

第六章

位错

(Dislocations)

引言

- 学习本章的意义:

晶体非完整性/
力学性能与缺陷密度的关系;

- 位错理论形成;

理论、实际强度的差异;

- 位错与其它章节的联系;

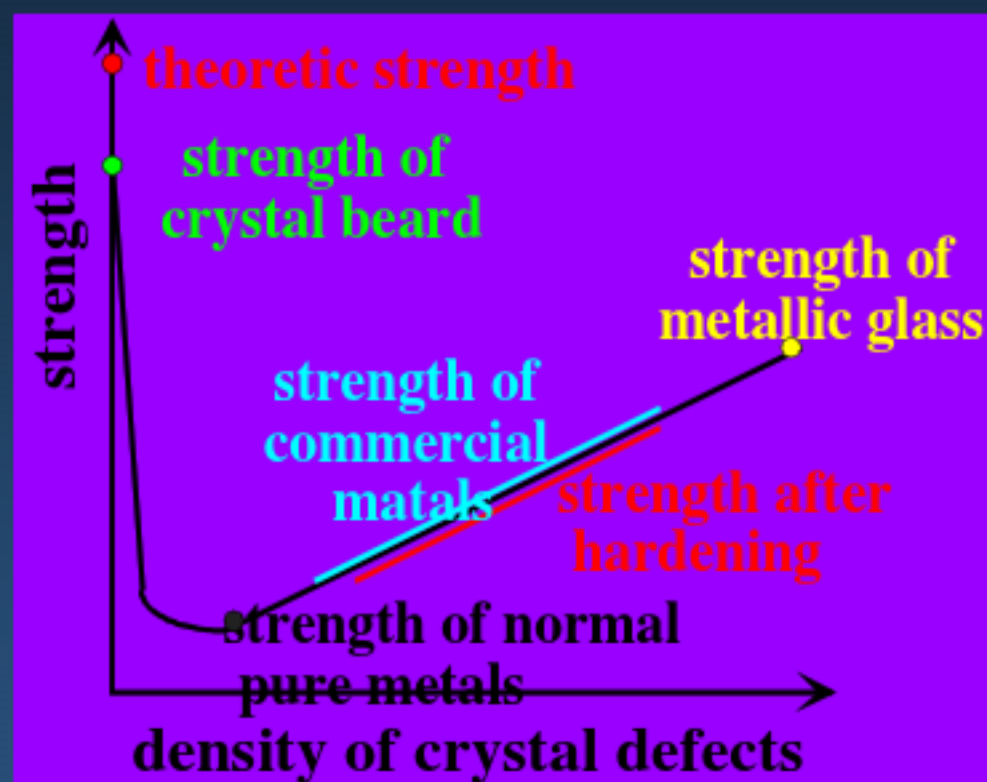
- 本章讨论的内容;

位错本身性质、应力场/能量;
和其它缺陷的交互作用;

位错的运动;

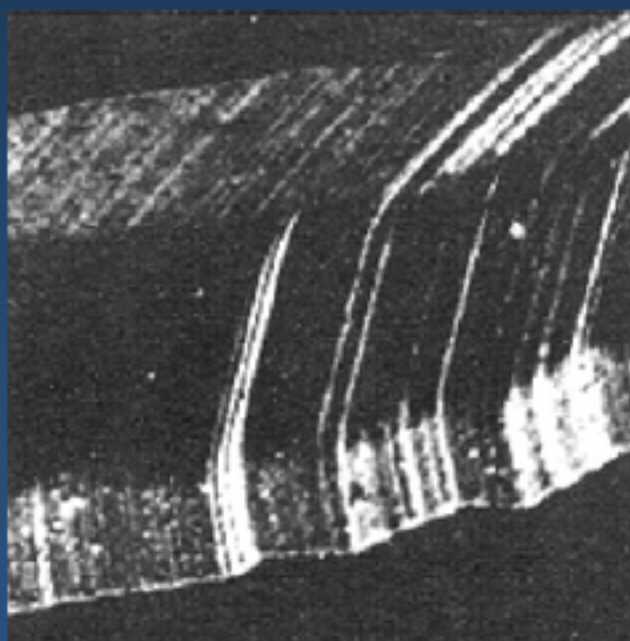
位错的产生;

实际晶体中的位错;

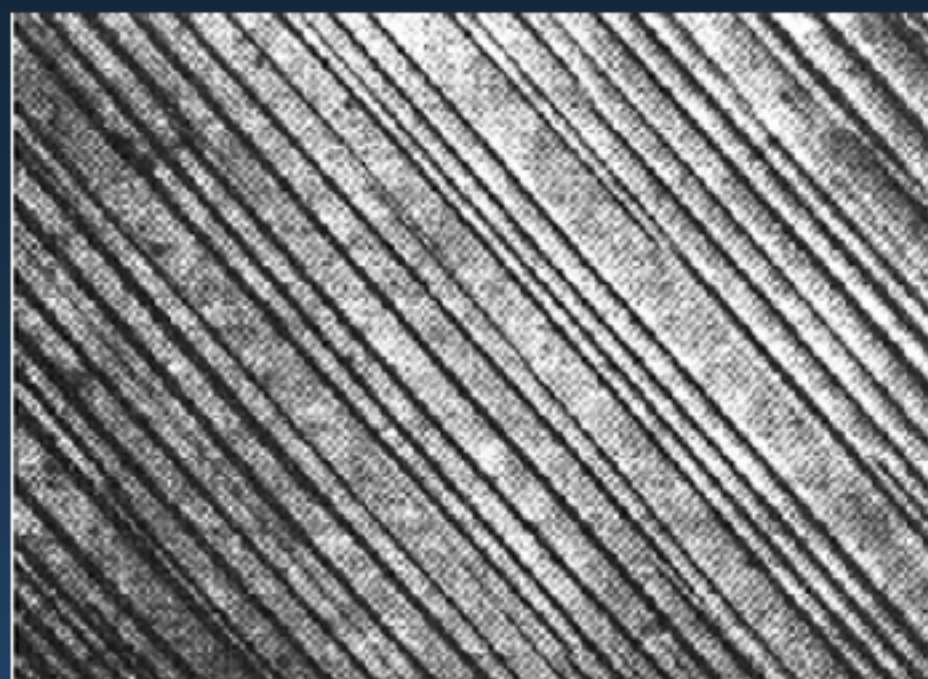


6.1 单晶体滑移

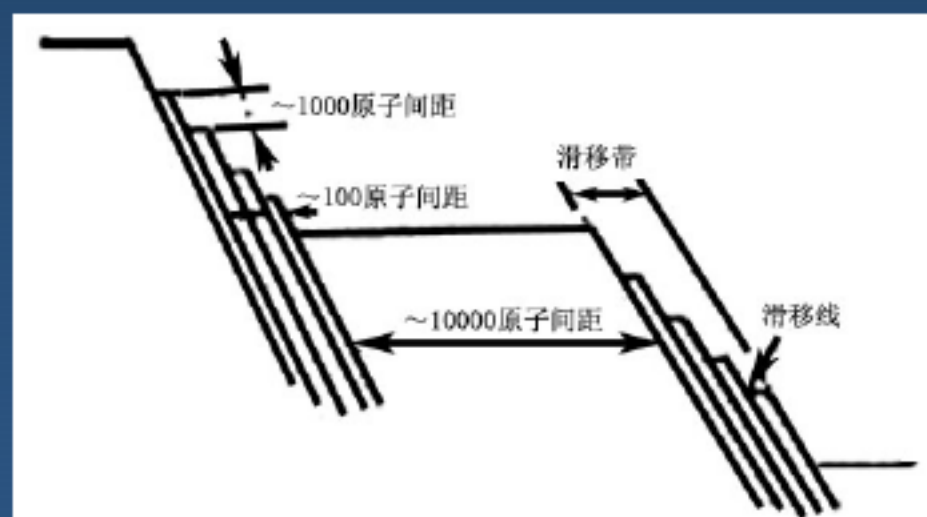
滑移是指在外力作用下晶体沿某些特定的晶面和晶向相对滑开的形变方式。



用扫描电镜观察到形变钴单晶的表面形貌



用光学显微镜观察经7%形变的铝的表面图象



滑移的特定晶面称**滑移面**，特定晶向称**滑移方向**。**滑移面和滑移方向合称为滑移要素（滑移系）**。对于一定的晶体结构，不论载荷大小或载荷的取向如何，**滑移要素的类型一般都是确定的**。在一般情况下，**滑移面和滑移方向是晶体的密排和较密排的面及密排方向**。

典型结构金属的滑移要素（滑移系）

晶体结构	金属	滑移面	滑移方向
FCC	Al, Cu, Ag, Au, Ni	{111}	$\langle 101 \rangle$
BCC	α -Fe	{110}, {112}, {123}	$\langle 111 \rangle$
	Mo, W	{112}	$\langle 111 \rangle$
	K	{123}	$\langle 111 \rangle$
	Nb	{110}	$\langle 111 \rangle$

典型结构金属的滑移要素（滑移系）（续）

晶体结构	金属	滑移面	滑移方向	c/a
HCP	Mg	$\{0001\}, \{10\bar{1}0\}$	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$	1.623
	Cd	$\{0001\}$		1.886
	Zn	$\{0001\}$		1.856
	Be	$\{0001\}$		1.586
	Ti	$\{10\bar{1}0\} \{0001\}$	$\{10\bar{1}1\} \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle \langle 11\bar{2}3 \rangle$	1.587
	Zr	$\{10\bar{1}0\} \{0001\}$	$\{10\bar{1}0\}$	1.593

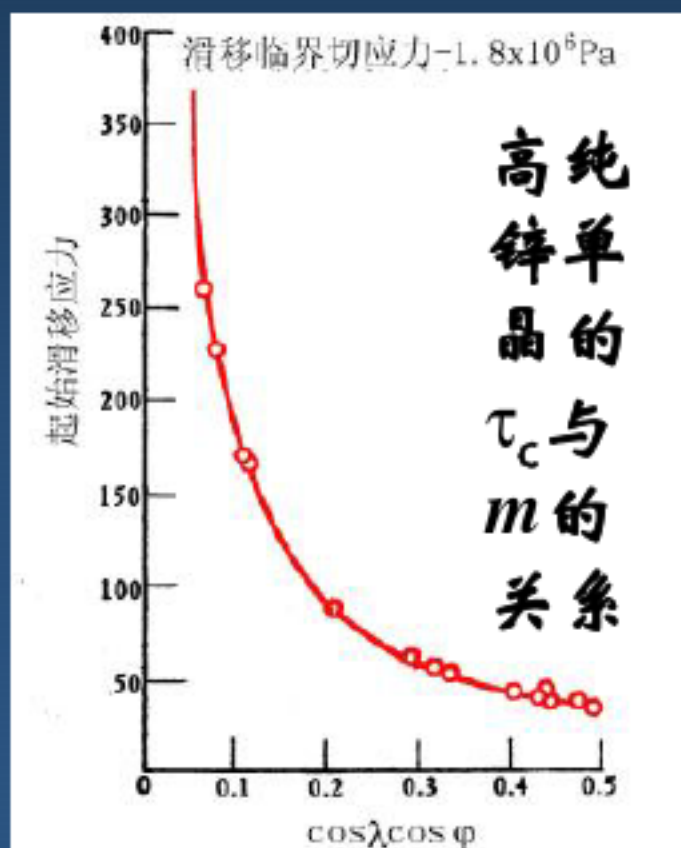
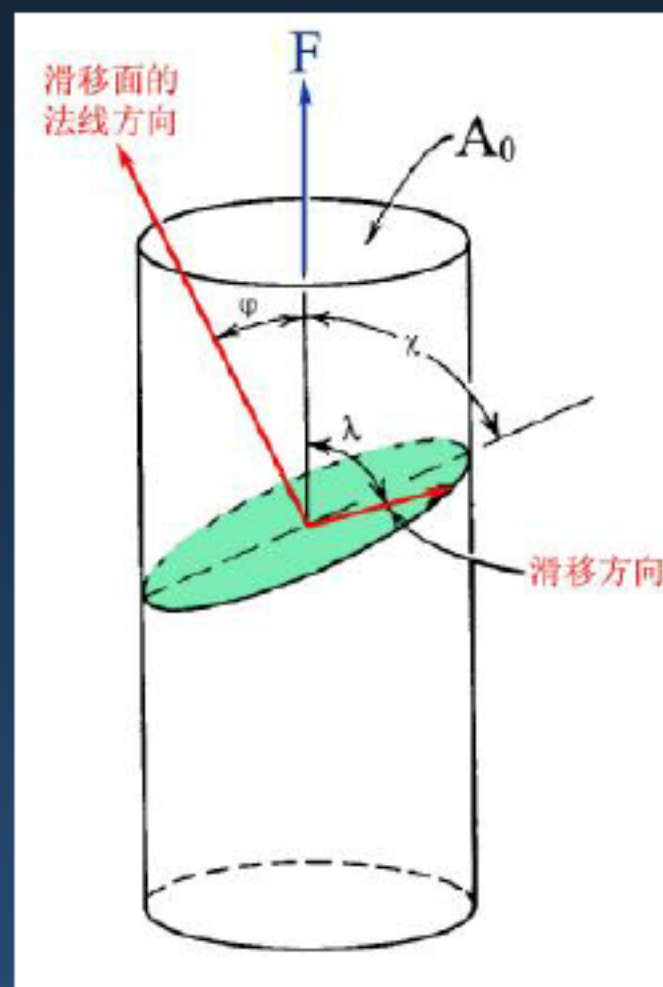
一个滑移面和一个滑移方向组成一个滑移系，面心立方结构有12个滑移系，体心立方结构有48个滑移系，而密排六方结构一般只有3个滑移系。在外力作用下，并不是所有的滑移系都会开动的，只能是其中一个或几个滑移系开动，那些没有开动的滑移系称为潜在滑移系。

Schmid定律

外加拉伸应力 σ 和滑移面内沿着滑移方向分切应力 τ 之间的关系。

$$\tau = \frac{F}{A_0} \cos \lambda \cos \varphi = m \sigma$$

$m = \cos \lambda \cos \varphi$ 是外加力相对于晶体滑移系的取向因子，又称Schmid因子。



实验看出：滑移系开动所需要的分切应力是一个常数，和外加力的取向无关。滑移系开动所需要的最小分切应力称为**临界分切应力 τ_c** 。

滑移系开动所需要的临界分切应力是和外力取向无关的常数的规律称Schmid定律或临界分切应力定律。

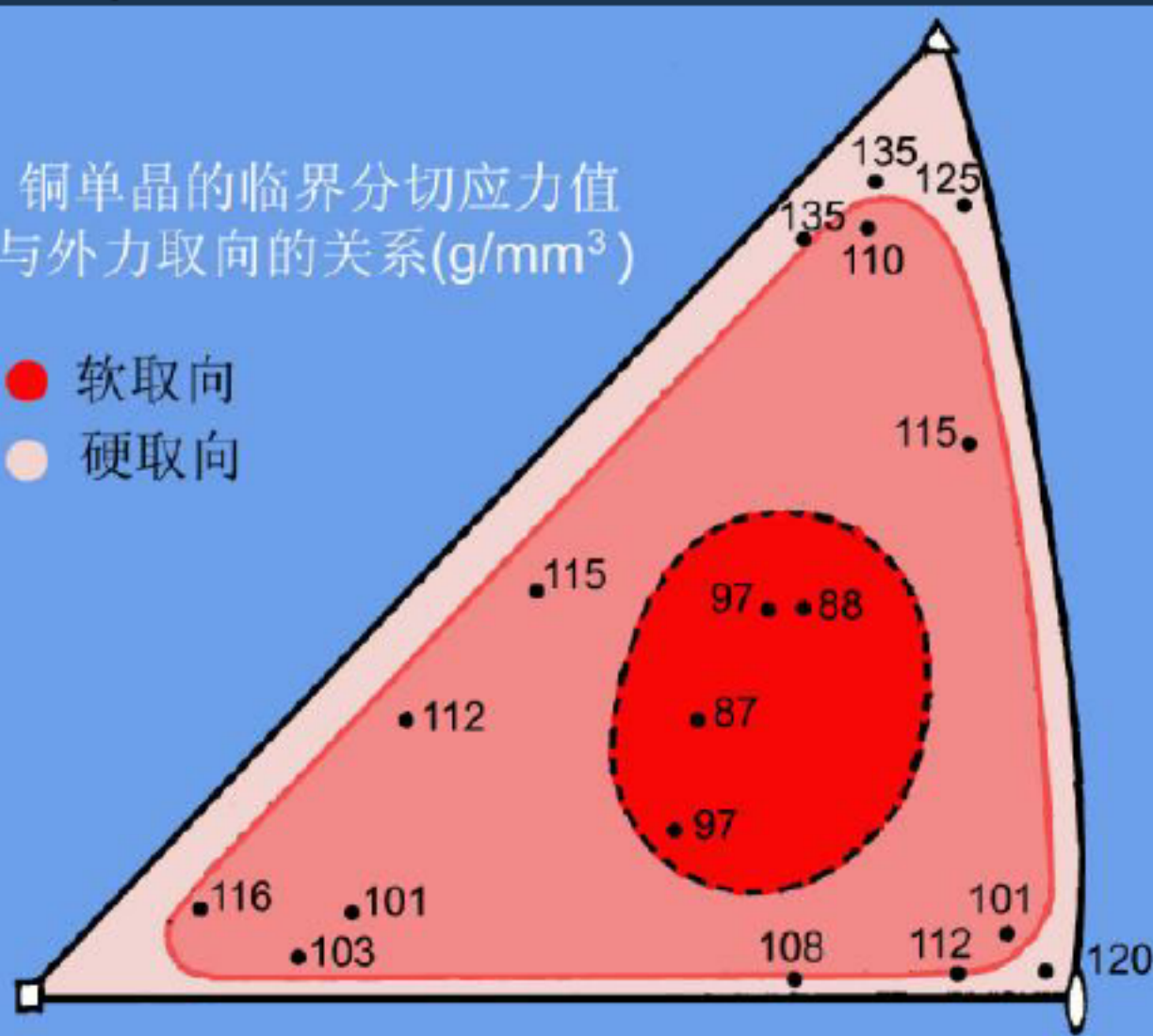
如果把滑移面开动所对应的正应力看作是屈服强度，则屈服强度和外加力的取向有关。 m 的数值越大，屈服强度越小，取向越“软”；屈服强度越高，取向越“硬”。

