

第三章 晶体缺陷

Imperfections (defects) in Crystals

沈耀

材料楼509B

Email: yaoshen2001@yahoo.com

yaoshen@sjtu.edu.cn

Tel: 34203763, 13524655390

第三章 晶体缺陷

Imperfections (defects) in Crystals

“It is the defects that makes materials so interesting, just like the human being.”

“Defects are at the heart of materials science.”

实际晶体中的缺陷

- 晶体缺陷：晶体中各种偏离理想结构的区域

根据几何特征分为三类

点缺陷 (point defect) 三维空间的各个方向均很小
零维缺陷 (zero-dimensional defect)

线缺陷 (line defect) 在二个方向尺寸均很小
一维缺陷 (one-dimensional defect)

面缺陷 (plane defect) 在一个方向上尺寸很小
二维缺陷 (two-dimensional defect)

课程安排

课程安排

点缺陷 (第1周)

位错几何 (第1、2周)

位错力学 (第2周)

位错运动、实际晶体中的位错 (第3、4周)

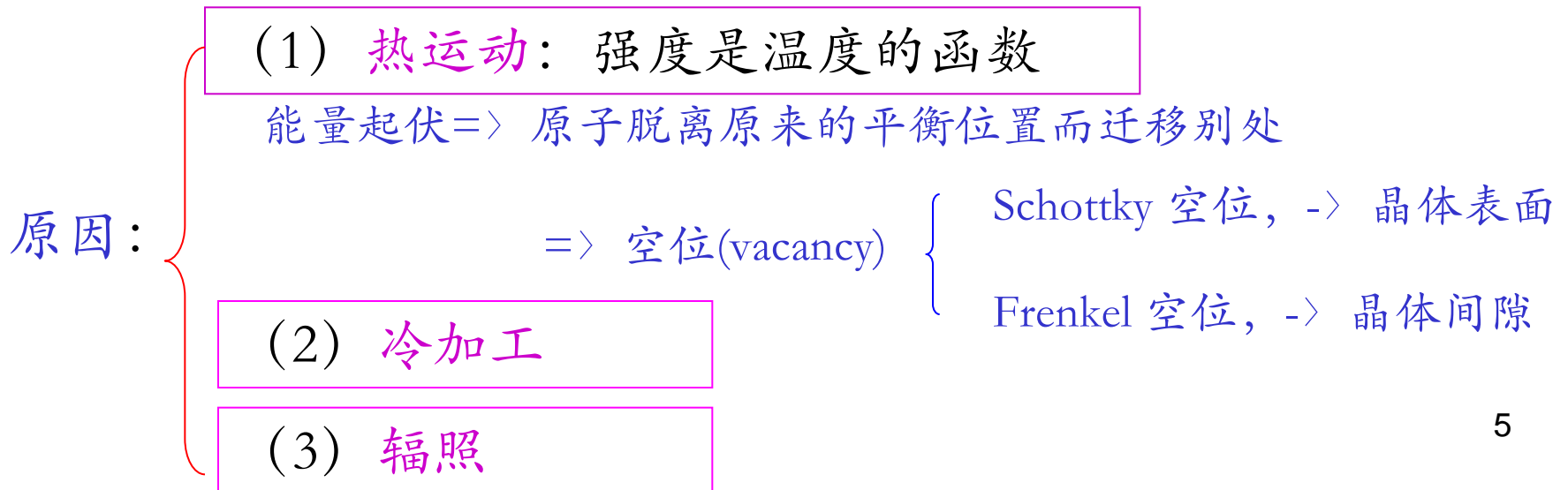
表面与界面 (第4、5周)

课堂讨论 (第5周)

点缺陷

- 点缺陷：空位、间隙原子、溶质原子、和杂质原子、+ 复合体（如：空位对、空位-溶质原子对）

点缺陷的形成 (The production of point defects)



平衡浓度的推导

平衡判据

$$F = U - TS$$

F: 赫姆霍茨自由能

U: 内能

S: 熵

$$\left(\frac{\partial F}{\partial n}\right)_T = \left(\frac{\partial \Delta F}{\partial n}\right)_T = 0$$

Stirling 公式: $\ln x! \approx \int_1^x \ln x dx \approx x \ln x - x$

• 假设条件:

- (1) 晶体体积保持常数, 不随温度而变; 每个缺陷的能量与温度无关;
- (2) 缺陷间没有相互作用, 彼此独立无关;
- (3) 空位及间隙原子的存在不改变点阵振动的本征频率。

与点缺陷有关的能量与频率

- 空位形成能： ΔE_v

原子 \rightarrow 晶体表面 = 电子能 + 畸变能

平衡浓度：

$$C = A \exp(-Q_f / RT)$$

热力学稳定的缺陷：产生与消亡达致平衡

- 空位迁移频率：

$$\nu = \nu_0 z \exp(-\Delta E_m / kT) \exp(\Delta S_m / k)$$

ΔE_m ：空位迁移能

ΔS_m ：空位迁移熵

点缺陷浓度及对性能的影响

*过饱和空位:

高温淬火、冷加工、辐照

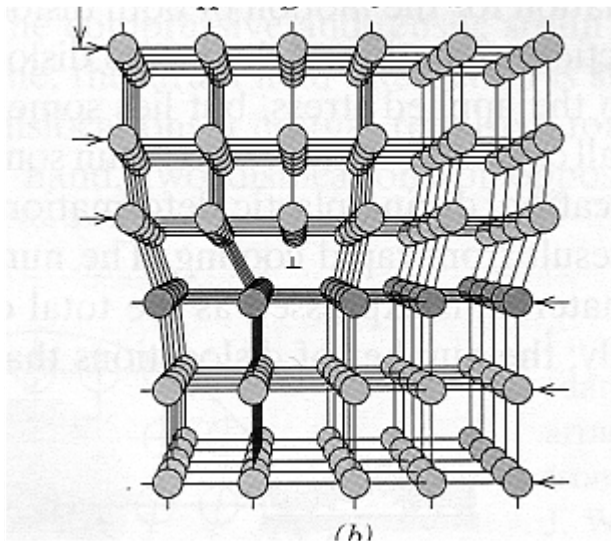
*点缺陷对性能的影响

1. 电阻增大
2. 提高机械性能
3. 有利于原子扩散
4. 体积膨胀，密度减小

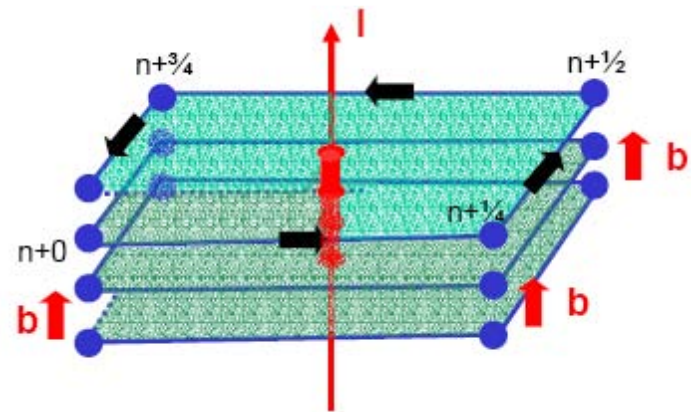
第二部分

位错概念与位错几何

位错举例：刃位错与螺位错



刃位错



螺位错

位错概念的提出（一）

材料科学中的有关晶体的核心概念之一；

《材料科学基础》中最难懂的概念。

假说：1934年

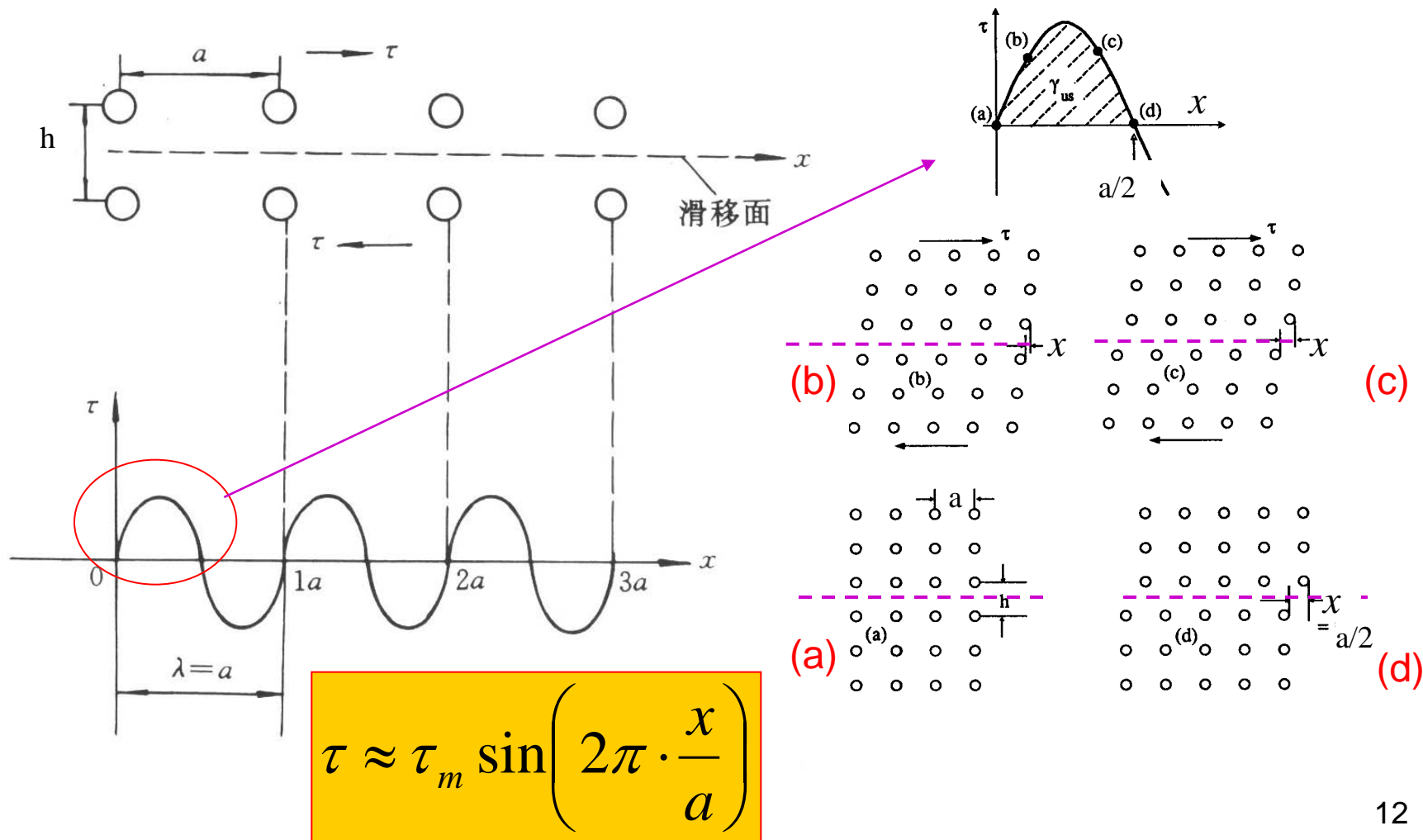
证实：上世纪50年代，电镜实验观察

缘起：单晶体理论强度（滑移的临界剪切应力）
与实验值有巨大差距

理论值： $\tau_c = 10^{-2} \sim 10^{-1} G$

实验值： $\tau_c = 10^{-8} \sim 10^{-4} G$

单晶体理论强度的计算 (一)



单晶体理论强度的计算 (二)

$$\tau \approx \tau_m \sin\left(2\pi \cdot \frac{x}{a}\right) \approx \tau_m \left(2\pi \cdot \frac{x}{a}\right) \Big|_{x \rightarrow 0}$$

$$\tau = G\gamma = G \cdot \frac{x}{h}$$

$$\tau_m = \frac{G}{2\pi} \cdot \frac{a}{h} \quad a \approx h$$

$$\tau_m \approx \frac{G}{2\pi} \propto 0.1G$$

$$\tau_m \propto 0.01 - 0.1G$$

计算中的假设

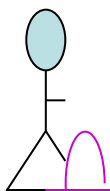
- 1。完整晶体，没有缺陷
- 2。整体滑动
- 3。正弦曲线 (0.01-0.1G)

问题出在假设1和2上！ 应是局部滑移！



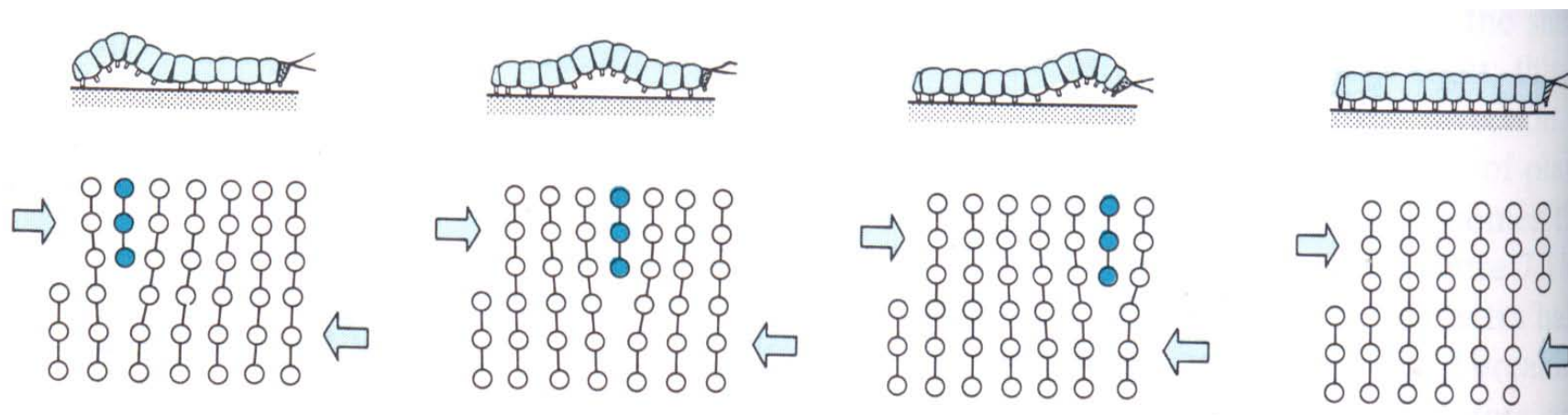
日常生活和大自然的启示=>

有缺陷晶体的局部滑动



小宝移大毯!

