

材料科学基础位错部分知识点

第三章 晶体结构缺陷（位错部分）

1. 刃型位错及螺型位错的特征

刃型位错特征：

- 1) 刃型位错是由一个多余半原子面所组成的线缺陷；
- 2) 位错滑移矢量（柏氏向量）垂直于位错线，而且滑移面是位错线和滑移矢量所构成唯一平面；
- 3) 位错的滑移运动是通过滑移面上方的原子面相对于下方原子面移动一个滑移矢量来实现的；
- 4) 刃型位错线的形状可以是直线、折线和曲线；
- 5) 晶体中产生刃型位错时，其周围的点阵发生弹性畸变，使晶体处于受力状态，既有正应变，又有切应变。

螺型位错特征：

- 1) 螺型位错是由原子错排呈轴线对称的一种线缺陷；
- 2) 螺型位错线与滑移矢量平行，因此，位错线只能是直线；
- 3) 螺型位错线的滑移方向与晶体滑移方向、应力矢量方向互相垂直；
- 4) 位错线与滑移矢量同方向的为右螺型位错；为此系与滑移矢量异向的为左螺型位错。

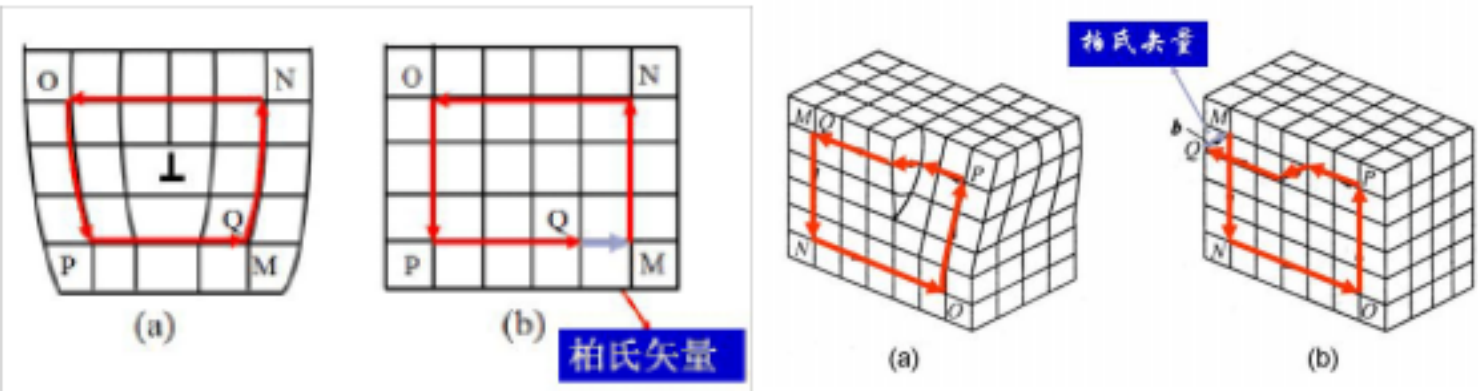
| | 刃型位错 | 螺型位错 |
|--------------------|------|------|
| 位错线和柏氏矢量关系（判断位错类型） | | |
| 滑移方向 | b | b |
| 位错线运动方向和柏氏矢量关系 | | |

相关概念（ppt 上的，大概看一看）：

- A. 位错运动与晶体滑移：通过位错运动可以在较小的外加载荷下晶体产生滑移，宏观显现为产生塑性变形。
- B. 位错线：位错产生点阵畸变区空间呈线状分布。对于纯刃型位错，其可以描述为刃型位错多余半原子面的下端沿线。为了与其它类型位错统一，位错线可表述为已滑移区与未滑移区的交界线。
- C. 混合型位错：在外力作用下，两部分之间发生相对滑移，在晶体内部已滑移和未滑移部分的交线既不垂直也不平行滑移方向（柏氏矢量 b ），这样的位错称为混合位错。（位错线上任意一点，经矢量分解后，可分解为刃位错和螺位错分量。晶体中位错线的形状可以是任意的。）
- D. 错位密度：单位体积内位错线的长度： $\rho_v=l/V$ ；单位面积内位错条数来表示位错密度： $\rho_s=n/S$ 。（金属中位错密度通常在 $10^{6-8}—10^{10-12} 1/c\ m^2$ 之间。）

