



《材料科学基础》考点精讲系列

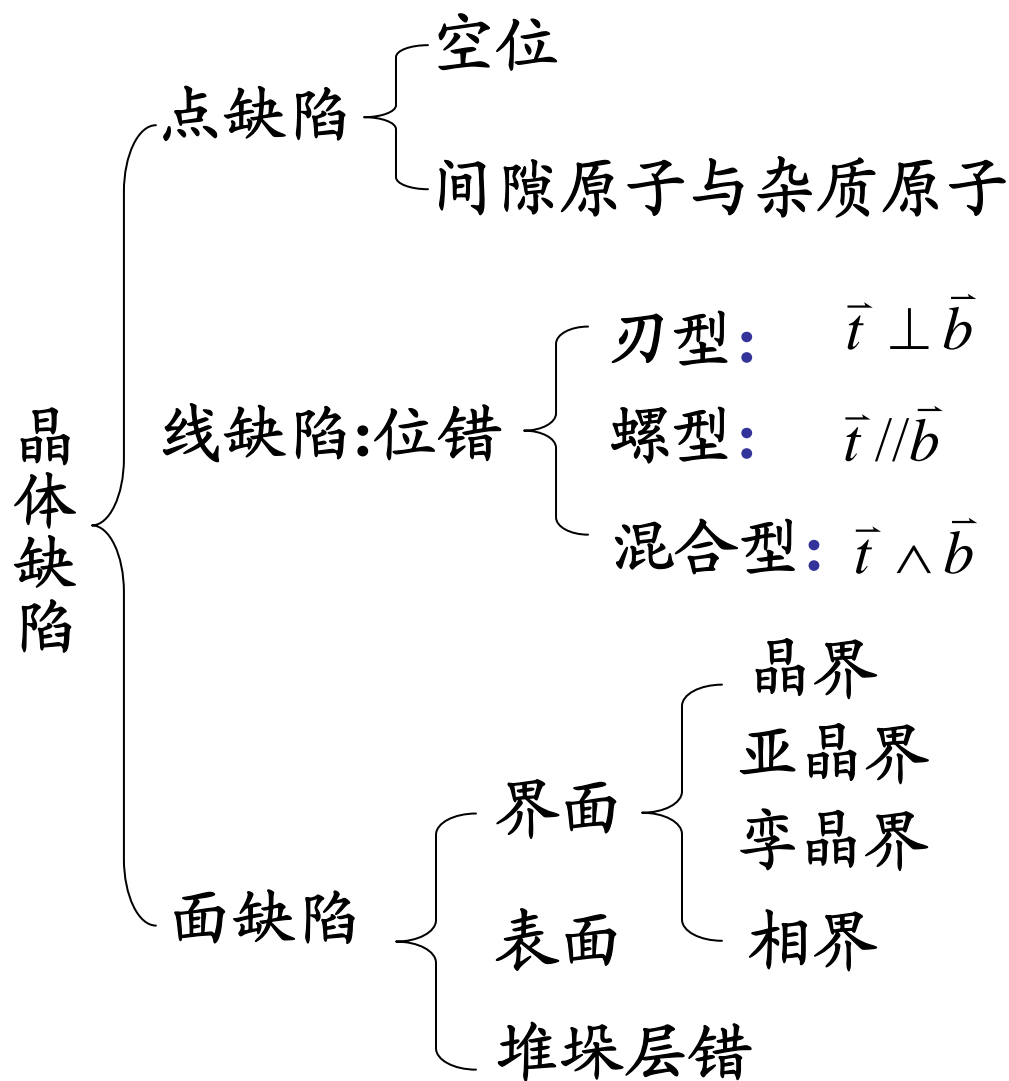
第4讲 晶体缺陷

主讲人：王 准

网学天地
www.e-studysky.com



概 述



一、分类

实际晶体中常存在各种偏离理想结构的区域，即晶体缺陷。晶体缺陷对晶体的性质起着重要作用。

存在于晶体结构中的缺陷，按几何特征可分为：

- 零维——点缺陷：空位、间隙原子、置换原子、复杂离子。
- 一维——线缺陷：各类位错。
- 二维——面缺陷：各类晶界，表面及层错等。

1. **点缺陷。** 在三维空间各方向上尺寸都很小，在原子尺寸大小的晶体缺陷。
2. **线缺陷。** 在三维空间的一个方向上的尺寸很大（晶粒数量级），另外两个方向上的尺寸很小（原子尺寸大小）的晶体缺陷。其具体形式就是晶体中的位错Dislocation。
3. **面缺陷。** 在三维空间的两个方向上的尺寸很大（晶粒数量级），另外一个方向上的尺寸很小（原子尺寸大小）的晶体缺陷。

真 題

1. 根据缺陷相对于晶体尺寸或其影响范围的大小，缺陷可以分为几类？简述这几类缺陷的特征。（03年）

2. 叙述常见的晶体缺陷。（09年）

答：**点缺陷**。在三维空间各方向上尺寸都很小，在原子尺寸大小的晶体缺陷。空位、间隙原子、置换原子

线缺陷。在三维空间的一个方向上的尺寸很大（晶粒数量级），另外两个方向上的尺寸很小（原子尺寸大小）的晶体缺陷。其具体形式就是晶体中的位错。

面缺陷。在三维空间的两个方向上的尺寸很大（晶粒数量级），另外一个方向上的尺寸很小（原子尺寸大小）的晶体缺陷。各类晶界，表面及层错等。

二、点缺陷

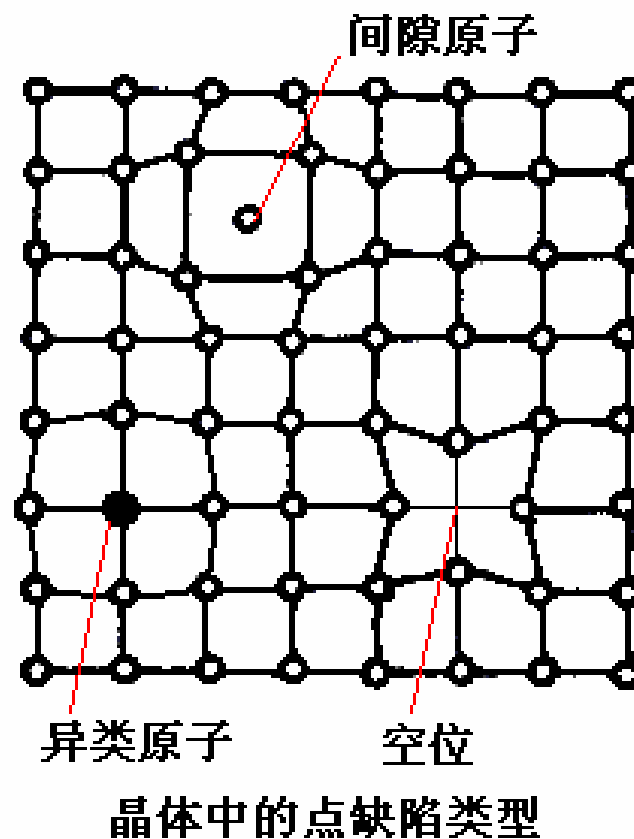
点缺陷：在三维空间各方向上尺寸都很小，在原子尺寸大小的晶体缺陷。

1. 点缺陷的类型

(1) 空位。在晶格结点位置应有原子的地方空缺，这种缺陷称为“空位”。

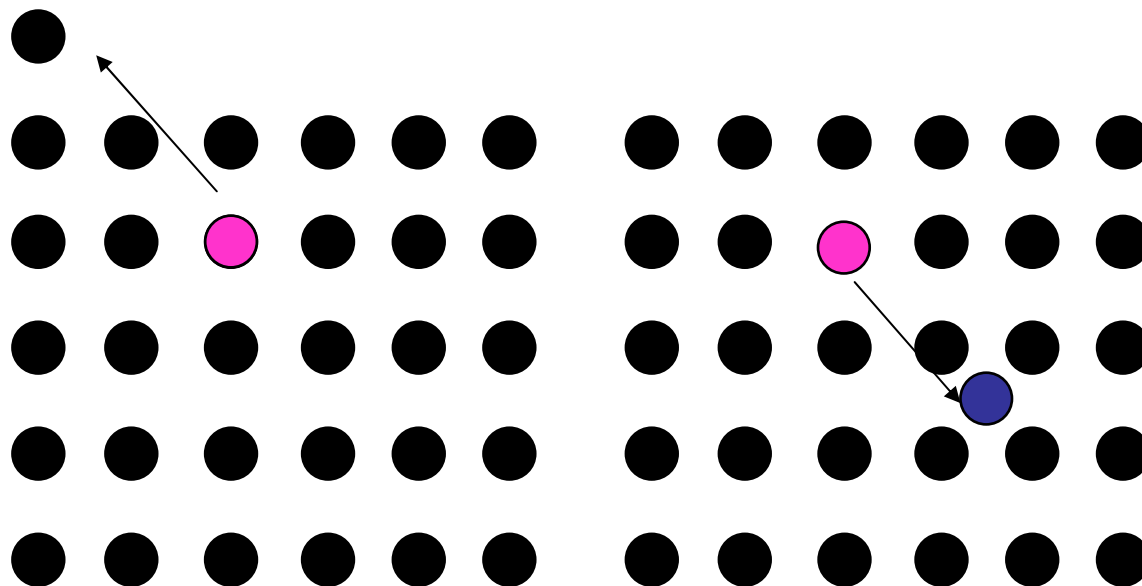
(2) 间隙原子。在晶格非结点位置，往往是晶格的间隙，出现了多余的原子。它们可能是同类原子，也可能是异类原子。

(3) 异类原子。在一种类型的原子组成的晶格中，不同种类的原子替换原有的原子占有其应有的位置。



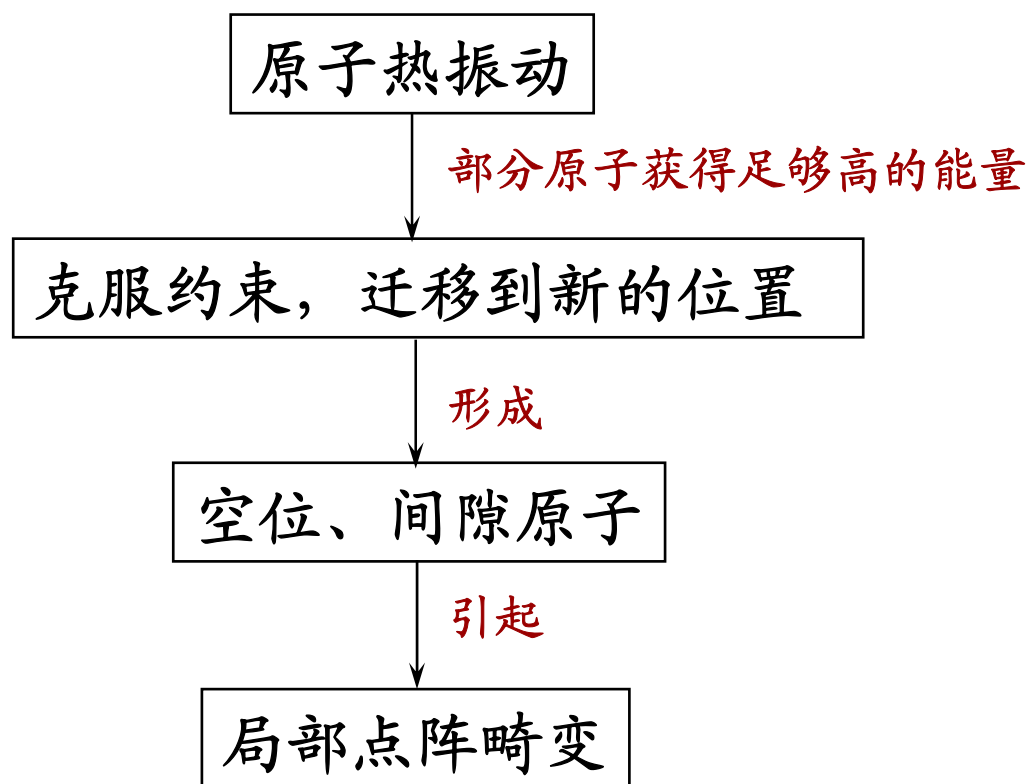
点缺陷分类:

- (1) 肖脱基缺陷——原子迁移到表面——仅在晶体内部形成空位。
- (2) 弗兰克尔缺陷——原子迁移到间隙中——形成空位-间隙对。



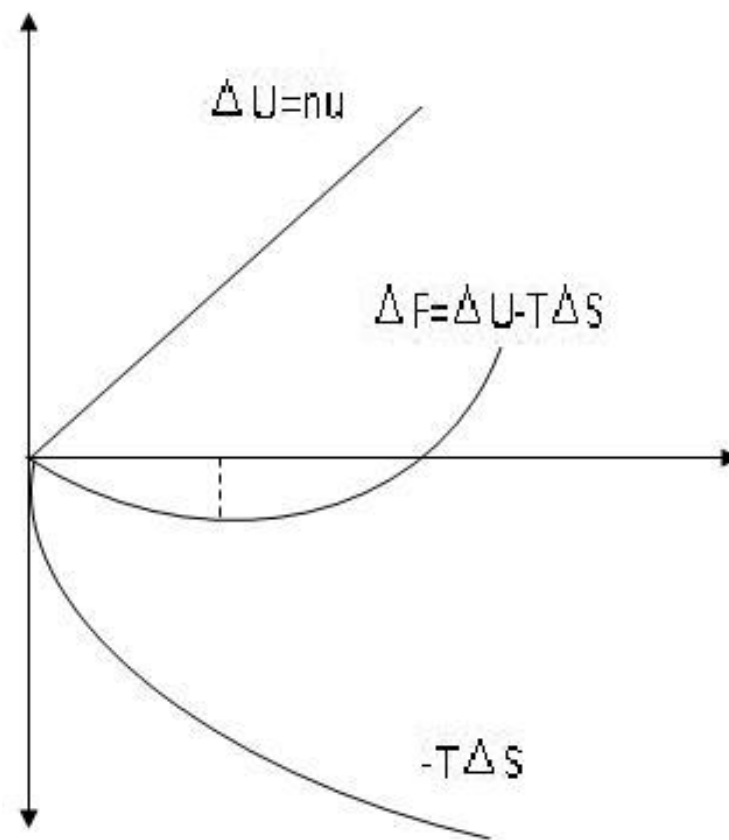
2. 空位平衡浓度

—— 包括空位、间隙原子、杂质或溶质原子



平衡空位浓度：体系的自由能最低时，晶体处于平衡稳定状态，晶体中存在的空位浓度。

- (1) 点缺陷引起点阵畸变，体系内能增大。
- (2) 点缺陷使混乱度增大，熵增大，系统能量下降（振动熵和排列熵）。
- (3) 二者的综合效应。



$$C_V = \frac{n}{(N+n)} = \exp(\Delta S_f / k) \cdot \exp(-E_V / kT) = A \exp(-E_V / kT)$$

n — 平衡空位数

N — 原子总数

ΔE_V — 每增加一个空位的能量变化

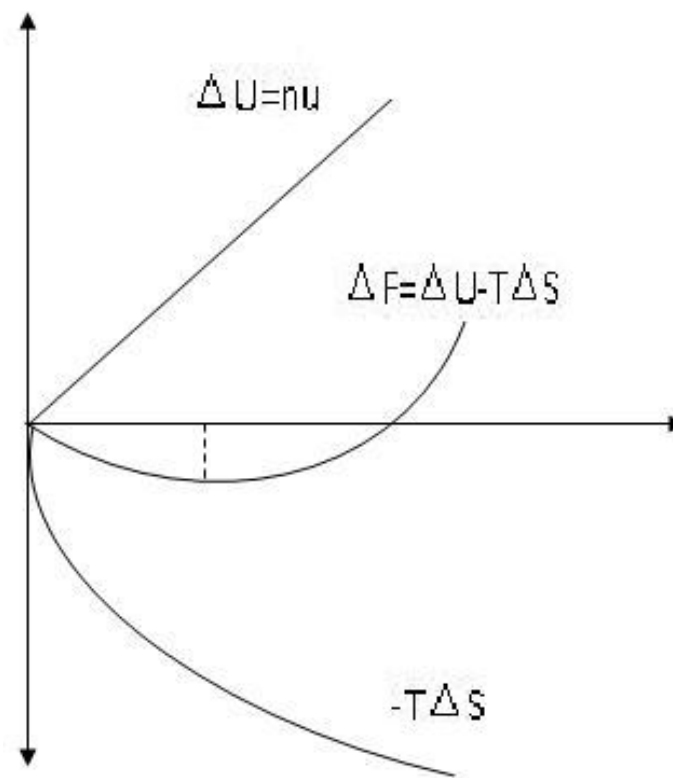
K — 玻尔兹曼常数

T — 绝对温度

式中 $A = \exp(\Delta S_f / k)$ ，由振动熵决定，约为 $1 \sim 10$ 。

上式表示的是空位平衡浓度和空位形成能以及温度之间的关系，由于间隙

原子的形成能较大，在相同温度下，间隙原子浓度比空位浓度小的多，通常可以忽略不计，所以一般情况下，金属晶体的点缺陷主要是指空位。



若已知 E_v 和 ΔS_f ，则可由上式计算出任一温度 T 下的浓度 C ，由上式可得：

- (1) 晶体中空位在热力学上是稳定的，一定温度 T 对应一平衡浓度 C 。
- (2) C 与 T 呈指数关系，温度升高，空位浓度增大。
- (3) 空位形成能 E_v 大，空位浓度小。