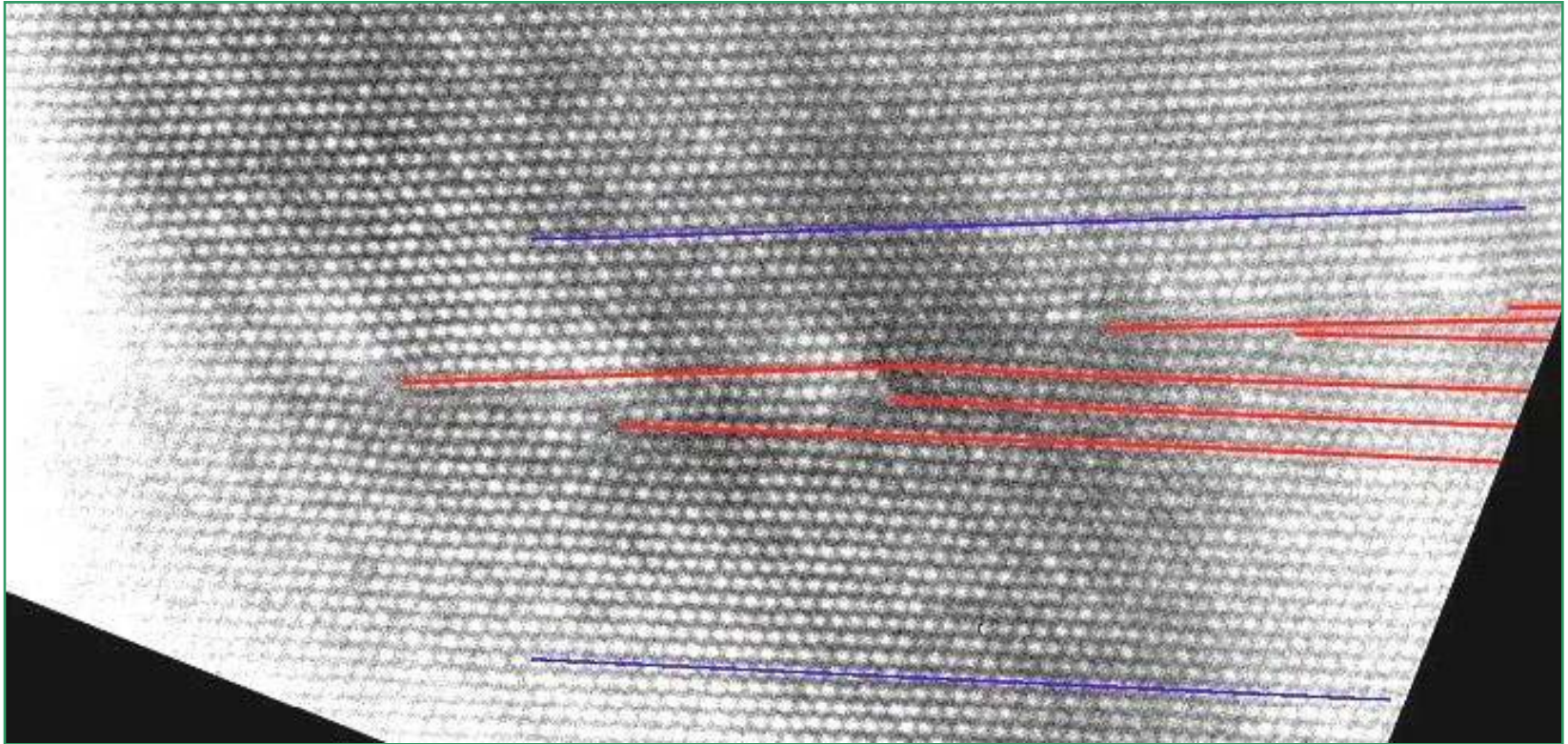
毛毛虫的蠕动



存在着某种缺陷---位错 (dislocation)

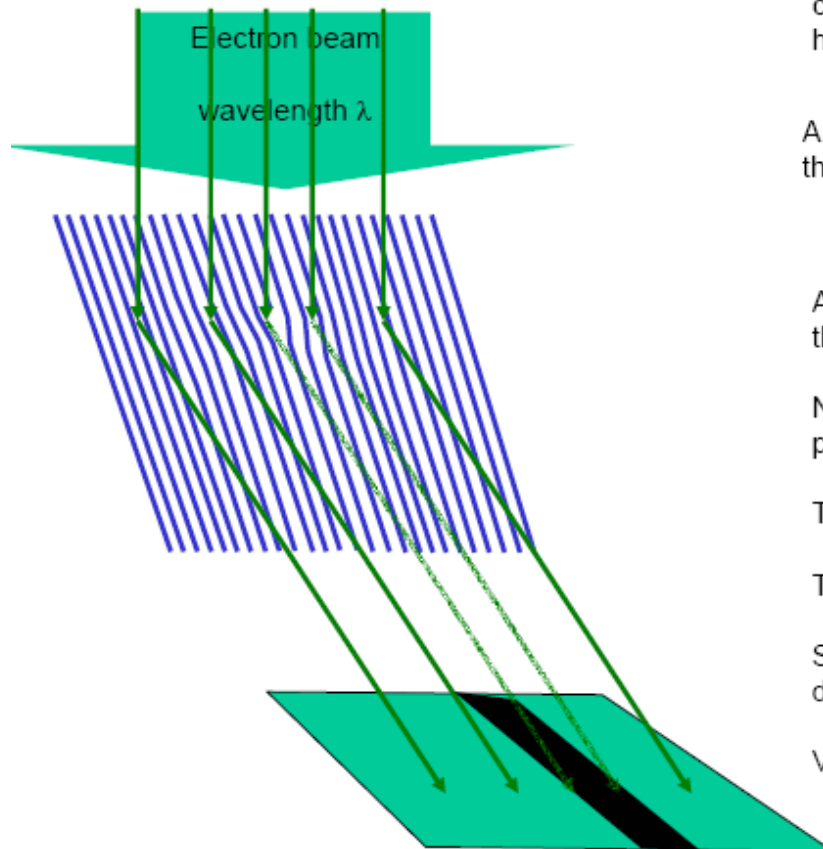
位错的运动 (逐步传递) => 晶体的逐步滑移

位错的高分辨图像



位错的明场像原理

Electron microscopy of dislocations



Diffraction contrast in the T.E.M. is now the commonest way of "seeing dislocations" and how they move and interact.

An electron beam is "shone" onto a crystal so that a Bragg condition is satisfied.

$$\lambda = 2d \sin \theta$$

A strong diffracted beam results, and illuminates the imaging screen.

Near the core of the dislocation, the lattice planes are bent.

The Bragg condition is no longer satisfied.

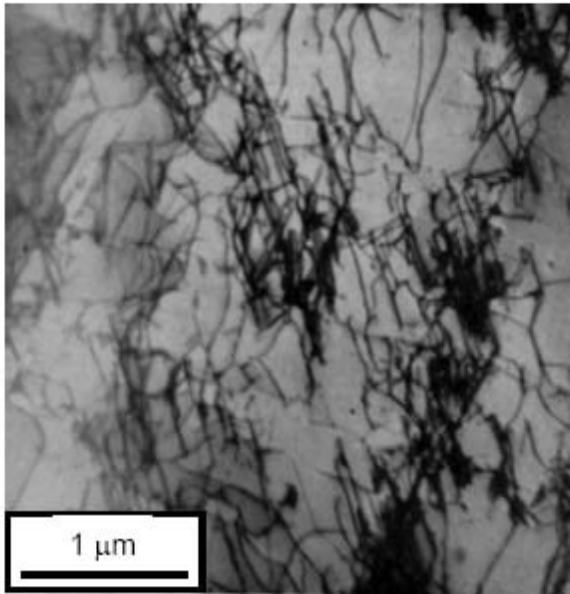
The diffracted beam is very weak or absent.

So in this "bright field" image the region near the dislocation core appears dark.

Visibility is due to the dislocation's **strain field**.

典型的位错明场像照片

Some TEM pictures of dislocations

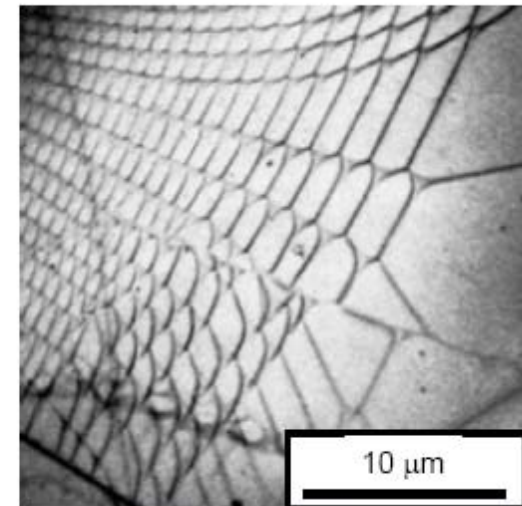


Dislocation tangles in strained stainless steel.