如果有多个滑移系开动，使问题复杂化。这样，Schmid定律只在某些取向范围（只有单系滑移）内才适用。

对于体心立方结构，一般是不遵守Schmid定律，这是由于它的位错核心的特殊结构造成的。

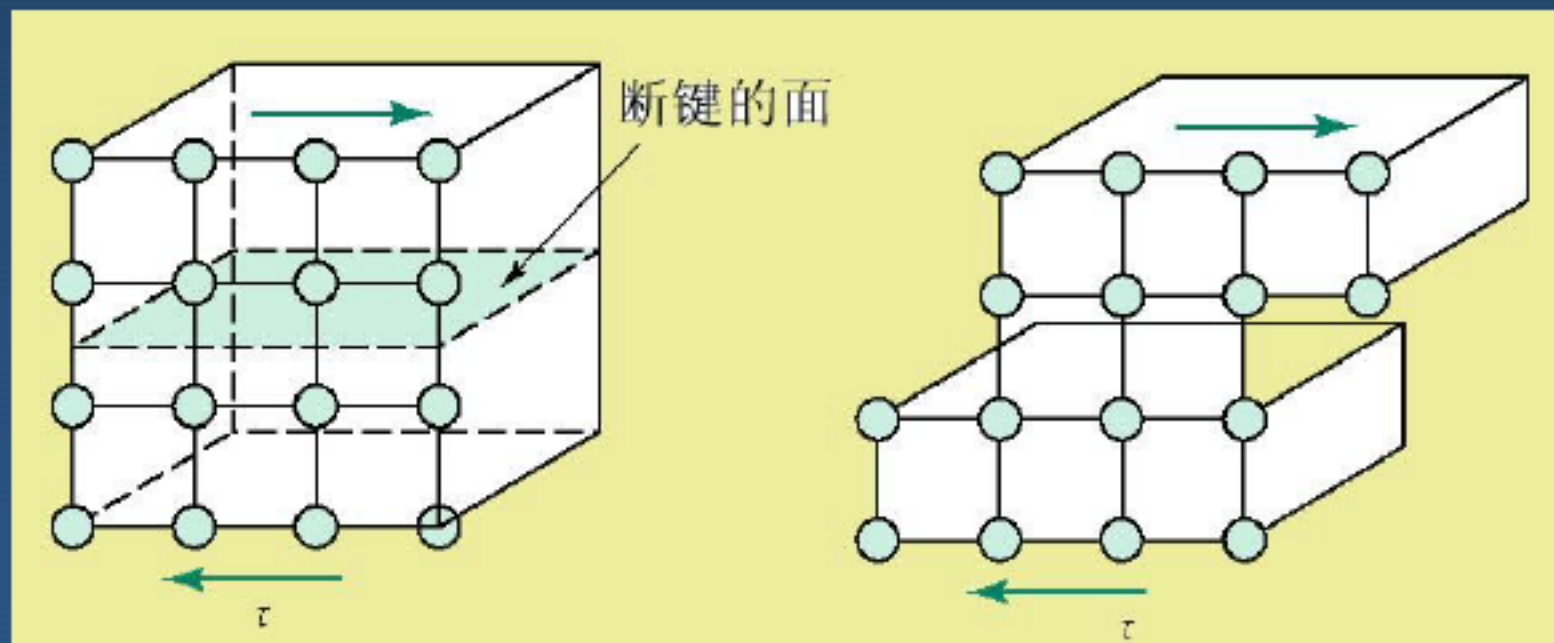
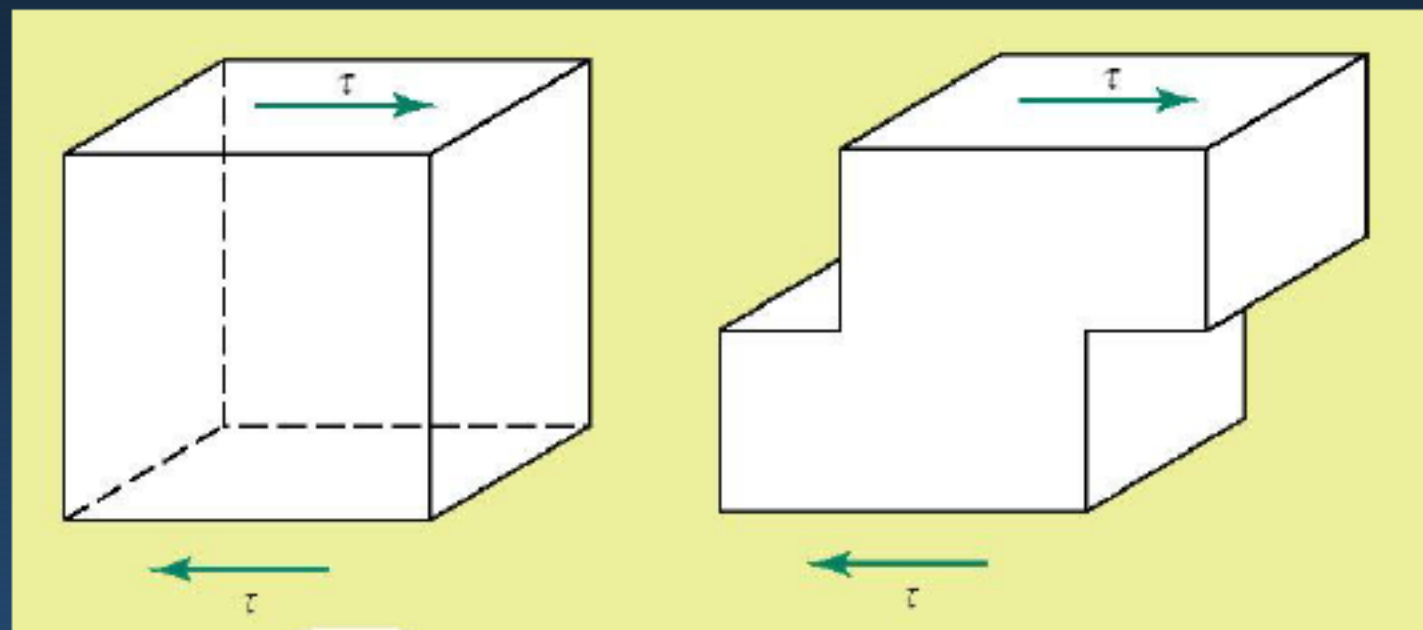
铜单晶的临界分切应力值与外力取向的关系(g/mm^3)

- 软取向
- 硬取向



变形时，若晶体在滑移面两侧相对滑过，则在滑移面上**所有的键**都要破断来产生永久的位移。据此，可估算滑移所需的临界分切应力。

这一过程的
宏观描述



这一过程的原子
尺度描述



6.2 位错基本概念

理论切变强度的估算

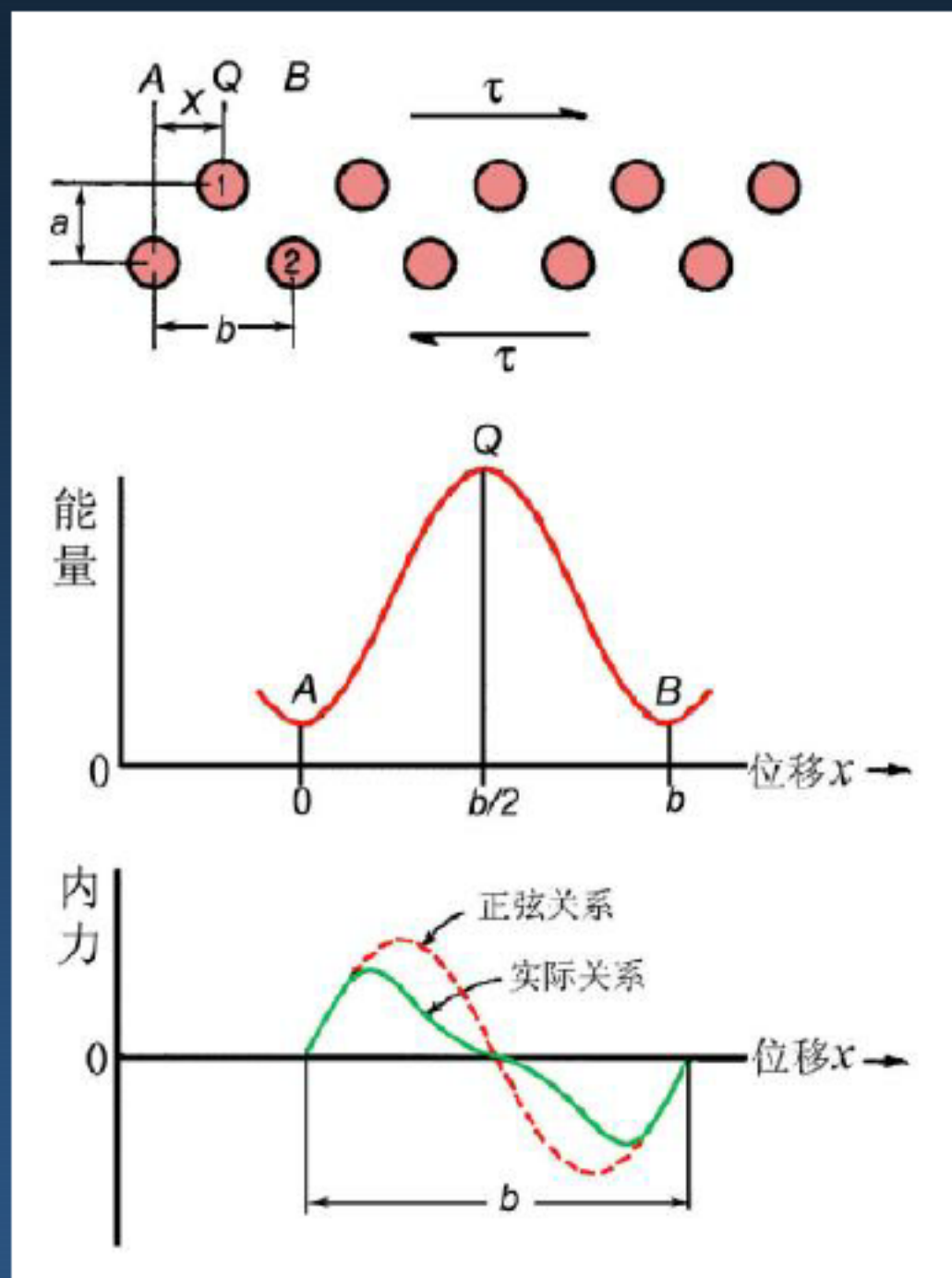
假设能量曲线是正弦形式。这样，要使原子面相对切开所需要的切应力为：

$$\tau = \tau_c \sin \frac{2\pi x}{b}$$

在弹性变形范围，应力和应变服从胡克定律： $\tau = \mu\gamma$

μ 是拉梅系数，对各向同性弹性体，它等于切变模量 G ， γ 是切应变。 γ 可以近似为 x/a ，上式变成：

$$\mu \frac{x}{a} \approx \tau_c \frac{2\pi x}{b} \quad \text{即} \quad \tau_c \approx \frac{\mu b}{2\pi a} \approx \frac{\mu}{2\pi}$$



因原子间斥力的短程性，能量曲线不是正弦形的，所以上面的估计是过高的， τ_c 的更合理值约为 $G/30$ 。理论切变强度和切变模量相差约1个数量级。但实验测定的切变强度比理论切变强度低2~4个数量级。

一些金属的理论强度与实验强度的比较

晶体	理论强度 ($G/30$) GPa	实验强度/MPa	理论强度 / 实验强度
Ag	2.64	0.37	$\sim 7 \times 10^3$
Al	2.37	0.78	$\sim 3 \times 10^3$
Cu	4.10	0.49	$\sim 8 \times 10^3$
Ni	6.70	3.2~7.35	$\sim 2 \times 10^3$
Fe	7.10	27.5	$\sim 3 \times 10^2$
Mo	11.33	71.6	$\sim 2 \times 10^2$
Nb	3.48	33.3	$\sim 1 \times 10^2$
Cd	2.07	0.57	$\sim 4 \times 10^3$
Mg (柱面滑移)	1.47	39.2	$\sim 4 \times 10$
Ti (柱面滑移)	3.54	13.7	$\sim 3 \times 10^2$
Be (基面滑移)	10.32	1.37	$\sim 8 \times 10^3$
Be (柱面滑移)	10.32	52	$\sim 2 \times 10^2$

晶体的实际强度和理论计算的强度相差几个数量级，人们就设想晶体中一定存在某种缺陷，由于它的存在和它的运动引起晶体的晶体的永久变形。

晶体变形的宏观现象：

- ①形变的晶体学性（即晶体在固定的晶面和晶向滑移）；
- ②形变的不均匀性和不连续性，即变形不是在整个晶体各处发生；
- ③形变滑移的传播性，形变时，观察到滑移线（带）是从无到有，由浅到深，由短到长（即），数目由少到多；
- ④滑移服从临界分切应力定律（以后会介绍，对于体心立方晶体，会发生例外）
- ⑤温度对临界分切应力有显著的影响，等等。

设想的这种缺陷结构及特性必需和上述观察到的宏观变形现象相符。

设想的缺陷引入晶体必需要：

- ①它的晶体学要素不依赖于外加力的大小，而由晶体学本身确定。由它运动导致的变形不破坏晶体结构，只是原子间的相对运动。所以引入的缺陷不是完全无规而是有晶体学特性的；
- ②它能解释变形的不均匀性，即能说明它的结构敏感性；
- ③它能说明变形过程的传播性；
- ④引入的这种缺陷是易动的，能解释实验强度比理论强度低的原因。但它又不能像空位那样易受热起伏的影响；
- ⑤它应有合理的增殖机制。

现在已经知道，这种缺陷就是这里要讨论的位错。

位错理论发展简史

1907年 Volterra解决了一类弹性体中的**内应力不连续的弹性问题**，把它称为**位错**。

1934年 M.Polanyi, E.Orowan和G.I.Taylor差不多同时地独立提出有关这类晶体缺陷（位错）的模型，特别是Taylor明确地把Volterra位错引入晶体。

约菲用正交的尼科耳镜观察岩盐形变，看到岩盐形变时有亮线从晶体一侧传播到另一侧，说明晶体形变滑移时局部地区有应力集中，并说明滑移是从一侧传播到另一侧的。

Taylor注意到这种实验现象，根据设想的位错排列形状，计算了位错运动所产生的晶体硬化曲线。

1939年 Burgers提出描述位错的一个重要特征量—柏氏矢量，同时引入了螺位错。

1940年 Peierls提出后来在**1947年**由Nabarro修正的位错点阵模型，它突破了一般弹性力学范围，提出了位错宽度的概念，估算了位错开动的应力，这一应力正是和实际晶体屈服应力的同一数量级。

1947年 Cottrell阐明溶质原子和位错的交互作用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。

同年 Shockley描绘了面心立方形成扩展位错的过程。

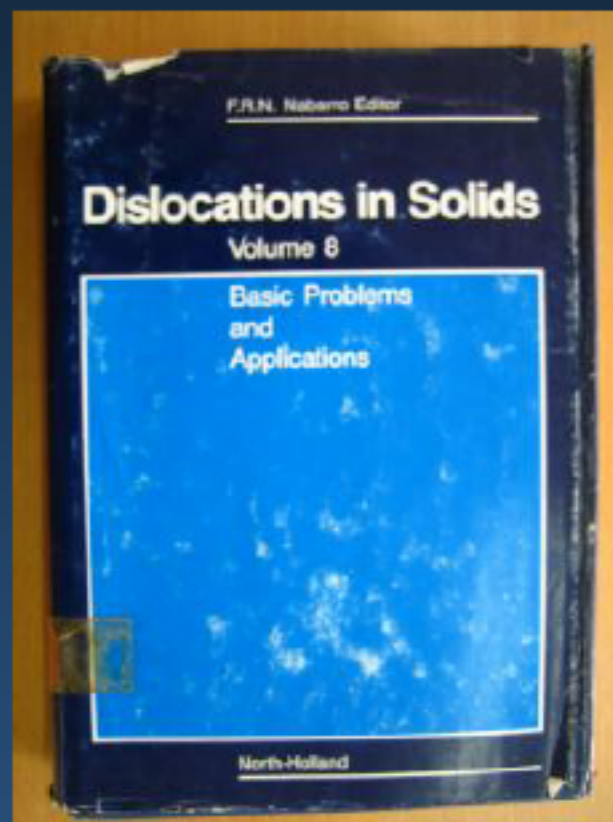
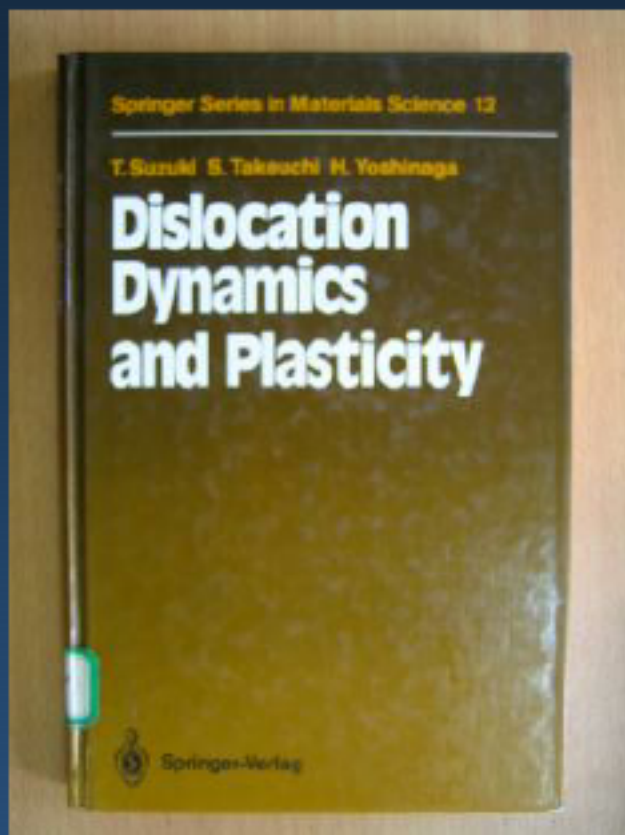
1950年 Frank和Read共同提出了位错的增殖机制。