例如：已知铜中 $E_v=1.44 \times 10^{-19}\text{J/atom}$ ， A 取为1，则：

T	100K	300K	500K	700K	900K	1000K
C_v	10^{-57}	10^{-19}	10^{-11}	$10^{-8.1}$	$10^{-6.3}$	$10^{-5.7}$

过饱和点缺陷

给定温度下，晶体中存在一平衡的点缺陷浓度，通过一些方法，晶体中的点缺陷浓度超过平衡浓度。

(1) 高温淬火把空位保留到室温：加热后，使缺陷浓度较高，然后快速冷却，使点缺陷来不及复合过程。

(2) 辐照：高能粒子辐照晶体，形成数量相等的空位和间隙原子（原子不断离位而产生）。

(3) 塑性变形：位错滑移并交割后留下大量的点缺陷。另外，点缺陷还会聚集成空位片，过多的空位片造成材料区域崩塌而破坏，形成孔洞。

3.点缺陷对材料性能的影响

原因：无论那种点缺陷的存在，都会使其附近的原子稍微偏离原结点位置才能平衡，即造成小区域的晶格畸变。

效果：

(1) 提高材料的电阻 定向流动的电子在点缺陷处受到非平衡力(陷阱)，增加了阻力，加速运动提高局部温度(发热)。

(2) 加快原子的扩散迁移 空位可作为原子运动的周转站。

(3) 形成其他晶体缺陷 过饱和的空位可集中形成内部的空洞，集中一片的塌陷形成位错。

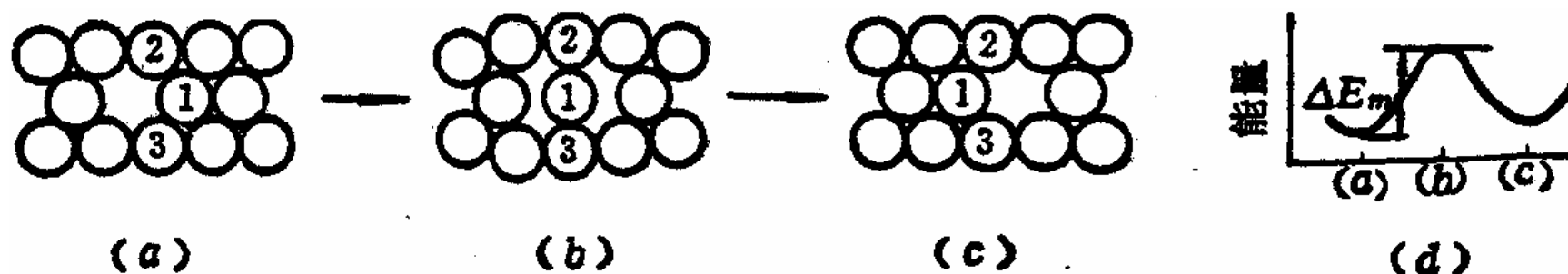
(4) 改变材料的力学性能 空位移动到位错处可造成刃位错的攀移，间隙原子和异类原子的存在会增加位错的运动阻力。会使强度提高，塑性下降。

4. 点缺陷运动

空位在晶体中的分布是一个动态平衡，其不断地与周围原子交换位置，使空位移动所必需的能量，叫空位移动能 E_m 。

迁移 — 空位或间隙原子由一个位置运动到另一个位置的过程。

复合 — 间隙原子与空位相遇时，将落入空位，两者同时消失，这一过程称为复合。



点缺陷运动的作用在于：由于空位和间隙原子不断的产生与复合，使得晶体中的原子不停地向别处作不规则地布朗运动，这就是晶体的自扩散，是固态相变、表面化学热处理、蠕变、烧结等过程的基础。

5. 点缺陷小结

- (1) 点缺陷是热力学稳定的缺陷。
- (2) 不同金属点缺陷形成能不同。
- (3) 点缺陷浓度与点缺陷形成能、温度密切相关。

$$C = \frac{n}{N} = \exp(\Delta S_v / k) \cdot \exp(-\Delta E_v / kT) = A \exp(-\Delta E_v / kT)$$

- (4) 点缺陷对金属的物理及力学性能有明显影响。
- (5) 点缺陷对材料的高温蠕变、沉淀、回复、表面氧化、烧结有重要影响。

真 題

1. Cu晶体的空位形成能 E_v 为0.9eV/atom, 或 1.44×10^{-19} J/atom, 材料常数 A 取作1, 玻尔兹曼常数 $k=1.38 \times 10^{-23}$ J/K, 计算:

(1) 在500℃下, 每立方米Cu中的空位数目。

(2) 500℃下的平衡空位浓度。

解: 首先确定1m³体积内Cu原子的总数 (已知Cu的摩尔质量为 $M_{Cu}=63.54$ g/mol, 500℃下Cu的密度 $\rho_{Cu}=8.96 \times 10^6$ g/m³)

$$N = \frac{N_0 \rho_{Cu}}{M_{Cu}} = \frac{6.023 \times 10^{23} \times 8.96 \times 10^6}{63.54} = 8.49 \times 10^{28}$$

(1) 将 N 代入空位平衡浓度公式，计算空位数目 n_v ：

$$\begin{aligned} n_v &= N \exp \frac{-E_v}{kT} = 8.49 \times 10^{28} \exp \frac{-1.44 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 773} \\ &= 8.49 \times 10^{28} \times e^{-13.5} = 8.49 \times 10^{28} \times 1.37 \times 10^{-6} \\ &= 1.2 \times 10^{23} / \text{m}^3 \end{aligned}$$

(2) 计算空位浓度

$$C_v = \frac{n_v}{N} = \exp \frac{-1.44 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 773} = e^{-13.5} = 1.4 \times 10^{-6}$$

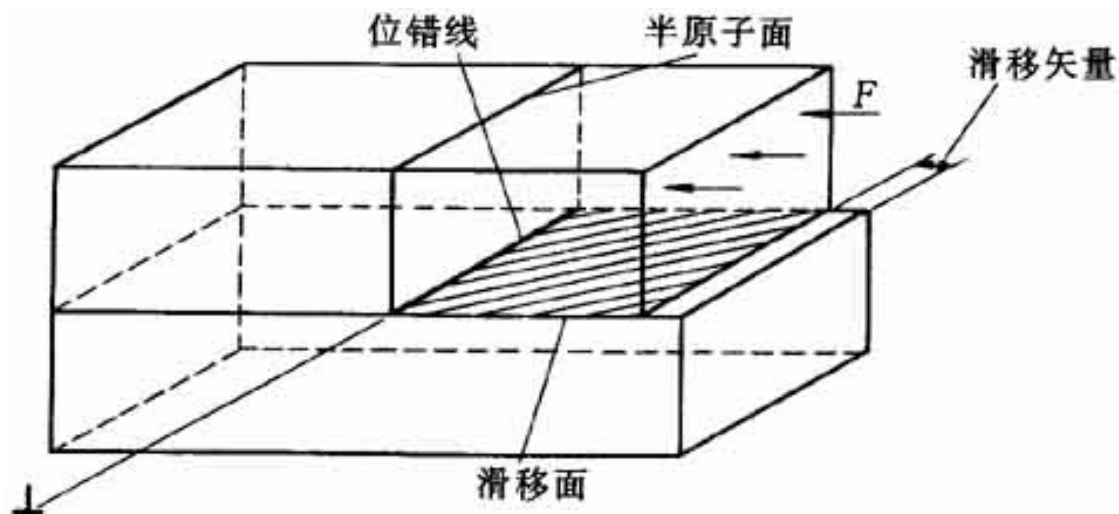
即在500℃时，每 10^6 个原子中才有1.4个空位。

三、位错

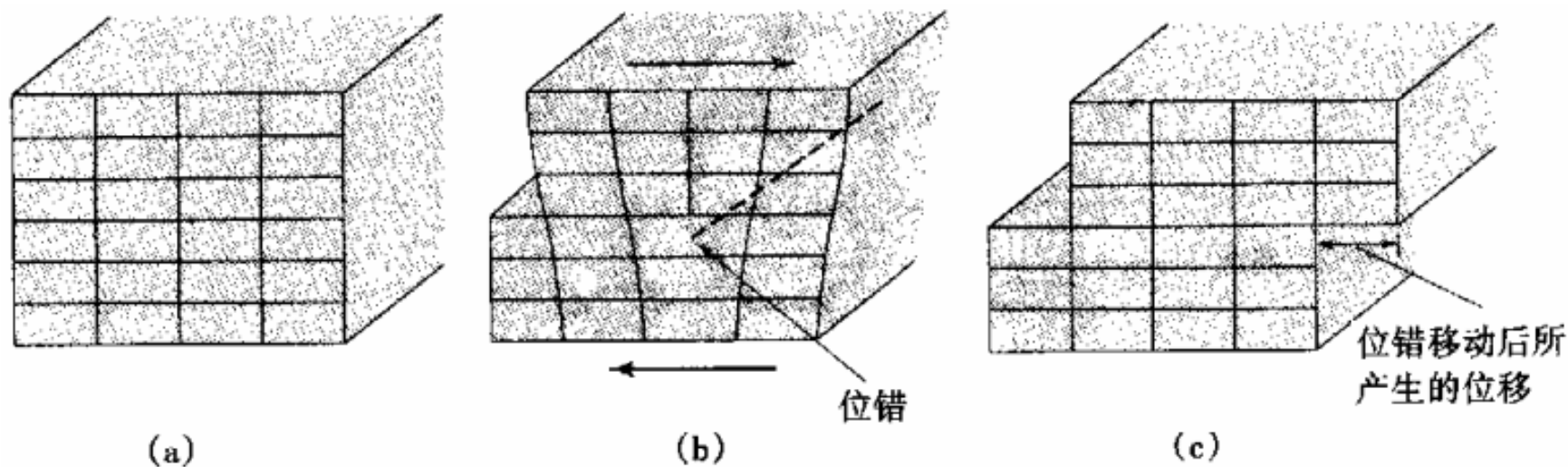
位错是指在一维方向上偏离理想晶体中的周期性、规则性排列所产生的缺陷，即缺陷尺寸在一维方向较长，另外二维方向上很短。

1. 位错的基本类型和特征

(1) 刃型位错

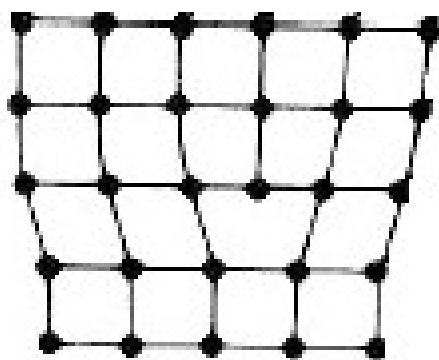


将晶体的上半部分向左移动一个原子间距，再按原子的结合方式连接起来。除分界线附近的一管形区域例外，其他部分基本都是完好的晶体。在分界线的上方将多出半个原子面，这就是**刃型位错**。

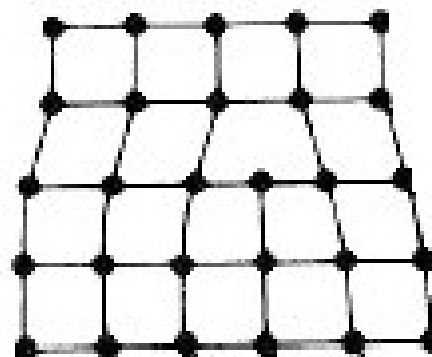


- (a) 位错刚要从左边引入 (b) 位错穿过晶体一半
(c) 位错从右边走出，同时上半部移动（位移）了一个原子单位
位错穿过晶体

几何特征：位错线与原子滑移方向相垂直；滑移面上部位错线周围原子受压应力作用，原子间距小于正常晶格间距；滑移面下部位错线周围原子受张应力作用，原子间距大于正常晶格间距。



(\perp)



(T)

分类：正刃位错，“ \perp ”；负刃位错，“T”。符号中水平线代表滑移面，垂直线代表半个原子面。

刃型位错特征:

①刃型位错有一额外半原子面。

多出的半原子面在上边的称为正刃型位错，记为“ \perp ”；

多出半原子面在下边的称为负刃型位错，记为“ $\text{—}\perp$ ”。

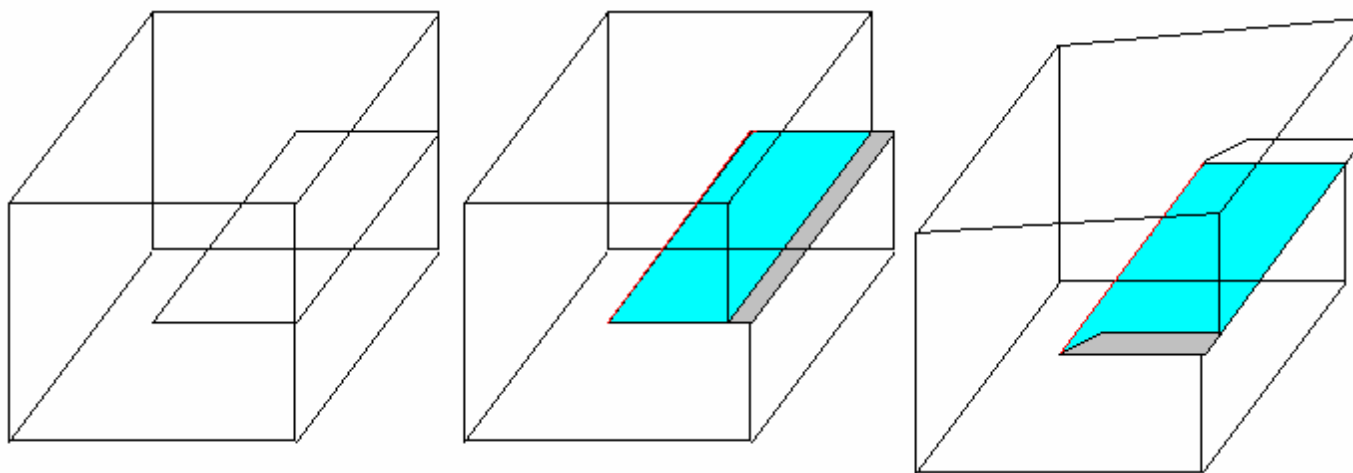
②刃型位错线可理解为晶体中已滑移区与未滑移区的边界线。

③位错线不一定是直线，可以是平面折线或曲线；刃型位错线必与滑移矢量垂直，

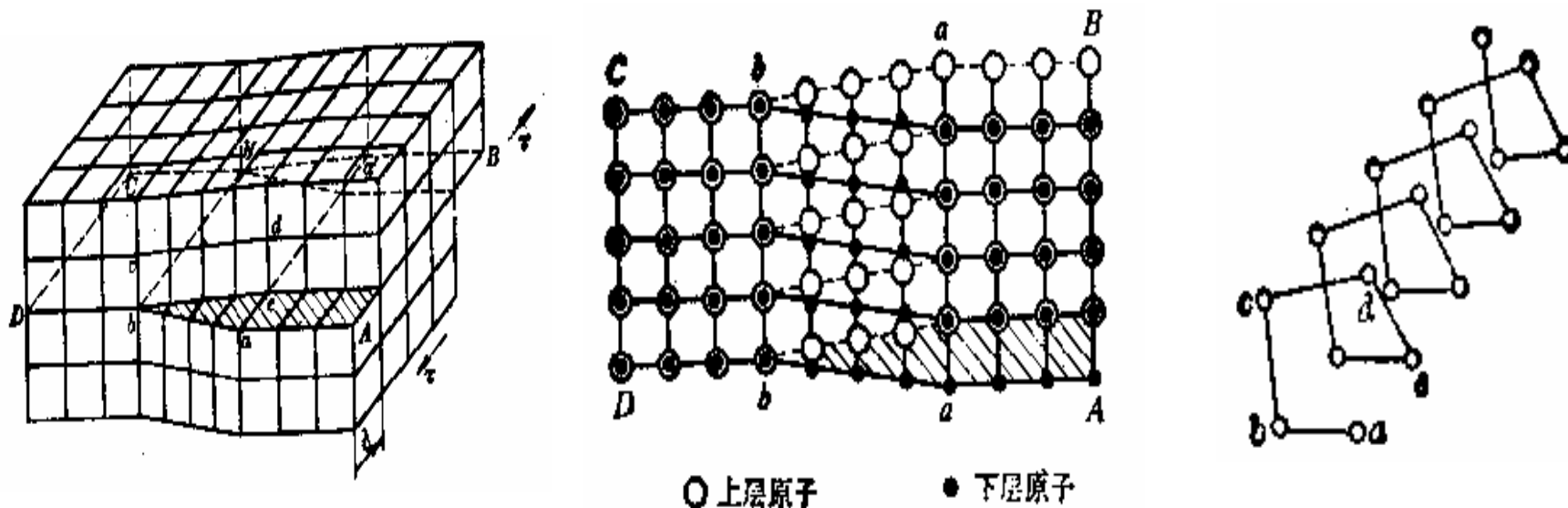
④滑移面是包含位错线和滑移矢量的唯一平面。

⑤位错周围的点阵发生弹性畸变，既有正应变，又有切应变

(2) 螺型位错



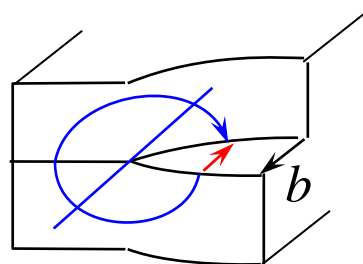
若将晶体的上半部分向后移动一个原子间距，再按原子的结合方式连接起来，同样除分界线附近的一管形区域例外，其他部分基本也都是完好的晶体。而在分界线的区域形成一螺旋面，这就是**螺型位错**。



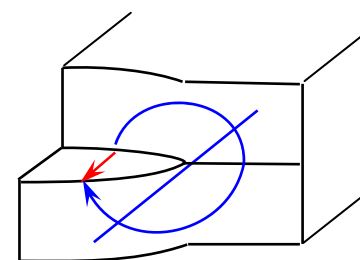
几何特征：位错线与原子滑移方向相平行；位错线周围原子的配置是螺旋状的。

分类：有左、右旋之分，它们之间符合左手、右手螺旋定则。

按旋进方向，螺位错分左旋与右旋两类。



右螺



左螺

螺型位错的特征

- (1) 螺型位错无额外半原子面，但是一些晶面变成了螺旋面，原子错排呈轴对称；
- (2) 位错线与滑移矢量平行，故一定是直线；
- (3) 包含螺位错线的面必然包含滑移矢量，故螺位错的滑移面不是唯一的；
- (4) 螺位错周围的点阵也发生了弹性畸变，但只有平行于位错线的切应变，无正应变（在垂直于位错线的平面投影上，看不出缺陷）；
- (5) 分左右螺旋。

