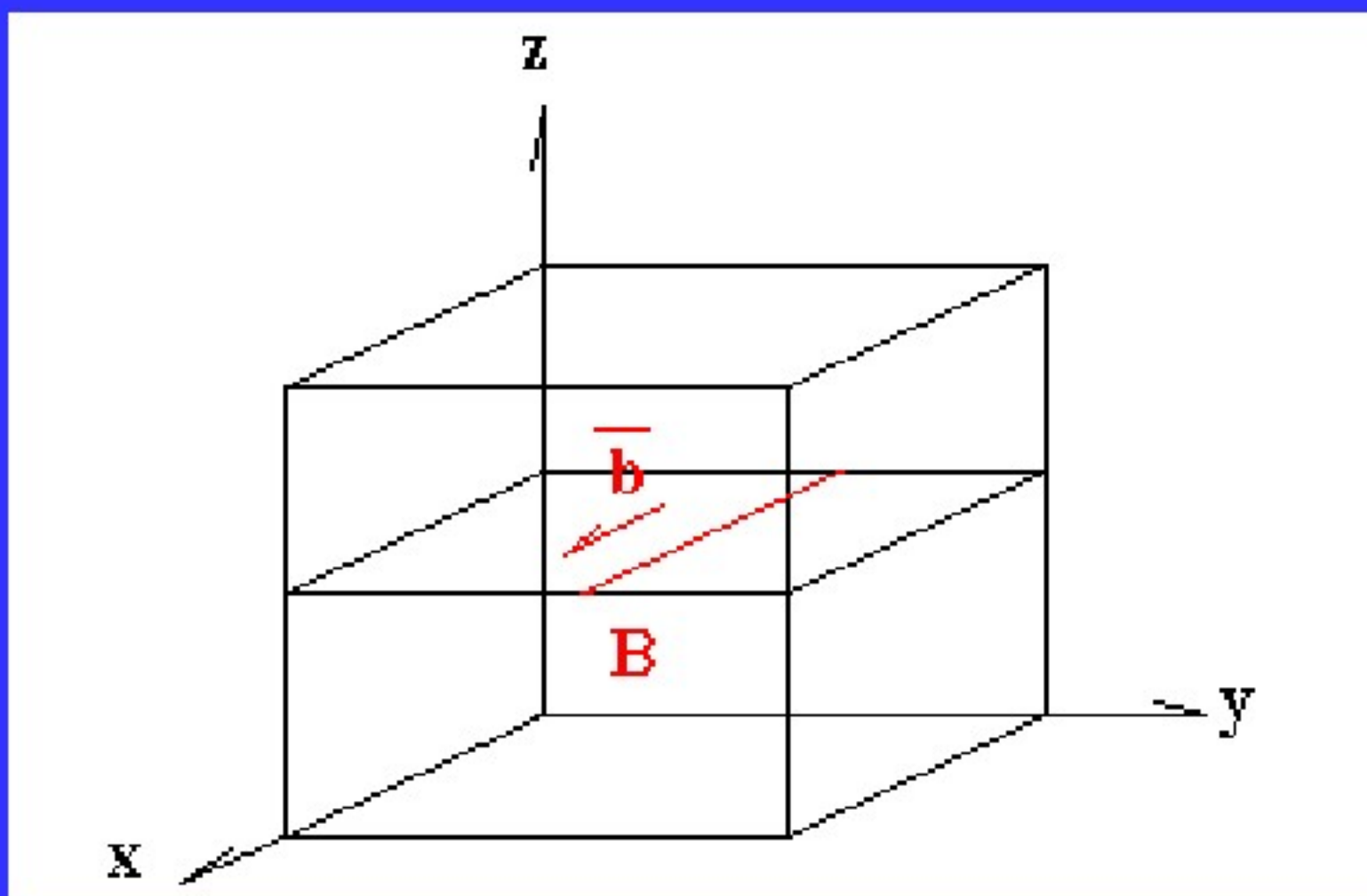


# • 晶体结构理论

## 位错组态（柏氏矢量和柏氏回路）

简单立方晶体

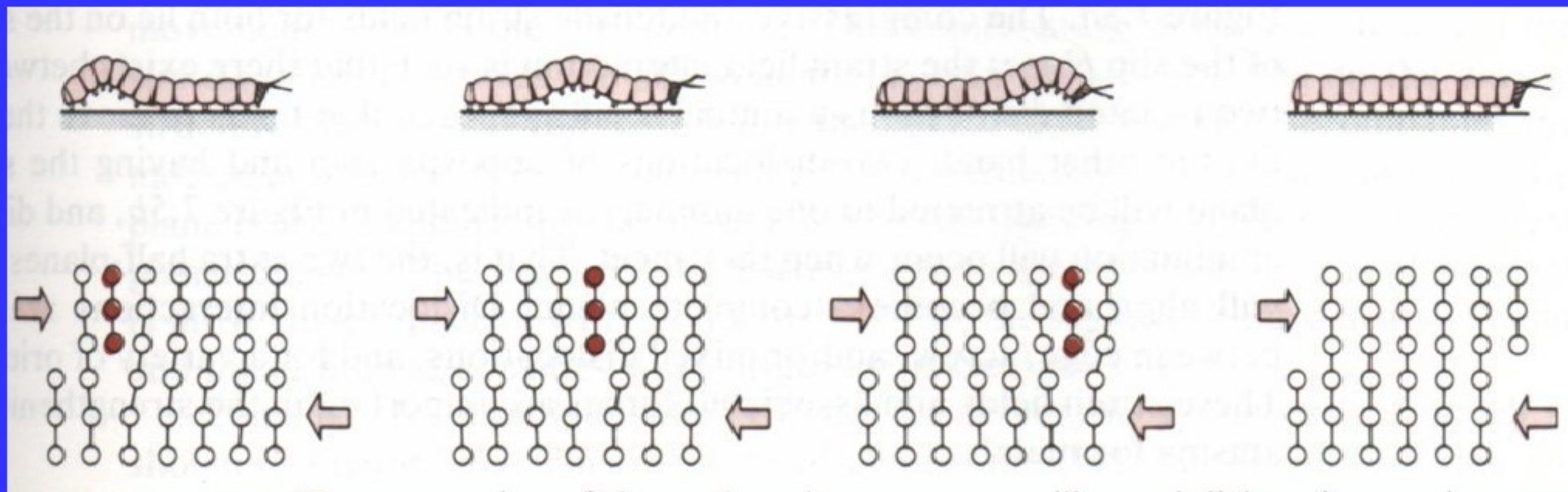
螺型位错B，柏氏矢量 $\vec{b} = a[100]$ ，在(001)晶面滑动