(Whelan, 1958)

Dislocation network in graphite

(Amelinckx 1960)



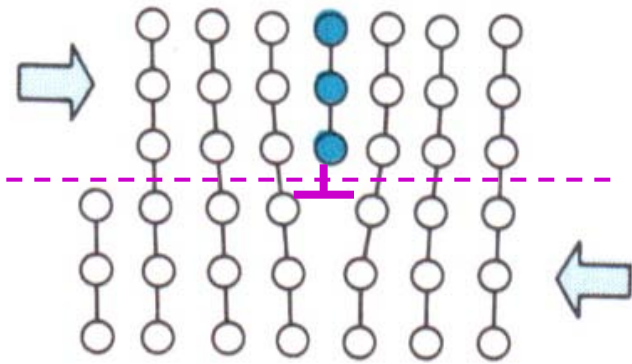
Moving dislocations in molybdenum

(Robertson 1999)



位错特性:

滑移面上已滑动区域与未滑动区域的边界



晶体局部滑动的推进=位错运动

运动前方: 未滑动区域

运动后方: 已滑动区域

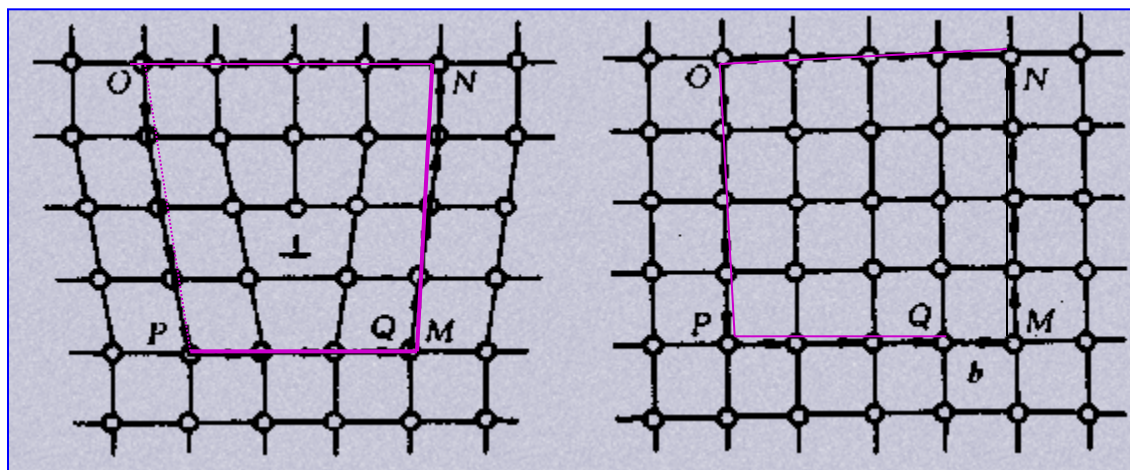
边界: 位错所在位置, 位错线

两个几何参量 (矢量) 表征位错的几何特征: 线缺陷
(不考虑位错核心结构)

{ 位错线方向矢量 (切矢量)
滑移矢量 (柏氏矢量)

柏氏矢量的确定 Burgers Vector

柏氏回路将位错正方向与滑移矢量（柏氏矢量）的正向关联起来！



1. 首先选定位错的正向 $\vec{\xi}$ ；
2. 然后绕位错线周围作右旋（RH）闭合回路-----柏氏回路；在不含有位错的完整晶体中作同样步数的路径，
3. 由终点向始点引一矢量，即为此位错线的柏氏矢量，记为 \vec{b}

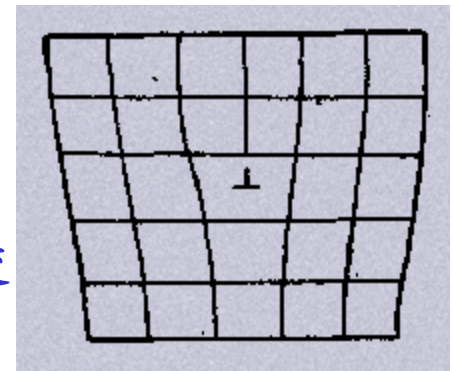
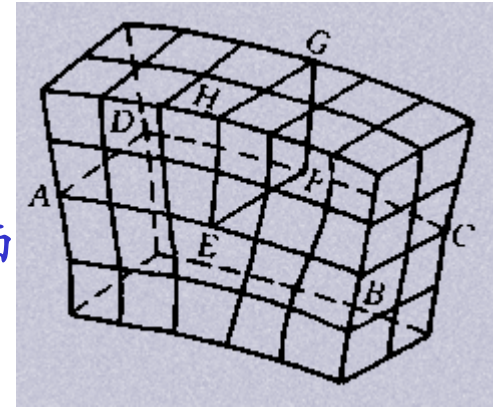
FS/RH 规则

刃型位错 edge dislocation

其形状类似于在晶体中插入一把刀刃而得名。

特征：

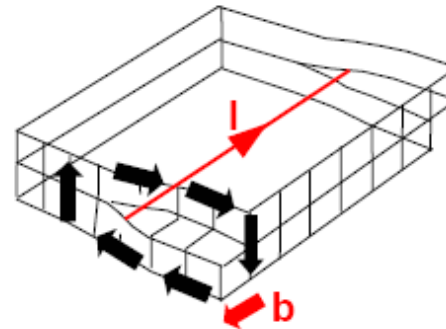
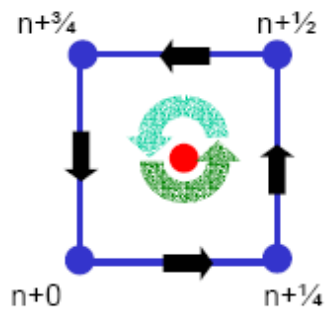
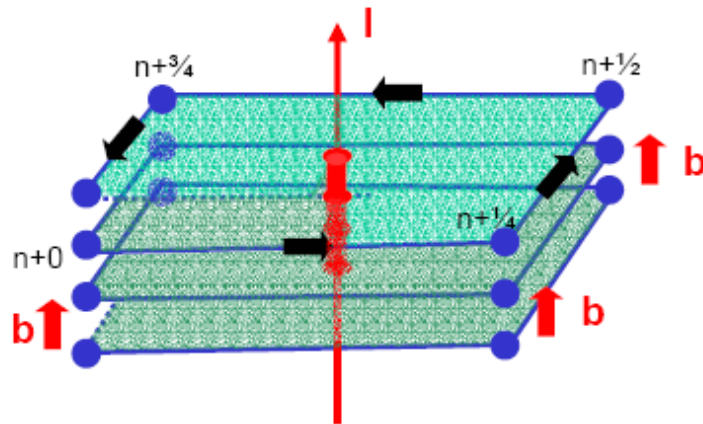
- *** 1) 有一额外原子面，额外半原子面刃口处的原子列称为位错
- *** 2) 位错线垂直于滑移矢量，位错线与滑移矢量构成的面是滑移面，刃位错的滑移面是唯一的。
- 3) 半原子面在上,正刃型位错 \perp ； 在下,负刃型位错 \dashv
- *** 4) 刃位错的位错线不一定是直线，可以是折线，也可以是曲线，但位错线必与滑移矢量垂直。
- 5) 刃型位错周围的晶体产生畸变，上压，下拉，半原子面是对称的，位错线附近畸变大，远处畸变小。
- 6) 位错周围的畸变区一般只有几个原子宽（一般点阵畸变程度大于其正常原子间距的1/4的区域宽度，定义为位错宽度，约2~5个原子间距。）



* 畸变区是狭长的管道，故位错可看成是线缺陷。

螺型位错的图像

Screw dislocations – more detailed geometry



The “standard picture” above makes it appear that the dislocation is confined to one plane (unless it reconstructs in some way).

Real situation for a *pure* screw dislocation is rather more like that to the left.

Displacement parallel to b accumulates *uniformly* as one progresses round the core of the dislocation.

In real materials this “helical” structure gets further complicated...