上面所列出的是早期位错理论的发展的重要过程，到那时，对于单个位错的运动规律，位错的交互作用等理论基本已经解决。

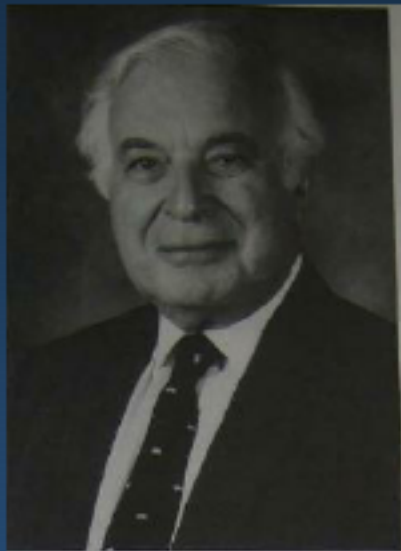
1953年 Nye和**1954年** Bilby以及以后的kröner提出的无限小位错连续分布模型，为研究更复杂位错组态提供方法。

在解决任意形状的位错线的性质方面，由Burgers在**1939年**提出的位移公式、Peach和kröner在**1950年**提出的应力场公式和位错受力公式及Blin在**1955年**提出的交互作用能公式等基本上能得到解决。**1956年** Menter直接在电镜观察了铂钨花青晶体中位错的存在，同年，Hirsch等应用相衬法在电镜观察到位错的运动，位错理论就在更坚实的基础上发展了。

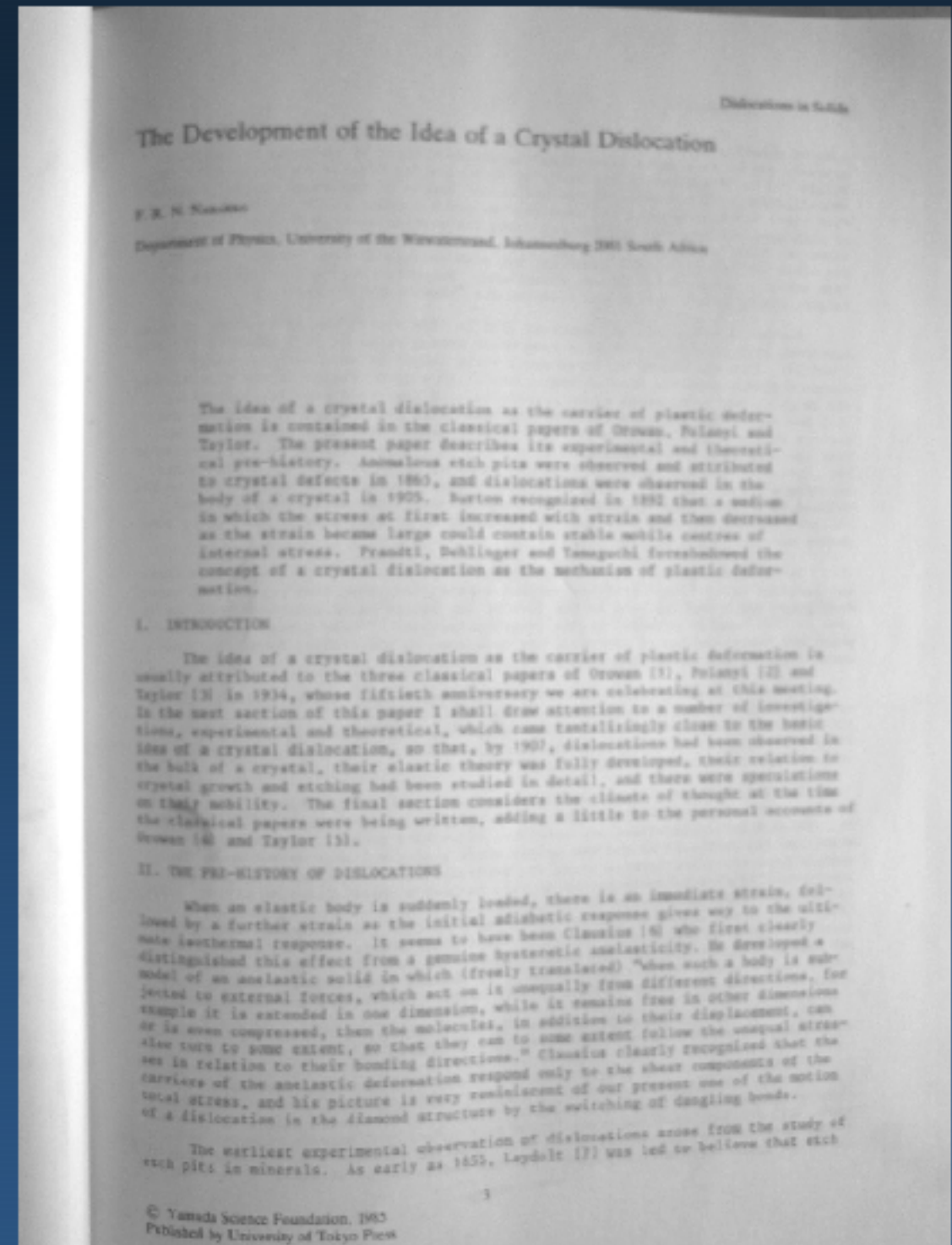
近几十年，随着实验设备和计算机的发展，研究位错核心的组态以及在复杂结构中的位错方面取得很多很有成效的结果。



The 1995 Institute of Metals Lecture and R.F.Mehl Award, Frank R.N.Nabaron.

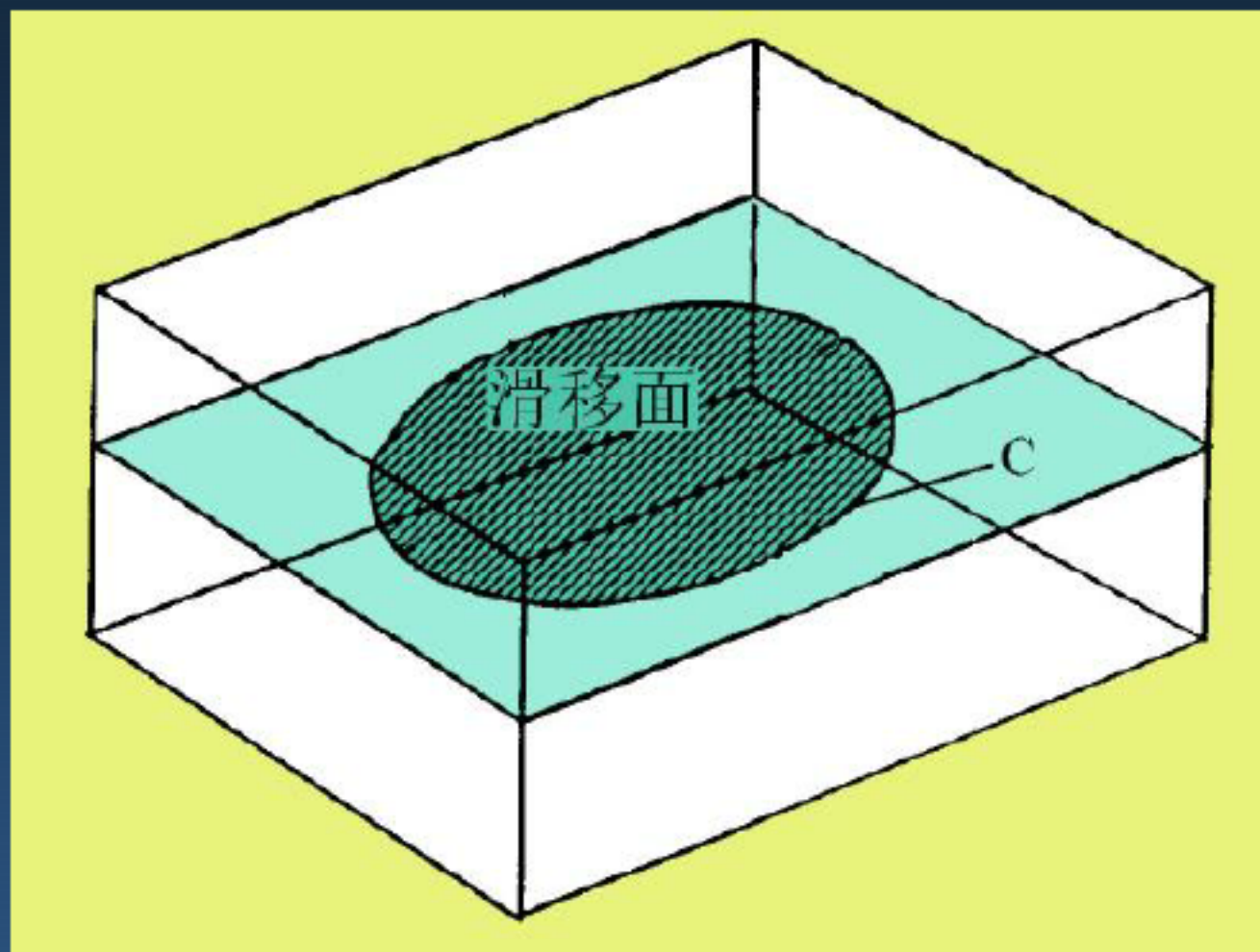


[15] 1991. 22A. No.8. 1693-
1708. L.M.Brown, R.F.Mehl
Medalist. Toward a sound
understanding of dislocation
plasticity



在晶体中位错概念的引入

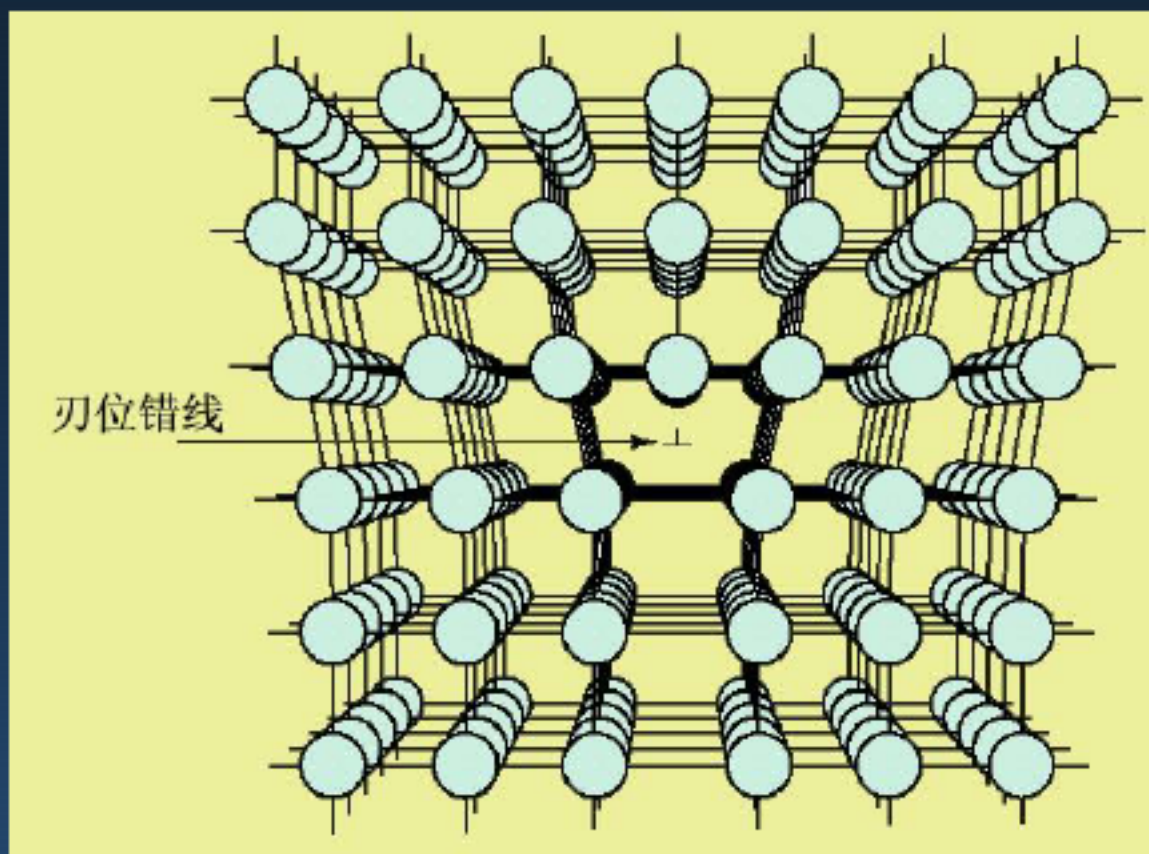
假设在滑移面上有部分面积已经滑移，上下侧相对滑移了 b 矢量，在已滑移区域和没有滑移区域的交界处必然存在很大畸变，它就是我们要寻找的缺陷，称之为**位错**。