2. 柏氏矢量：

1) 刃型位错和螺型位错的柏氏矢量表示：



2) 柏氏矢量的含义：

柏氏矢量反映出柏氏回路包含的位错所引起点阵畸变的总累计。通常将柏氏矢量模长称为位错强度，它也表示出晶体滑移时原子移动的大小。柏氏矢量方向表示原子移动方向。

柏氏矢量的守恒性：一个柏氏矢量是固定不变的

推论：

- 1. 一条位错线只有一个柏氏矢量

2. 流向节点的各位错的柏氏矢量的和等于流出的总和

3. 位错线不能终止于晶体内部

3. 位错运动：刃型位错——滑移和攀移；螺型位错——滑移和交滑移

相关概念：

滑移：切应力的作用下，当此力克服位错运动时受到的阻力时，位错便可以沿着特定原子面（滑移面）移动，这种沿着滑移面移动的位错运动称为滑移。（位错运动滑移面是该条位错柏氏矢量与其位错线确定的平面。）

可动位错：当该原子面为实际晶体滑移面时位错运动阻力小，可产生滑移运动，称为可移动位错。

不可动位错：当该原子面不是实际晶体滑移面时位错运动阻力很大，不可产生滑移运动，称为不可移动位错。

交滑移：由于螺型位错滑移面不唯一，当其滑移运动过程受到阻碍，可沿相同滑移方向在其它滑移面上进行。

攀移：刃型位错还在垂直于滑移面的方向上运动即发生攀移。攀移的实质是多余半原子面的伸长或缩短。

位错运动特征：

刃位错滑移：

A. 位错逐排依次前进，实现两原子面的相对滑移；

B. 滑移量 = 柏氏矢量的模；

C. 外力 \parallel b，位错线 \perp b，位错线运动方向 \parallel b；

D. 一定时，正、负位错运动方向相反，但最终滑移效果相同；

E. 滑移面唯一。

螺位错滑移：

A. 位错逐排依次滑移，实现原子面的滑移；

B. 滑移量 = 柏氏矢量的模；

C. \perp b，位错线 \parallel b，位错线运动方向 \perp b；

D. 一定时，左、右螺位错位错运动方向相反，但最终滑移效果相同；

E. 滑移面不唯一。

刃位错攀移：

A. 刃位错垂直于滑移面运动——非守恒运动

B. 属扩散过程——需热激活——高温易出现

攀移作用：（攀移只能在刃位错中发生）

原滑移面上运动受阻——攀移——新滑移面——滑移继续

说明：攀移不是位错运动主要机制——但是通过攀移可避开障碍物——便于滑移

结论：攀移能力——影响滑移进行——进一步影响塑变能力

位错启动——派纳力（老师没说）：

位错中心偏离平衡位置引起晶体能量增加，构成能垒 - 位错运动阻力， $P = \frac{2G}{1 - \nu} \exp\left[-\frac{2\pi a}{(1 - \nu)b}\right]$ Peierls - Nabarro 力

$$P = \frac{2G}{1 - \nu} \exp\left[-\frac{2\pi a}{(1 - \nu)b}\right] \quad \frac{2G}{1 - \nu} \exp(-2\pi W/b) \quad \text{其中 } W = \frac{a}{(1 - \nu)} \text{ 称为位错宽度}$$

a 为滑移面的面间距，b 为滑移方向上的原子间距。

密排面（a 大），密排方向（b 小），故派纳力较小

推论：

通过位错滑动而使晶体滑移， P 较小。当 $a \approx b$ ， $\nu=0.3$ 时，则 P 为 $(10^{-3} - 10^{-4})G$ ，仅为理想晶体的 $1/100 - 1/1000$ 。

P 随 a 值的增大和 b 值的减小而下降，在晶体中，原子最密排面其间距 a 为最大，原子最密排方向其 b 值为最小，可解释晶体滑移为什么多是沿着晶体中原子密度最大的面和原子密排方向进行。

P 随位错宽度减小而增大

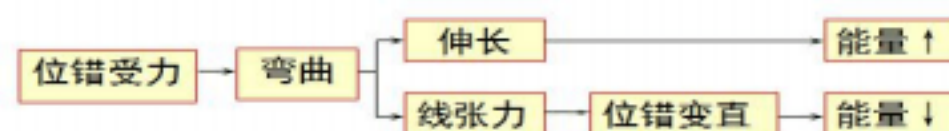
可见强化金属途径：一是建立无位错状态，二是引入大量位错或其它障碍物，使其难以运动。