螺型位错的特征

特征： 1) 无额外半原子面，原子错排是轴对称的

2) 位错线与柏氏矢量平行，且为直线

3) 凡是以螺型位错线为晶带轴的晶带由所有晶面都可以为滑移面。

4) 螺型位错线的运动方向与柏氏矢量相垂直

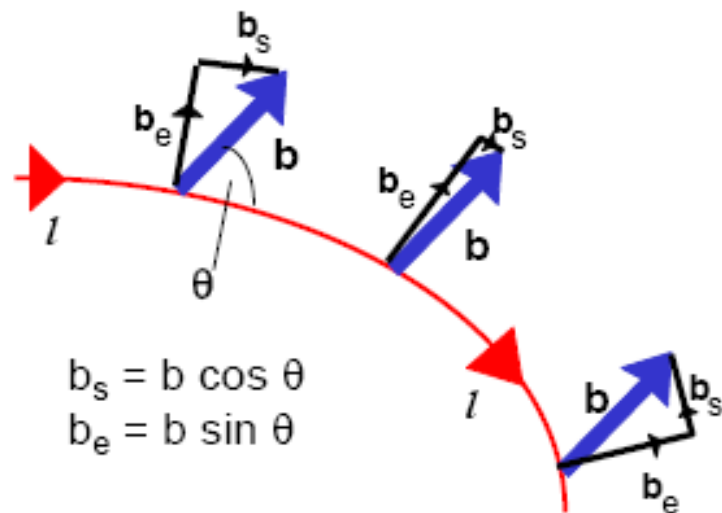
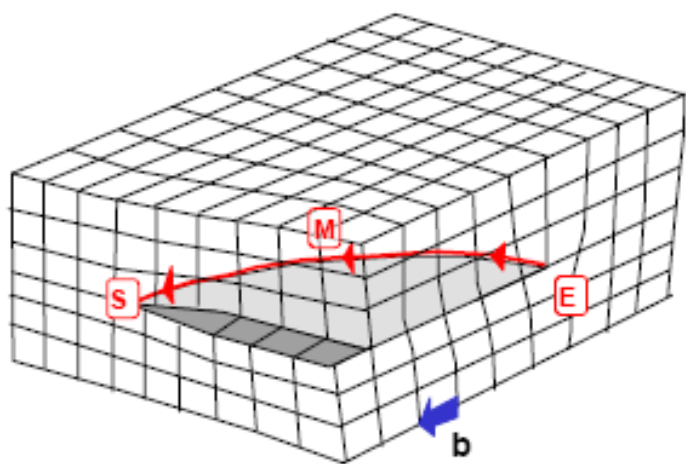
5) 分左螺旋位错 left-handed screw 符合左手

法则

右 right-handed screw 右

6) 螺型位错也是包含几个原子宽度的线缺陷

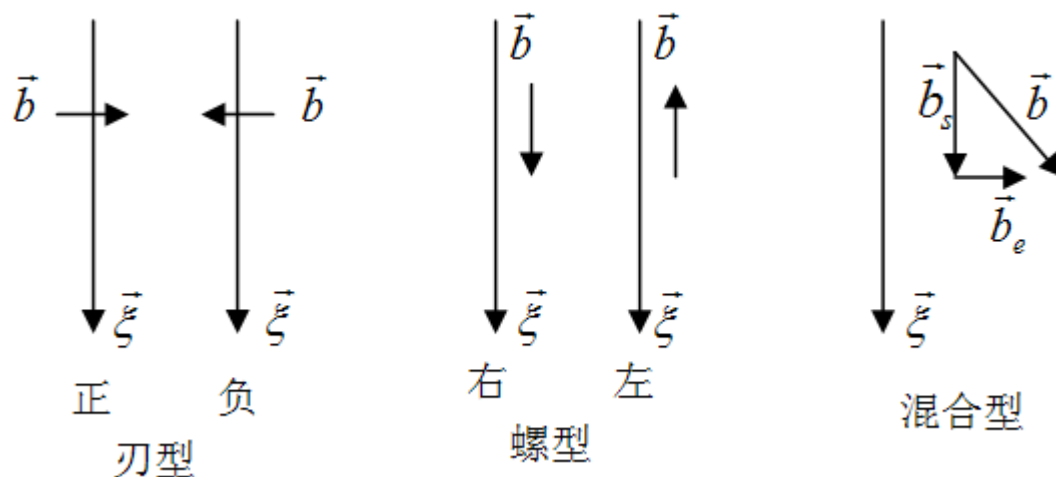
混合位错



混合位错： 滑移矢量既不平行也不垂直于位错线，而是与位错线相交成任意角度。

一般混合位错为曲线形式，故每一点的滑移矢量式相同的，但其与位错线的交角却不同。

各种位错的柏氏矢量



刃型位错: $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = 0$; 右螺旋位错: $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = b$; 左螺旋位错 $\vec{b} \cdot \vec{\xi} = -b$

混合位错: 螺型分量 $\vec{b}_s = (\vec{b} \cdot \vec{\xi}) \vec{\xi}$ $b_s = b \cos \Phi$

刃型分量 $\vec{b}_e = [(\vec{b} \times \vec{\xi}) \cdot \vec{e}] (\vec{\xi} \times \vec{e})$ $b_e = b \sin \Phi$

\vec{e} 为垂直于滑移面的单位矢量 $\vec{e} = \frac{\vec{b} \times \vec{\xi}}{|\vec{b} \times \vec{\xi}|}$

柏氏矢量的物理意义

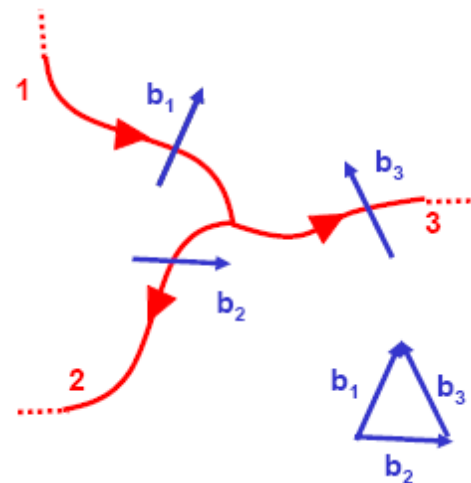
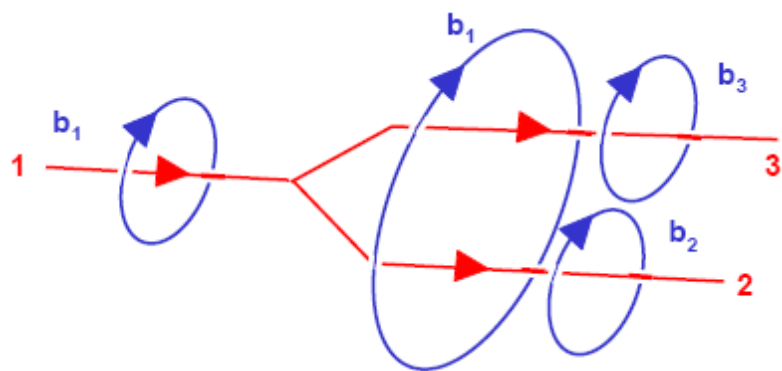
1. 反映位错周围点阵畸变的**总积累**（包括强度和取向）
2. 该矢量的方向表示位错运动导致晶体滑移的方向，而该矢量的模表示畸变的程度称为位错的强度。
(strength of dislocation)

柏氏矢量的守恒性

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

1。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。

2。位错的连续性：位错线只能终止在晶体表面或界面上，而不能中止于晶体内部；在晶体内部它只能形成封闭的环线或与其他位错相交于结点上。



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

推论： 1) $\vec{b} \Rightarrow \vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3, \dots, \vec{b}_n$; $\vec{b} = \sum_{i=1}^n \vec{b}_i$

柏氏矢量的表示法

- 柏氏矢量的大小和方向可用它在晶轴上的分量-----点阵矢量, \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} 表示
- 在立方晶体中, 可用于相同的晶向指数来表示:

$$\text{记为 } \vec{b} = \frac{a}{n} \langle u \ v \ w \rangle \quad \text{其中 } n \text{ 为整数}$$

位错强度

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

位错合并

$$\vec{b}_1 = \frac{a}{n} \langle u_1 \ v_1 \ w_1 \rangle, \quad \vec{b}_2 = \frac{a}{n} \langle u_2 \ v_2 \ w_2 \rangle$$

$$\vec{b} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \frac{a}{n} [(u_1 + u_2), (v_1 + v_2), (w_1 + w_2)]$$