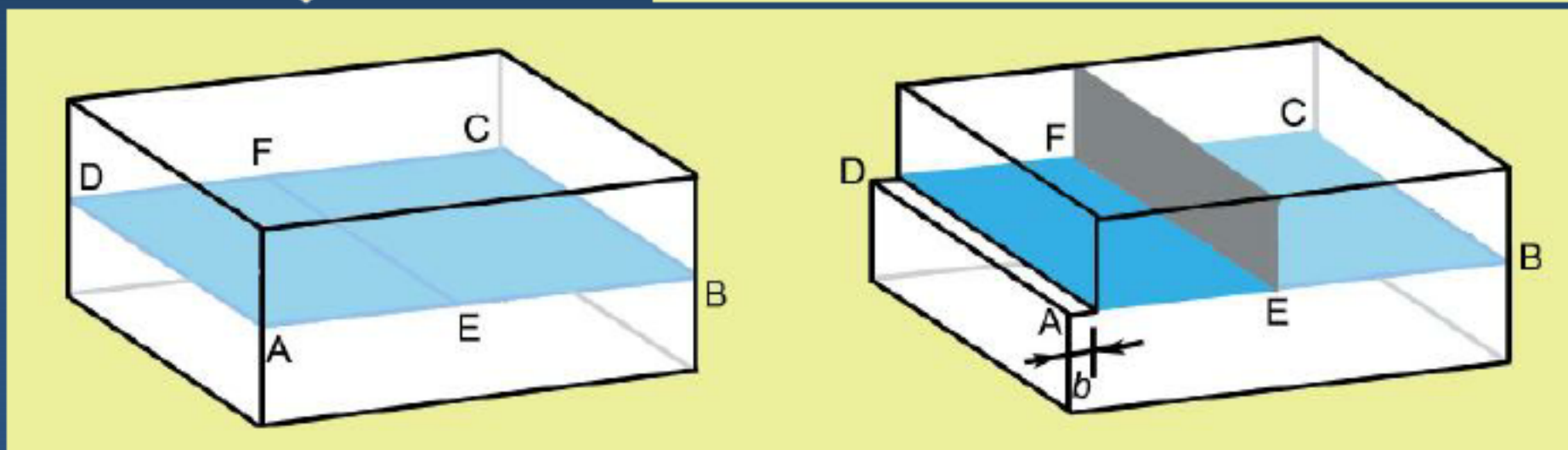
6.3 位错的几何形态

刃型位错

刃位错的原子模型

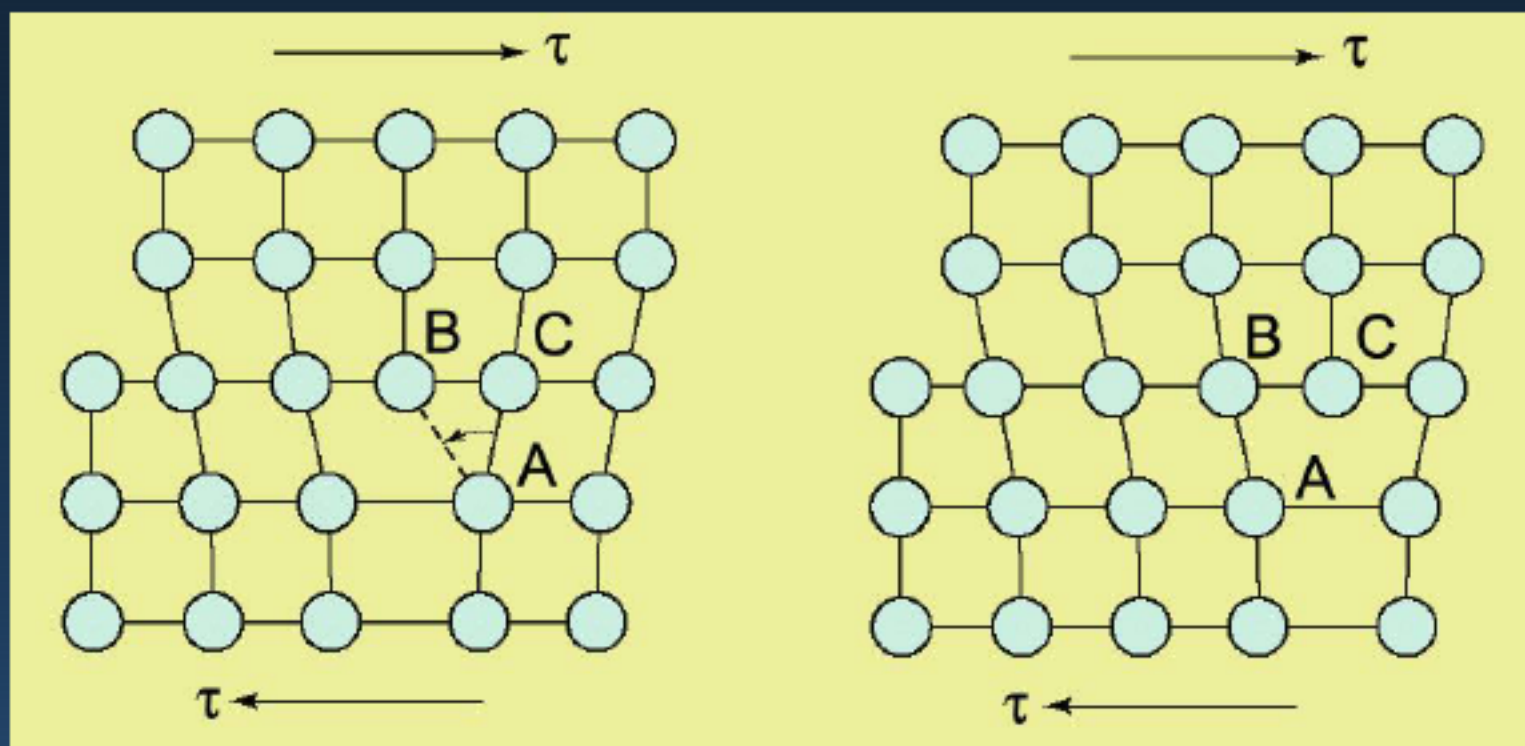


产生刃位错的Volterra过程

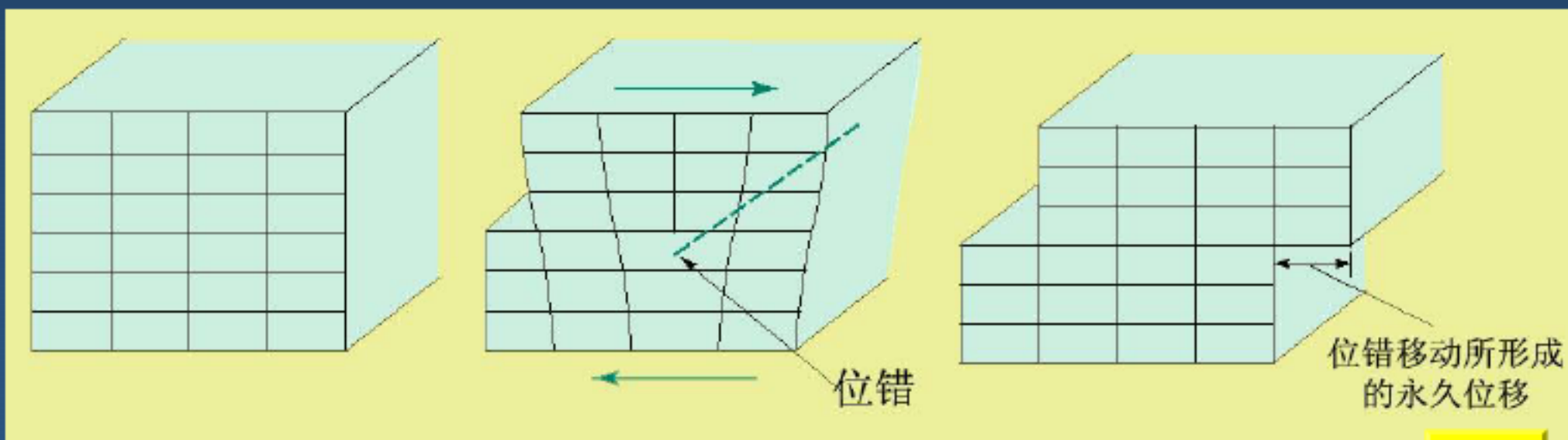


半原子面在上侧，称正刃位错，“ \perp ”；若半原子面在下侧，称负刃位错，“ \dashv ”。

位错易动性的示意说明



位错移动所引起的永久变形的示意说明

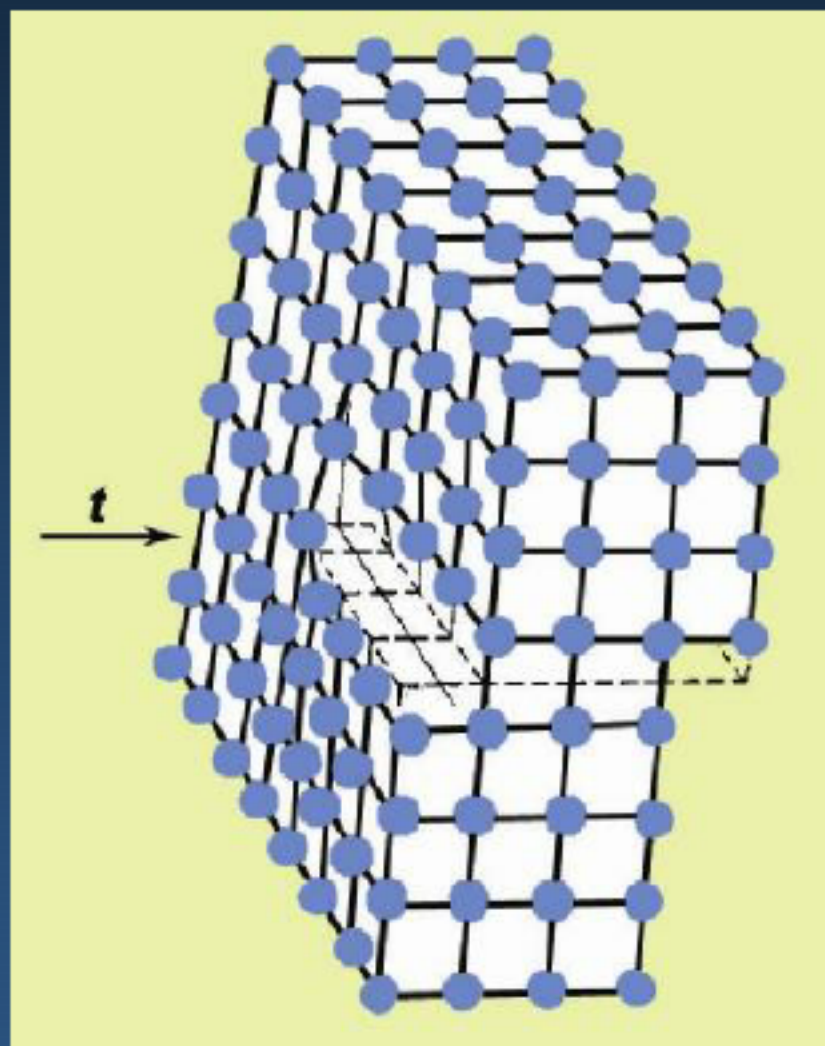


观看刃位错的运动

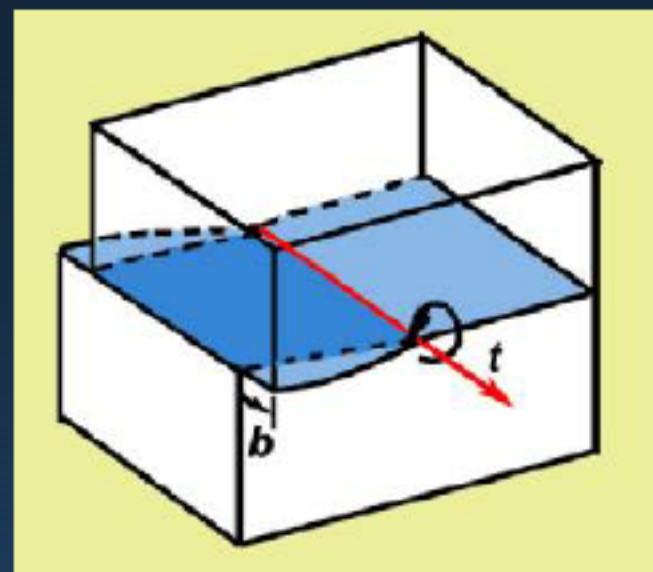


螺型位错

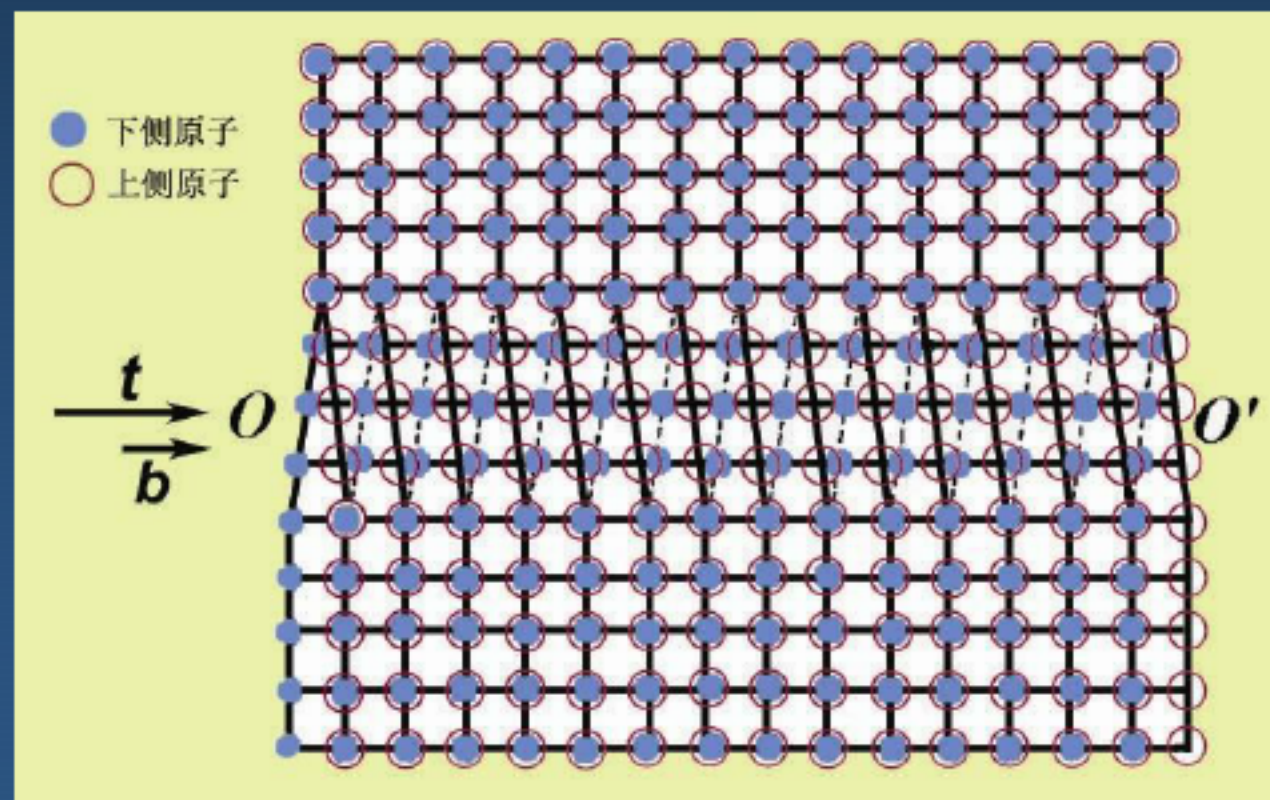
右螺位错的原子模型



产生右螺位错的
Volterra过程



右图的顶视投影图

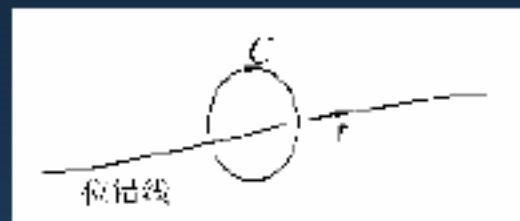


观看螺位错的运动



柏氏回路及柏氏矢量

位错线在晶体中产生应力和应变场，从“制造”位错的Volterra过程可知，剖面的相对位移矢量 b 是位错的最根本特征，绕位错的回路 C 的弹性位移 u 的线积分值应该等于 b ：



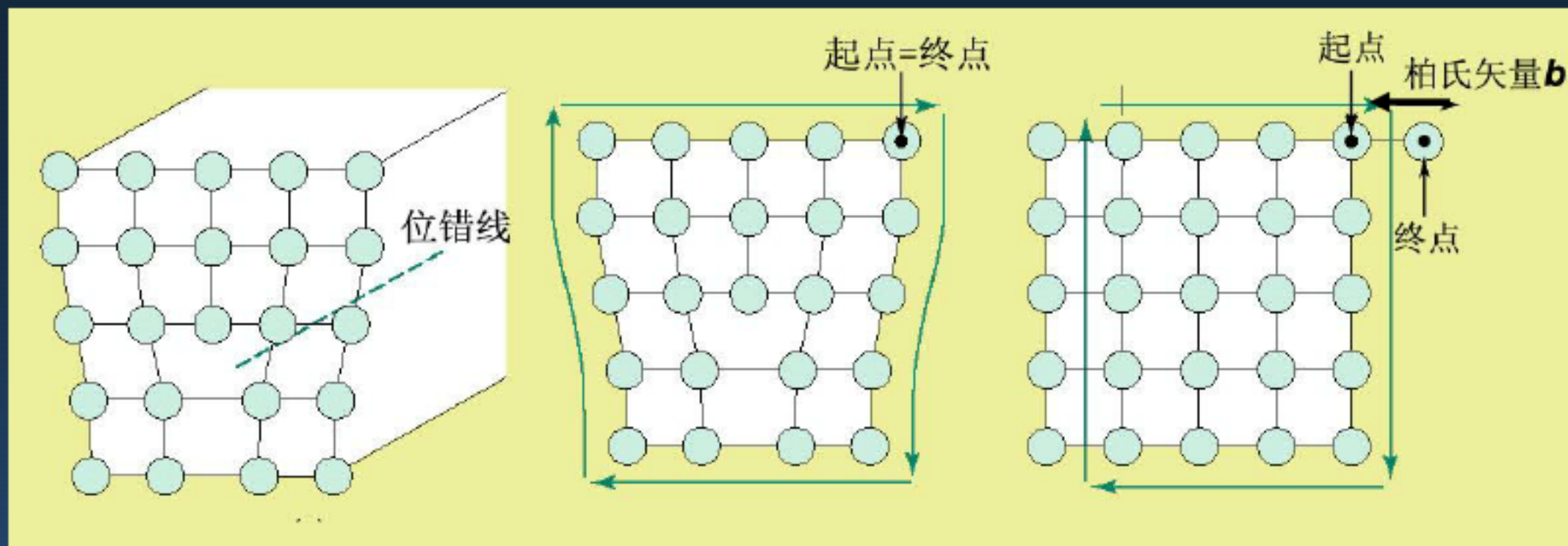
$$b = \oint_C du$$

b 称**柏氏矢量**。按照这样的概念，可以用简单的作图法来定出位错的柏氏矢量。其步骤如下：

- ①人为规定位错线正向 t （单位矢量）；
- ②以位错线正向为轴环绕位错线在位错线附近的原子错排区作右螺旋闭合回路（称**柏氏回路**）；
- ③用同样方法在不含位错的完整晶体中作相同回路；
- ④比较这2个回路，绕位错线所作的回路是闭合的，则在完整晶体中所作的相同回路是不闭合或是重叠的，从这个回路的终点向始点连接所得的矢量就是位错线的柏氏矢量 b 。