4. 位错受力

位错的线张力：

单位位错具有能量，受能量降低影响位错线总是趋于收缩，这使得位错具有线张力。线张力在数值上与位错应变能相等。

$$T = W = Gb^2 = 0.5Gb^2$$



作用：使位错变直——降低位错能量；相当于物质弹性——称之为位错弹性性质；类似于液体的表面张力。

作用在位错线上的力：

作用在刃型位错线上的滑移力 F 方向与外切应力 σ 方向一致，而作用在螺型位错线上的滑移力 F 方向与外切应力 σ 相垂直。共性：指向滑移面的未滑移区。

外加正应力对位错线的作用：

作用在单位长度刃型位错线上的攀移力 F_y 的方向和位错线攀移方向一致，垂直于位错线。

$F_y = \sigma b$ 压应力促进正攀移，拉应力促进负攀移。

5. 位错弹性力学性质（应力场 + 能量）

应力场：

螺位错：螺型位错的应力场中没有正应力分量，只有两个切应力分量，且其大小只与 r 有关，而与 z 无关。即螺型位错应力场是轴对称的。注：公式不适用于位错中心处。 $\tau_{\theta z} = Gb/2\pi r$ 。

刃位错：1. 既有正应力分量，又有切应力分量

2. 应力大小与位错线距离呈反比

3. 与 z 坐标无关

4. 滑移面为纯剪切应力，滑移面以上受压应力，滑移面以下受拉应力。

5. $\sigma_{xx} > \sigma_{yy}$

位错应变能：

位错周围点阵畸变引起弹性应力场导致晶体能量的增加。

位错的能量可分为位错中心畸变能和位错应力场引起的弹性应变能。其中弹性应变能约占总能量的 90%。

实际分析中，位错的应变能是指中心区域以外的弹性应变能。我们讨论的能量都是指单位长度位错线的能量。刃型位错弹性应变能约为螺型位错的 1.5 倍。

结论：

位错应变能是由位错中心畸变能和弹性应变能两部分组成。

位错的应变能与柏氏矢量的平方成正比。柏氏矢量越小应变能越低，位错越稳定。因此，柏氏量大的位错可能发生分解。

晶体中刃型位错具有的位错能最高，混合位错次之，螺型位错最低，因此，在晶体中最易于形成螺型位错。

直线位错比曲线位错的能量小，位错总有伸直的趋势。

6. 位错与其它晶体缺陷的交互作用

位错间交互作用：位错应力场交互作用（位错的抵消、位错的排列分布）

A. 位错弹性交互作用（位错线平行）

螺型位错与螺型位错：异号位错相互吸引，同号相互排斥

刃型位错与刃型位错：位于同一滑移面上的刃型位错表现为异号位错相互吸引，同号相互排斥。处于不同滑移面上的位错受应力场相互作用将重新排列。（小角度晶界；多变化过程）

B. 运动位错交截（位错线垂直）：割阶、扭折、固定割阶

共性：产生位错线弯曲，增加位错线长度，加大位错运动阻力。

扭折：弯曲段仍在原滑移面上，仍可随原位错滑移运动，易消失。

割阶：不处于原滑移面上，难消失，阻碍位错运动。

固定割阶：不处于原位错面，不随原位错运动。（攀移）

C.位错塞积：（不动位错的产生）

在分切应力 τ_0 作用下，由同一位错源放出的位错在障碍前受阻，形成塞积群。

条数： $n=k \cdot L/Gb$ （ k 系数，螺型 $k=1$ ，刃型 $k=1/2$ ； L 位错源至障碍物距离； G 剪切弹性模量； b 位错柏氏矢量）

影响：后续位错运动受阻；反作用与位错源，使位错源停止开动；产生应力集中，引起相邻晶粒变形或产生裂纹

位错与溶质原子交互作用

1947 年 Cottrell 阐明溶质原子和位错的交互作用（Cottrell 气团）并用以解释低碳钢的屈服现象，第一次成功地利用位错理论解决金属机械性能的具体问题。