第三部分

位错力学

位错的应力场：应力张量

- 应力张量：二阶张量

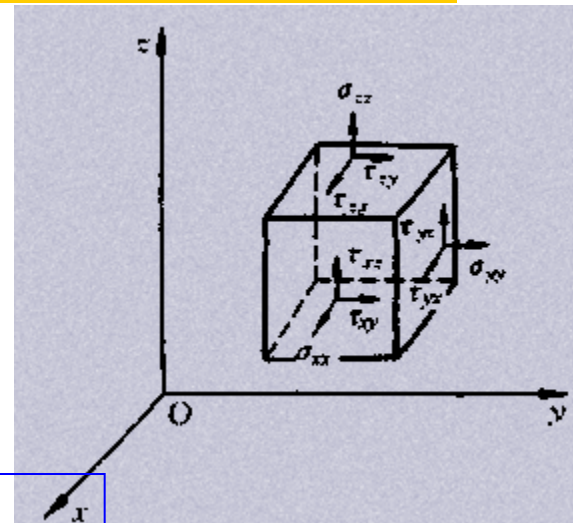
$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

Scientific

or

$$\begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}$$

Engineering



平衡状态： $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$, $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$, $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$

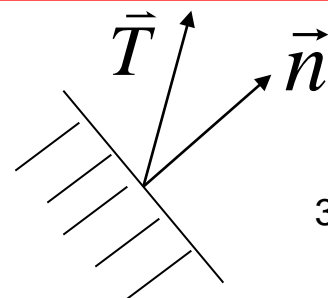
or $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$

应力二阶张量的意义

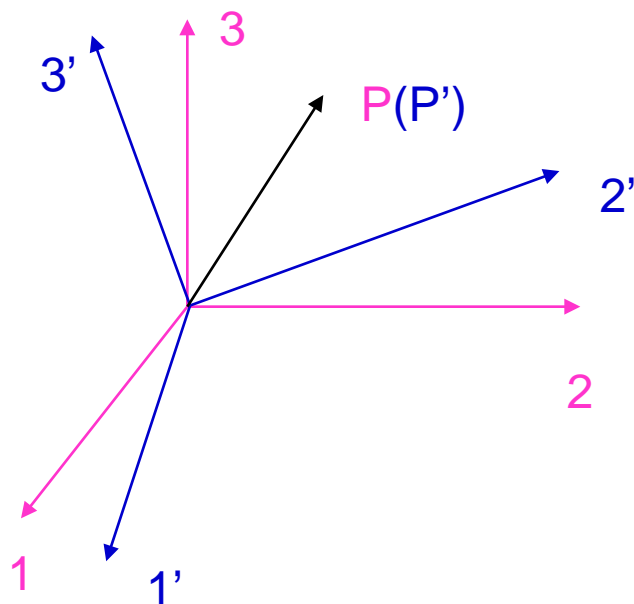
$$\left[\begin{array}{c} \text{单位} \\ \text{面积} \\ \text{上的} \\ \text{力矢量} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{应力} \\ \text{张量} \end{array} \right] \bullet \left[\begin{array}{c} \text{面法} \\ \text{向单} \\ \text{位矢} \\ \text{量} \end{array} \right]$$

矢量 二阶张量 矢量

$$\vec{T} = [\sigma] \bullet \vec{n}$$



矢量与张量的坐标转换



夹角余弦矩阵

	1	2	3
1'	L11	L12	L13
2'	L21	L22	L23
3'	L31	L32	L33

矢量: $P_i' = \sum L_{ij} * P_j, \quad j=1, 2, 3$

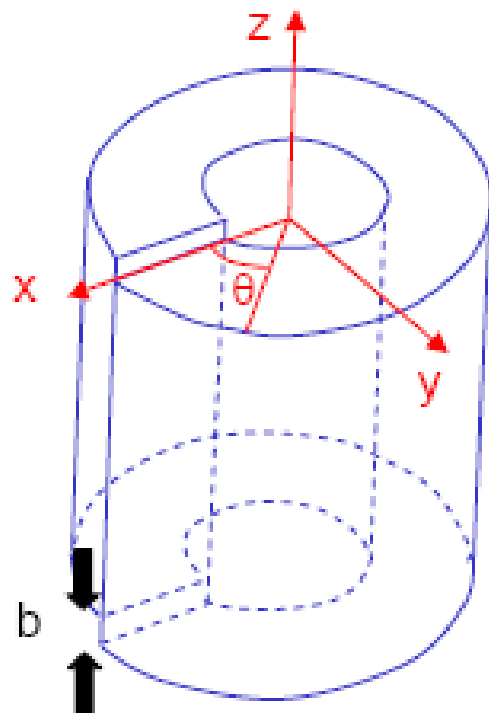
张量: $\sigma_{IJ}' = \sum \sum L_{Ii} * L_{Jj} * \sigma_{ij}; \quad i, j=1, 2, 3$

螺型位错的应力场

连续介质模型：

中空圆柱（不考虑位错中心区）

圆柱坐标：方便（利用其轴对称特性！）



位移： u_z ，其余分量为零

应变： $g_{qz}=b/2pr=g_{zq}$ ，其余分量为零

应力： $t_{qz}=t_{zq}=Gg_{qz}=Gb/2pr$ ，虎克定律；其余分量为零

直角坐标

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2},$$

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2},$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0.$$

螺型位错的应力场的特点

- 只有切应力分量，无体积变化
- 应变、应力场为轴对称
- $1/r$ 规律； $r \rightarrow 0$, 应力无穷大，不合实际情况，不适合中心严重畸变区。此规律适用于所有位错！

刃型位错的应力场

连续介质模型：

1。切开，插入半原子面大小的弹性介质

2。中空圆柱，径向平移

$$\sigma_{xx} = -D \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

$$\sigma_{yy} = D \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

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

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = D \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

$$\tau_{xx} = \tau_{zx} = \tau_{yz} = \tau_{zy} = 0。$$

$$D = \frac{Gb}{2\pi(1-\gamma)}$$

直角坐标

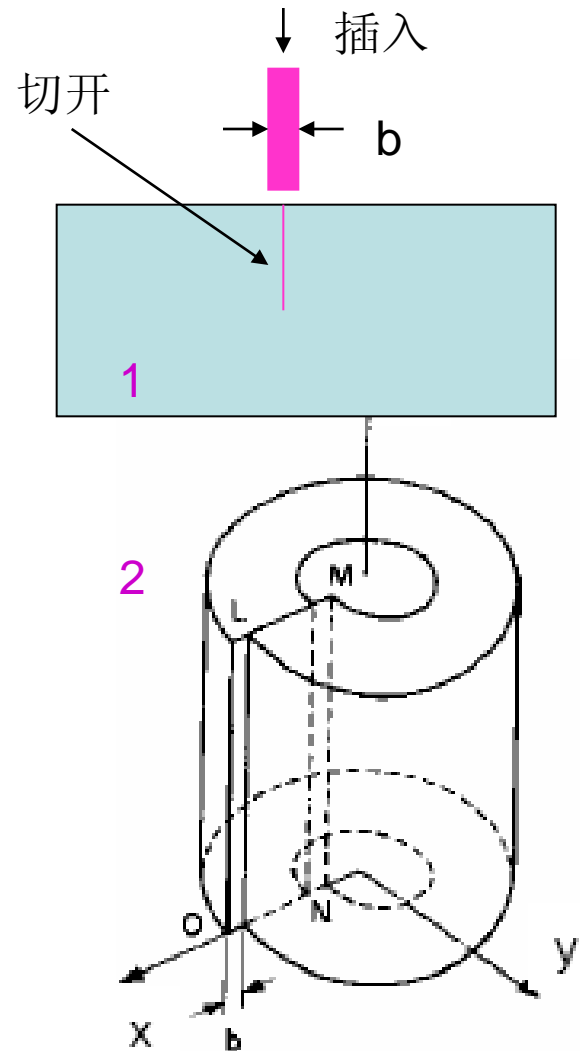
圆柱坐标

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -D \frac{\sin \theta}{r},$$

$$\sigma_{zz} = -\gamma(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta}),$$