位错线上任一点的滑移矢量相同，但两者方向夹角呈任意角度，图为混合位错的产生

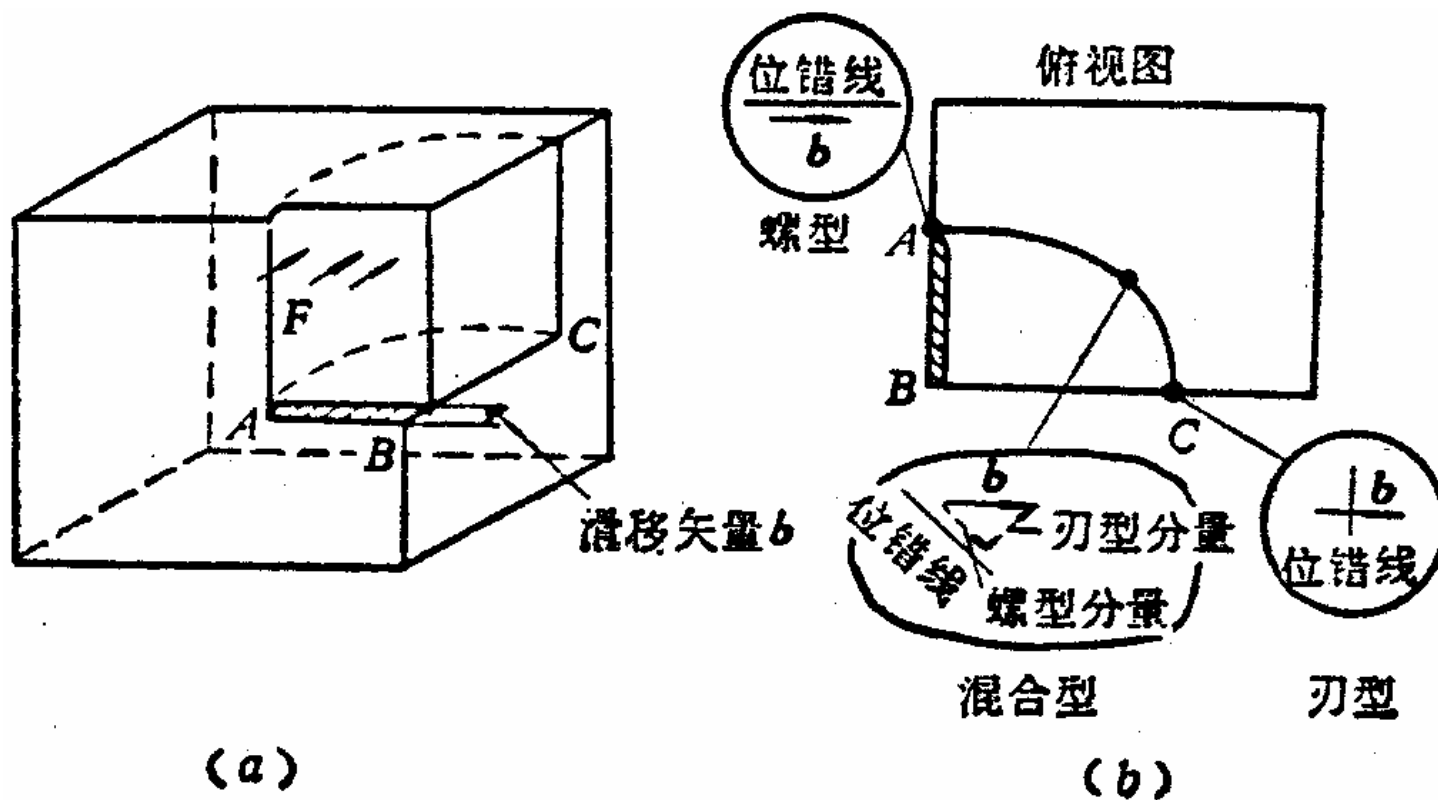
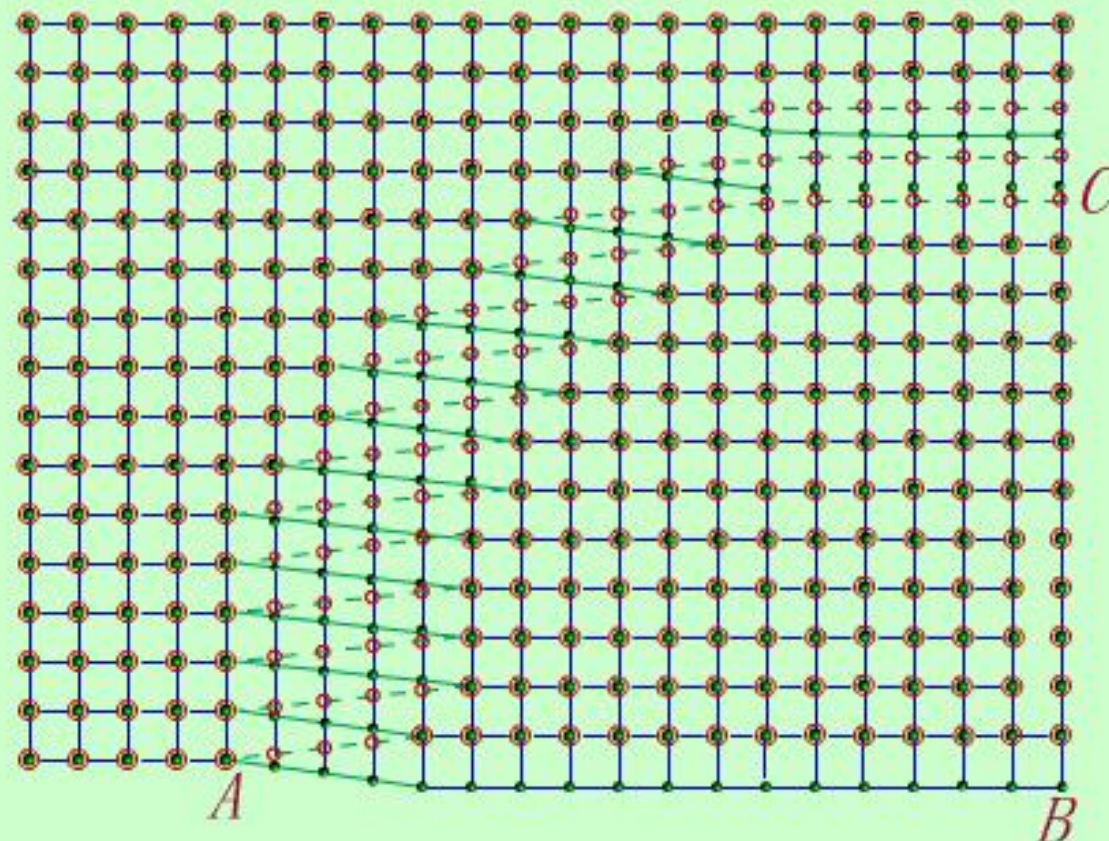


图 混合位错的产生



混合位错的原子组态



位错线的一些性质

- (1) 位错线是已滑移区和未滑移区的边界;
- (2) 位错及其畸变区是一条管道, 位错线附近的原子偏离了平衡位置。
- (3) 位错线具有连续性, 即位错线不能中断于晶体内部。只可在表面露头, 或终止于晶界和相界, 或其它位错相交, 或自行封闭成环。

真 題

1. 位错。（01年）（08年）名词解释和简述

答：围绕着一一条很长的线，在一定范围内的原子都发生了有规律的错动，都离开了他们原来的平衡位置的一种二维晶体缺陷。

2. 刃型位错和螺型位错模型（03年）名词解释

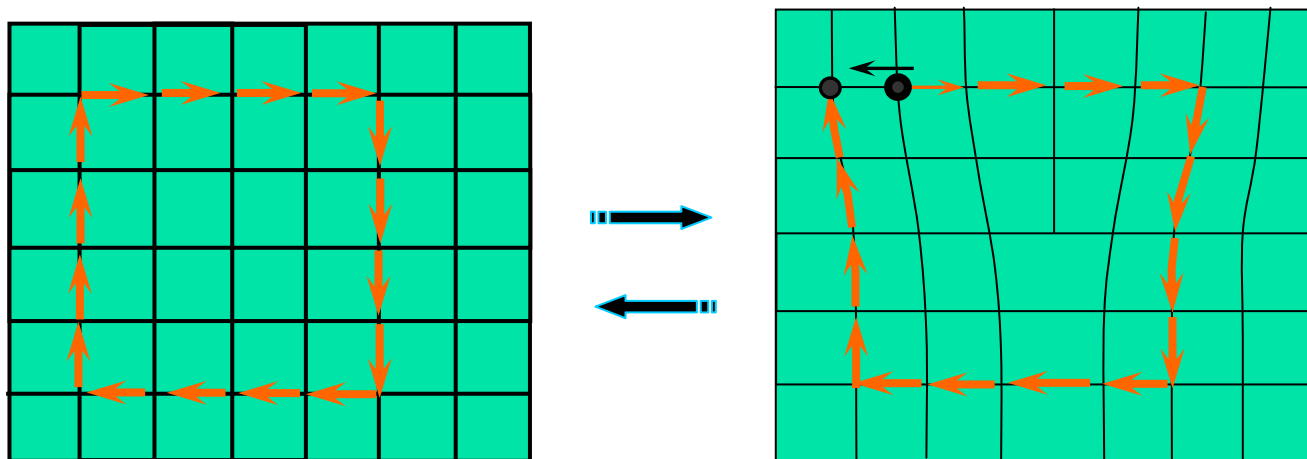
答：刃位错：只将晶体上半部分用刀劈开，然后插入半个晶面，再粘合起来，相当于刃端部分为中心线在其附近一个相当范围区域内，原子的位置发生了错动。

螺位错：只将晶体的前半部分用刀劈开，以刃端为界，将晶体左右部分沿向上和向下方向发生一个相对切变，再粘合起来。

2. 柏氏矢量

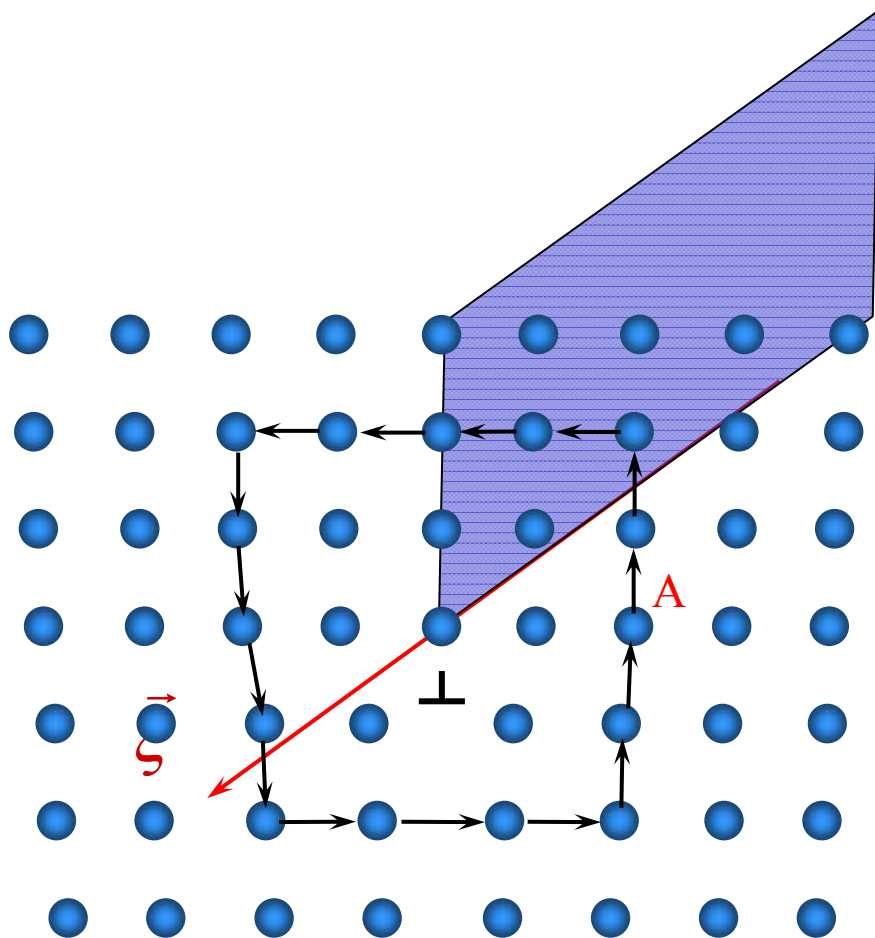
定义：表示位错区域原子畸变特征（晶向和大小）的物理量。

\vec{b} 反映了滑移区与未滑移区的边界，产生相对移动的大小和方向，即滑移矢量。

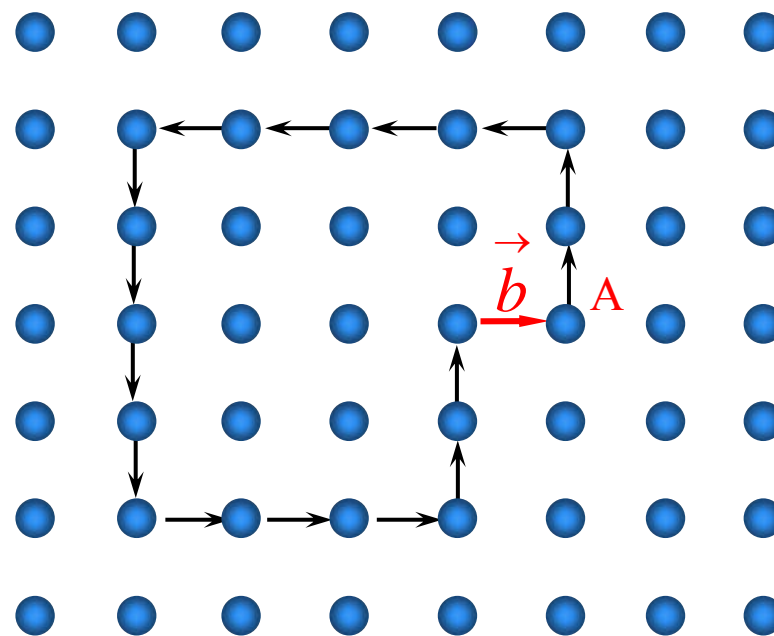


(1) 柏氏矢量的确定

- ① 选定位错线的正方向 $\vec{\xi}$ 。
- ② 在含有位错的晶体中，绕位错线沿好区作右旋的闭合回路。
- ③ 在完整晶体中作同样回路，它必然不能闭合。
- ④ 从终点连向起点得 \vec{b} 。



右旋闭合回路



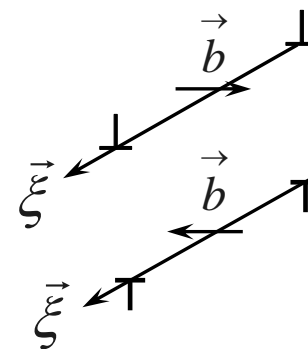
完整晶体中回路



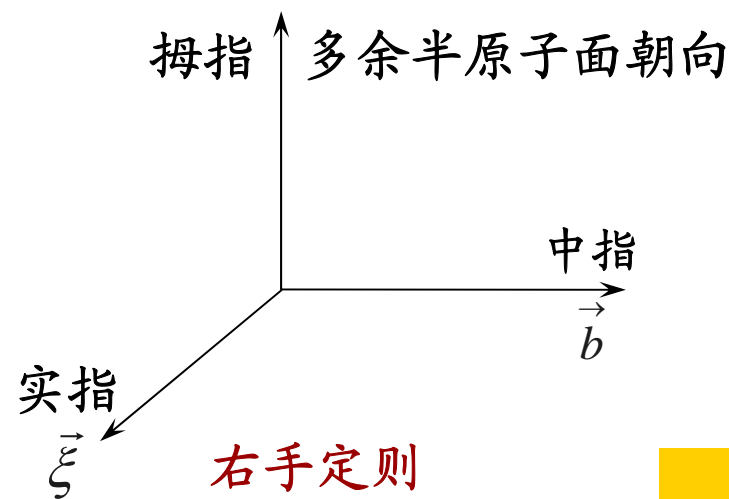
由此确定的柏氏矢量与柏氏回路的大小及形状无关，位错运动或形状发生变化时，其柏氏矢量不变。

对刃位错 $\vec{\xi} \times \vec{b} =$ 向上 为正刃

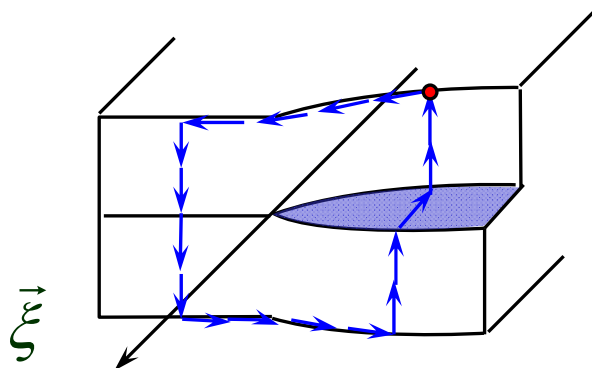
($\vec{\xi} \perp \vec{b}$) $\vec{\xi} \times \vec{b} =$ 向下 为负刃



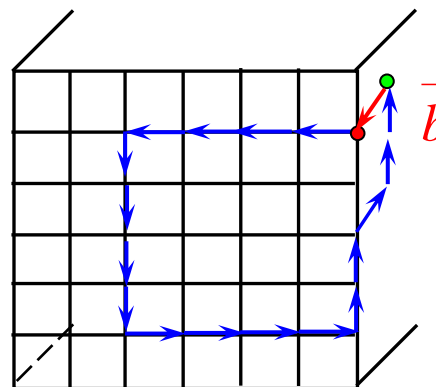
多余原子面、位错线和
柏氏矢量服从右手定则。



螺位错柏氏矢量的确定:



右旋闭合回路



完整晶体中回路

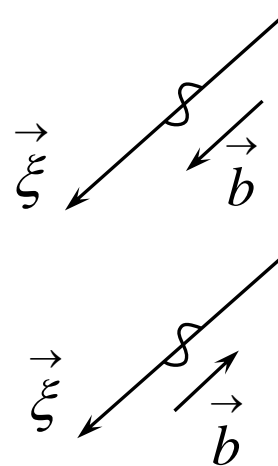
螺位错 $\vec{\xi} \parallel \vec{b}$

右螺

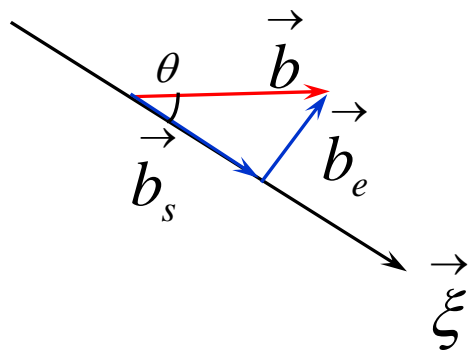
$$\vec{\xi} \cdot \vec{b} = b$$

左螺

$$\vec{\xi} \cdot \vec{b} = -b$$



混合型位错的柏氏矢量:



$$b_e = b \cdot \sin \theta$$

$$b_s = b \cdot \cos \theta$$

(2) 柏氏矢量的物理意义

- ① 柏氏矢量既表示位错的性质，又表示了位错区域点阵畸变总量的大小和方向。
- ② 柏氏矢量的另一个重要意义是指出了位错滑移后，晶体上、下部分产生相对位移的方向和大小，即滑移矢量。

(3) 柏氏矢量的特性

- ① 柏氏矢量的守恒性：与柏氏回路起点的选择无关，也与回路的具体途径无关。
- ② 柏氏矢量的唯一性：一根位错线具有唯一的柏氏矢量，其各处的柏氏矢量都相同，且当位错运动时，其柏氏矢量也不变。