# • 晶体结构理论

## 位错的运动 (1)







# • 晶体结构理论

## 位错的运动 (2)

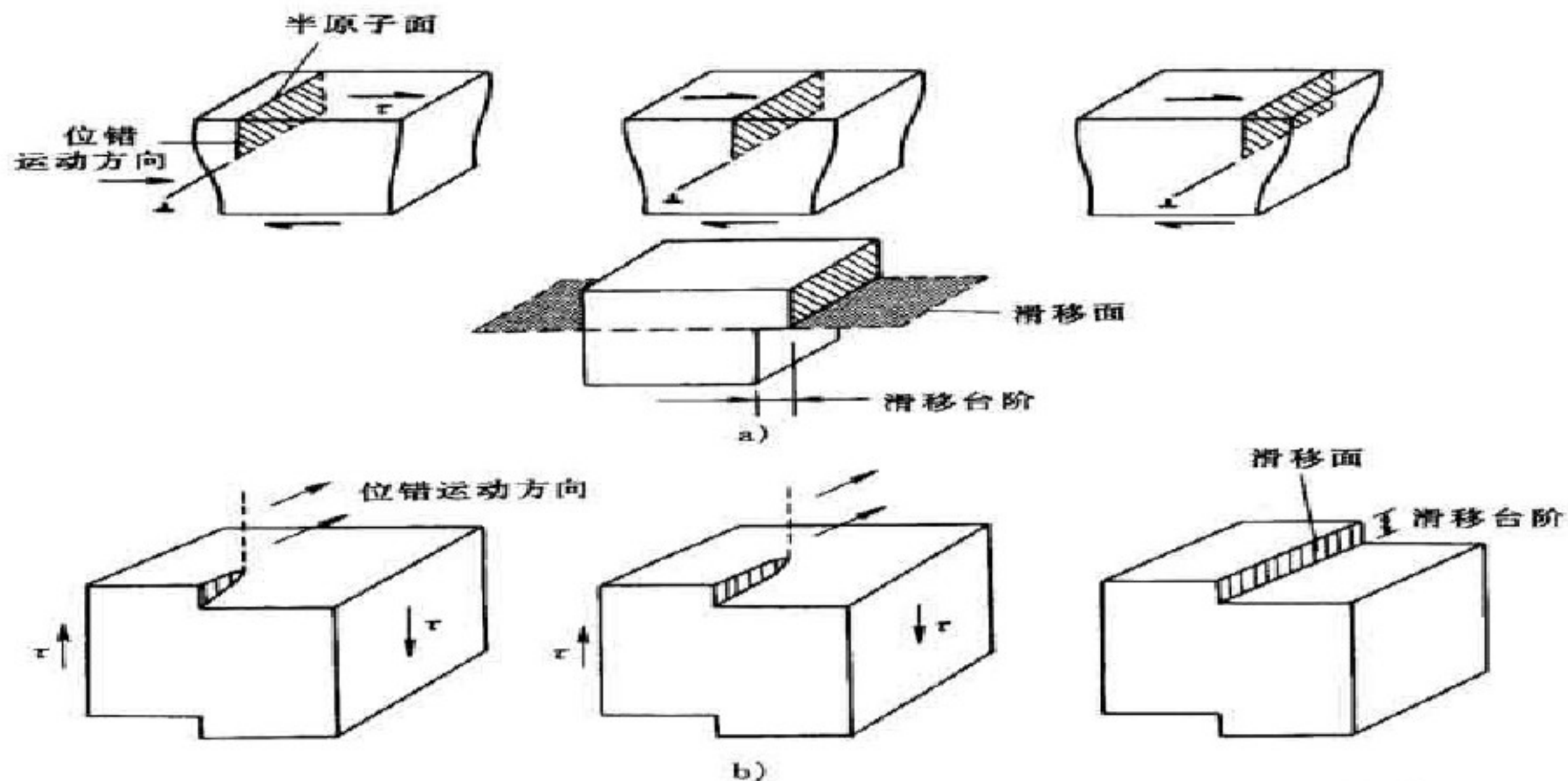


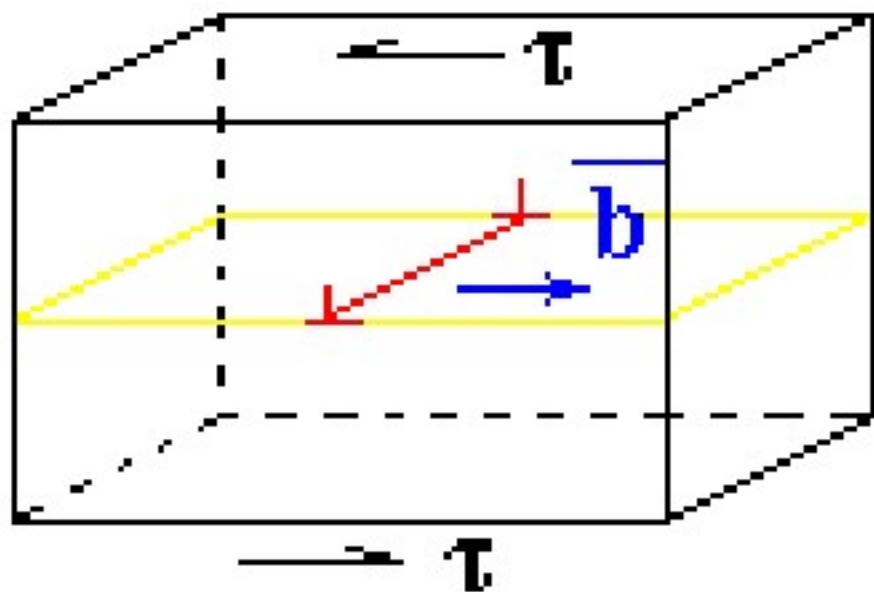