这种方法记为**RH/FS**法。在确定柏氏矢量时，若位错线的正向相反时，所得的柏氏矢量也同时反向。

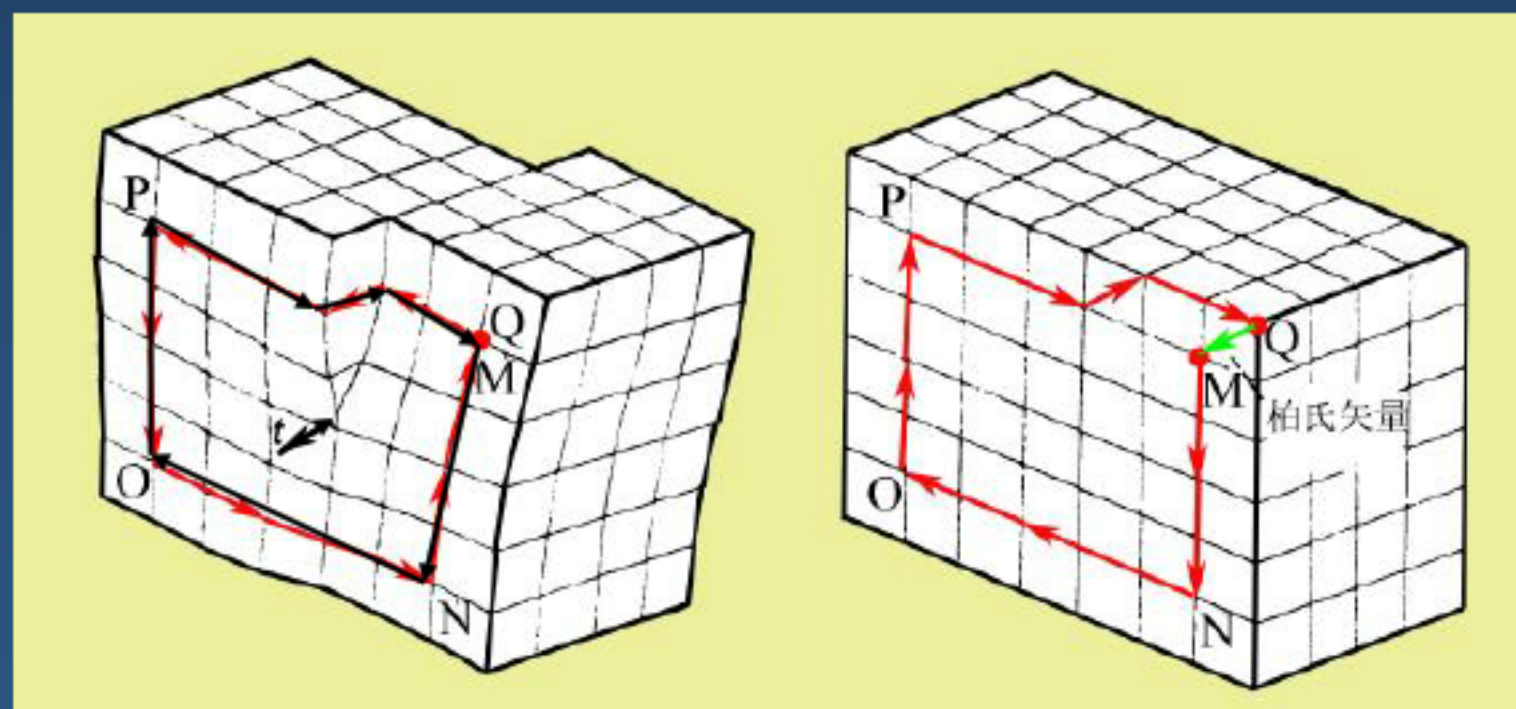
刃位错的柏氏回路和柏氏矢量



螺位错的柏氏回路和柏氏矢量



复习 b 的确定方法



柏氏矢量是位错线的一个特征量，可以用它来明确地定义位错的类型：

$t \cdot b = 0$ 刃位错；

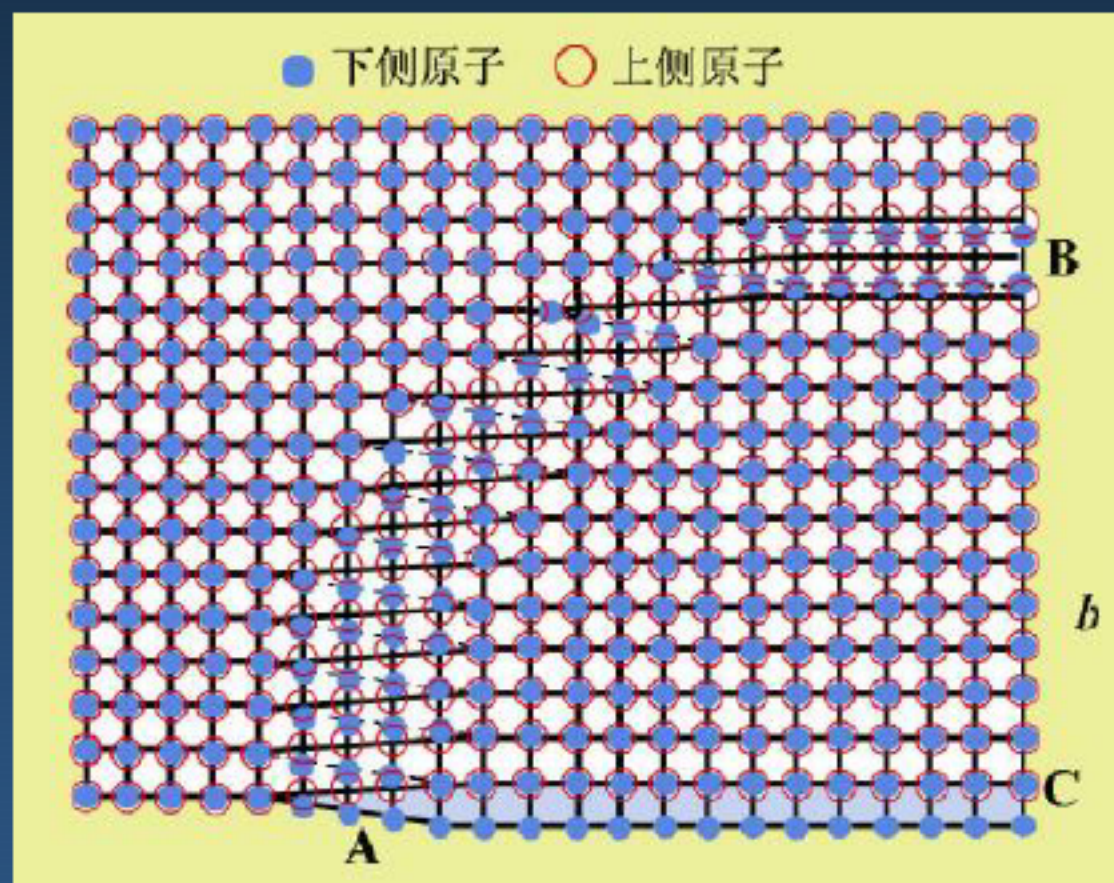
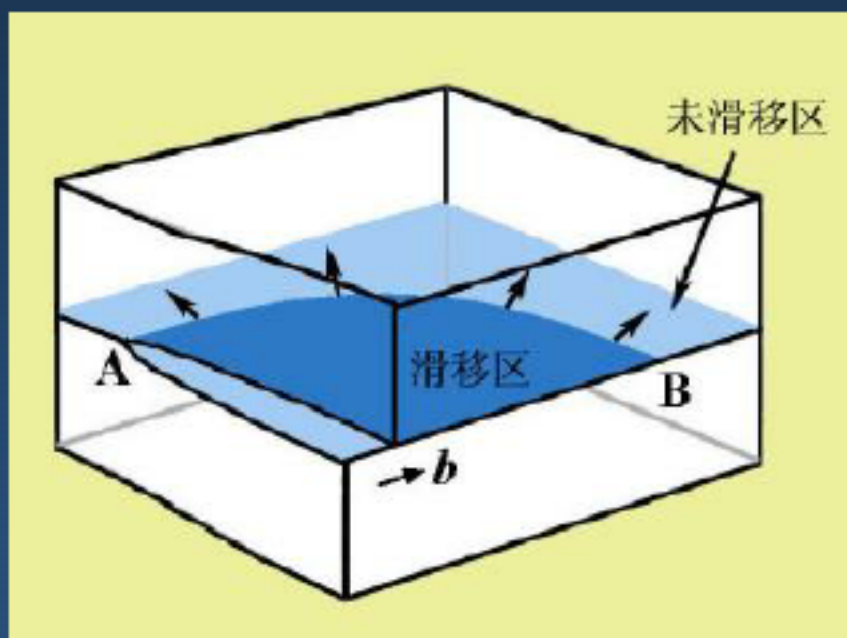
$t \cdot b = |b|$ 右螺位错，

$t \cdot b = -|b|$ 左螺位错

位错线和其柏氏矢量既非垂直又非平行的是混合位错。

右图的顶视投影原子模型图

产生混型位错的Volterra模型



一个柏氏矢量 b 与位错线 t 夹角为 ϕ 的混位错，可以看成是柏氏矢量为 $b\sin\phi$ 的刃位错和柏氏矢量为 $b\cos\phi$ 的螺位错的叠加。

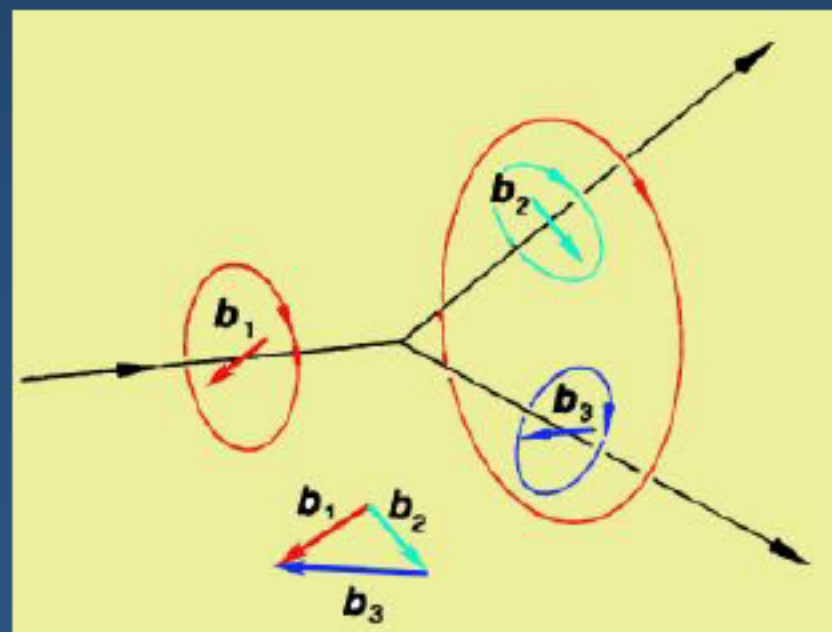


柏氏回路任意扩大、移动，只要在扩大和移动过程不和原位错线或其它位错线相遇，由它确定的柏氏矢量也不会改变，这就是**柏氏矢量的守恒性**。从这一点引伸，我们可以得到如下的重要概念：

- ①一根不分岔的位错线不论它的形状如何变化，它只有一个恒定的柏氏矢量。
- ②一根位错线不能终止在晶体内部，只能终止于晶体表面或晶界；若它终止在晶体中部，它必和其他位错线相连接，相交于一个接点，或者自成封闭的位错环。
- ③汇聚在一点的各位错线，如果从汇聚点向外的方向定为正向，则它们的柏氏矢量总和为零。

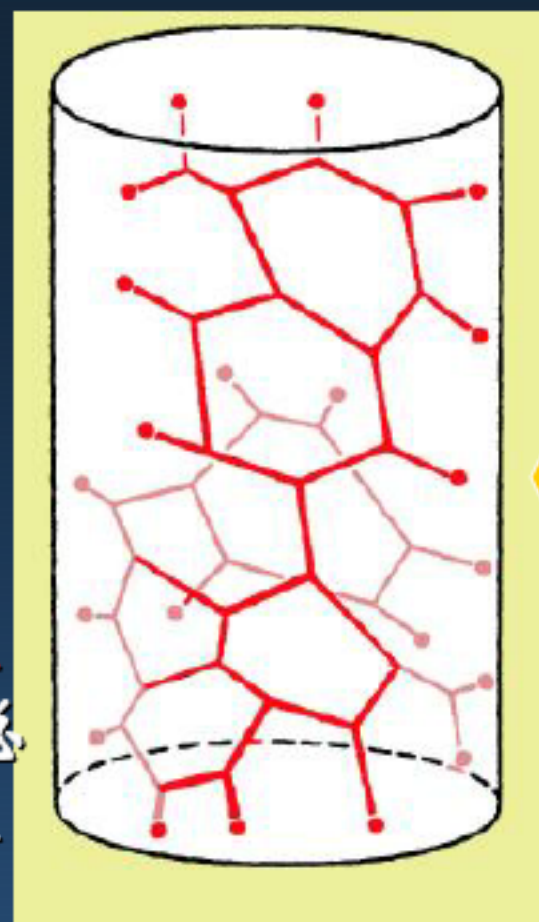
绕 b_1 的位错的柏氏回路扩大，移动到包围其它2个位错的区域，这个回路所确定的柏氏矢量始终不变，仍为 b_1 。故

$$b_1 = -(b_2 + b_3) \quad \text{即} \quad \sum b_i = 0$$



晶体中的位错组态常是位错网络。除了位错网络外，位错还可以单独的以位错环的形式存在。在经强烈冷加工后，晶体中的位错组态很复杂，经常出现象发团一样的位错“缠结”。

单位体积中含位错的总长度称**位错密度** ρ ， $\rho = L/V$ ，其中 L 为体积 V 中的位错线总长度。另一种有时使用更为方便的定义是：在单位面积上截过的位错数目。



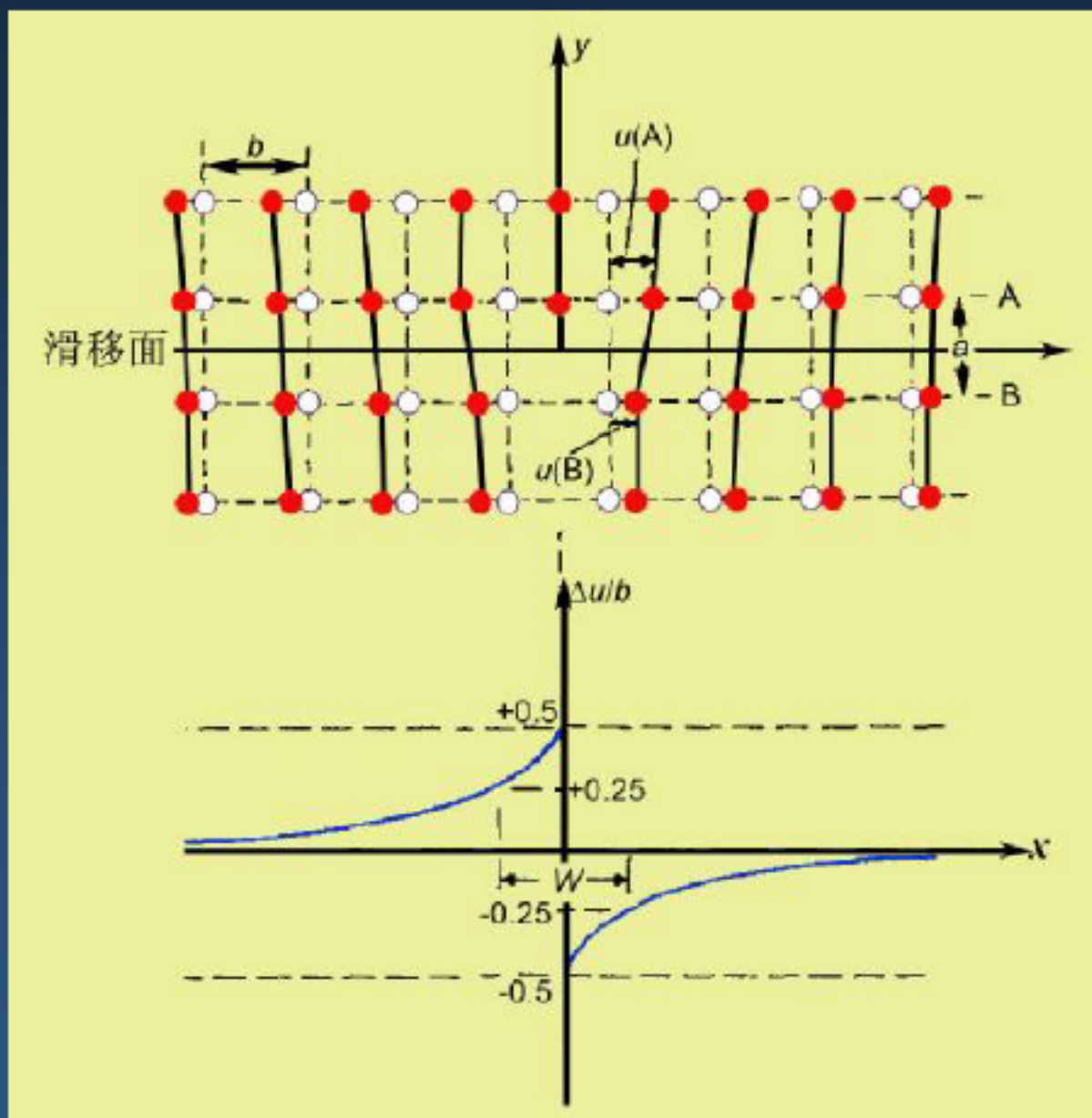
如果所有的位错线平行且垂直于表面，这两种定义的密度值是相同的。对于完全**随机排列的位错组态**，**体密度是面密度的2倍**。

在充分退火的金属晶体中 ρ 通常在 $10^6 \sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$ 之间。位错密度随塑性变形而快速增加，强烈冷加工金属的典型值约为 $10^{11} \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 。在非金属晶体中 ρ 通常低些。

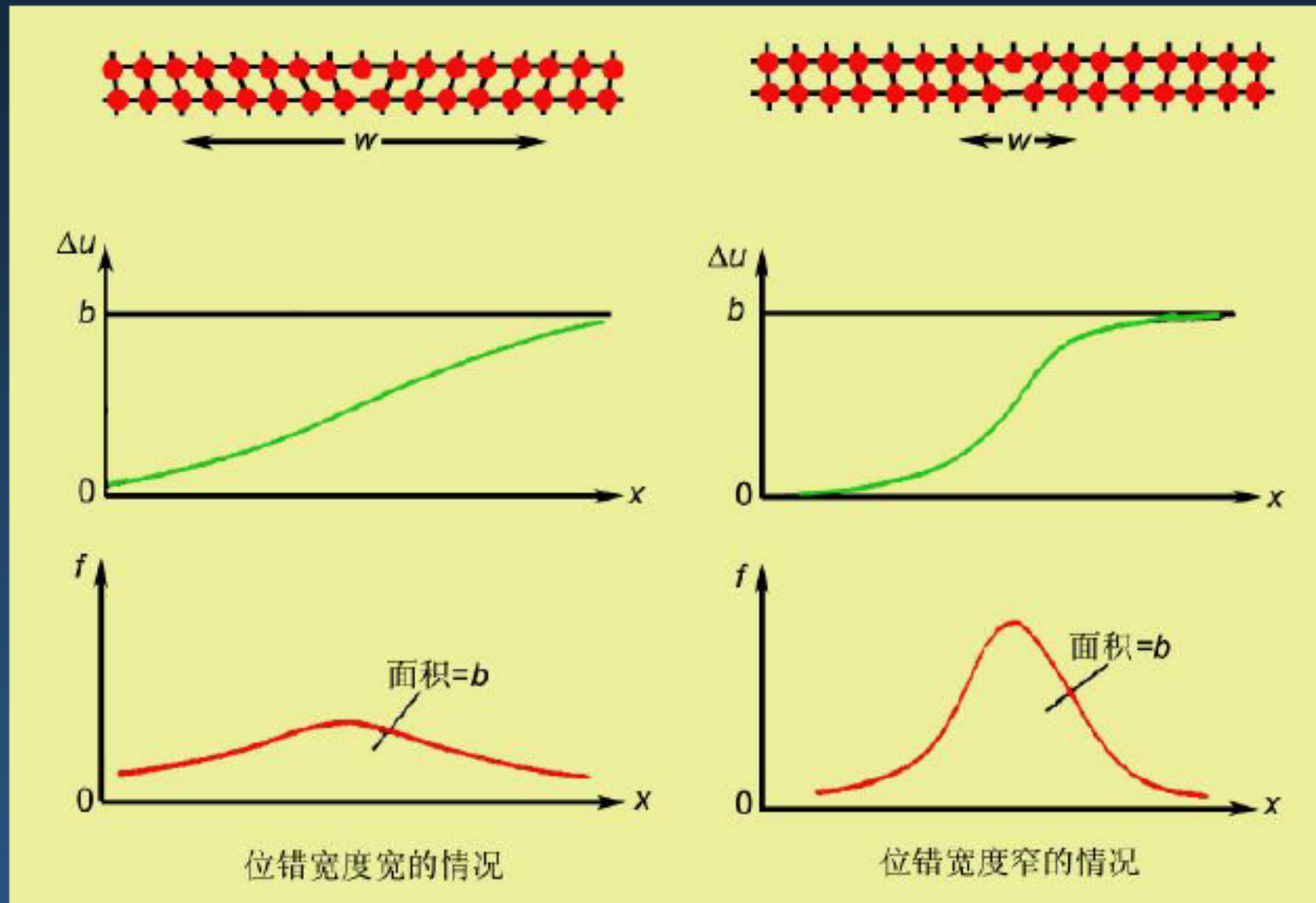
位错核心结构

位错所引起的畸变大部分集中在原子排列不太精确的核心区域。按如下的方法来定量描述这种错排：

滑移面上侧(A)和下侧(B)的原子分别发生了位移 $u(A)$ 和 $u(B)$ ，即沿滑移面原子的错排 $\Delta u = u(B) - u(A)$ 。 Δu 的最大值为 $b/2$ ，并随离开位错中心迅速减小。把错排大小大于其最大值一半($\pm b/4$)的那段距离定义为位错宽度 W 。位错宽度通常在 $b \sim 5b$ 之间，取决于原子间势能和晶体结构。密排金属的位错宽度比较大；共价键材料例如硅、金刚石等的位错宽度比较窄。