(4) 柏氏矢量表示法

$$\vec{b} = \frac{a}{n} [uvw] = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

对于立方晶系: $a = b = c$

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

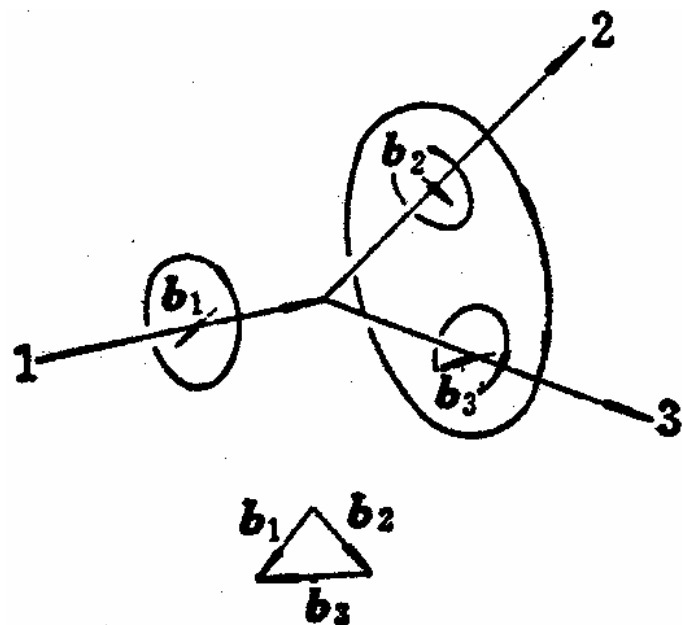
$$\text{例: } \vec{b}_2 = \frac{a}{2} [10\bar{1}] \quad |\vec{b}_2| = \frac{a}{2} \sqrt{1^2 + 0^2 + (-1)^2} = \frac{\sqrt{2}}{2} a$$

$$\vec{b}_5 = \frac{a}{2} [10\bar{1}], \quad \vec{b}_6 = \frac{a}{2} [011]$$

$$\vec{b}_5 + \vec{b}_6 = \frac{a}{2} [10\bar{1}] + \frac{a}{2} [011] = \frac{a}{2} [110]$$

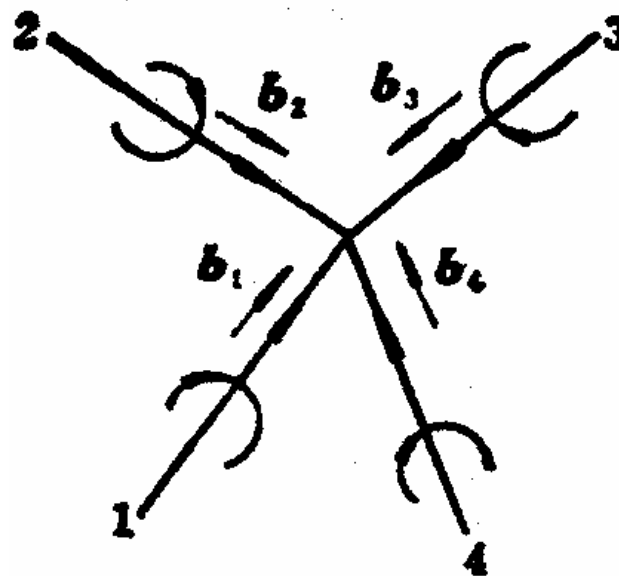
几根位错相遇于一点，其方向朝着节点的各位错线的柏氏矢量 \vec{b} 之和等于离开节点之和。如有几根位错线的方向均指向或离开节点，则这些位错线的柏氏矢量之和值为零。

$$\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$$



三位错线相遇于一点 $b_1 = b_2 + b_3$

$$\vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 + \vec{b}_4 = 0$$



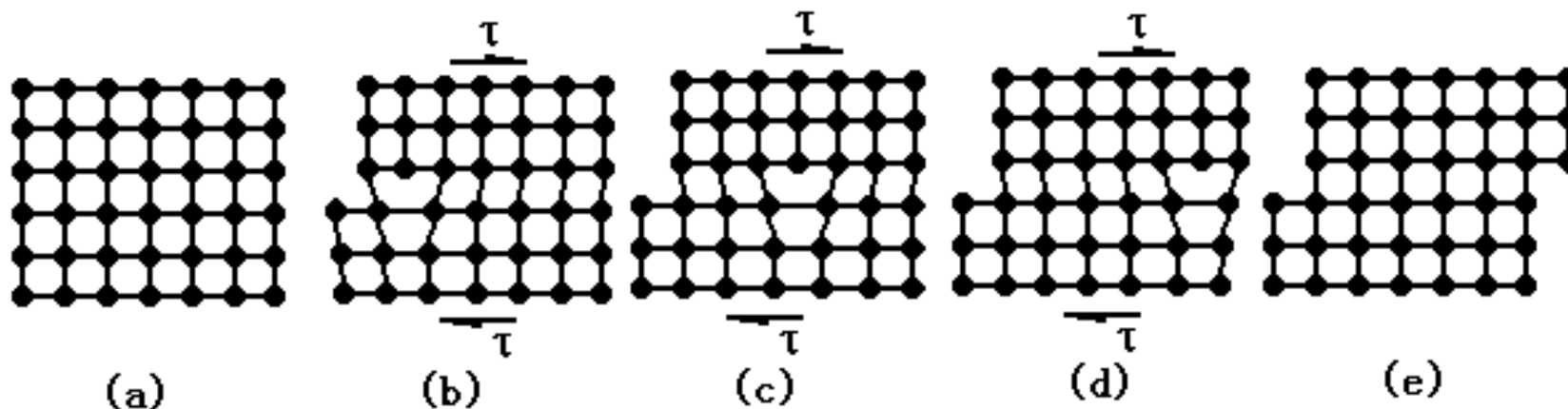
四位错线相遇于一点

3. 位错的运动

滑移面：过位错线并和柏氏矢量平行的平面（晶面）是该位错的滑移面。

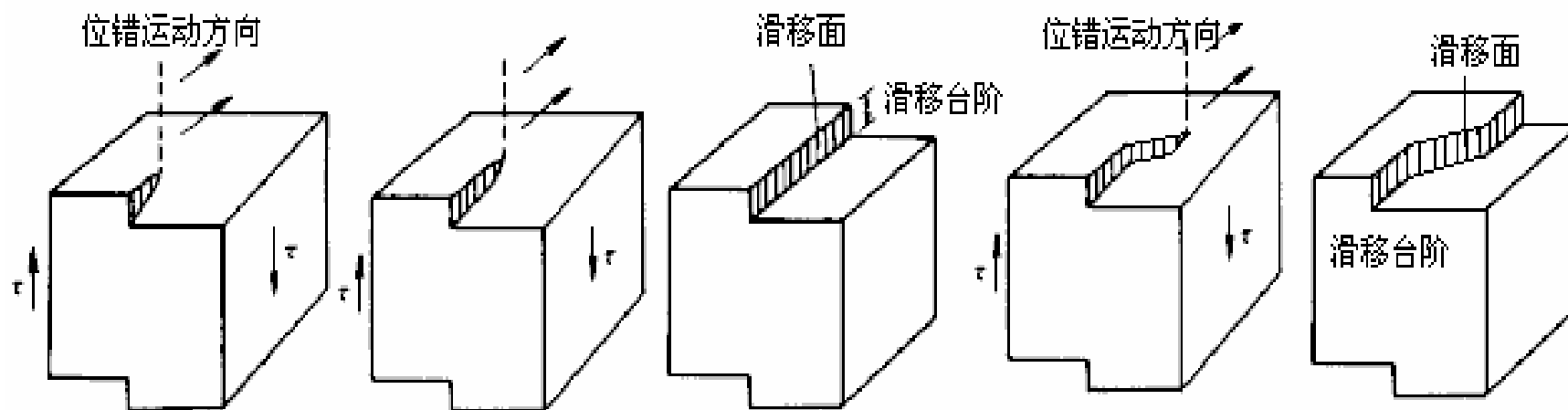
位错的滑移运动：位错在滑移面上的运动。

(1) 位错的滑移运动

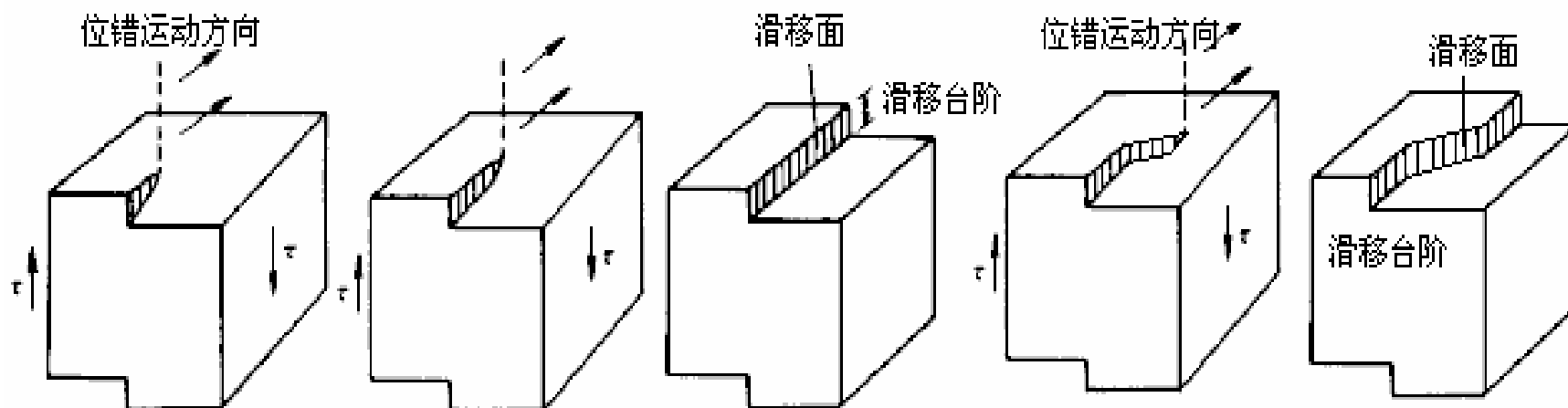


晶体中通过位错运动而造成滑移的示意图

刃型位错的滑移运动：在图示的晶体上施加一切应力，当应力足够大时，有使晶体上部有发生移动的趋势。假如晶体中有一刃型位错，显然位错在晶体中发生移动比整个晶体移动要容易。因此：①位错的运动在外加切应力的作用下发生；②位错移动的方向和位错线垂直；③运动位错扫过的区域晶体的两部分发生了柏氏矢量大小的相对运动(滑移)；④位错移出晶体表面将在晶体的表面上产生柏氏矢量大小的台阶。



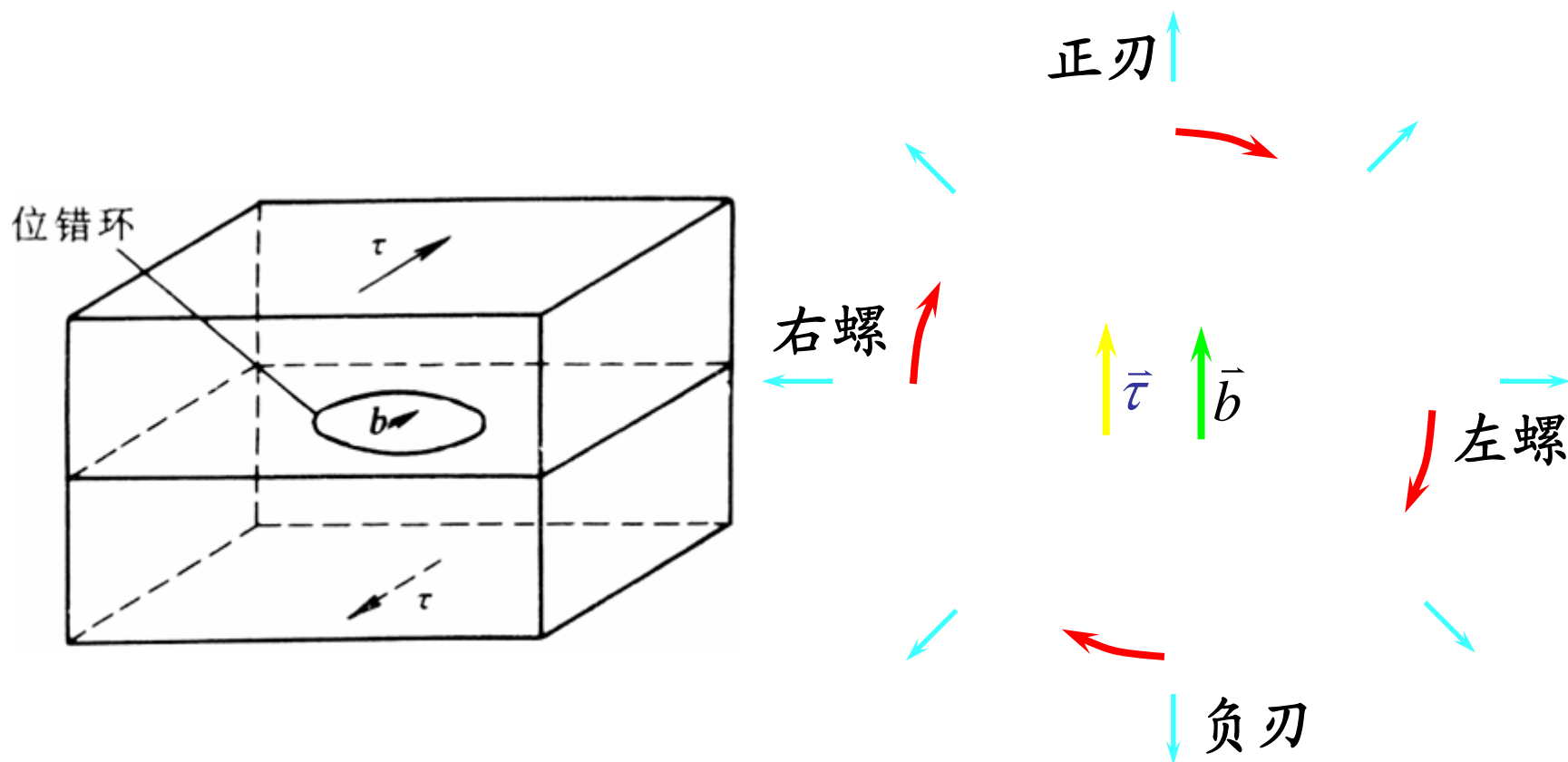
螺型位错的滑移：在图示的晶体上施加一切应力，当应力足够大时，有使晶体的左右部分发生上下移动的趋势。假如晶体中有一螺型位错，显然位错在晶体中向后发生移动，移动过的区间右边晶体向下移动一柏氏矢量。因此：①螺位错也是在外加切应力的作用下发生运动；②位错移动的方向总是和位错线垂直；③运动位错扫过的区域晶体的两部分发生了柏氏矢量大小的相对运动（滑移）；④位错移过部分在表面留下部分台阶，全部移出晶体的表面上产生柏氏矢量大小的完整台阶。这四点同刃型位错。



刃、螺型位错滑移的比较:

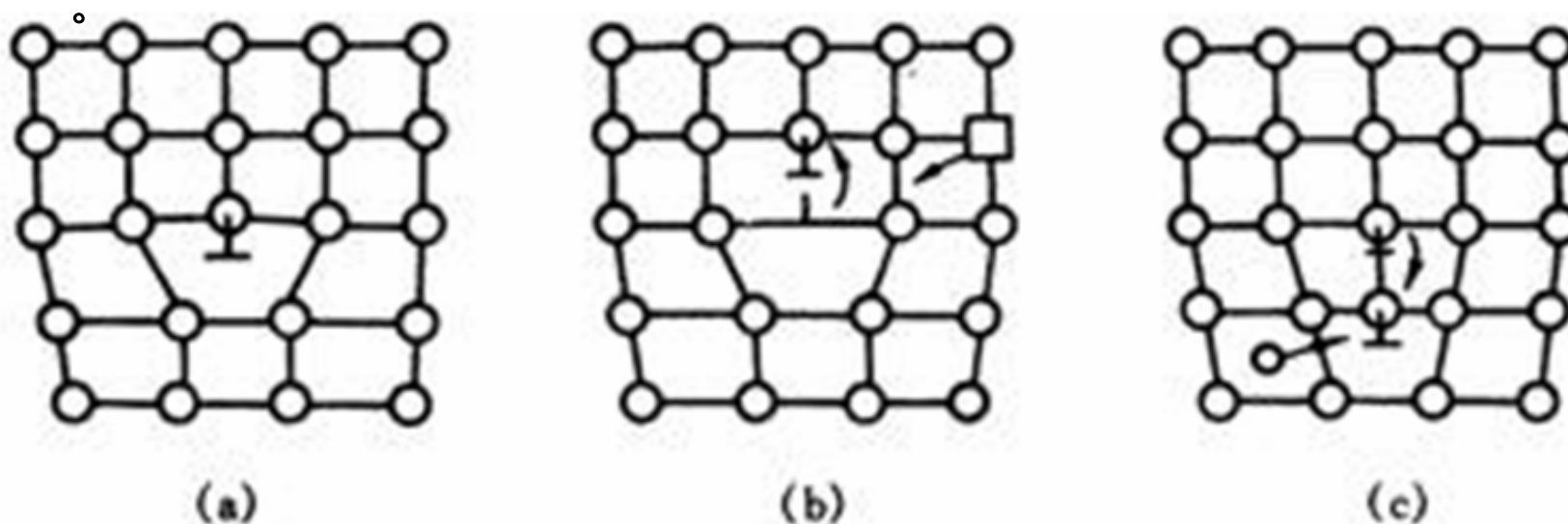
- ① 因为位错线和柏氏矢量平行，所以螺型位错可以有多个滑移面，螺型位错无论在那个方向移动都是滑移。
- ② 晶体两部分的相对移动量决定于柏氏矢量的大小和方向，与位错线的移动方向无关。

分析一位错环的运动



(2) 位错的攀移

只有刃型位错才能发生**攀移**运动，即位错在垂直于滑移面的方向上运动。其实质是构成刃型位错的多余半原子面的扩大或缩小，它是通过物质迁移即原子或空位的扩散来实现的。通常把半原子面向上运动称为**正攀移**，向下运动称为**负攀移**，如图所示。