图 4-18 位错运动方向、切应力方向及晶体滑移方向间的关系

a) 刃位错 b) 螺位错



# • 晶体结构理论

## 位错的运动 (2)

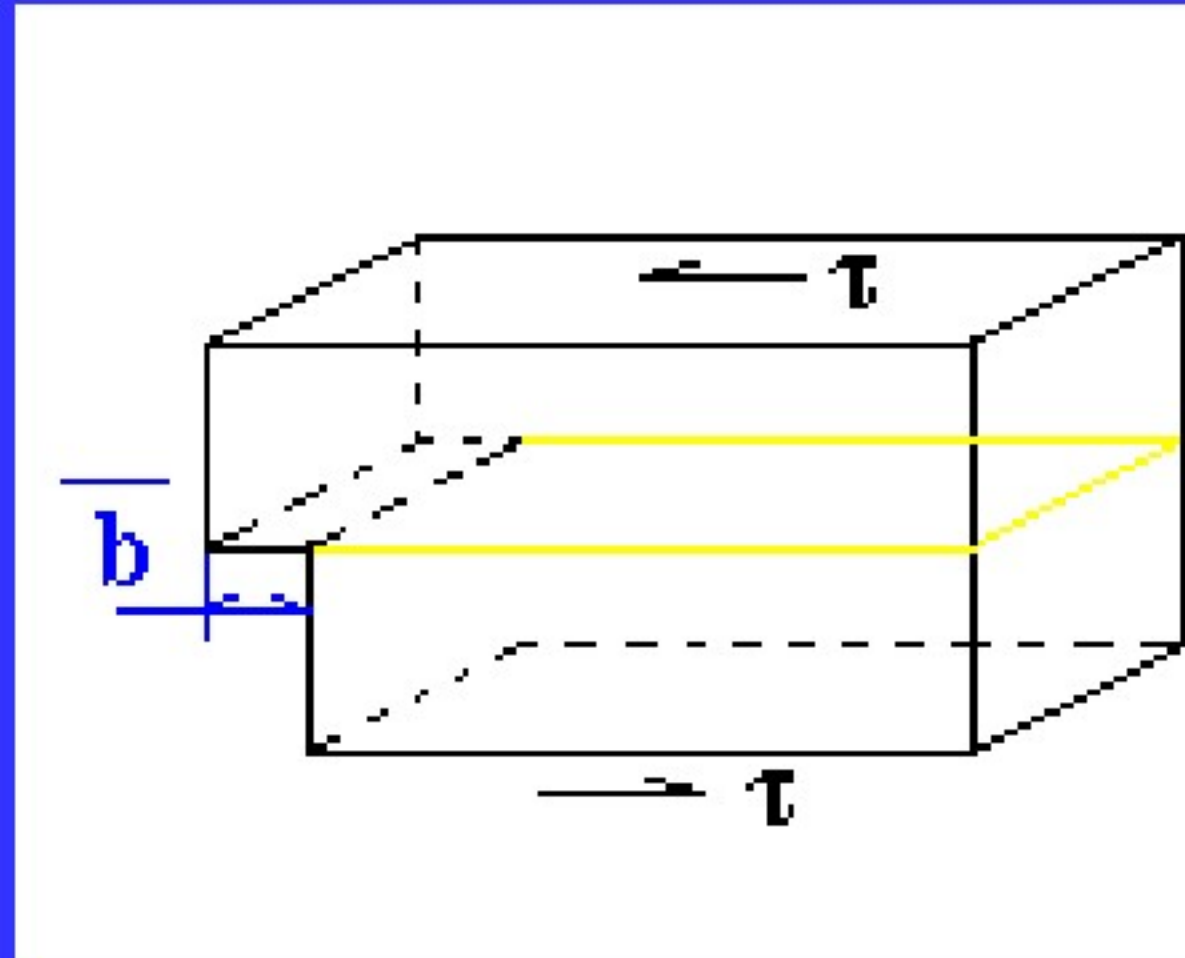
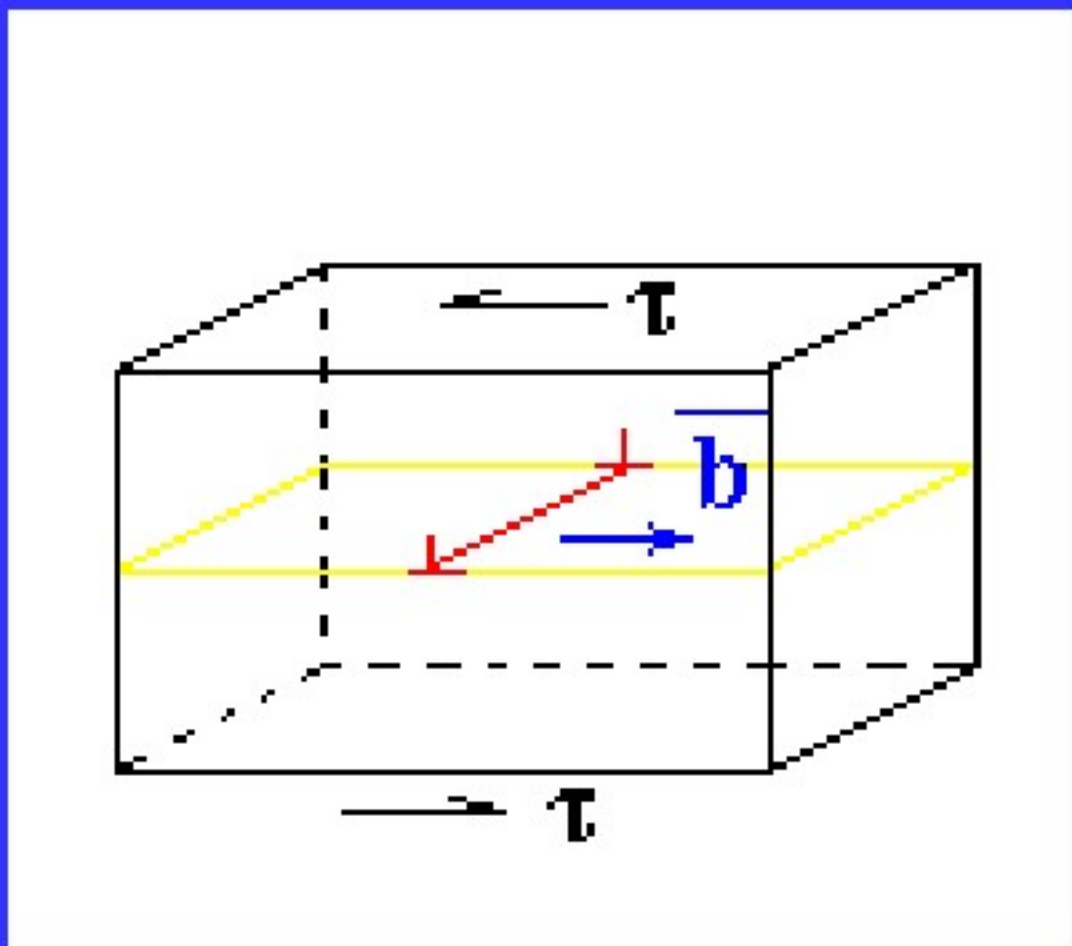