Snoek 气团：BCC晶体中溶质原子在螺型位错周围某些间隙位置聚集。

铃木（Suzuki）气团：FCC晶体中溶质原子在扩展位错层错带中的富集或贫化。

位错与第二相粒子交互作用：切割和绕过机制

切割机制：

滑移面上位错驱动力足够大，可变形沉淀相颗粒产生变形，位错运动切过第二相继续运动。

产生条件：沉淀相具有一定塑性，粒子半径相对较小。

强化机制：沉淀相自身强度；产生新相界；基体与沉淀相滑移面错配；沉淀析出共格晶界破坏。

绕过机制：

驱动力足够大位错绕过不可变形第二相粒子继续运动，并包绕第二相粒子遗留位错环。

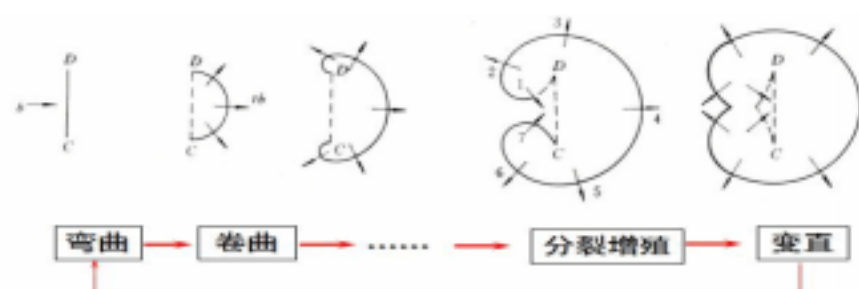
产生条件：沉淀相具有高强度，粒子半径比较大。

强化机制：第二相自身强度；增加位错线长度；沉淀相粒子与位错环共同作用加大后续阻力；包绕沉淀相粒子位错环，使颗粒有效距离减小。

7. 位错增殖机制

弗兰克-瑞德(F-R)源

增殖过程；



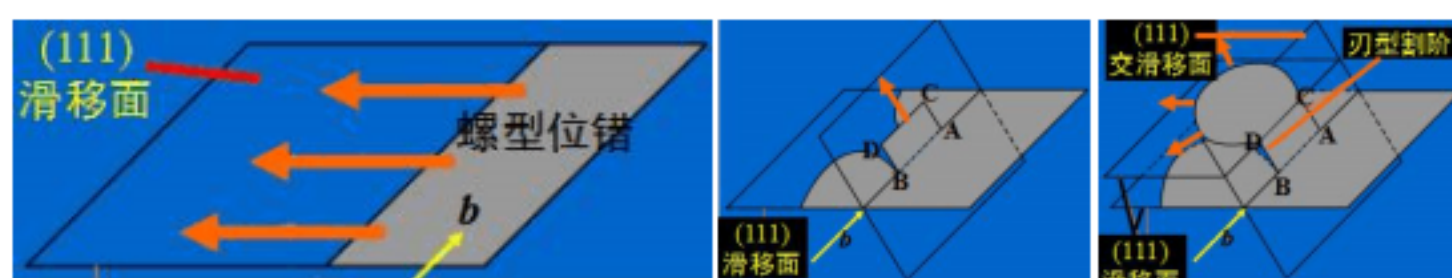
产生方式：刃型位错的攀移；位错的交截形成固定割阶；螺型位错交滑移

开动条件：推动力（外力） $>$ 位错运动点阵摩擦力和障碍物阻力。

当外力作用在两端不能自由运动的位错上时，位错将发生弯曲。弯曲半径 r 与外力 F 成反比。

当位错弯曲成半圆时， r 最小， F 最大。 $F = Gb/L$ 。

双交滑移增殖机制



A. 螺型位错在 (111) 面上滑移。 B. 因局部切应力变化螺型位错改变了滑移面。 C. 又因局部切应力的减弱螺型位错发生交滑移，又回到原来的滑移面上。

有时在第二个 (111) 面扩展出来的位错圈又可以通过交滑移转移到第三个 (111) 面上进行增殖。从而使

位错迅速增加，因此，它是比上述的弗兰克-瑞德更有效的增殖机制。

8. 实际晶体中的位错（全位错，不全位错，层错）

相关概念：

全位错：即柏氏矢量等于点阵矢量或其整数倍的位错。期中恰好等于点阵矢量的位错称单位位错。

不全位错：柏氏矢量不等于点阵矢量的位错。

层错：晶体在某一区域晶面堆垛顺序发生错乱，属于面缺陷。

层错能：形成层错几乎不产生点阵畸变，但其破坏了晶体排列周期性，造成附加能量升高。

金属中产生层错与层错能有关（不锈钢、黄铜层错能低；铝具有较高的层错能）

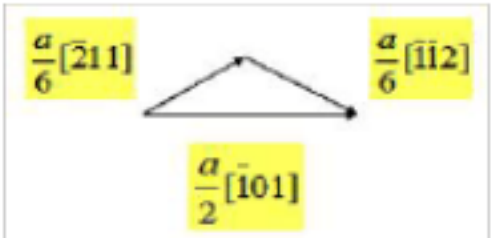
典型不全位错：

1. 肖克莱不全位错

肖克莱不全位错为混合型位错，可在滑移面上滑移。对于具有低层错能金属，很容易扩展成不全位错加层错带结构。

肖克莱不全位错扩展与束集

位错扩展平衡宽度： $d = G(b_2 \cdot b_3) / 2$



2. 弗兰克不全位错

插入或抽去一层密排面造成的不全位错，即为弗兰克不全位错。为纯刃型位错，其柏氏矢量为 $a/3 \langle 111 \rangle$ ，垂直于滑移面，故弗兰克不全位错不能滑移，只能攀移。

| 位错名称 | 全位错 | 肖克莱位错 | 弗兰克位错 |
|--------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| 柏氏矢量 | $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ | $\frac{a}{6} \langle 112 \rangle$ | $\frac{a}{3} \langle 111 \rangle$ |