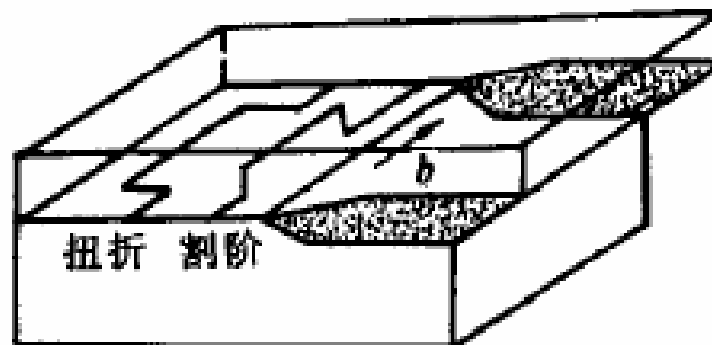
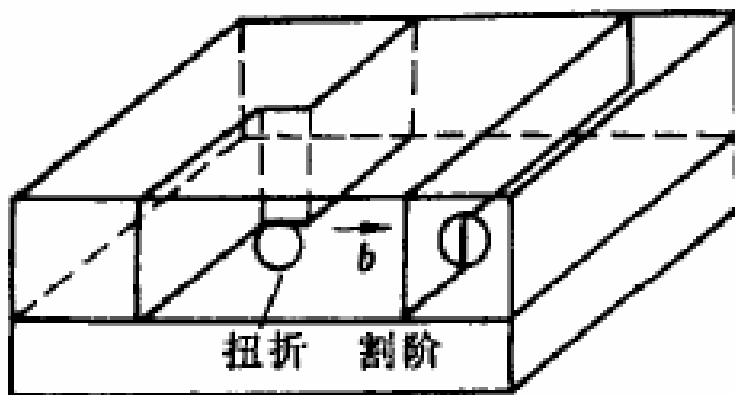


- 晶体体积变化;
- 滑移时，体积不变，保守运动;
- 攀移时，体积变化，非保守运动。

4. 位错运动的交割

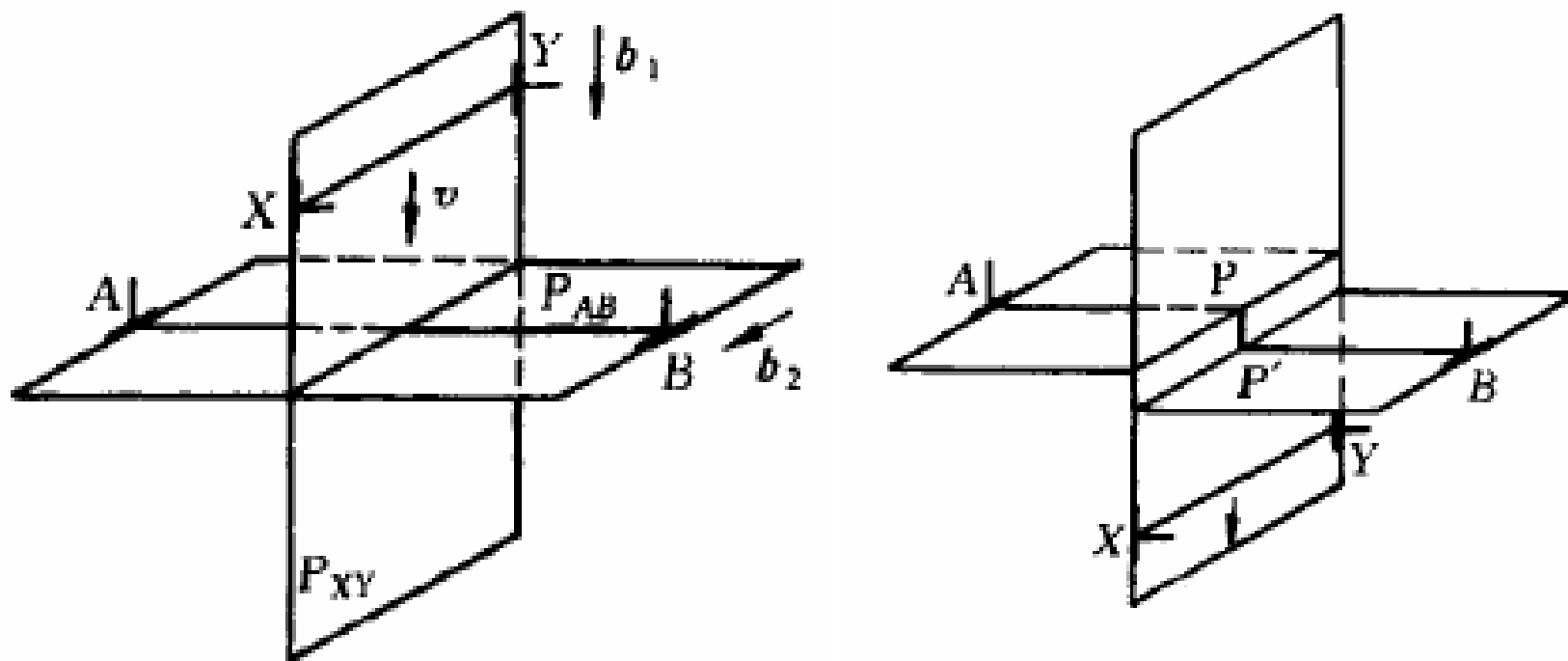
(1) 割阶和扭折

在位错滑动过程中，其位错线往往很难同时实现全长的运动。因而一根运动的位错线，特别是受到阻碍的情况下，有可能通过其中一部分线段首先进行滑移。若由此形成的曲折线段就在位错的滑移面上时，称为**扭折**；若该曲折线段垂直于位错的滑移面时，则称为**割阶**。扭折和割阶也可由位错之间交割形成。

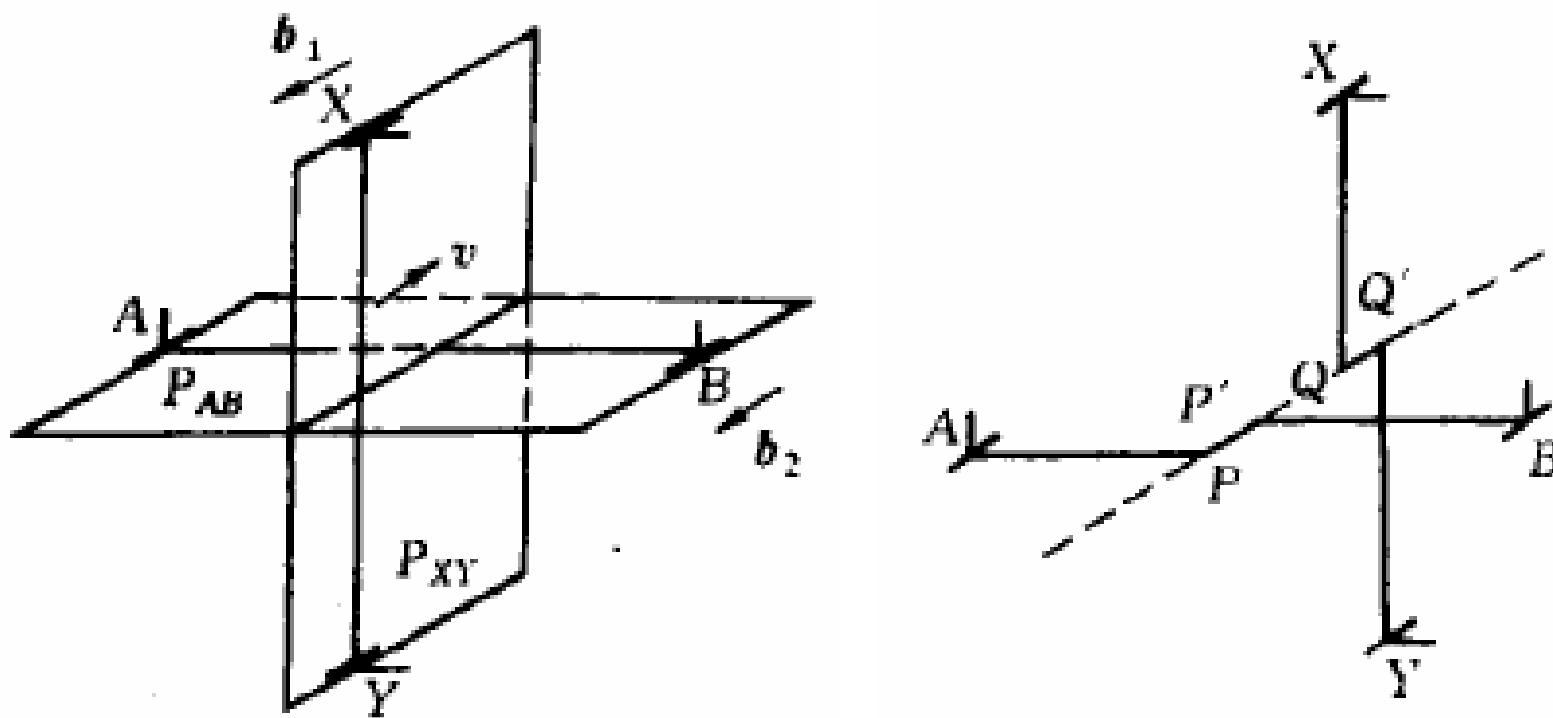


(2) 几种典型的位错交割

① 两个柏氏矢量互相垂直的刃型位错交割

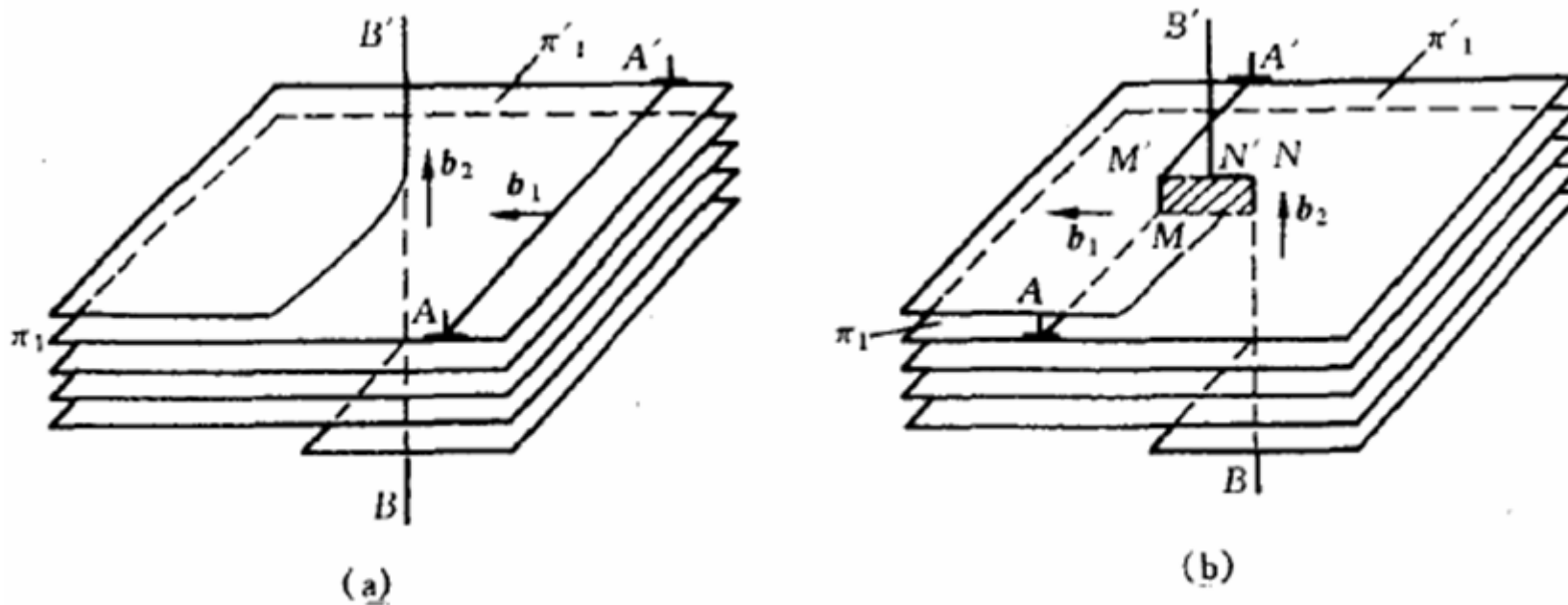


② 两个柏氏矢量互相平行的刃型位错交割





③两个柏氏矢量垂直的刃位错和螺位错的交割。



刃型位错和螺型位错的交割

(a) 交割前 (b) 交割后

小结:

(1) 运动位错交割后, 每根位错线上都可能产生一扭折或割阶, 其大小和方向取决于另一位错的柏氏矢量, 但具有原位错的柏氏矢量;

(2) 所有的割阶都是刃型位错, 但扭折可以使刃型的也可以是螺型的;

(3) 扭折与原位错线在同一滑移面上, 可随主位错线一道运动几乎不产生阻力, 且在张力作用下易于消失;

(4) 割阶与原位错线不在同一滑移面上, 故除非割阶产生攀移, 否则割阶就不能跟随主位错线一道运动, 称为位错运动的障碍, 通常称此为割阶硬化。

5. 位错的生成和增殖

(1) 位错的密度

位错密度：单位体积中的位错线的总长度。

$$r = L/V \quad (1/\text{cm}^2) \quad (1)$$

$$r = nl/lA = n/A \quad (2)$$

(实际计算：面积A中所见的位错线数目)

$$(2) < (1)$$

金属晶体中的位错密度：

超纯金属单晶体： $< 10^3/\text{cm}^2$

充分退火的金属多晶体： $10^6 \sim 10^8/\text{cm}^2$

剧烈冷变形的金属： $10^{10} \sim 10^{12}/\text{cm}^2$

(2) 位错的生成

- ① 晶体凝固过程中产生的位错：
 - i. 凝固过程杂质原子不均匀分布 → 成分不同 → 晶块点阵常数不同 → 位错过渡
 - ii. 温度浓度梯度、振动 → 生长晶体偏转、弯曲 → 位相差 → 位错过渡
 - iii. 相邻晶粒碰撞、体积变化、热应力 → 台阶或变形 → 产生位错
- ② 快速凝固 → 过饱和空位 → 聚集 → 位错。
- ③ 热应力和组织应力 → 界面和微裂纹处应力集中 → 局部滑移 → 位错。

(3) 位错的增殖

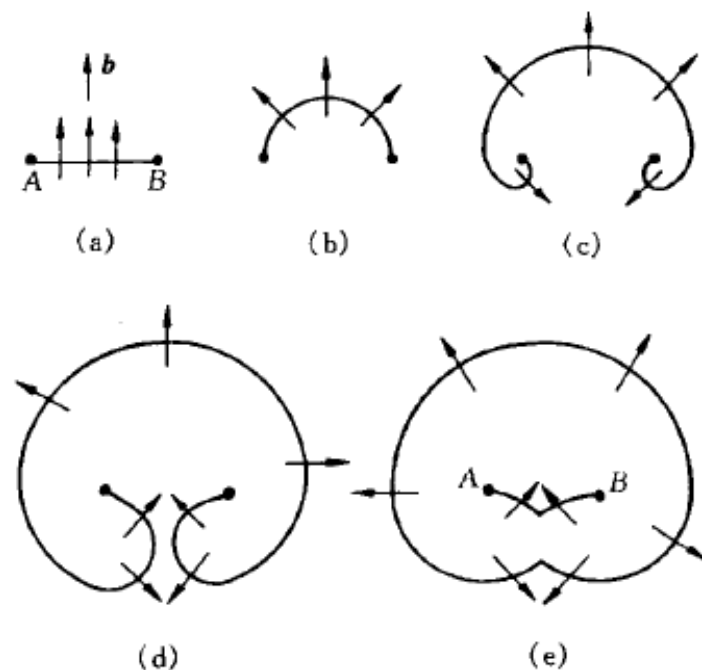
位错滑移到表面 → 宏观变形 (减少?)

事实上：密度增加，可达4~5个数量级-位错，因此，必有增殖！

①主要增殖机制：Frank-Read 位错源

刃位错AB的两端A和B被位错用结点钉扎住 m, n 两处同属纯螺型位错，但位错性质恰好相反，两者相遇时，彼此便会抵消，这使原来整根位错线断开成两部分，外面为封闭的位错环，里面为一段连接A和B的位错线，在线张力作用下变直恢复到原始状态。

在外力的继续作用下，它将重复上述过程，每重复一次就产生一个位错环，从而造成位错的增殖，并使晶体产生可观的滑移量。



F-R源动作过程

F-R位错增殖机制已为实验所证实：Si, Al-Cu...晶体中观察到

其它增殖机制：①双交滑移增殖；②攀移增殖

F-R源开动的最小应力

F-R源开动条件:

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。由位错线张力与外力平衡关系：

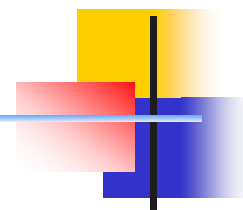
$$\tau b = \frac{T}{r} = \frac{kGb^2}{r} \quad \text{得:} \quad \tau = \frac{kGb}{r}$$