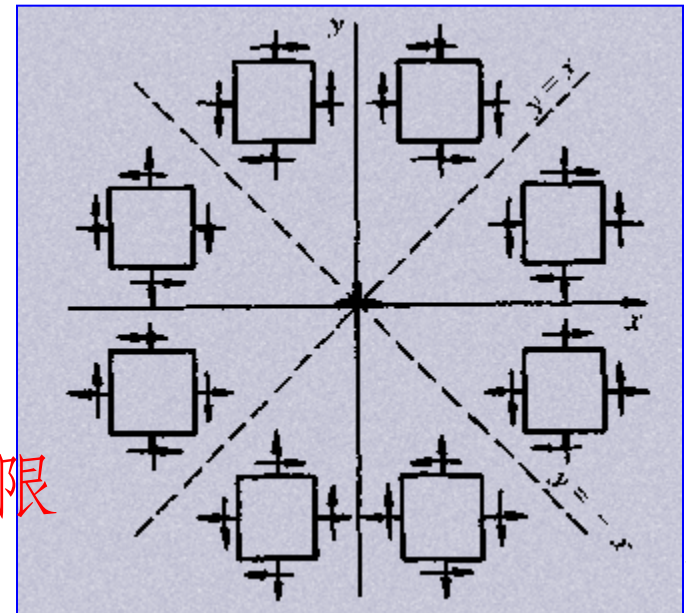
$$\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = D \frac{\cos \theta}{r},$$

$$\tau_{rz} = \tau_{zr} = \tau_{\theta z} = \tau_{z\theta} = 0。$$



刃型位错应力场的特点

- 同时存正、切应力分量，正比于 Gb
- 各应变、应力只是 (x, y) 的函数，平面应变
- 多余半原子面所在平面为对称平面
- 滑移面上无正应力、切应力达最大值 $\left(\frac{Gb}{2\pi(1-\gamma)} \frac{1}{x} \right)$
- 上压下拉
- Anywhere $|\sigma_{xx}| > |\sigma_{yy}|$
- 特征分界线 $x = \pm y$,
 τ_{xy}, τ_{yy} 在其两侧变号,
其上则为零



注意：前述为无限长直位错在无限大均匀各向同性介质中的应力场

位错的应变能 Strain Energy

位错=> 点阵畸变=> 能量的增高, 此增量称为位错的应变能
($E = E_c + E_s \approx E_s$)

E_c : 位错中心应变能(占总的10%)

E_s : 位错应力场引起的弹性应变能

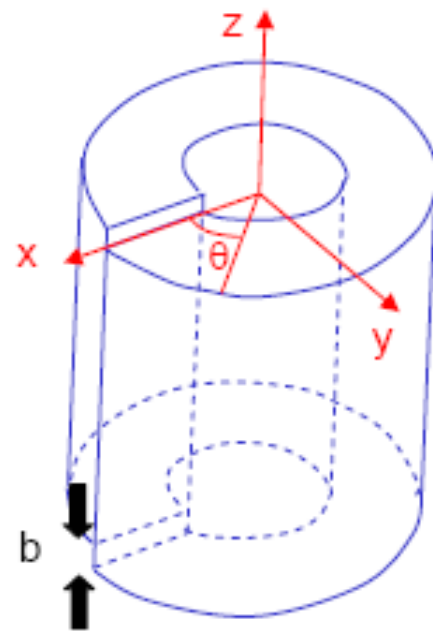
位错的应变能 = 制造单位位错所作的功

根据位错切移模型和弹性理论可求得

$$E_e^e = W = \int_r^R \int_0^b \tau_{\theta r} dx dr = \int_r^R \int_0^b \frac{Gx}{2\pi(1-\nu)} dx dr = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}$$

$$E_e^s = \frac{Gb}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}$$

$$E_e^m = E_e^e + E_e^s = \frac{Gb^2 \sin^2 \varphi}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} + \frac{Gb^2 \cos^2 \varphi}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} = \frac{Gb^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{r_0}$$



混合位错角度因素: $K = \frac{1-\nu}{1-\nu \cos^2 \varphi}$ 螺 $K=1$ 刃 $K=1-\nu$

位错应变能的特点

- 1) 应变能与 b^2 成正比，故具有最小 b 的位错最稳定 b ，大的位错有可能分解为 b 小的位错，以降低系统能量。
 - 2) 应变能随 $R \uparrow$ 而 \uparrow ，故在位错具有长程应力场，其中的长程应变能起主导作用，位错中心区能量较小，可忽略不计。
 - 3) $E_s^{\text{螺}}/E_s^{\text{刃}} = 1 - \nu$ 常用金属材料 ν 约为 $1/3$ ，故 $E_s^{\text{螺}}/E_s^{\text{刃}} = 2/3$
 - 4) 位错的能量还与位错线的形状及长度有关，两点之间以直线为最短，位错总有被拉直的趋势，产生一线张力。
 - 5) 位错的存在 \rightarrow 体系内能 \uparrow ，
晶体的熵值 \uparrow 可忽略
- 因此位错的存在使晶体处于高能的不稳定状态，可见位错是热力学不稳定的晶体缺陷。

位错的线张力

- 线张力: 为了降低能量, 位错自发变直, 缩短长度的趋势

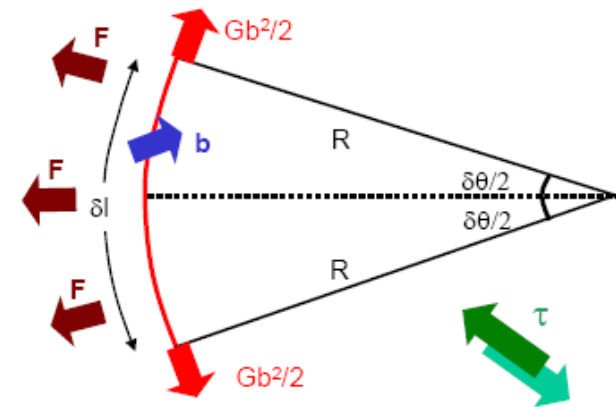
$$T = dE/dl \quad T = \alpha Gb^2 \quad (\alpha = 0.5 \sim 1.0)$$

- * 组态力 趋向于能量较低的状态, 没有施力者
- * 线张力的意义:
 - a. 使位错线缩短变直
 - b. 晶体中位错呈三维网状分布

端点固定的位错在剪应力作用下的平衡形态

$$\tau b \Delta s = 2T \sin \frac{d\theta}{2} \Rightarrow \tau b = \frac{T}{r} \approx \frac{Gb^2}{2r} \quad \text{或}$$

$$\tau = \frac{Gb}{2r}$$



第四部分

位错运动与实际晶体中的位错

位错的运动（一）

人们为什么对位错感兴趣？

大量位错在晶体中的运动 \Rightarrow 晶体宏观塑性变形

位错运动的两种基本形式：滑移和攀移

滑移面：位错线与柏氏矢量所在平面

刃位错的滑移面：？ 螺位错的滑移面：？

刃位错的滑移

滑移2DMove1: 4-12

滑移2DMove2: 4-13

晶体的滑移总是与 \mathbf{b} 矢量在同一直线上，同向或反向，取决于剪应力方向

位错的运动 (二)