| 位错类型 | 刃、螺、混 | 刃、螺、混 | 纯刃 |
| 位错线形状 | 空间曲线 | {111} 面上任意曲线 | {111} 面上任意曲线 |
| 可能运动方式 | 滑移、攀移 | 只滑不攀 | 只攀不滑 |

位错反应（重）习题 3-11

需满足的条件：

(1) 几何条件 - 柏氏矢量守恒： $b_{前} = b_{后}$

(2) 能量条件 - 满足热力学定律： $b_{前}^2 = b_{后}^2$

位错反应生成固定位错： $\frac{1}{2}a[10\bar{1}] + \frac{1}{2}a[011] = \frac{1}{2}a[110]$

FCC中，一个全位错分解成两个肖克莱不全位错：

$\frac{1}{2}a[110] = \frac{1}{6}a[211] + \frac{1}{6}a[12\bar{1}]$

一个肖克莱不全位错和一个弗兰克不全位错合成全位错：

$\frac{1}{6}a[112] + \frac{1}{3}a[11\bar{1}] = \frac{1}{2}a[110]$

两个全位错合并成另一全位错：

$\frac{1}{2}a[011] + \frac{1}{2}a[10\bar{1}] = \frac{1}{2}a[110]$

两个位错合并组合成另外两个位错：

$a[100] + a[010] = \frac{1}{2}a[111] + \frac{1}{2}a[11\bar{1}]$

第四章 晶态固体中的扩散

1. 相关概念：

扩散现象：原子、分子或离子迁移的微观过程以及由此引起的宏观现象。

扩散：扩散是一种由原子、分子或离子热运动引起的物质传输过程。

稳态扩散：在稳态扩散中，单位时间内通过垂直于给定方向的单位面积的净原子数（称为扩散通量）不随时间变化，即任一点的浓度不随时间变化。（ $dc/dt=0$ ）

非稳态扩散：扩散过程中任一点的浓度随时间而变化。（ $dc/dt \neq 0$ ）

下坡扩散：扩散由高浓度区向低浓度区进行。

2. 菲克第一定律

内容：在稳态扩散的条件下，单位时间内通过垂直于扩散方向的单位面积的扩散物质量（通称扩散通量）与该截面处的浓度梯度成正比。

$$J = -D \frac{dc}{dx}$$

单位：扩散通量， J ，atoms/(m²·s) 或 kg/(m²·s)；扩散系数， D ，m²/s；浓度梯度， dc/dx ，atoms/(m³·m) 或 kg/(m³·m)

“-”号表示扩散方向为浓度梯度的反方向，即扩散常由高浓度向低浓度区进行（称为下坡扩散）。

3. 菲克第二定律

非稳态扩散时，在一维情况下，菲克第二定律的表达式为：

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{d^2c}{dx^2}$$

式中： c 为扩散物质的体积浓度（atoms/m³ 或 kg/m³）； t 为扩散时间（s）； x 为扩散距离（m）。

扩散第二方程反映的是扩散物质浓度与时间和空间位置之间的定量关系。

4. 扩散方程求解（计算题）

扩散第一方程（稳定扩散）： $J = -D \frac{dC}{dx} = -D \frac{C_2 - C_1}{x}$

扩散第二方程：

高斯解：