即，弯曲半径 r 与外力 τ 成反比。

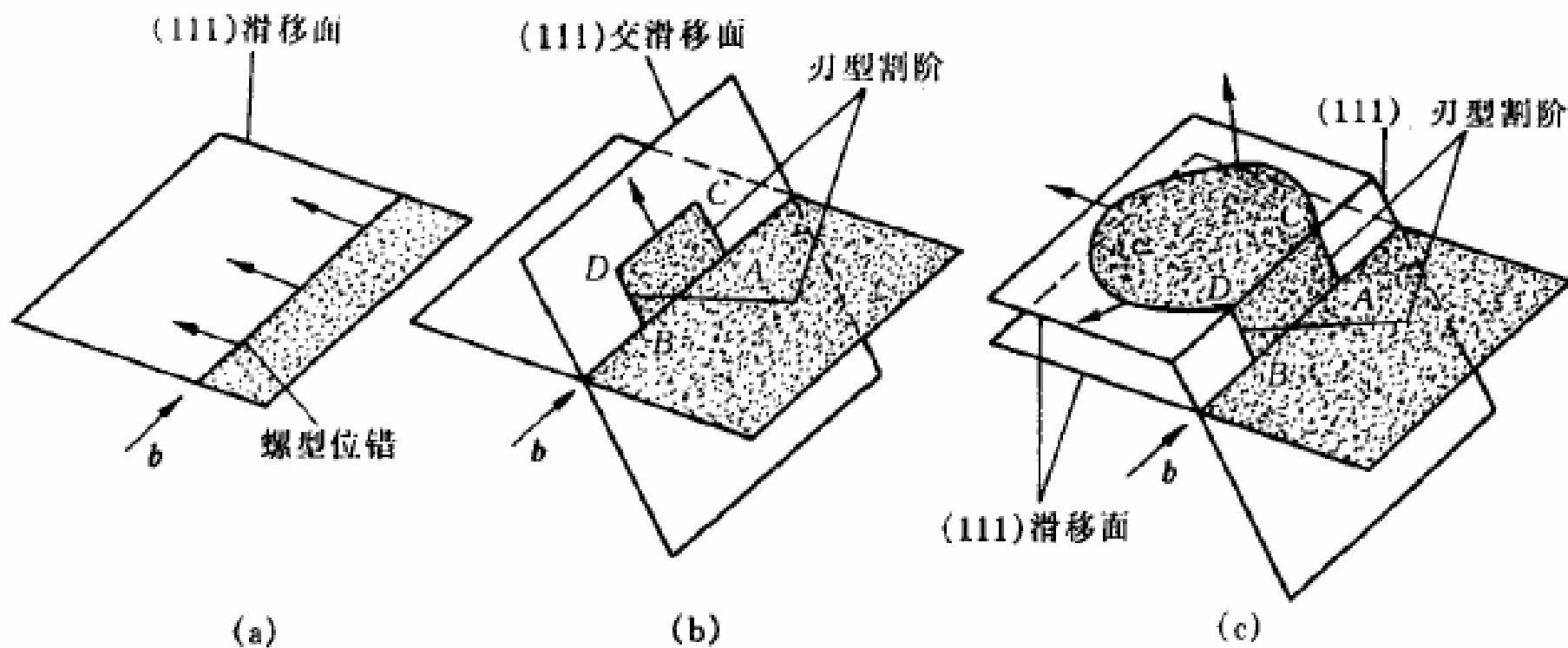
当位错弯曲成半圆时， r 最小， τ 最大。

近似地取 $k = 0.5$ 时： $\tau = \frac{Gb}{2r}$

若两固定点间距离为 l ，则半圆时 $l \approx 2r$ 得： $\tau = \frac{Gb}{l}$



②双交滑移机制



真 題

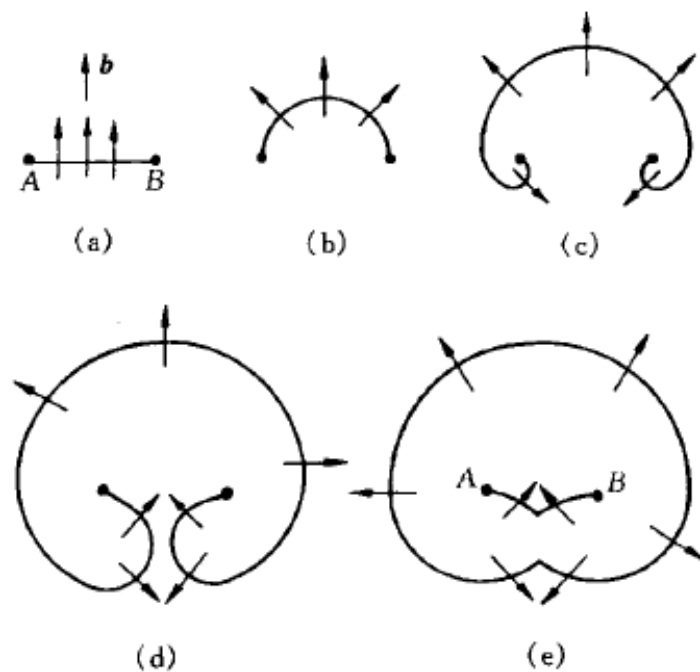
1. 在形变过程中，位错增殖的机理是什么？（99年）
2. 画图并简述形变过程中位错增殖的机制。（02年）

答：刃位错AB的两端A和B被位错用结点钉扎住 m, n 两处同属纯螺型位错，但位错性质恰好相反，两者相遇时，彼此便会抵消，这使原来整根位错线断开成两部分，外面为封闭的位错环，里面为一段连接A和B的位错线，在线张力作用下变直恢复到原始状态。

在外力的继续作用下，它将重复上述过程，每重复一次就产生一个位错环，从而造成位错的增殖，并使晶体产生可观的滑移量。

F-R位错增殖机制已为实验所证实：Si, Al-Cu...晶体中观察到

其它增殖机制：①双交滑移增殖；②攀移增殖

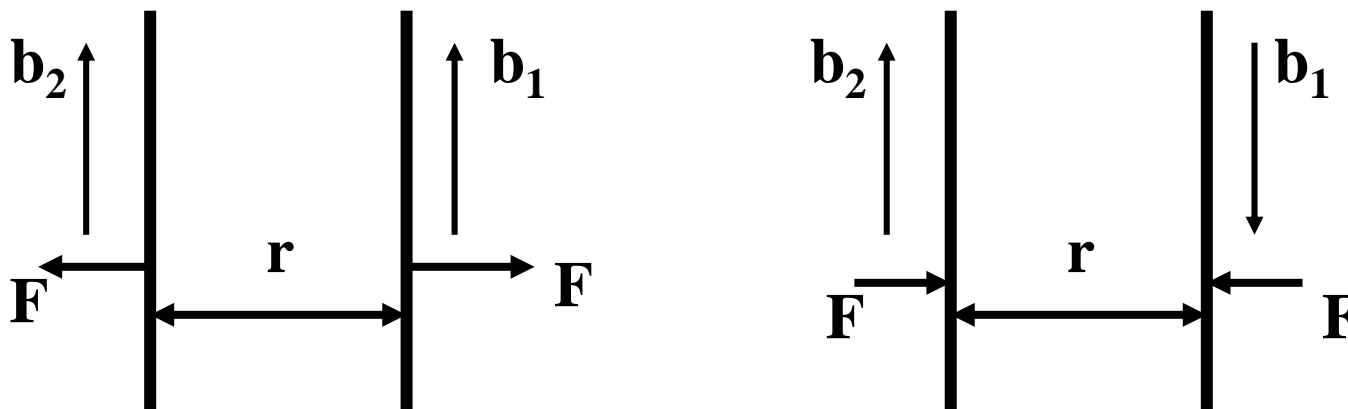


6. 位错间的交互作用力

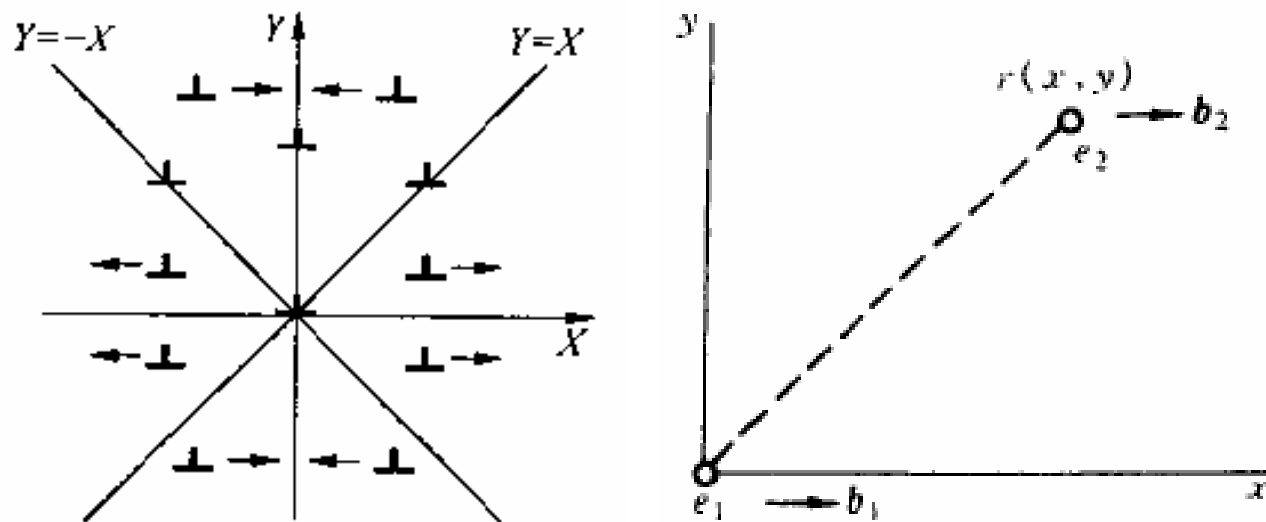
(1) 两平行螺位错的交互作用

在距离 b_1 为 r 处所产生的切应力为: $\tau = \frac{Gb_1}{2\pi r}$

在切应力作用下, b_2 受到的力为: $f = \tau b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi r}$



(2) 两平行刃位错的交互作用



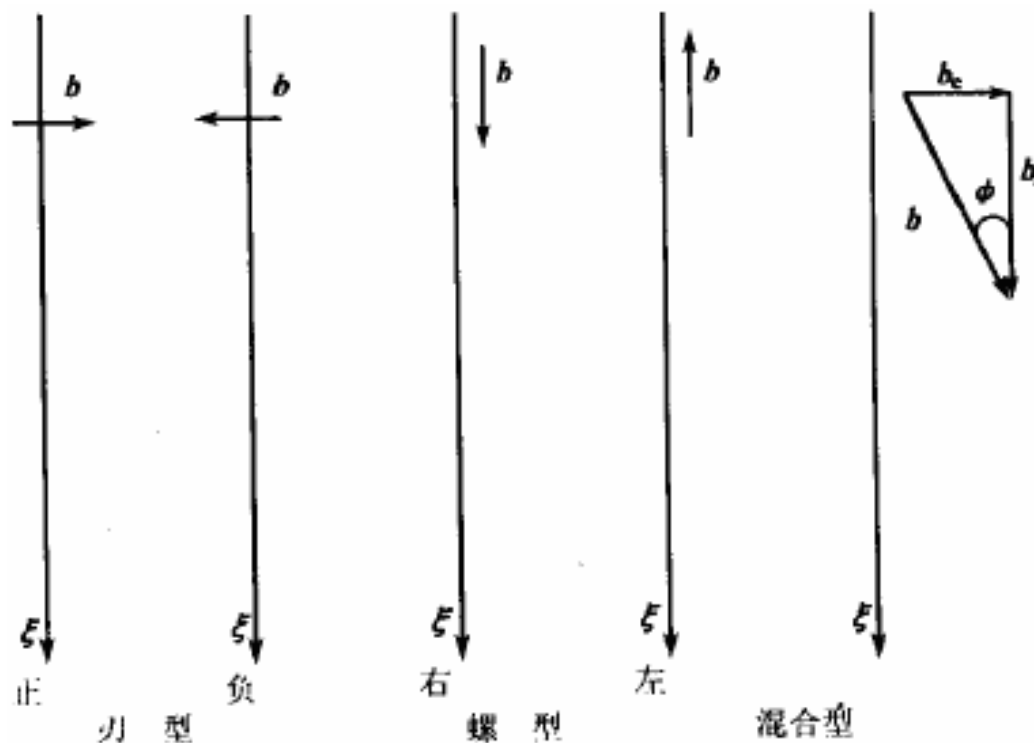
滑移力
$$F_x = \tau_{yx} \cdot b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

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

根据以上两式可推断出II在不同位置所受到的攀移力和滑移力。

真题

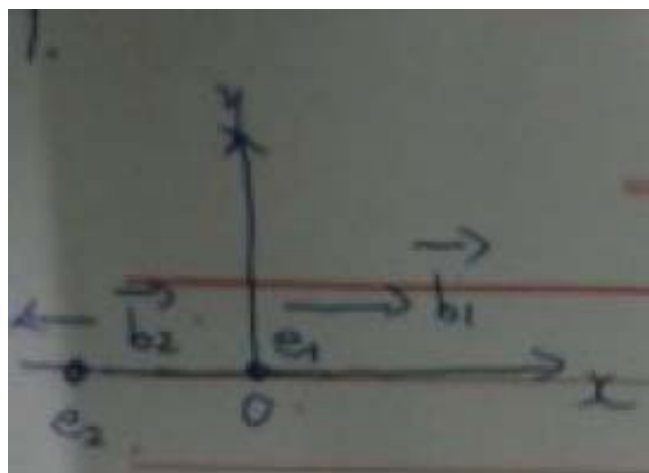
如图是在同一滑移面上三组相互平行的相距为 d 的直位错，它们的柏氏矢量 \vec{b} 的模相等，箭头指向是柏氏矢量 \vec{b} 和位错线 t 的方向。问每组的位错之间是相互吸引还是相互排斥。为什么。（13年）





解:

1.

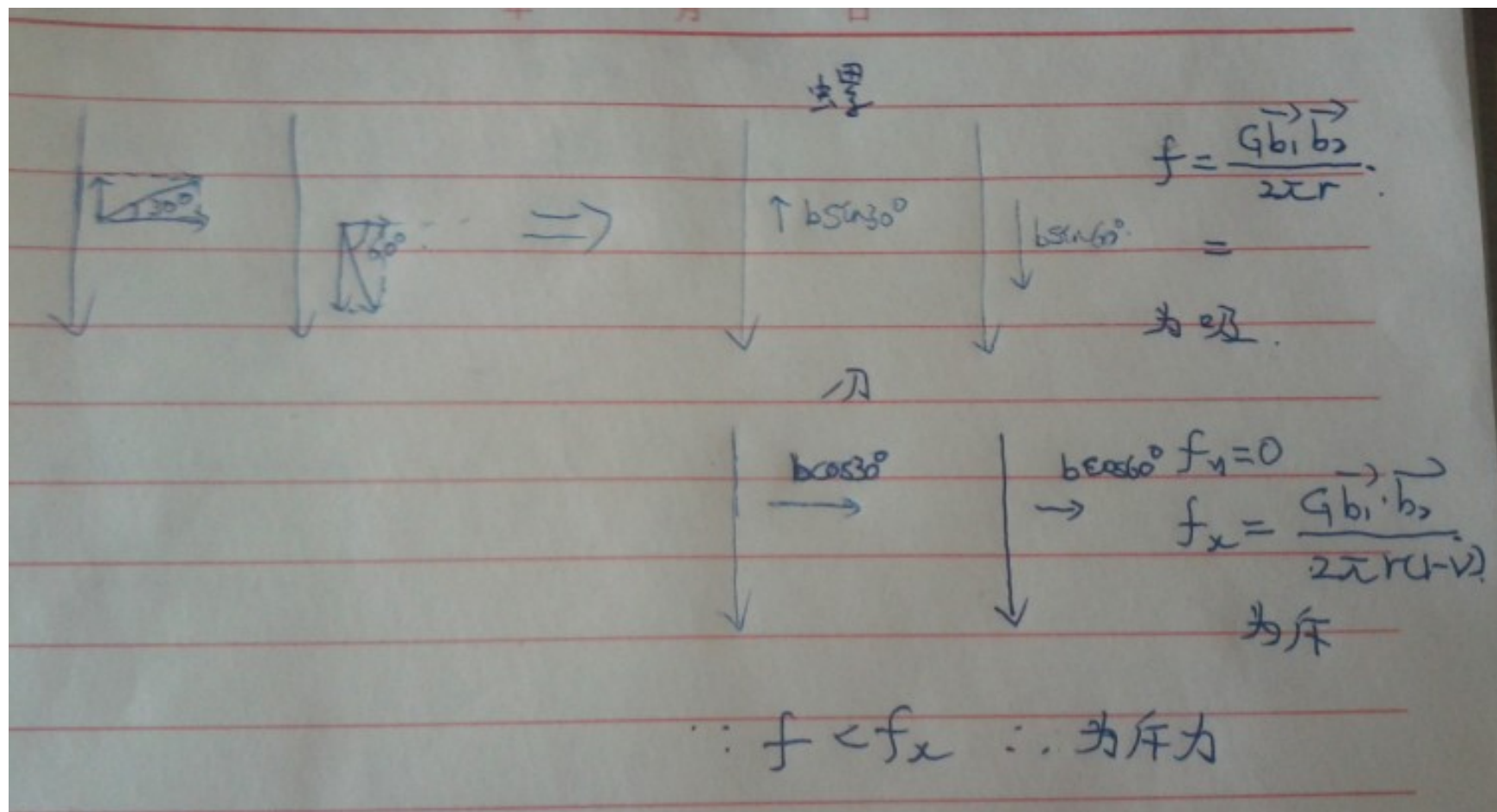


① 两位错
② 异号
③ $y=0$
④ $x < 0$

由此可判断, 两位错相互吸引

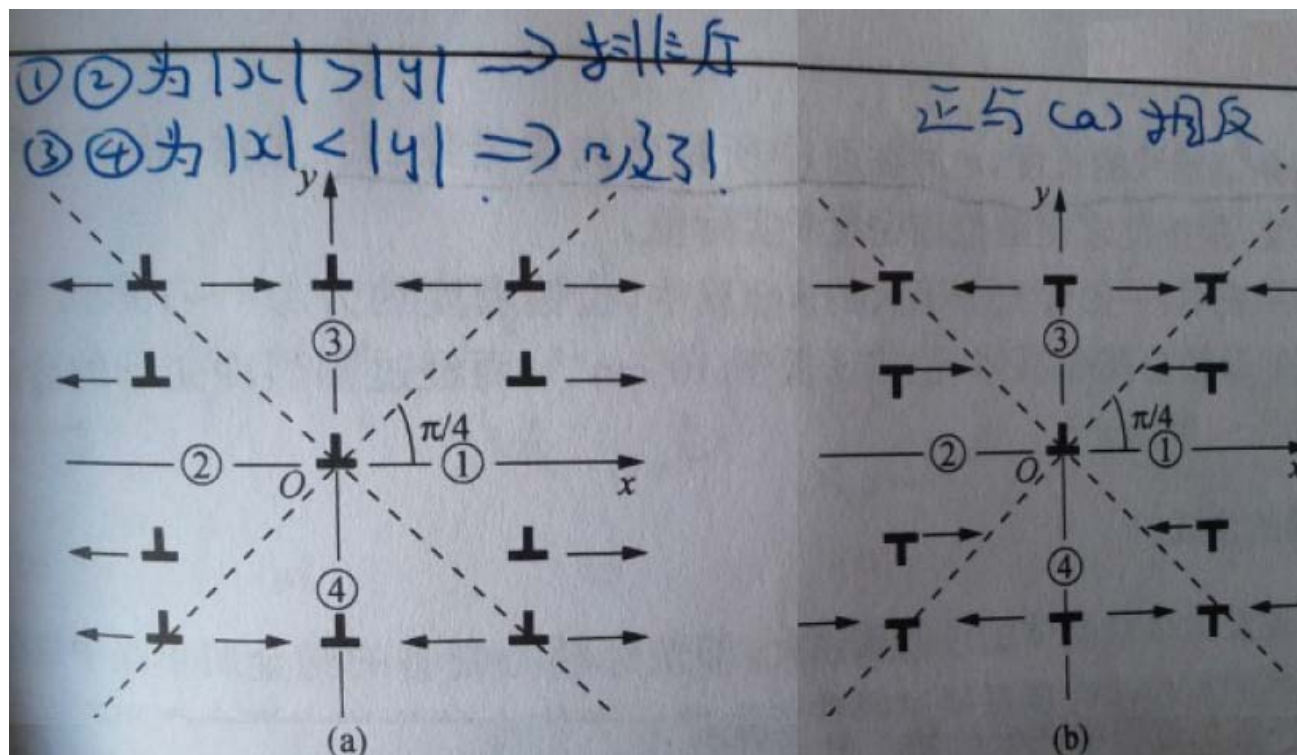
2. $f = \frac{G \vec{b}_1 \vec{b}_2}{2\pi r}$