# • 晶体结构理论

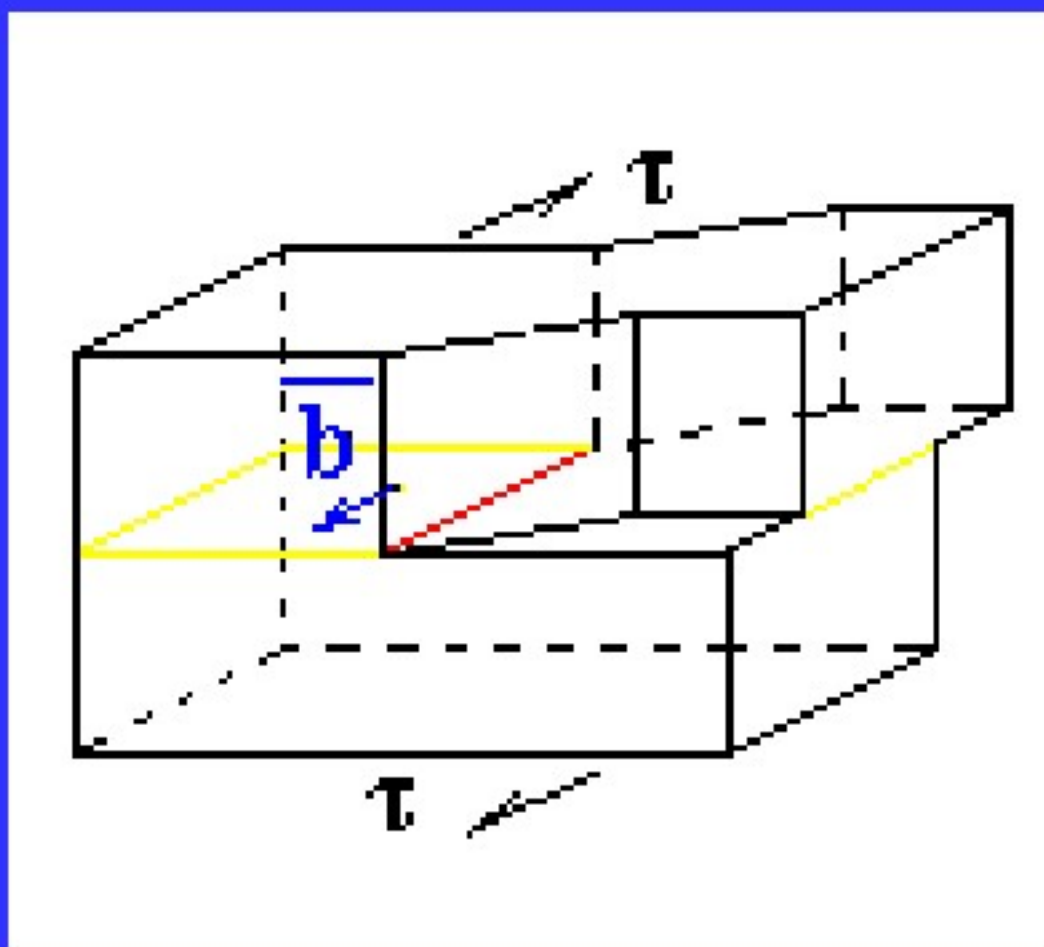
## 位错的运动 (2)





# • 晶体结构理论

## 位错的运动 (2)

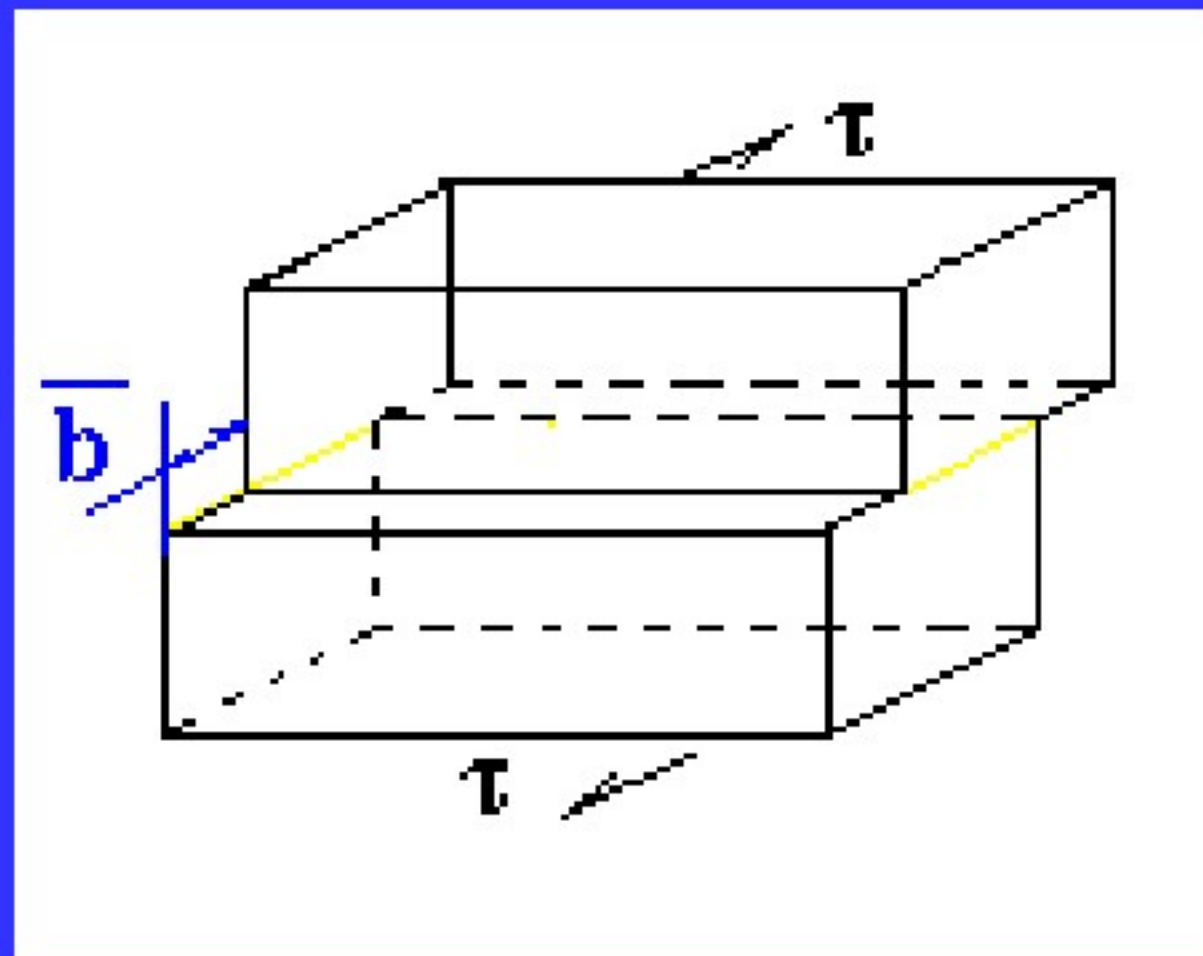
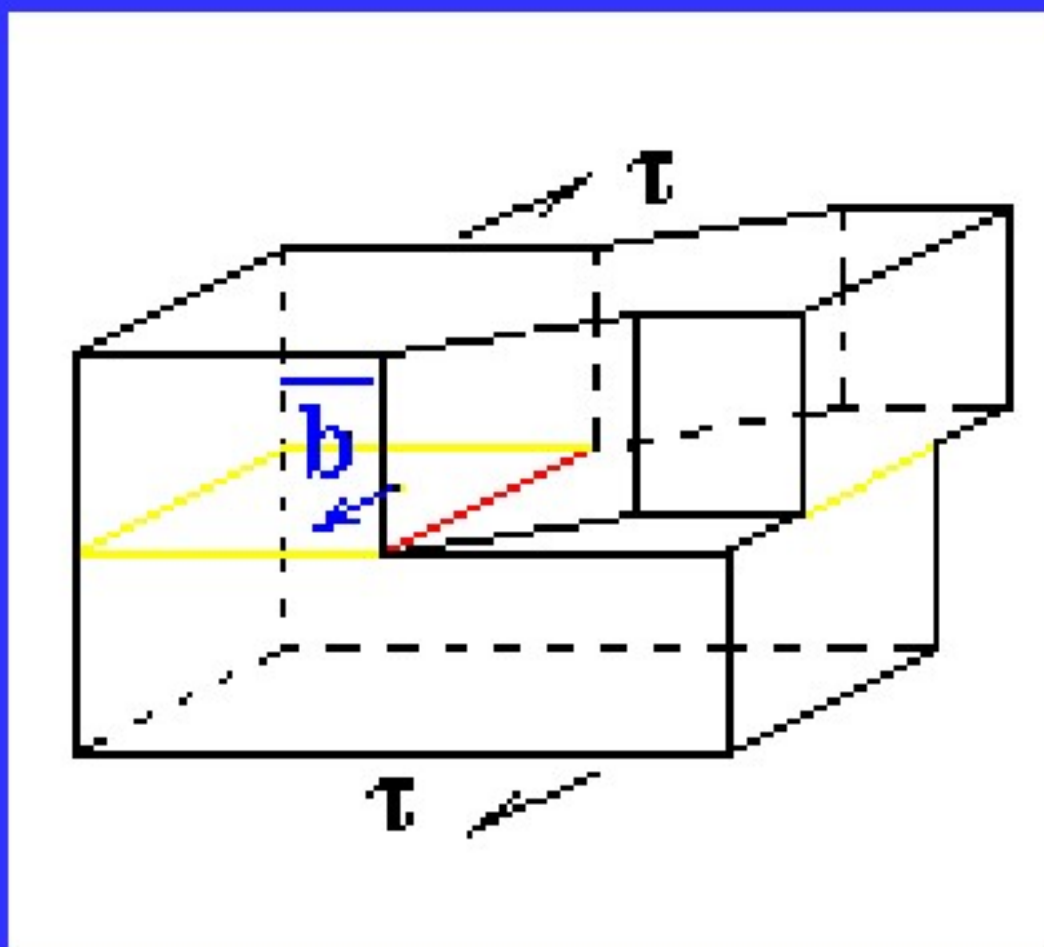