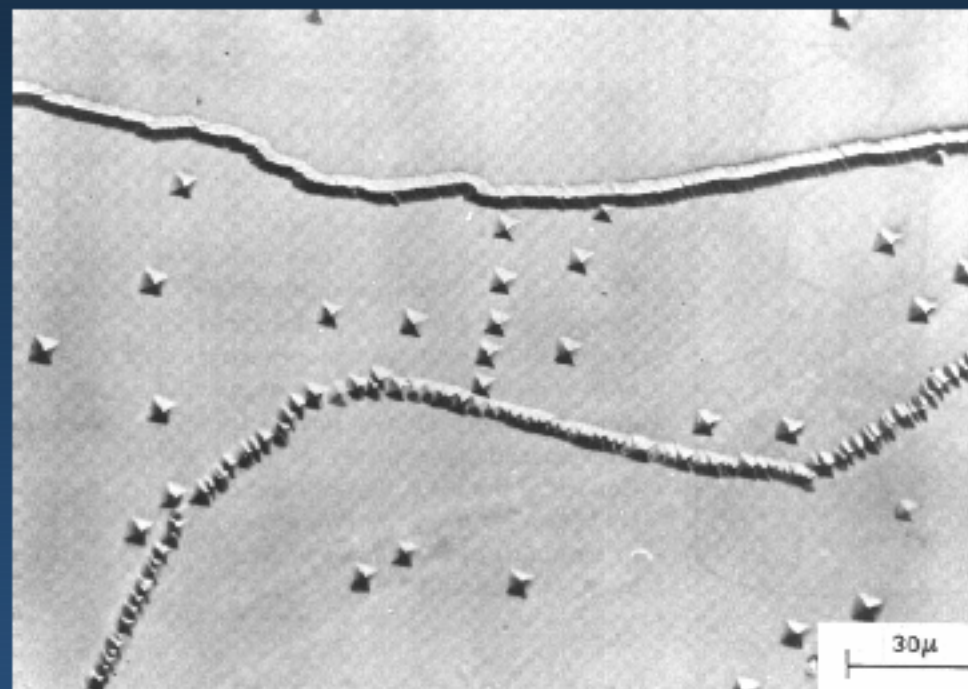
把错排曲线变成连续曲线 这时，对错排曲线求导数得 $f(x) = \frac{d(\Delta u)}{dx}$



因为 $f(x)$ 曲线下面的面积等于 b ，所以称 $f(x)$ 为柏氏矢量分布函数。分布函数清楚地显示错排集中于何处。

位错的观察

早期对位错的观察的例子：



氟化锂表面浸蚀出的位错露头
的浸蚀坑



KCl中的位错

KCl晶体是透明的，用杂质“装饰”位错以便可以见到它（白色）。位错形成网络

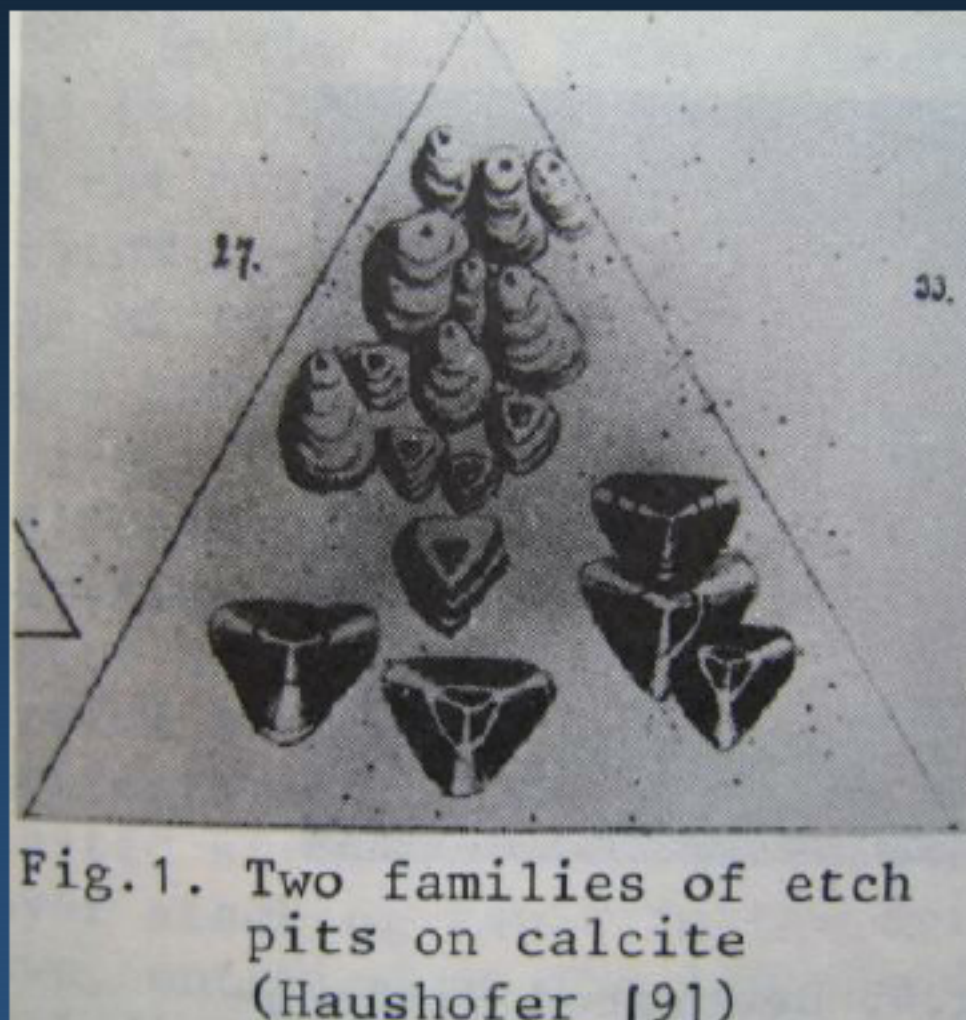


Fig.1. Two families of etch pits on calcite (Haushofer [9])

方解石



Fig.5. Decorated dislocations in rock salt (Siedentopf [13])



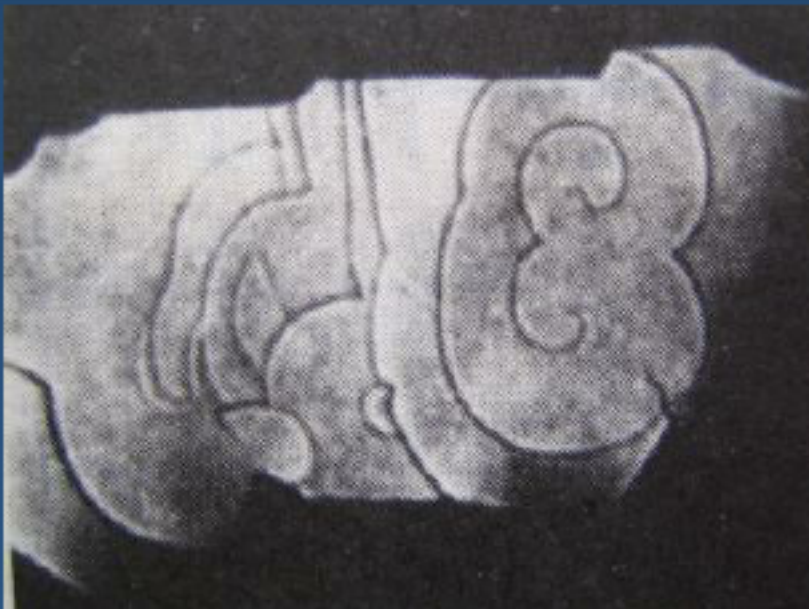
Fig.11. Growth spiral on
paraffin (Heck [32])

石蜡



Fig.10. Growth spiral on carbo-
rundum (Menzies and
Sloat [31])

金刚砂



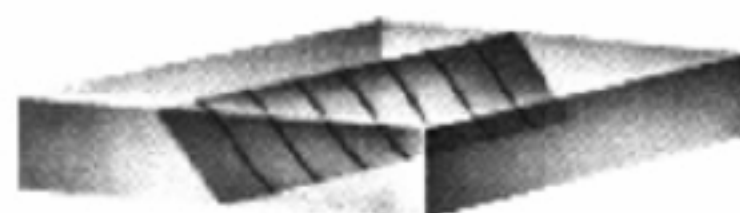
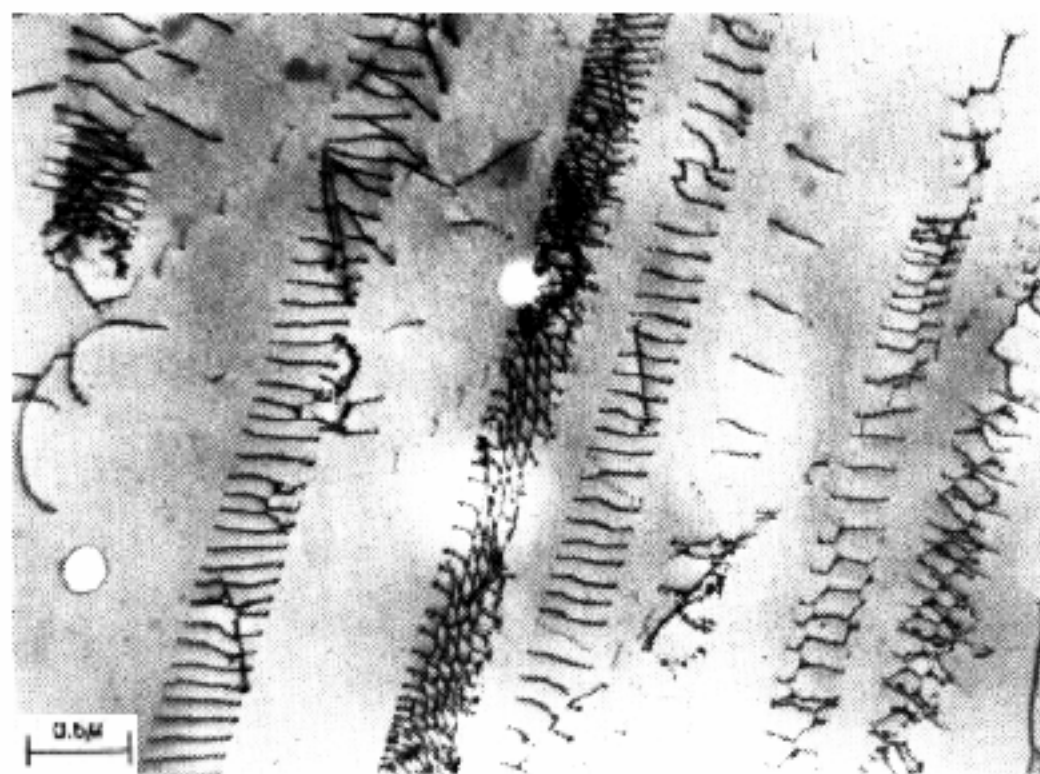
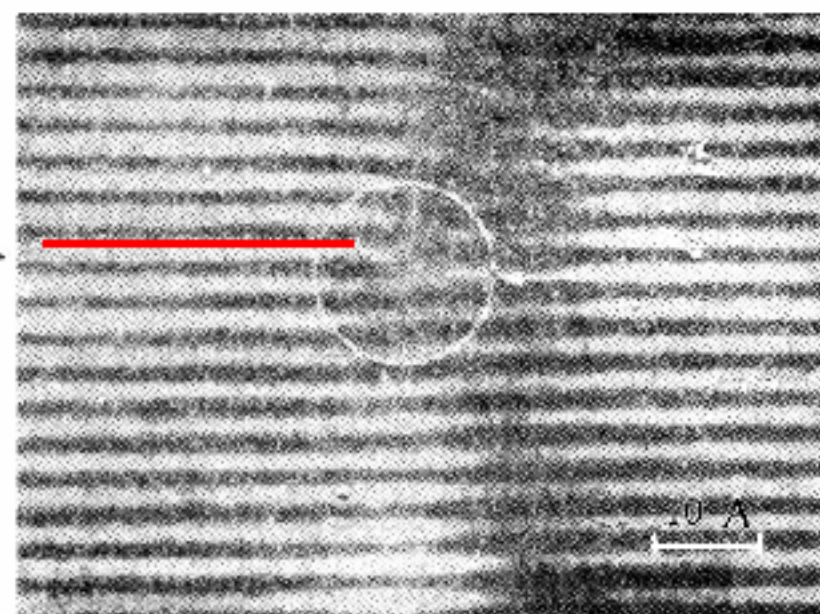
甲苯胺双螺位错生长中心

位错的电子显微镜观察的例子

错晶体中位错的
电子显微镜图象



额外半原子面的位置



在薄膜中排列在滑移面上的位错的示意图

18Cr-Ni不锈钢中的平面排列的位错

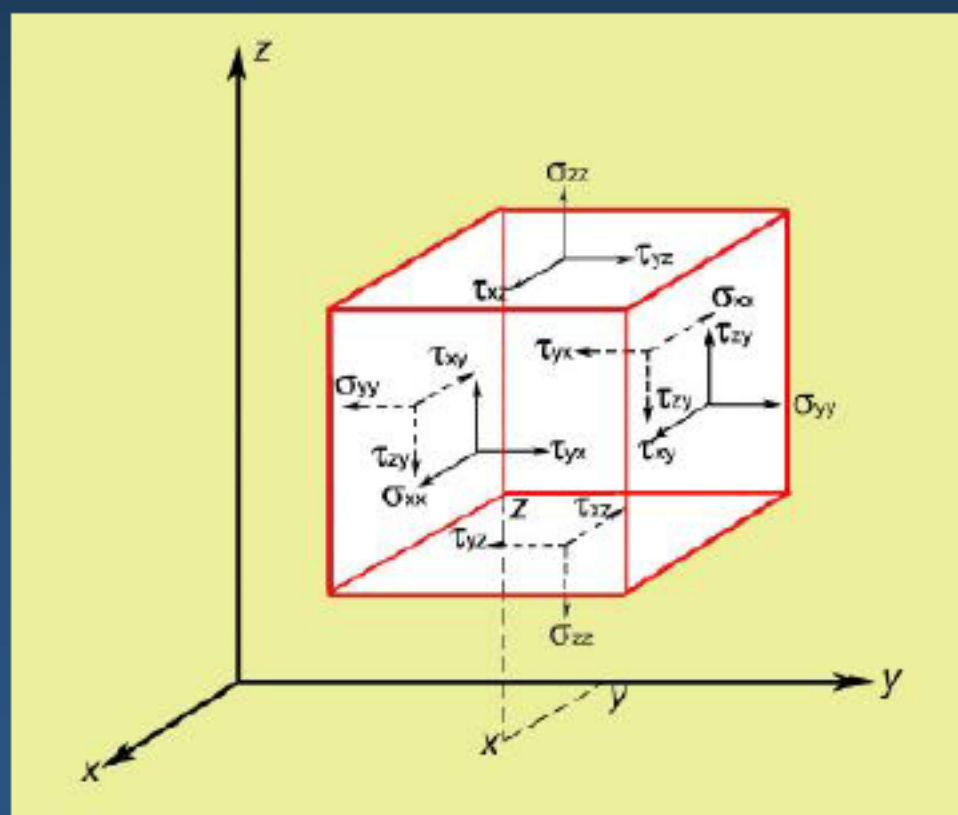


6.4 在弹性介质中的位错

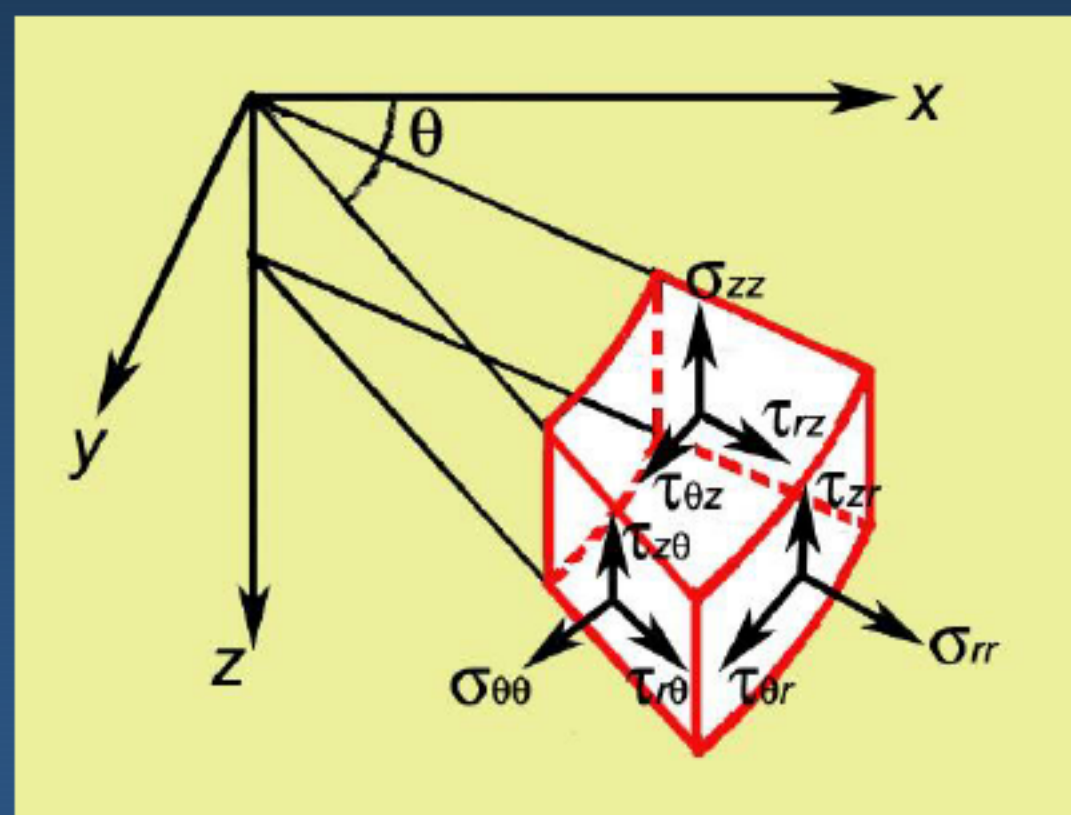
设晶体是一个连续的各向同性弹性介质，并忽略位错中心附近的点阵结构的影响，根据线弹性理论就可获得非常接近真实情况的位错应力场的表达形式。