\vec{b}_1 与 \vec{b}_2 反向, 则 f 为负, 即 S 位向相反, 因此为相互吸引。



总结：（1）对于螺位错的判断，以公式来，柏氏矢量同向的，相互排斥，柏氏矢量反向的，相互吸引。

（2）对于刃位错的判断，比较复杂。按照以下的步骤来判断：判断异号位错还是同号位错；若为同号，则用(a)图，否则，用(b)图。



（3）不但要会判断力的方向，对于力的大小也要会判断，有可能考到。

7. 实际晶体中的位错

——由简单立方，深化到面心立方、体心立方和密排六方晶体中的位错。

(1) 全位错与不全位错

实际晶体中的位错类型

简单立方: $b \equiv$ 点阵矢量 —— 只有全位错

实际晶体:

$b >$	{	$b = \text{点阵矢量整数倍}$	—— 全位错
$b =$		其中 $b = \text{点阵矢量}$	—— 单位位错
$b <$		$b \neq \text{点阵矢量整数倍}$	—— 不全位错
		其中 $b < \text{点阵矢量}$	—— 部分位错

晶体结构	位错类型	柏氏矢量
bcc	全位错	$\frac{a}{2} \langle 111 \rangle$ $a \langle 100 \rangle$
	不全位错	$\frac{a}{3} \langle 111 \rangle$, $\frac{a}{6} \langle 111 \rangle$, $\frac{a}{8} \langle 110 \rangle$, $\frac{a}{3} \langle 112 \rangle$
fcc	全位错	$\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$
	不全位错	$\frac{a}{6} \langle 112 \rangle$, $\frac{a}{3} \langle 111 \rangle$, $\frac{a}{3} \langle 110 \rangle$,
hcp	全位错	$\frac{a}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, $\frac{a}{3} \langle 11\bar{2}3 \rangle$, $c \langle 0001 \rangle$
	不全位错	$\frac{c}{2} \langle 0001 \rangle$, $\frac{a}{6} \langle 20\bar{2}3 \rangle$, $\frac{a}{3} \langle 10\bar{1}0 \rangle$

8. 位错反应——位错的合并与分解

几何条件： 反应前后柏氏矢量和相等（方向、大小）

能量条件： 反应后能量降低

判断方法：

几何条件判断方法： 求反应前后各个位错柏氏矢量的矢量和

能量条件判断方法： 由 $w = \alpha G b^2$ 知 $w \propto b^2$

求反应前后各位错 $|b|^2$ 的和

真 題

bcc 中，当 $\bar{b}_1 = \frac{a}{2}[\bar{1}11]$ 与 $\bar{b}_2 = \frac{a}{2}[11\bar{1}]$ 相遇时，能否合并为 $\bar{b}_3 = a[010]$

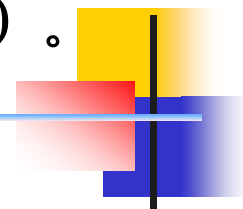
几何条件：

$$\begin{aligned}
 \bar{b}_1 + \bar{b}_2 &= \frac{a}{2}[\bar{1}11] + \frac{a}{2}[11\bar{1}] \\
 &= \left(-\frac{1}{2}\bar{a} + \frac{1}{2}\bar{b} + \frac{1}{2}\bar{c}\right) + \left(\frac{1}{2}\bar{a} + \frac{1}{2}\bar{b} - \frac{1}{2}\bar{c}\right) \\
 &= 0 + \bar{b} + 0 = a[010] \\
 \bar{b}_3 &= a[010] \\
 \text{即： } \bar{b}_1 + \bar{b}_2 &= \bar{b}_3
 \end{aligned}$$

能量条件：

$$\begin{aligned}
 |\bar{b}_1|^2 &= \frac{a^2}{4}(-1^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{3}{4}a^2 \\
 |\bar{b}_2|^2 &= |\bar{b}_1|^2 = \frac{3}{4}a^2 \\
 |\bar{b}_3|^2 &= a^2(0^2 + 1^2 + 0^2) = a^2 \\
 \text{即： } |\bar{b}_1|^2 + |\bar{b}_2|^2 &> |\bar{b}_3|^2
 \end{aligned}$$

满足几何条件和能量条件，反应可以发生（自发进行）。



fcc 中，有 $\bar{b}_1 = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$ 、 $\bar{b}_2 = \frac{a}{6}[\bar{2}11]$ 、 $\bar{b}_3 = \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ ，问能否 $\bar{b}_1 \rightarrow \bar{b}_2 + \bar{b}_3$

几何条件：

$$\bar{b}_2 + \bar{b}_3 = \frac{a}{6}[\bar{2}11] + \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$$

$$= \frac{a}{6}[\bar{3}03] = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$$

$$\bar{b}_1 = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$$

即： $\bar{b}_1 + \bar{b}_2 = \bar{b}_3$

能量条件：

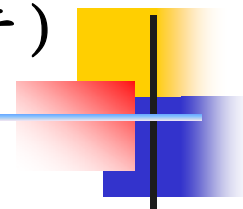
$$|\bar{b}_1|^2 = \frac{a^2}{4}(-1^2 + 0^2 + 1^2) = \frac{1}{2}a^2$$

$$|\bar{b}_2|^2 = \frac{a^2}{36}(-2^2 - +1^2 + 1^2) = \frac{a^2}{6}$$

$$|\bar{b}_2|^2 = |\bar{b}_3|^2 = \frac{a^2}{6}$$

即： $|\bar{b}_1|^2 > |\bar{b}_2|^2 + |\bar{b}_3|^2$

满足几何条件和能量条件，反应可以发生（自发进行）



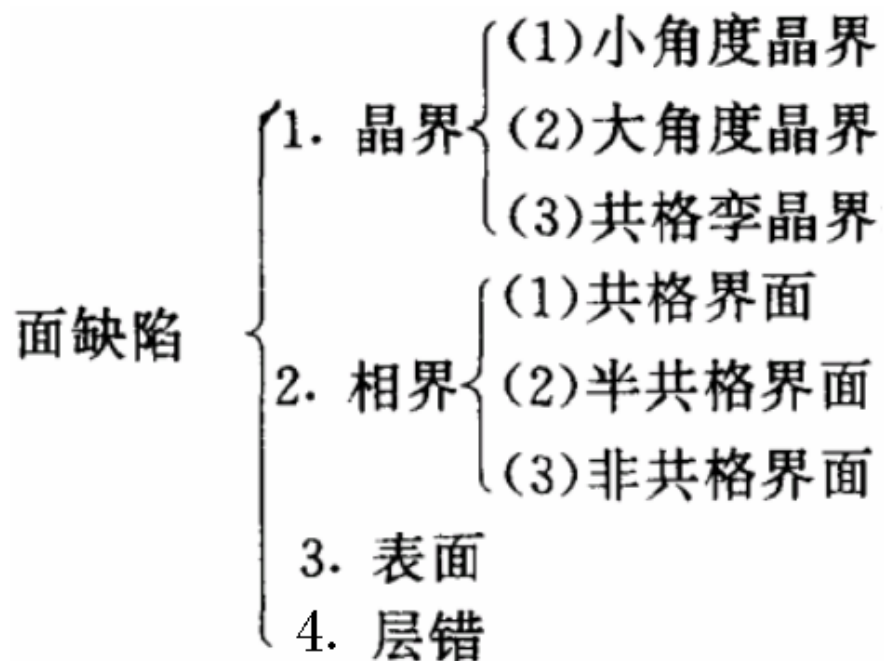
位错是不稳定缺陷

- (1) 位错使晶体的内能提高，但是熵增十分有限，不稳定缺陷
- (2) 通过估算得出，因应变能而引起系统自由能的增加，远大于熵增加而引起系统自由能的减小。故位错与空位不同，它在热力学上是不稳定的。

四、面缺陷

原子偏离理想状态的区域在二维方向上都较大，而在第三维方向上很小的晶体缺陷。包括晶界、相界、外表面、层错、孪晶面等等。

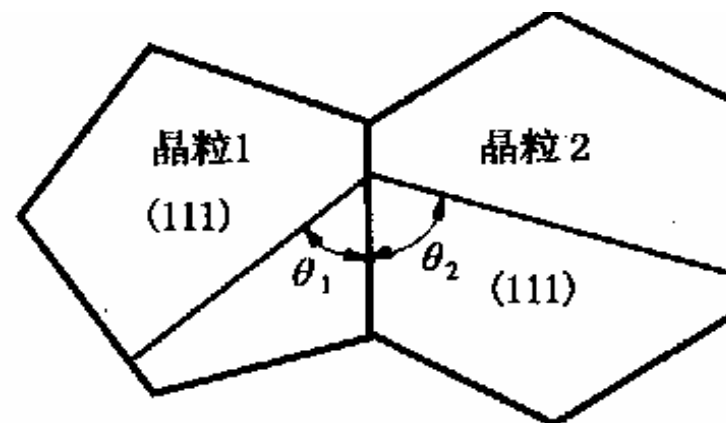
表面与界面的理论是非常重要的基础理论之一，而且具有广泛的应用价值。



气相（或真空）与凝聚相之间的分界面称为表面（surface）；凝聚相与凝聚相之间的分界面称为界面（inteface）。

1. 晶界

从晶体几何学的角度来看，两晶粒交接后，各晶粒原子排列的位向差的角度称为**晶界角**。



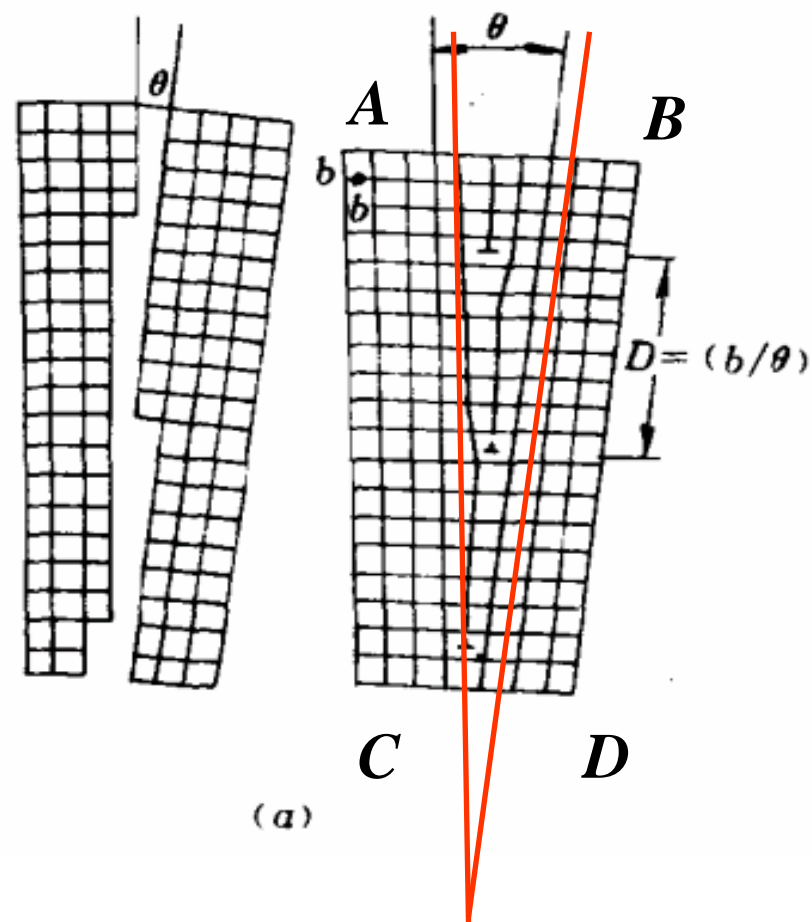
晶界角示意图

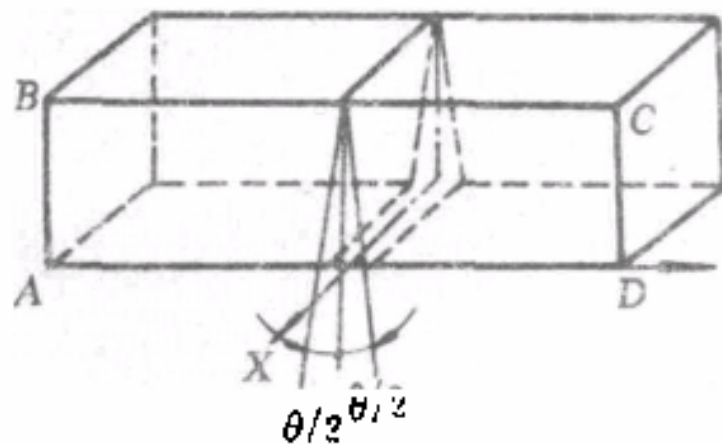
小角度晶界是由一定组态的位错所构成的，按其结构又可分为对称倾侧晶界，不对称倾侧晶界和扭转晶界三类。

(1) 小角度晶界

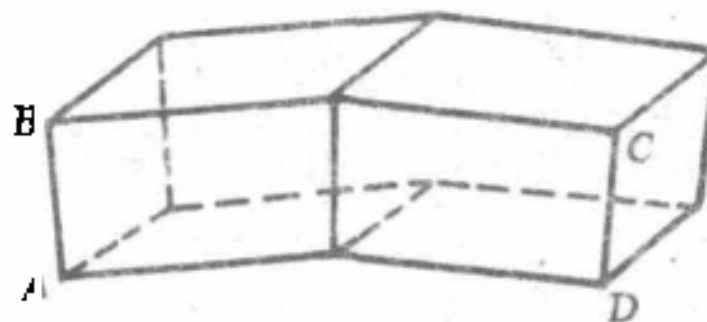
相邻两个晶粒的取向差小于 10° 时，其界面称为小角度晶界。

① 对称倾侧小角度晶界是由一系列垂直分布的同号刃型位错所组成的。





(a) 傾側前



(b) 傾側后

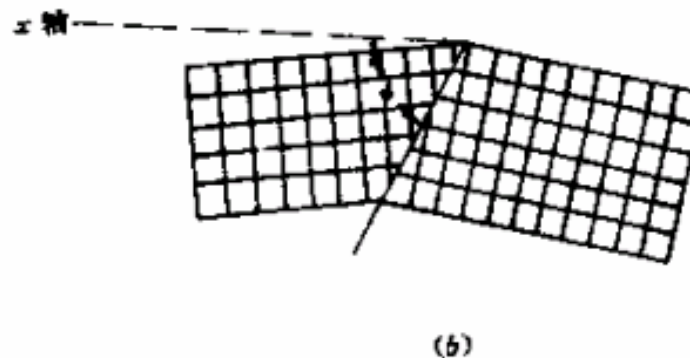
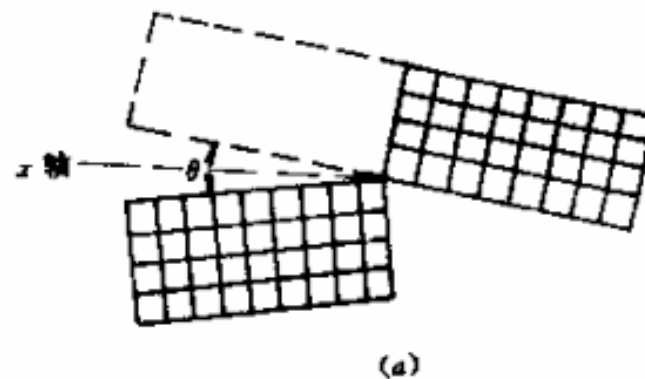
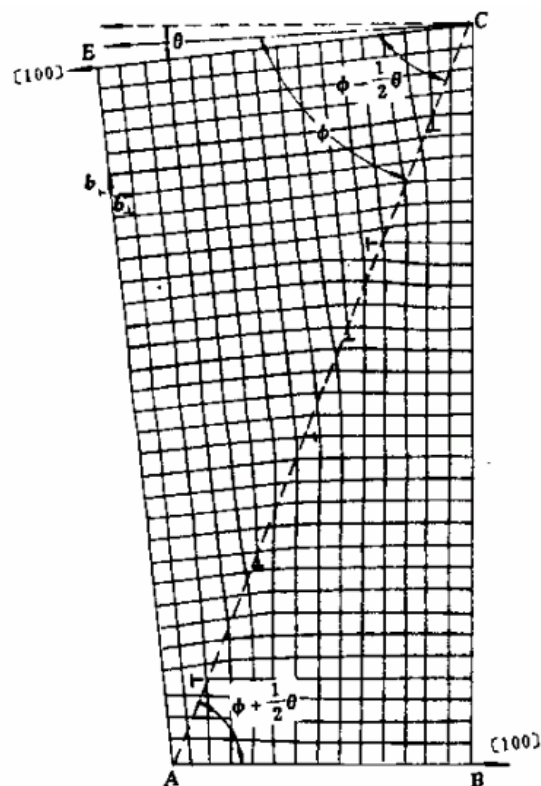
对称傾側晶界的形成



铜的小角度晶界上的位错蚀坑、 $\times 450$



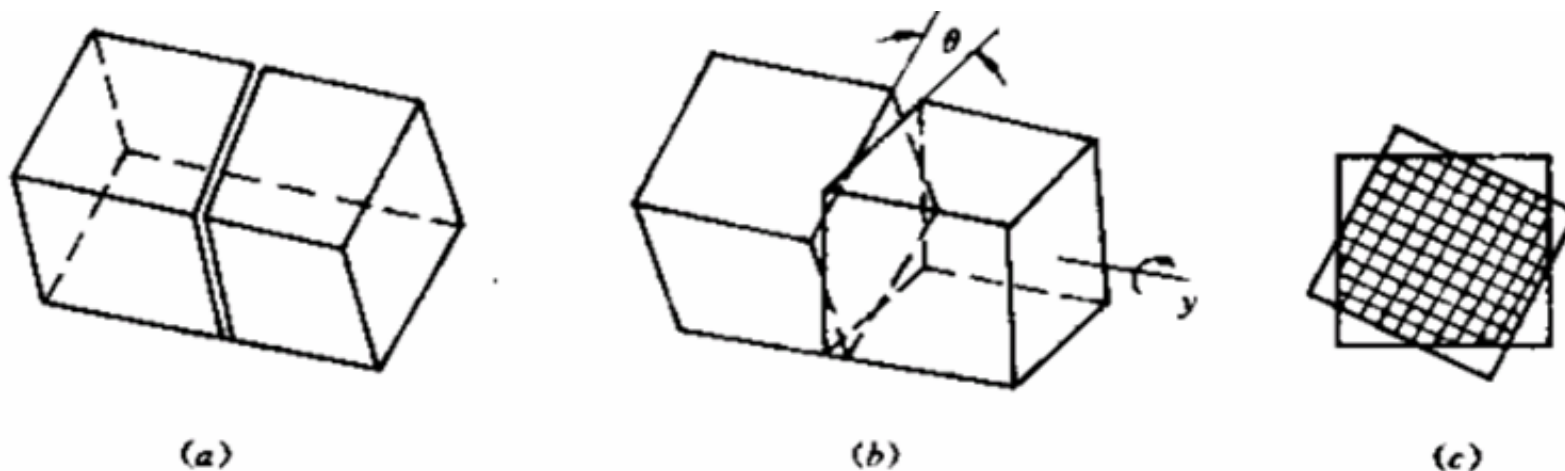
②非对称倾侧小角度晶界



晶界的构成方式：先将两个晶体绕 x 轴各自反向旋转 $\theta/2$ ，则两晶粒的位向差为 θ ，而晶界与 x 轴成 ϕ 角。不对称倾侧晶界是由两组柏氏矢量相互垂直的刃型位错所组成的。