# • 晶体结构理论

## 位错的运动 (2)

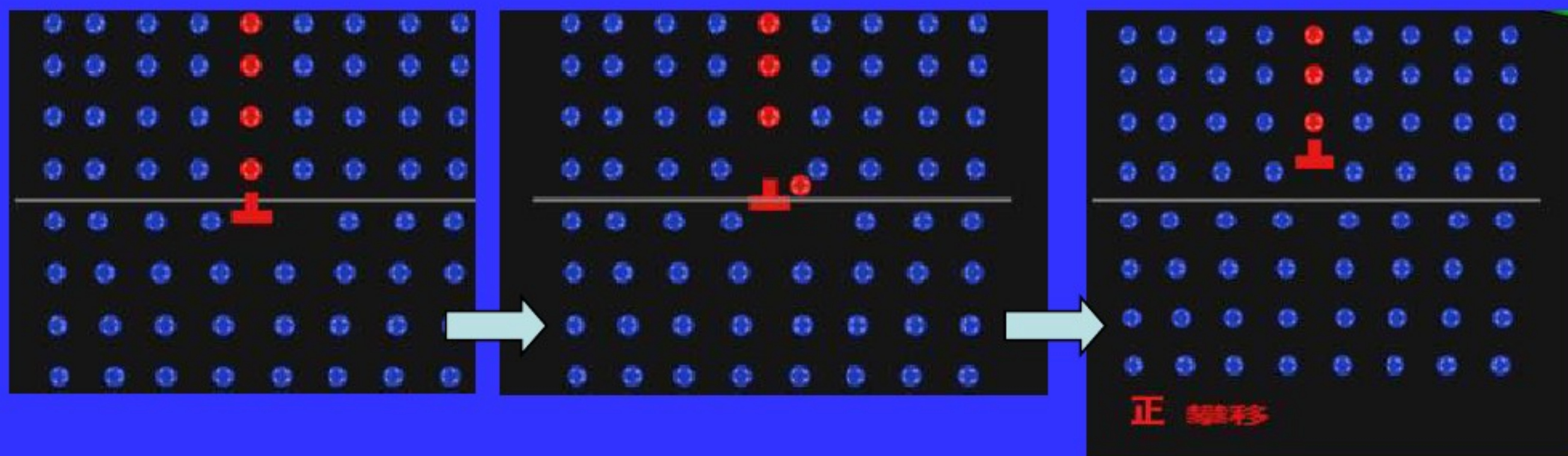




# • 晶体结构理论

## 位错的运动 (2)

**攀移：**刃型位错在垂直于滑移面方向上的运动







# • 晶体结构理论

## 位错的运动 (3)

位错与位错的交互作用:

- 同号相互排斥, 异号相互吸引

位错与溶质原子的相互作用:

- 间隙原子聚集于位错中心, 使体系处于低能态
- 柯氏气团: 溶质原子在位错线附近偏聚



# • 晶体结构理论

## 位错的运动（位错的增殖、塞积与交割）

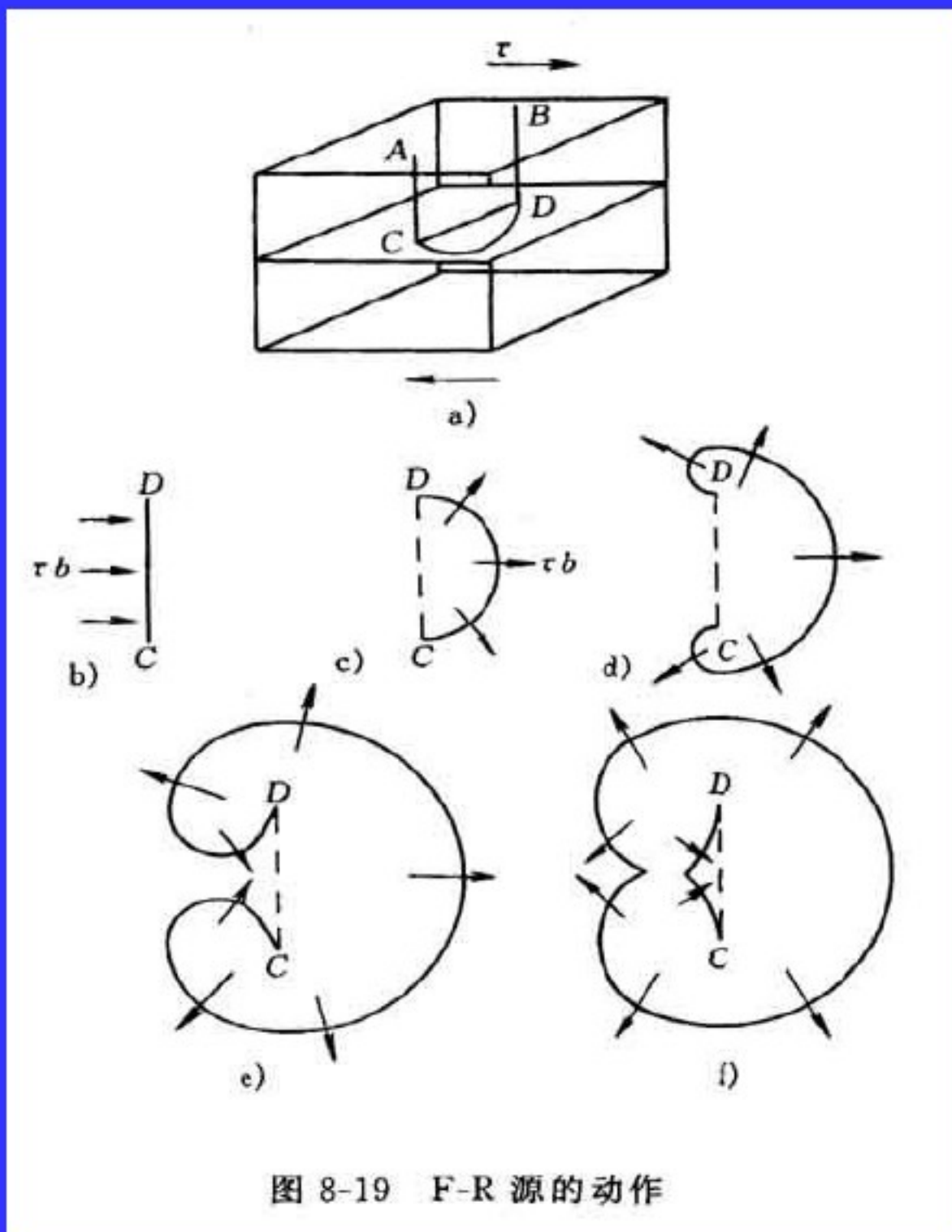


图 8-19 F-R 源的动作

剧烈冷加工的晶体  
 $\rho_s = 10^{16} \text{m}^{-2}$

充分退火的金属晶体

$\rho_s = 10^8 \sim 10^{12} \text{m}^{-2}$

精心制备超纯半导体

$\rho_s = 10^6 \text{m}^{-2}$





# • 晶体结构理论

## 位错的运动（位错的增殖、塞积与交割）



外力为  $\tau$  ，  $n$  为塞积群数目

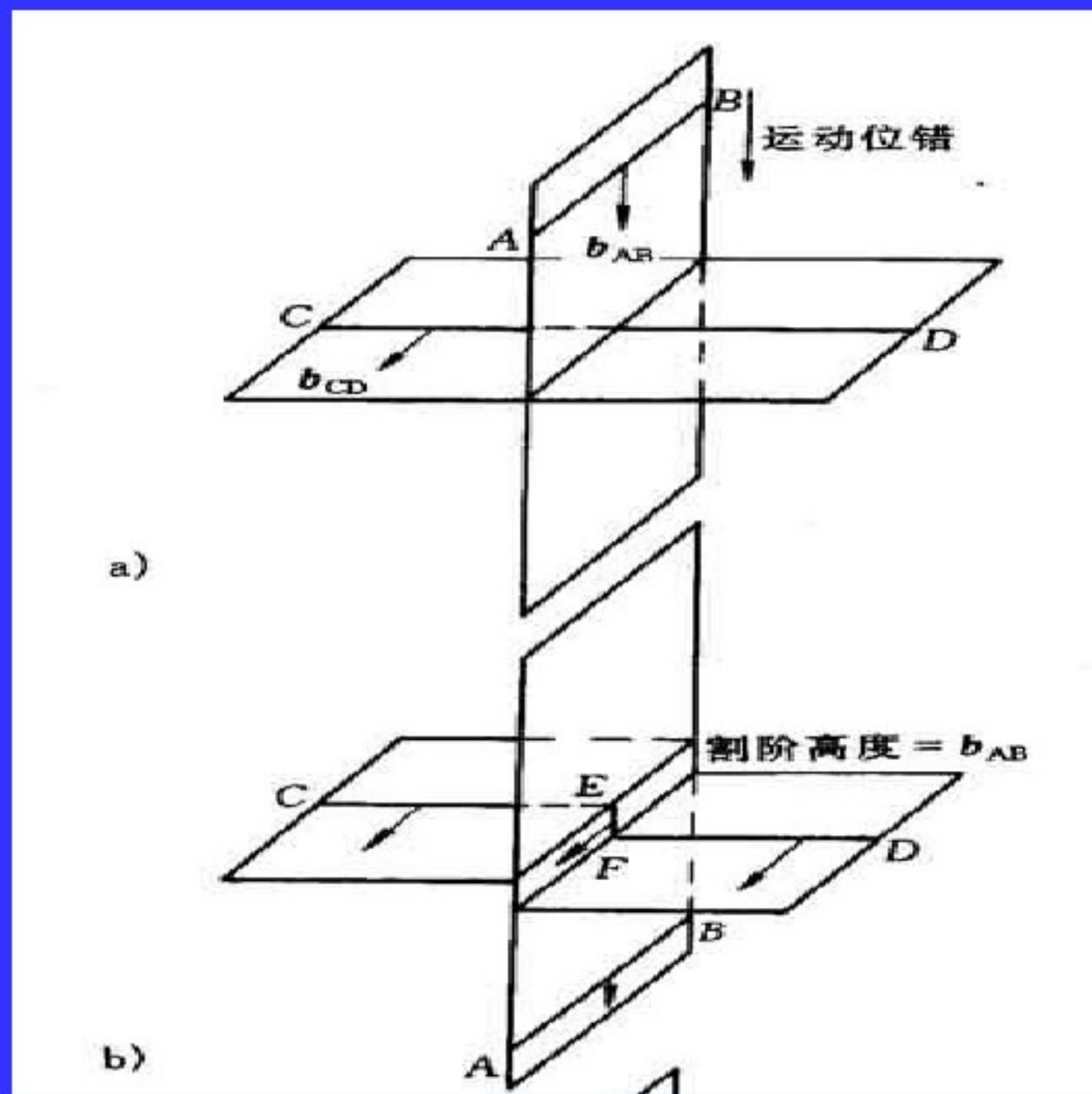
障碍物前应力集中