应力的表示

在均匀应力场下直角坐标的一个微元的各应力分量

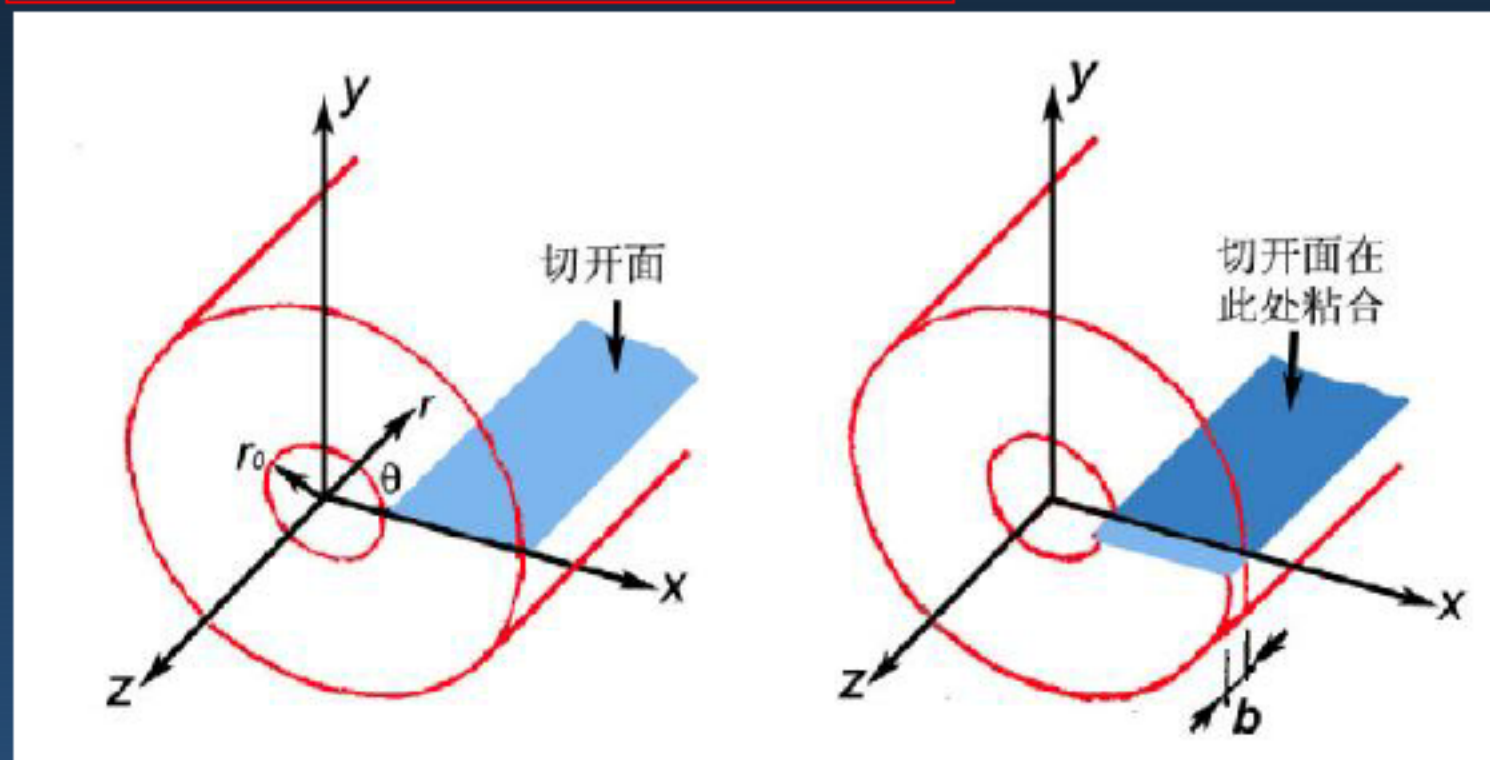


在均匀应力场下柱坐标的一个微元的各应力分量



直螺位错的应力场

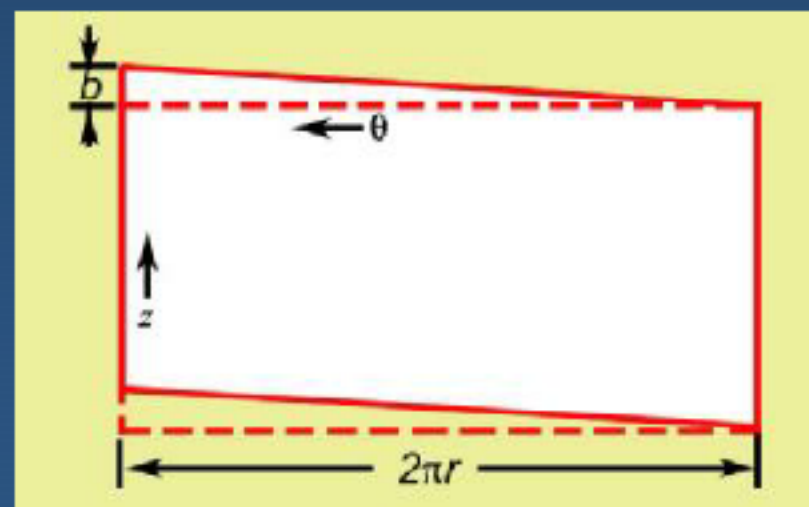
计算直螺位错应力场的模型



位移只有 u_3 分量，整体只有切应变和切应力。

把半径为 r (他可以为任意值) 处的柱面展开，很容易计算其切应变 $\gamma_{z\theta}$:

$$\gamma_{z\theta} = \frac{b}{2\pi r}$$



按Hook's law, 相应的切应力 $\tau_{z\theta}$ 为:

$$\tau_{z\theta} = G\gamma_{z\theta} = \frac{Gb}{2\pi r} \quad \text{其它分量为} \quad \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} = \tau_{r\theta} = \tau_{rz} = 0$$

应力场的值与 z 无关。对于左螺位错, 它的应力场的所有分量均反号。当 $r \rightarrow 0$ (即 $r \rightarrow 0$) 时, 应力发散, 因而上述结果不适于位错中心区域, 为严重畸变区, 线弹性理论不适用, 这也是弹性模型采用空心 (半径 r_0) 圆柱的原因, 空心区域是核心区域。

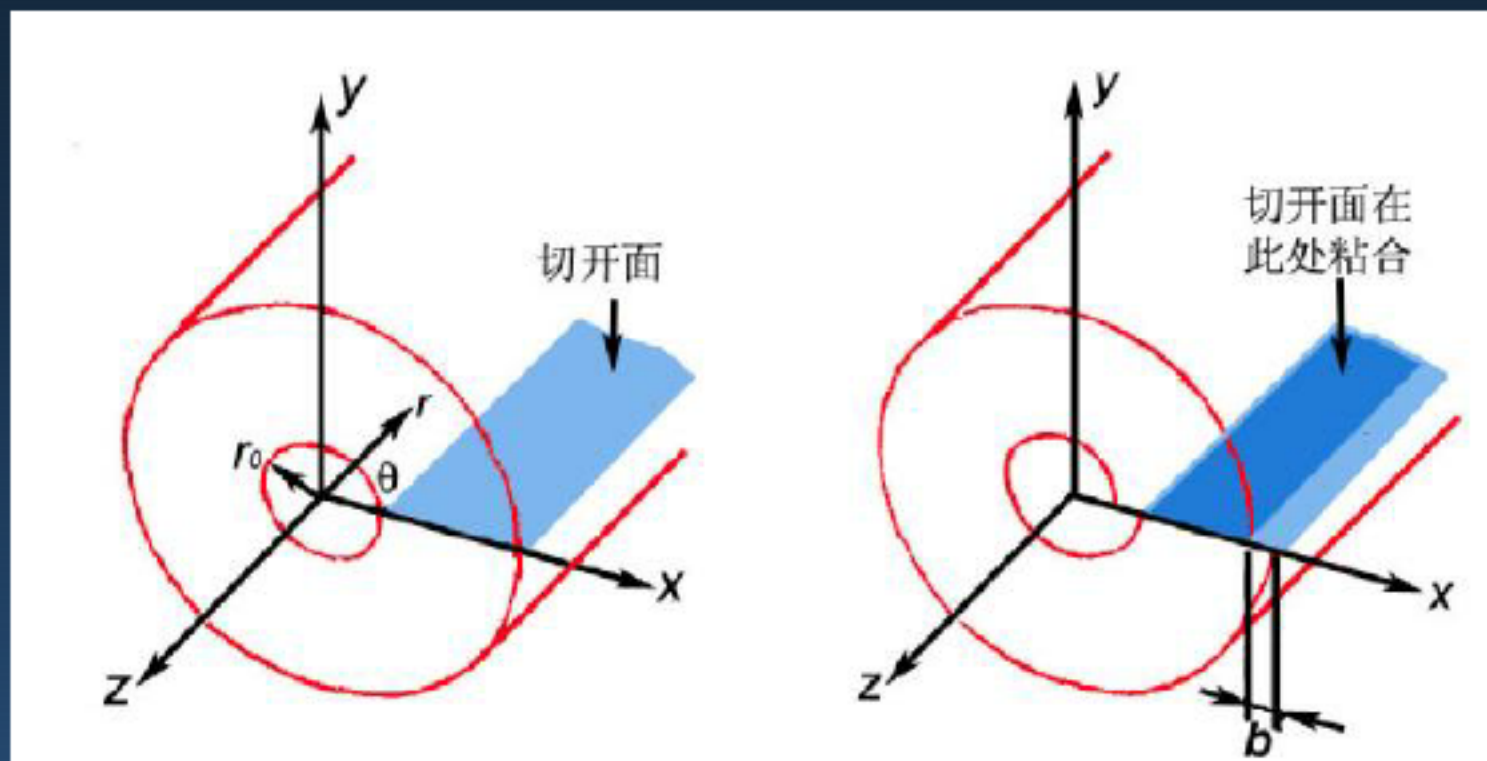
当 $r \approx b$ 时应力达到理论切变强度, 并且应变超过10%, 因而合理的 r_0 取值范围在 b 到 $4b$ 之间, 即绝大多数场合 $r_0 \leq 1\text{nm}$ 。

把应力场用直角坐标表达, 得:

$$\tau_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} \quad \tau_{yz} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \quad \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \tau_{xy} = 0$$



计算直刃位错应力场的模型



位移的 $u_3 = 0$, 并且 u_1 和 u_2 不是 z 的函数。

根据边界条件，按弹性理论求得其应力场为

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

$$\sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

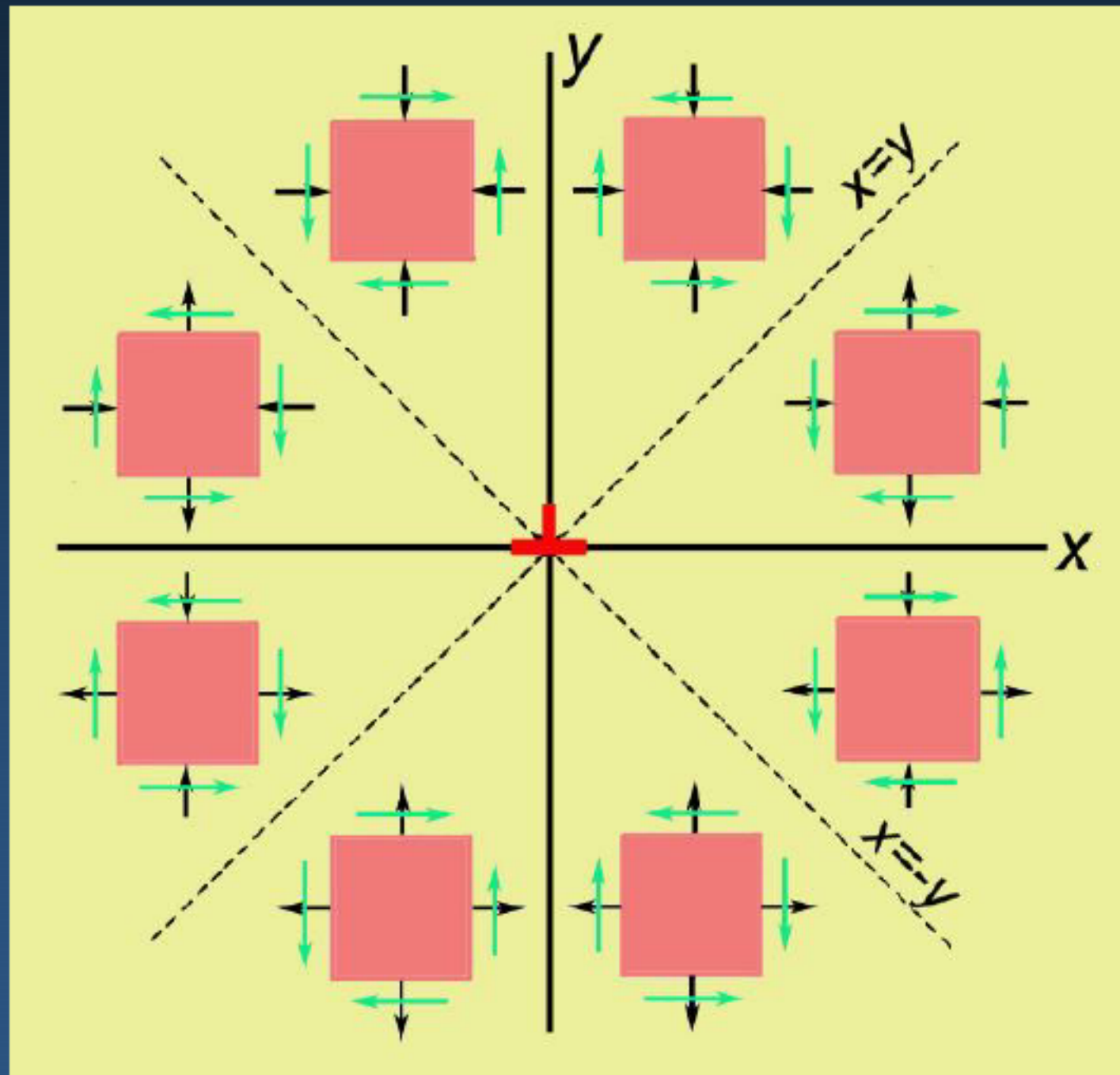
$$\tau_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$

$$\tau_{xz} = \tau_{yz} = 0$$

应力场的值与 z 无关。同样，上述结果不适于位错中心区域。

正刃位错周围的应力场的正值和负值的分布



为了了解各应力分量大小的分布，常在x-y平面上画出应力场的等应力线。为此，以r和 θ 表达 ($r^2=x^2+y^2$, $\tan\theta=y/x$)，得

$$\sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin\theta(2+\cos 2\theta)}{r}$$

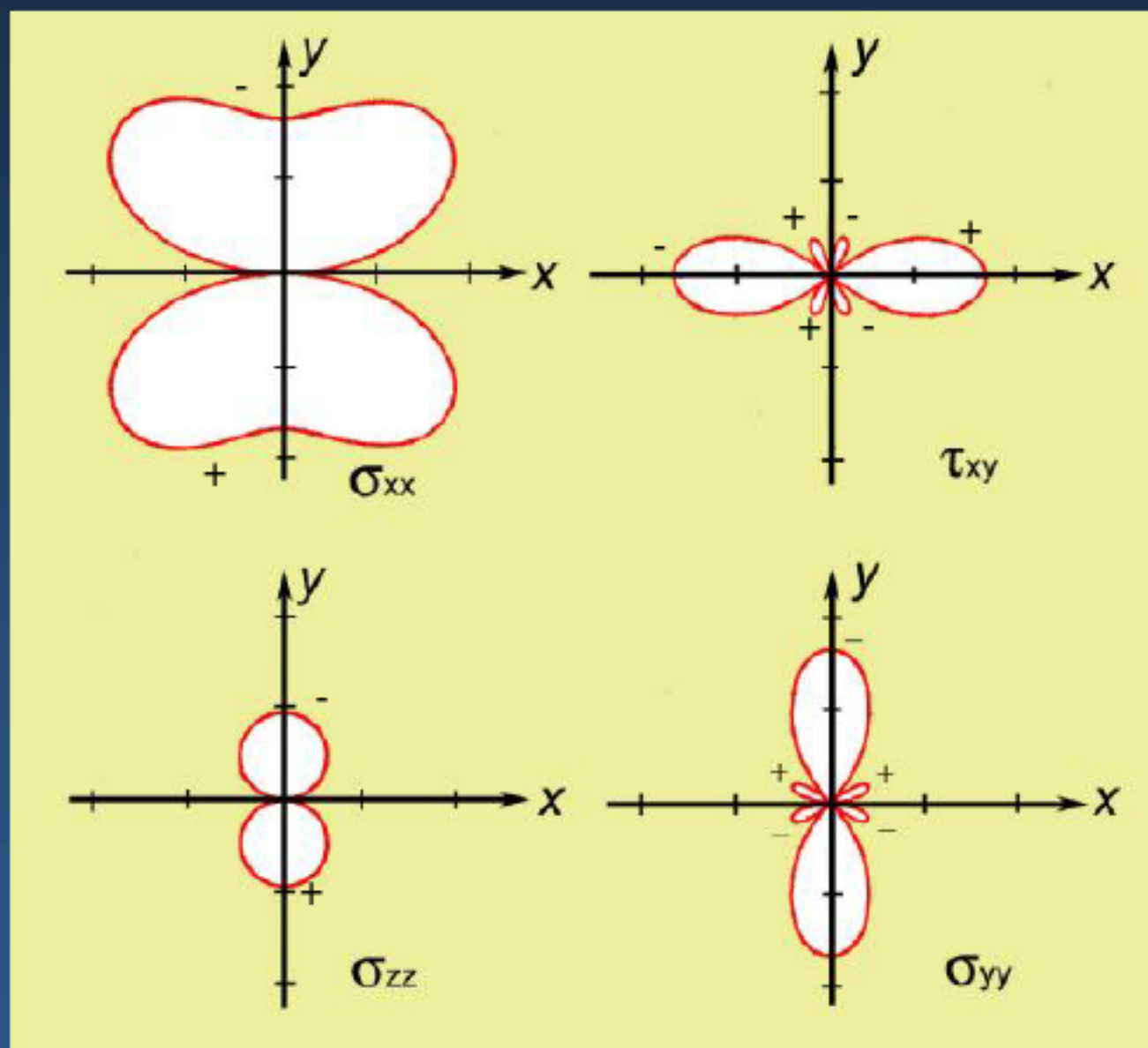
$$\sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin\theta \cos 2\theta}{r}$$

$$\tau_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos\theta \cos 2\theta}{r}$$