③ 扭转小角度晶界



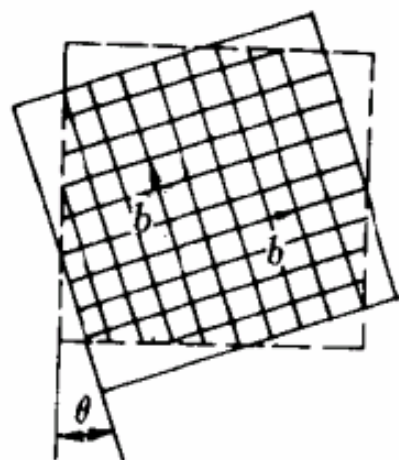
扭转晶界的形成过程

(a) 晶体切开呈两部分；(b) 右半晶体绕 y 轴旋转 θ 角；

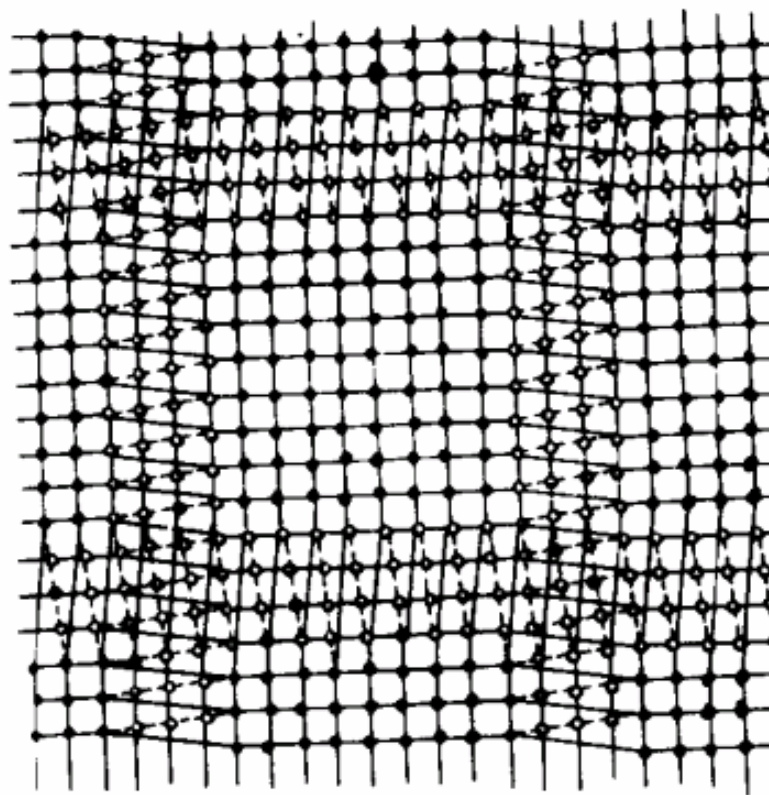
(c) 旋转后形成两晶面的位错网络

二晶粒以界面为共同晶面，但旋转过一个小角度 θ 。扭转界面是由相互垂直的两排螺型位错线的网格组成的，相邻螺位错线间的距离 D 也与 θ 角成反比，即 $D=b/\theta$ 。





(a) 扭转界面示意



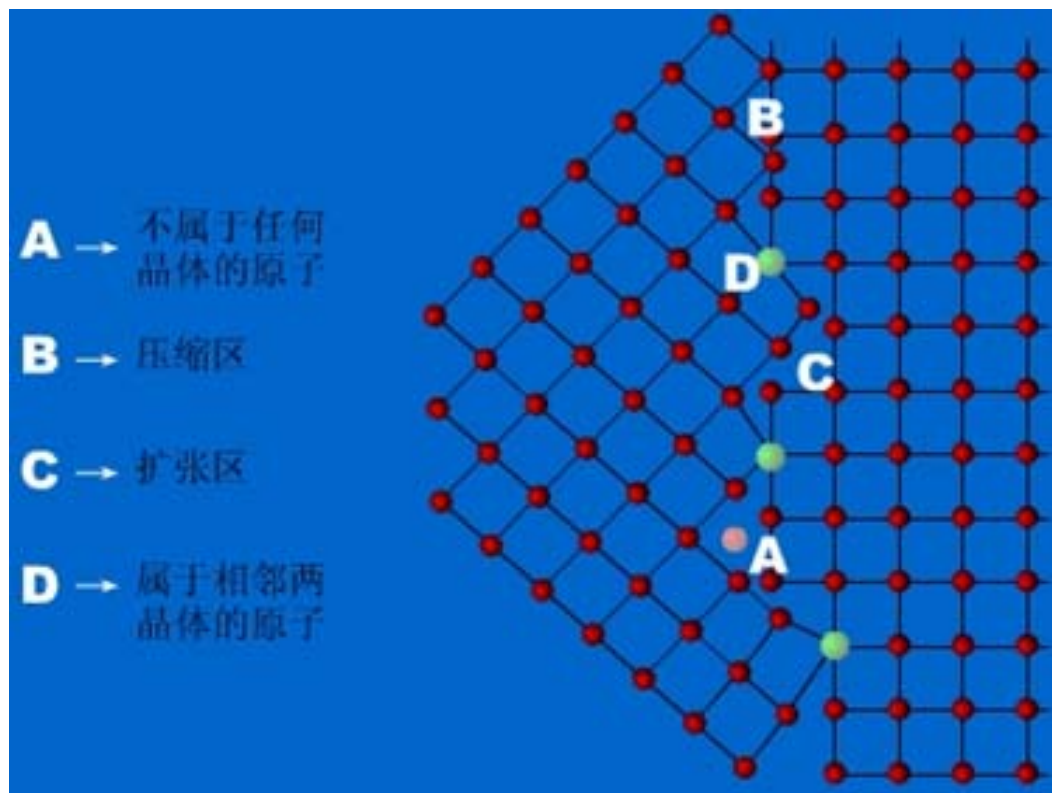
(b) 小角度扭转晶界上的原子分布
小角度扭转晶界

相当于在四个角上都施加了一个切应力 τ ，导致晶体整体旋转一个角度



(2) 大角度晶界

大角度晶界的结构较复杂，原子排列很不规则，由不规则的台阶组成的。晶界可看成坏区与好区交替相间组合而成。



真 題

1.什么叫晶界？简述小角度晶界和大角度晶界的晶体结构特点。（00年）

答：各晶粒之间，由于相对取向不同，而出现的接触界面。取向差大于 10° 的晶界称为大角晶界。大角度晶界的结构较复杂，原子排列很不规则，由不规则的台阶组成的。晶界可看成坏区与好区交替相间组合而成。

取向差小于 10° 的晶界称为小角晶界。小角度晶界是由一定组态的位错所构成的，按其结构又可分为对称倾侧晶界，不对称倾侧晶界和扭转晶界三类。

2.晶界和界面能。（03年）名词解释

答：各晶粒之间，由于相对取向不同，而出现的接触界面。平均在单位面积上的超额能量，可用单位长度上的力来表示，也叫做界面张力。

3. 单相金属或合金各晶粒间的界面一般称之为晶界，通常晶界又分为小角度晶界和大角度晶界，试问：划分两类晶界的依据是什么？并讨论构成小角度晶界的结构模型。（04年）

答：取向差小于 10° 的晶界称为小角晶界。小角度晶界是由一定组态的位错所构成的，按其结构又可分为对称倾侧晶界，不对称倾侧晶界和扭转晶界三类。

对称倾侧小角度晶界是由一系列垂直分布的同号刃型位错所组成的。

不对称倾侧晶界是由两组柏氏矢量相互垂直的刃型位错所组成的。

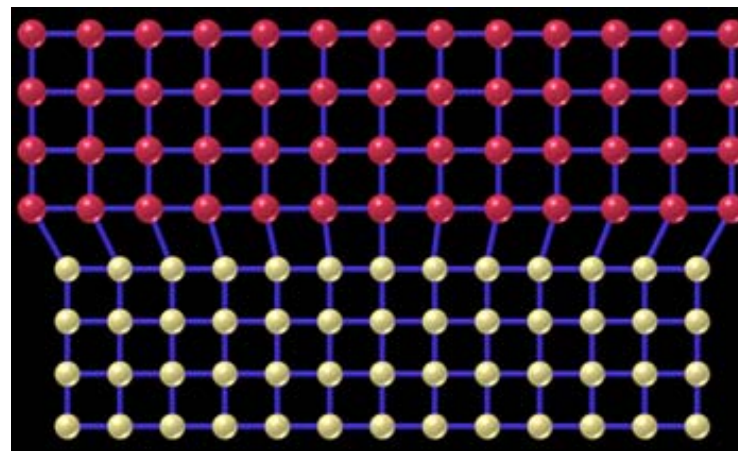
扭转晶界可以看成相互交叉的螺位错组成。

2. 相界面

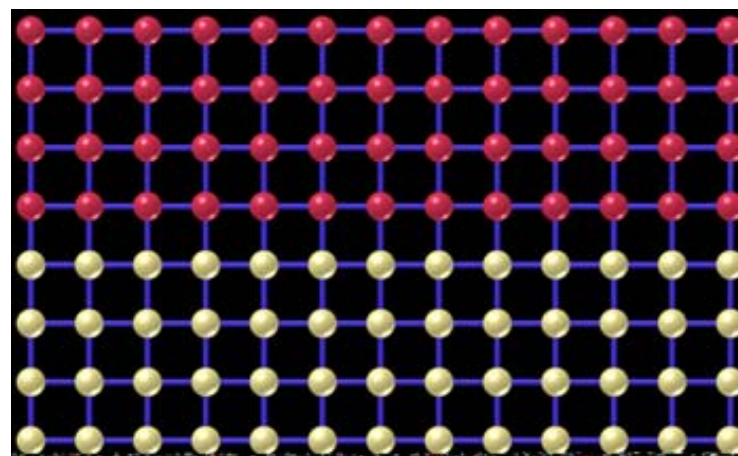
(1) 共格界面

两相在某种晶面上具有相同的原子排列方式及相近的原子间距时，两相的晶格在界面上能够相互衔接，一一对应，这种界面称为**共格界面**。

共格相界面的晶格畸变较小，还不足以破坏其共格的形式。



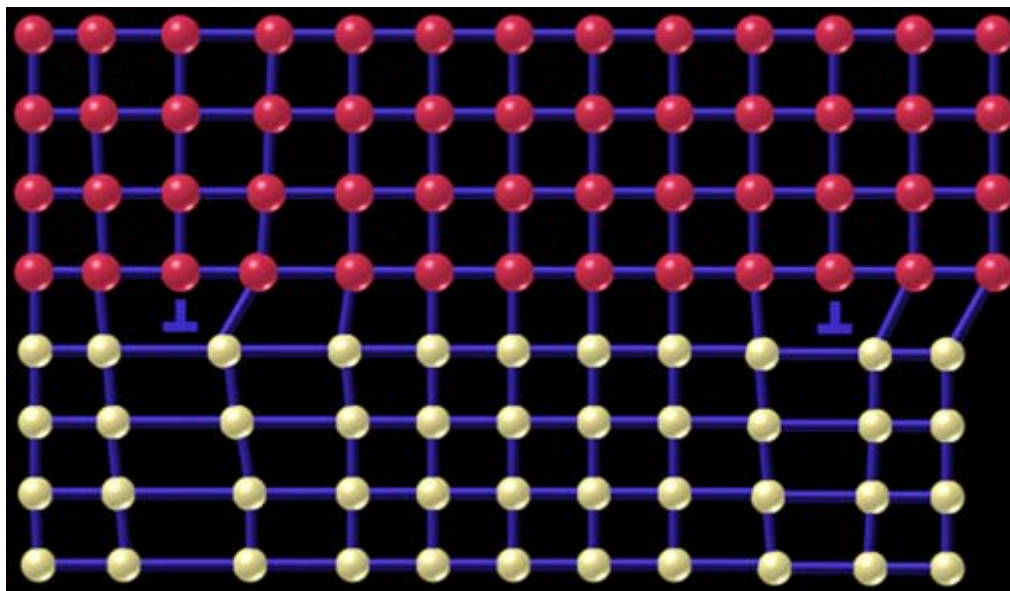
具有弹性畸变的共格相界



具有完善共格关系的相界

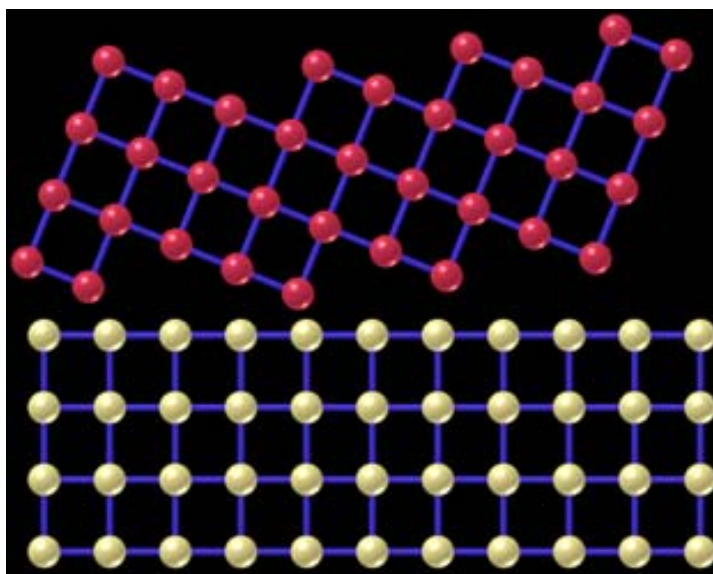


(2) 半共格界面



(3) 非共格界面

两相点阵类型或点阵参数具有很大差别时易出现。



一个全位错分解为2个肖克莱不全位错，中间夹着一片层错，它们的组合就叫做扩展位错。称之为**扩展位错**。

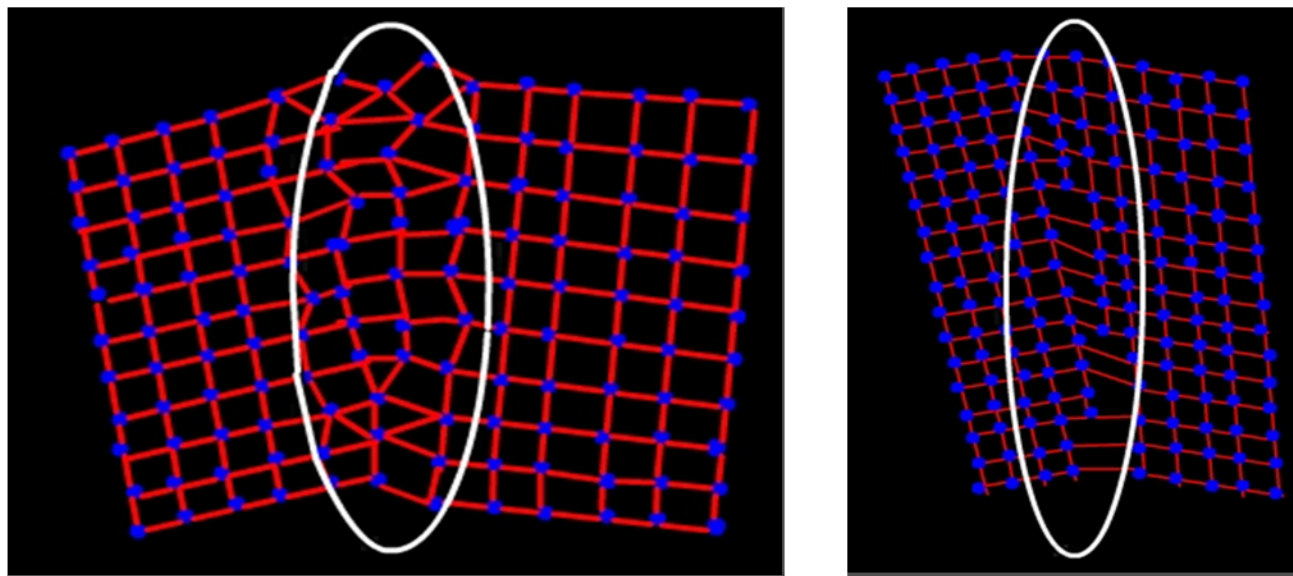
$$b_1 = b_2 + b_3 + \text{层错}$$



(b) 相邻两层(111)面上原子的排列

FCC 晶体中扩展位错的结构

4. 亚晶界



晶界与亚晶界示意图

- (1) 位向差小于 1° 的小晶粒。
- (2) 亚晶粒的平均尺寸在 $1\mu\text{m}$ 左右。
- (3) 亚晶界能量比晶内的高，也是溶质原子优先聚集和第二相优先析出的地方；可以阻碍位错的运动。亚晶粒的细化将使得金属的强度提高。

5. 界面的性质

(1) 界面有不同于晶内的力学性质。

一般情况下，在常温下晶界的强度高于晶内，而且晶界阻碍位错的运动，因此细晶粒材料具有较高的强度。高温下晶界的强度低于晶内，因此容易造成沿晶界的流动。

(2) 界面有不同于晶内的化学性质。

因界面上的原子能量较高，因此化学稳定性较低，容易受到腐蚀。

(3) 界面有不同于晶内的物理性质。

例如，界面将使电阻增大，并可对材料的磁性、光学性质等物理性质产生重要的影响。

(4) 界面上的原子具有较高的能量，因此界面的状态有利于原子的扩散，并对以扩散为主要特征的物理冶金过程产生重大的影响，如烧结、化学热处理等等。

(5) 界面的状态有利于新相的形核，在固态相变、再结晶及热处理等过程中起很重要的作用。

谢谢!