$$\tau^* = n\tau$$



# • 晶体结构理论

## 位错的运动（位错的增殖、塞积与交割）







# • 晶体结构理论

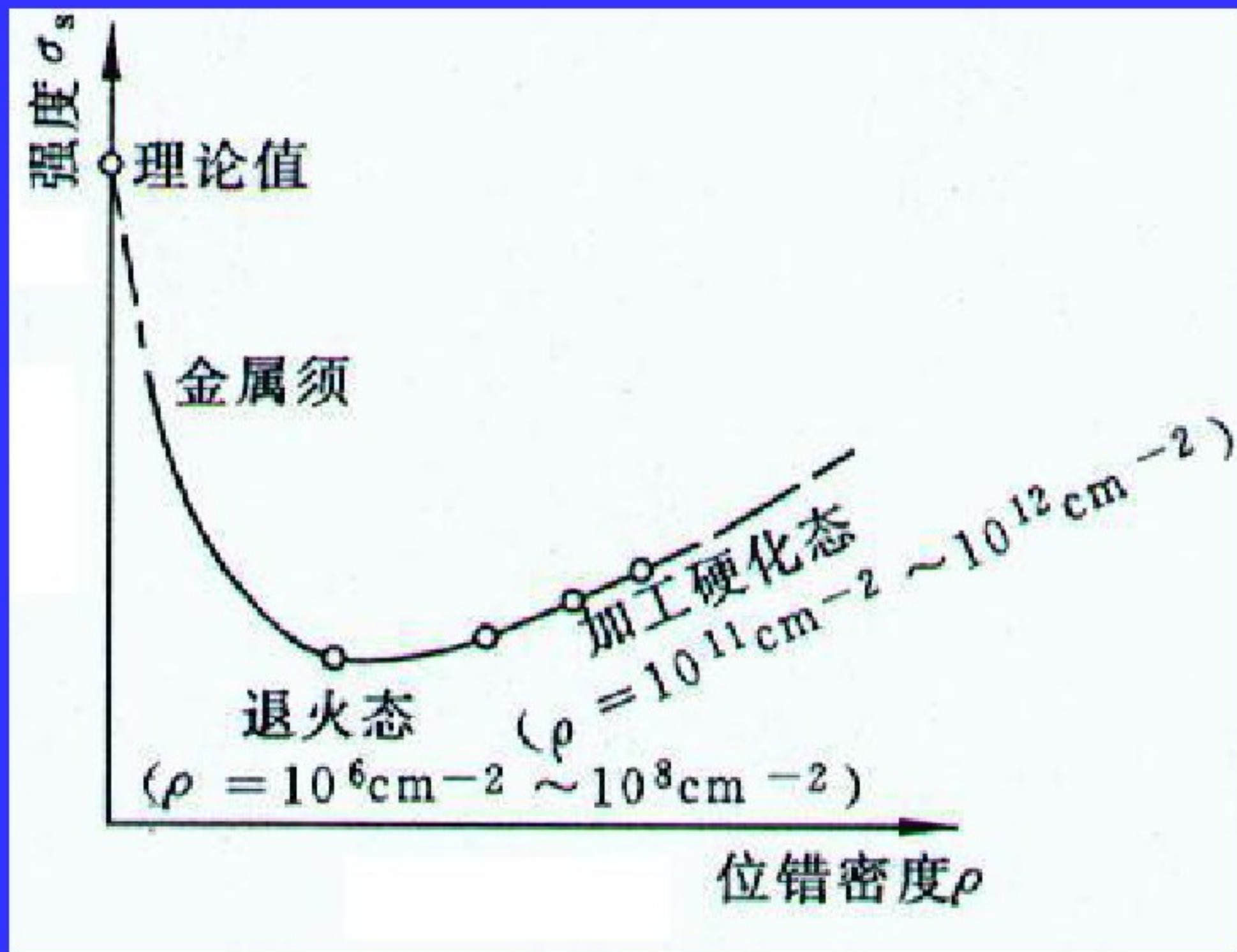
## 位错的运动

- 位错在切应力的作用下运动
- 位错运动至晶体表面，表面产生滑移台阶
- 位错运动至另一个缺陷处将受阻
- 在力的作用下，位错会不断的形成



# • 晶体结构理论

## 位错与强度







# • 晶体结构理论

## • 面缺陷

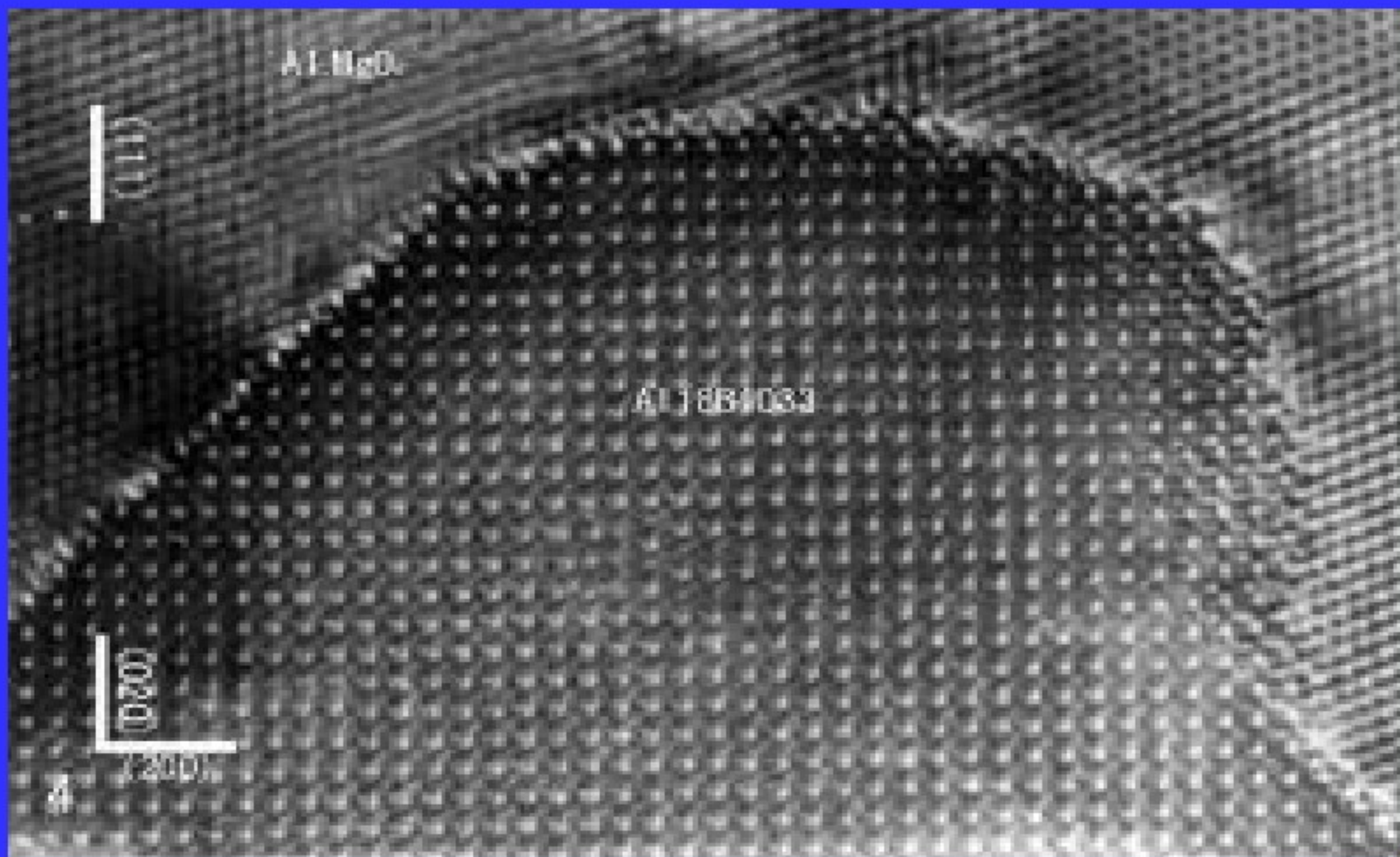
• 晶界、亚晶界、相界、表面



# • 晶体结构理论

## 面缺陷

- 大角度晶界：晶粒位向差大于10度的晶界







# • 晶体结构理论

## 面缺陷

• 小角度晶界：晶粒位向差小于10度的晶界