看两类位错的
应力场分布



刃位错各应力分量的等应力线



混型直位错的应力场

因为混型直位错可看成是刃型分量和螺型分量位错的迭加，所以混型直位错的应力场也可以由刃型分量和螺型分量位错的应力场叠加得出。如果混位错的柏氏矢量的螺型分量是 b_s 、刃型分量是 b_e ，则其应力场为：

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

$$\sigma_{yy} = \frac{Gb_e}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$

$$\tau_{xy} = -\frac{Gb_e}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\tau_{xz} = -\frac{Gb_s}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}$$

$$\tau_{yz} = \frac{Gb_s}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}$$

应该注意到，混型位错的应力场包含全部的六个分量。

6.4.2 位错线的能量

和位错引起的畸变相关的应变能 E 包括弹性应变能 E_{el} 和核心能量 E_{core} 两部分。我们讨论的能量都指单位长度位错线的能量。

螺位错的弹性应变能

把应力场的应变能密度 $w (= \sum \gamma_{ij} \tau_{ij} / 2)$ 与单位长度位错线对应的晶体体积积分就能求出位错的应变能 E_{el} 。螺位错的 $w = \gamma_{z\theta} \tau_{z\theta} / 2$ ，对中空圆柱域积分，得



$$\begin{aligned} E_{el(S)} &= 2\pi \int_{r_0}^R w r dr = 2\pi \int_{r_0}^R \gamma_{z\theta} \tau_{z\theta} r dr \\ &= \frac{Gb^2}{4\pi} \int_{r_0}^R \frac{dr}{r} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \end{aligned}$$

1/2

刃位错的弹性应变能

可以把 E_{el} 看作是“制造”位错时使割面位移 b 时反抗位错自身应力场所作的功。这样，计算能量就简单得多。

剖面上单位长的面积元 $dA=1 \times dx$ ，
在 x 方向相对位移 αb 时

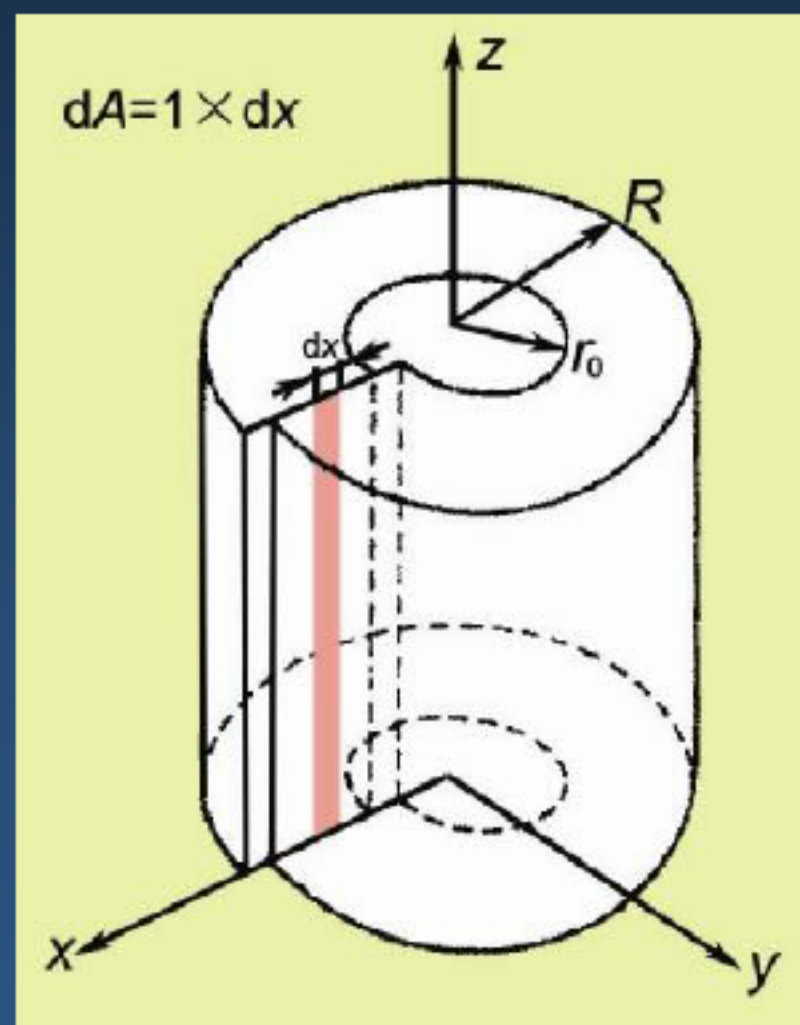
($0 \leq \alpha \leq 1$)，

相当已形成一个柏氏矢量大小为 αb 的刃位错，这个位错在滑移面上 ($y=0$) x 处的切应力 τ'_{xy} 为

$$\tau_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$



$$\tau_{xy} = \frac{G\alpha b}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{x}$$

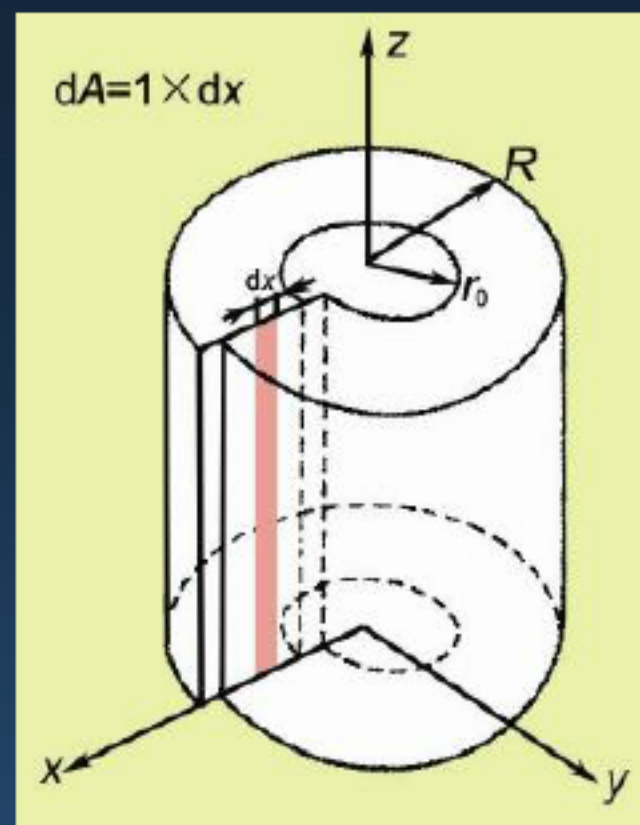


在这个切应力的作用下，
 剖面 dx 位移 $b d\alpha$ 作的功 dW 为：

$$dW = \frac{G\alpha \boxed{b^2 d\alpha}}{2\pi(1-\nu)} \frac{dx}{x}$$

若剖面位移从0到 b （即 α 从0到1），
 整个剖面克服应力场作的功（即位错的 E_{el} ）为

$$\begin{aligned} E_{el(R)} &= \int_0^1 \int_{r_0}^R \frac{Gb^2\alpha}{2\pi(1-\nu)} \frac{d\alpha dx}{x} = \frac{1}{2} \int_{r_0}^R \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{dx}{x} \\ &= \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} \end{aligned}$$



混型位错的弹性应变能

混型位错的 E_{el} 可简单地由它的刃型分量 ($b\sin\varphi$) 和螺型分量 ($b\cos\varphi$) 的应变能加和得出。

$$E_{el(M)} = \frac{Gb^2}{4\pi} \left(\frac{\sin^2\varphi}{1-\nu} + \cos^2\varphi \right) \ln \frac{R}{r_0} = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{r_0}$$

其中

$$\frac{1}{K} = \frac{\sin^2\varphi}{1-\nu} + \cos^2\varphi$$

刃位错的应变能比螺位错高即约1.5倍。从上式看出，当 $r_0 \rightarrow 0$ 及 $R \rightarrow \infty$ 时，位错应变能均趋于无限大。 $r_0 \rightarrow 0$ 是不适用的， $R \rightarrow \infty$ 是没有实际意义的。

位错中心部分的能量约为直位错总能量的10%~25%。把这一数值计算入内，可以把位错的总能量改写为：

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{\lambda b}$$

对于金属来说， $\lambda \approx 1/4$ 。

单位长度位错的能量与位错类型、 R 和 r_0 值的变化关系不大。如果取 $r_0 \approx b$ （约为 $2.5 \times 10^{-8} \text{cm}$ ），取 $R \approx 10^{-4} \text{cm}$ （近似于一般的晶粒大小或位错平均距离），则单位长度位错应变能约为

$$E = k_0 G b^2 = 2.5 \text{ nJ} \cdot \text{m}^{-1}$$

0.5~1.0 40GPa 0.25nm

晶体中位错存在的稳定性？

位错的存在引起体系的排列熵值并不大，在含许多位错的晶体中，即使在高温，位错的排列熵也不足以使系统的吉布斯自由能变为负值。所以，**从热力学角度来看，晶体中的位错是不稳定的**。但由于位错间相互作用，形成一种亚稳组态，即使经长时间充分退火，也不能完全消除位错（一般经充分退火的金属，其位错密度 ρ 仍达 $10^6 \sim 10^8 \text{cm}^{-2}$ ）。

6.4.3 位错受力

广义力定义:

物体的能量 E_t 随广义坐标 η 的变化而变化, 则认为物体在 η 方向受广义力 F_η

$$F_\eta = -\frac{\partial E_t}{\partial \eta}$$

位错受力的概念:

加到晶体上的外应力通过和位错应力场的作用使位错受到‘力’。

外应力可是: 外加机械力

晶体内部应力 (如其它位错、点缺陷, 界面, 自身力等)。

位错保守运动与非保守运动的概念

位错运动扫过的面的两侧相对移动 b ，单位长度位错 t 向任意方向移动了 dd ，位错线扫过的面积 ds 为

$$ds = t \times dd = n ds$$

位错运动引起的体积变化为 $\Delta V = b \cdot ds = b \cdot n ds$

• 当位错线在 t 与 b 共面的面运动时， $b \cdot n = 0$ ， $\Delta V = 0$ ，称**保守运动**，称滑移， t 和 b 共面的面称位错的**滑移面**。

• 当位错不在滑移面上运动时， $\Delta V \neq 0$ ，称**非保守运动**。
非保守运动可分解为在滑移面上运动（滑移，保守运动）
和垂直于滑移面运动（攀移，非保守运动）的合成。

位错所受的机械力

(按位错在滑移及攀移方向的受力讨论)

• 设滑移面滑移方向的分切应力 τ_g ，长度为 δL 位错在滑移面扫过 δd 距离，则在 $\delta L\delta d$ 面积上在 b 方向的切力为 $\tau_g\delta L\delta d$ ，位错移动时外力做功为 $b\tau_g\delta L\delta d$ ，这相当于晶体势能减小 $\delta W_p = -b\tau_g\delta L\delta d$ 。故单位长度位错在滑移面上受的滑移力 F_g 为

$$F_g = -\frac{\delta W_p}{dL\delta d} = \tau_g b$$

力的方向与位错运动方向相同，
即处处和位错线垂直。

• 当长度为 δL 的位错向上攀移 δd 间距时，体积变化 $\Delta V = -b\delta L\delta d$ ，外加应力场 σ 中只有 σ_{xx} 分量对这一体积变化做功，等于 $-\sigma_{xx}b\delta L\delta d$ 。故单位长度位错线受的攀移力 F_c 为

$$F_c = -\frac{\delta W_p}{\delta L\delta d} = -\sigma_{xx} b$$

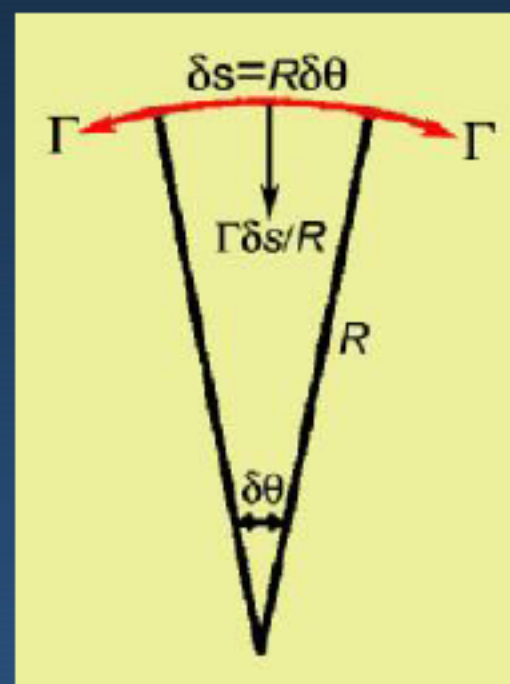
受力方向是攀移 y （垂直滑移面）方向，
力也是和位错线垂直的。

位错的线张力

把位错线看成是一根有张力的弹性绳，所以位错就有线张力。线张力 Γ 的单位就是单位长度位错线的能量： $\Gamma=E$ 。

位错弯曲时，位错的线张力使位错线受一指向曲率中心的力，这力力求把位错线变直。只有存在反向外力时位错才能保持弯曲状态。设加在单位长度位错线上滑移力为 $\tau_g b$ ，则

$$b \tau_g \delta s = \Gamma \frac{\delta s}{R} \quad \text{即} \quad \tau_g = \frac{\Gamma}{bR} = \frac{kGb}{R}$$



注：线张力为常数时，弯曲位错线是一段圆弧。
若考虑位错类型，线张力会产生一**力矩**把位错线转至螺位错取向，使整体位错的形状近似为椭圆形，它的主轴平行于柏氏矢量，轴比近似为 $1/(1-\nu)$ 。

位错所受的化学力

化学力（渗透力）的含义：晶体中的过饱和**点缺陷**会在**刃**位错上沉积，使位错**攀移**。相当于过饱和点缺陷对位错施加一个附加的攀移力，

设作用在单位长度正刃位错攀移方向的力 F 使 δl 位错正攀移了 δs 距离，做功 $F\delta l\delta s$ ，引起 $b\delta l\delta s$ 的体积变化，并吸收了 $b\delta l\delta s/\Omega$ 个空位（ Ω 是单个原子体积）。因而空位形成能变化了 $F\Omega/b$ ，这样在存在位错时空位平衡浓度**减少**为：

$$c = \exp[-(E_f^v + F\Omega/b)/kT] = c_0 \exp(-F\Omega/bkT)$$

如果在刃位错附近出现过饱和或欠饱和空位时，相当于**对单位长度位错线施加一个如下的力：**

$$F_s = \frac{bkT}{\Omega} \ln \frac{c}{c_0} \approx \frac{kT}{b^2} \ln \frac{c}{c_0}$$

高温淬火可获得过饱和空位，提供位错的攀移力，但一般情况下渗透力并不大。

映像力

概念：若位错靠近自由表面，它的一部分应变能会被松弛。为降低能量，位错就有逃出表面的倾向，即自由表面对位错有一吸力。

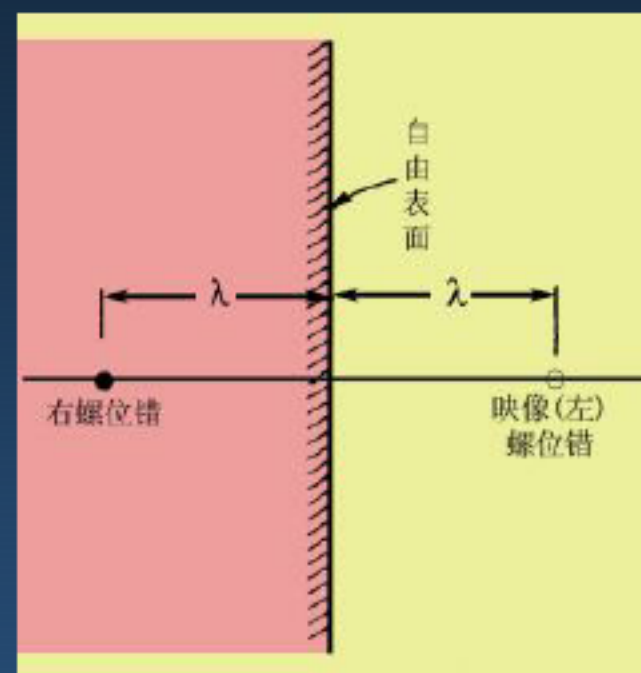
计算：一平行于表面距表面为 λ 的直螺位错，

其单位长度的弹性应变能为

$$E_{el} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{\lambda}{r_0}$$

位错所受自由表面的吸力为

$$F_{im} = \frac{\partial E_{el}}{\partial \lambda} = \frac{Gb^2}{4\pi\lambda}$$



说明：

- 该力相当于在自由表面外侧与位错成镜面对称的位置放入一个反号螺位错（称映像位错）对真实位错的作用力，故这力称**映像力**。
- 对刃位错也近似用此法计算映像力。
- 在两个弹性模量不同的材料边界附近的位错，界面也会对它产生映像力。
- 在薄膜晶体中映像力将起重要作用。

6.5 位错运动

原因：位错运动是因它沿受力方向改变位置会使系统自由能减少，位错实现运动要求它所受的力足以克服运动阻力。

类型：两种---保守运动和非保守运动。

保守运动是位错在滑移面上的滑动或滑移，滑动和滑移通常是同义的。但严格地说，“滑动”指单个位错的行为而“滑移”指多个位错的行为。

非保守运动是离开滑移面的运动，最本质的非保守运动是**位错的攀移**，只有刃位错才有攀移运动，并引起位错的半原子面扩大和缩小，因此攀移总是伴随着点缺陷的输运。

宏观现象

1) 问题：位错扫过的面两侧会相对滑移 b ，究竟哪一侧滑动了 b ？

判别方法：右手定则：