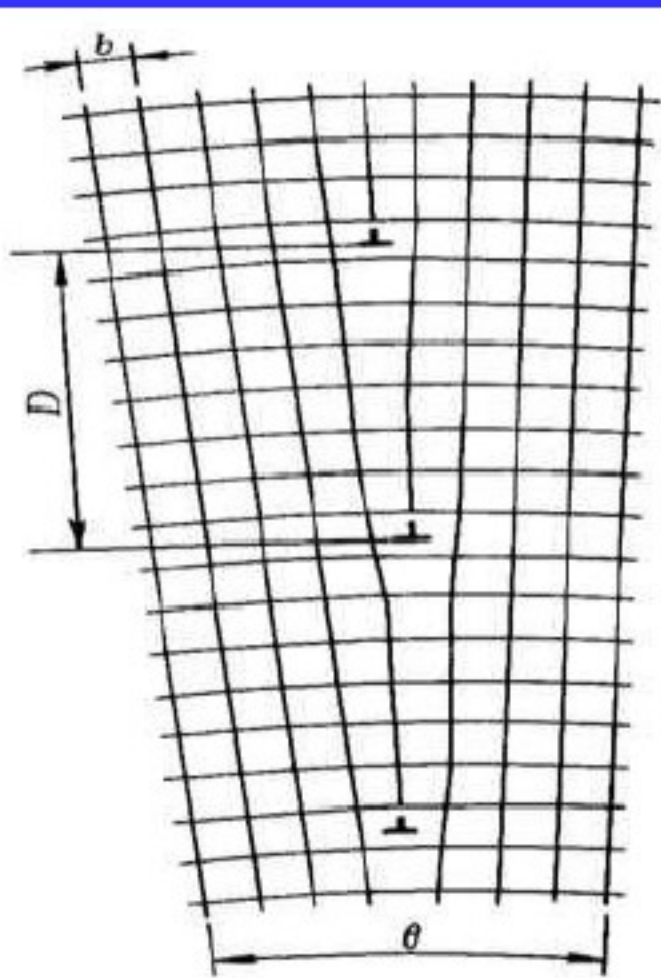


图 4-39 对称倾斜小角度晶界的结构

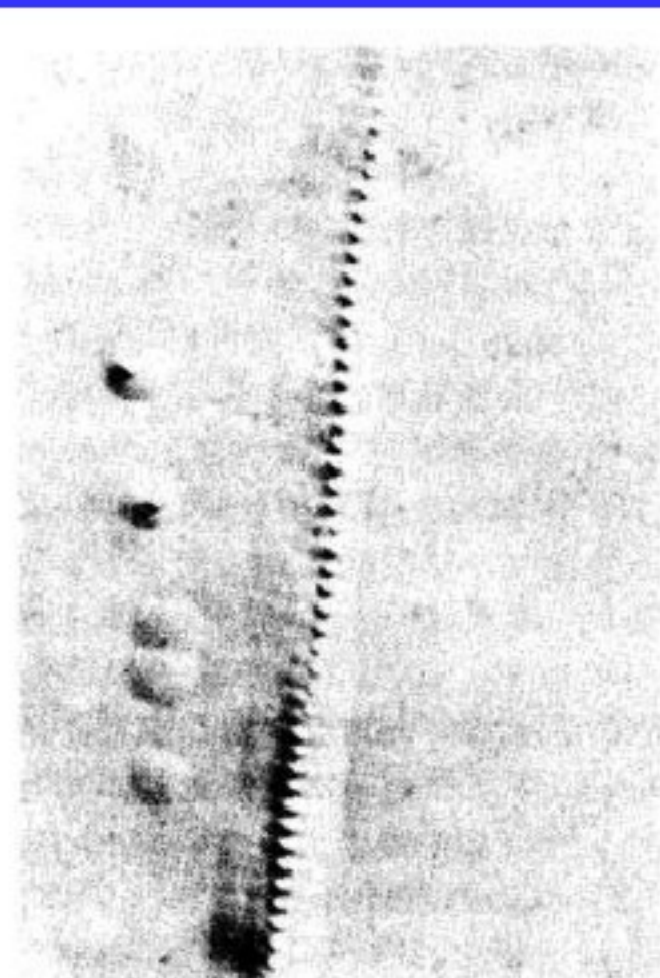


图 4-40 晶体中的小角度晶界与位错蚀坑 1500X







# • 晶体结构理论

## 面缺陷特性

- (1) 界面能会引起界面吸附。
- (2) 界面上原子扩散速度较快。
- (3) 对位错运动有阻碍作用。
- (4) 易被氧化和腐蚀。
- (5) 原子的混乱排列利于固态相变的形核。





# • 晶体结构理论

## • 面缺陷

- 晶界、亚晶界、相界、表面

## • 体缺陷

- 夹杂物、沉淀（析出）相



# • 晶体结构理论

## 理想晶体结构

- 纯金属的晶体结构
- 合金的晶体结构

## 实际晶体结构

- 点缺陷、线缺陷、面缺陷、体缺陷





# •习题

## •铁的两种结构