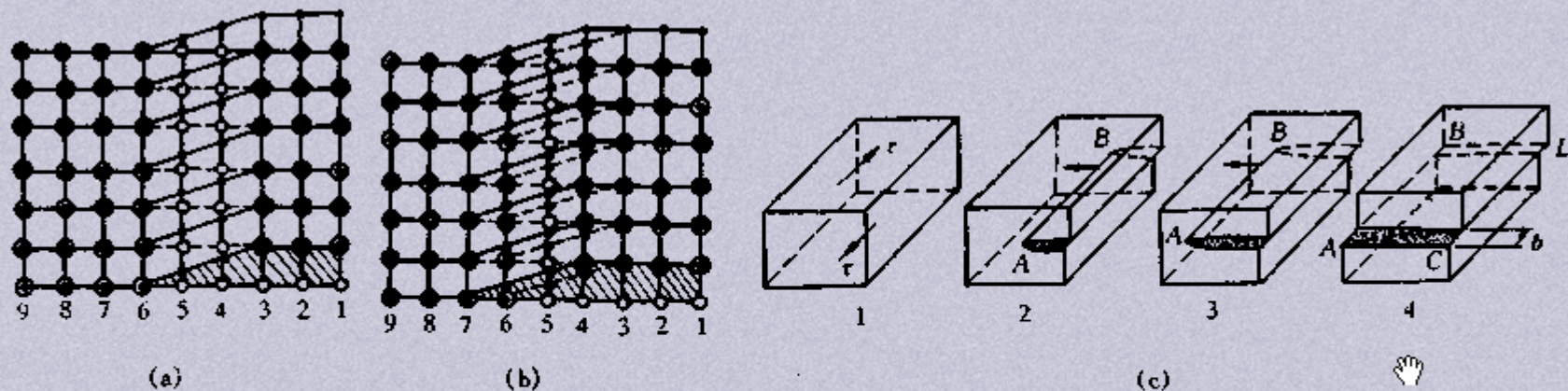


图 3.13 螺型位错的滑移

(a) 原始位置 (b) 位错向左移动了一个原子间距 (c) 滑移过程

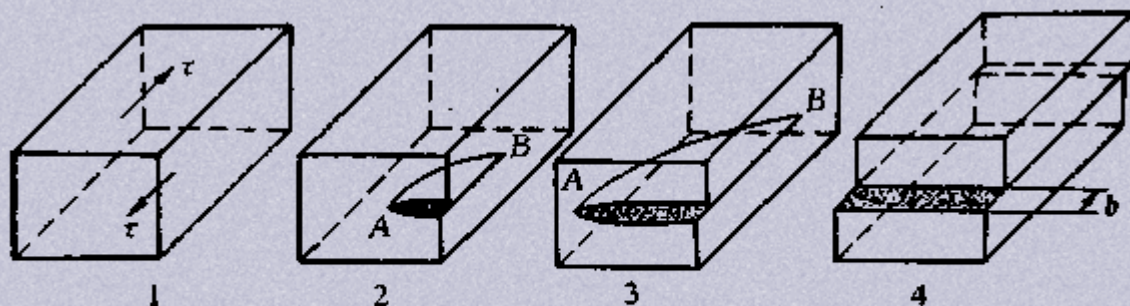
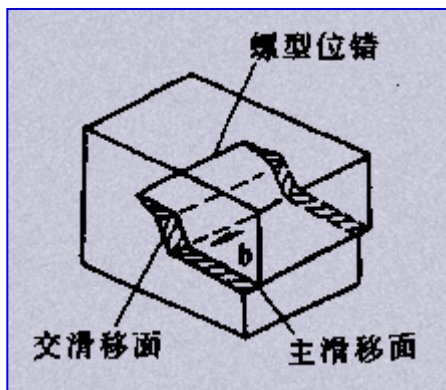


图 3.14 混合位错的滑移过程

位错有一定宽度，位错滑移一个 b 时，位错中原子各移动一小距离。宽位错易移！

位错的运动 (三)



螺位错的交滑移

涉及多个滑移面的滑移

攀移：刃位错 \perp 滑移面 \leq 多余半原子面的扩大或缩小 \leq 原子或空位的扩散

- 特点：(1) 扩散需要热激活，比滑移需要更大的能量
(2) 纯剪应力不能引起体积变化，对攀移不起作用
(3) 过饱和空位的存在有利于攀移进行。

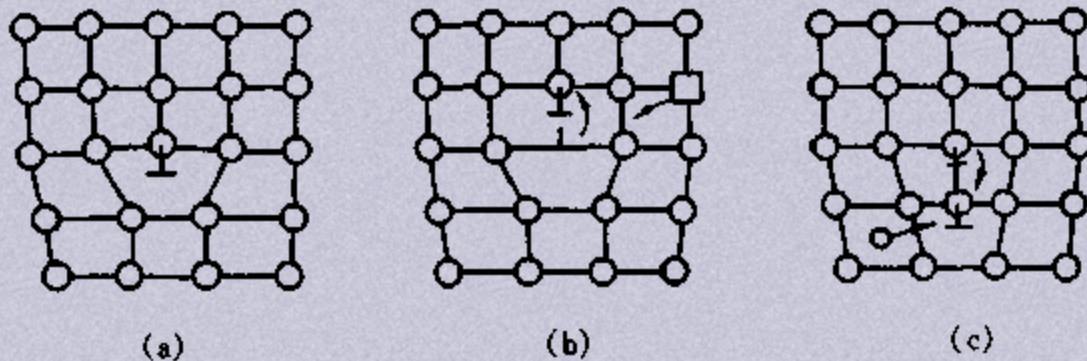


图 3.16 刃型位错的攀移运动模型

(a) 未攀移的位错 (b) 空位运动引起的正攀移 (c) 间隙原子引起的负攀移

位错的交割 (一)

交割：位错与穿过其滑移面的位错彼此切割

意义：有利于晶体强化及空位和间隙原子的产生。

几种典型的位错交割

1. 两个互相垂直的刃位错的交割

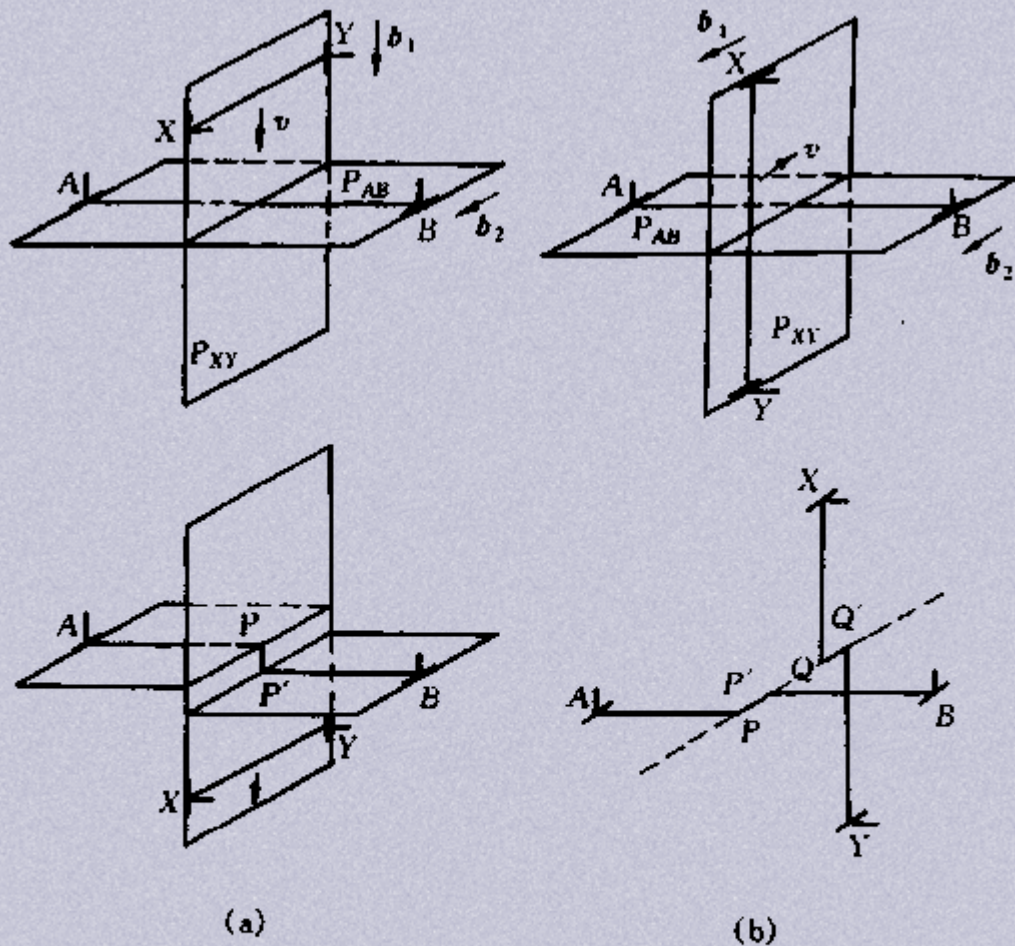
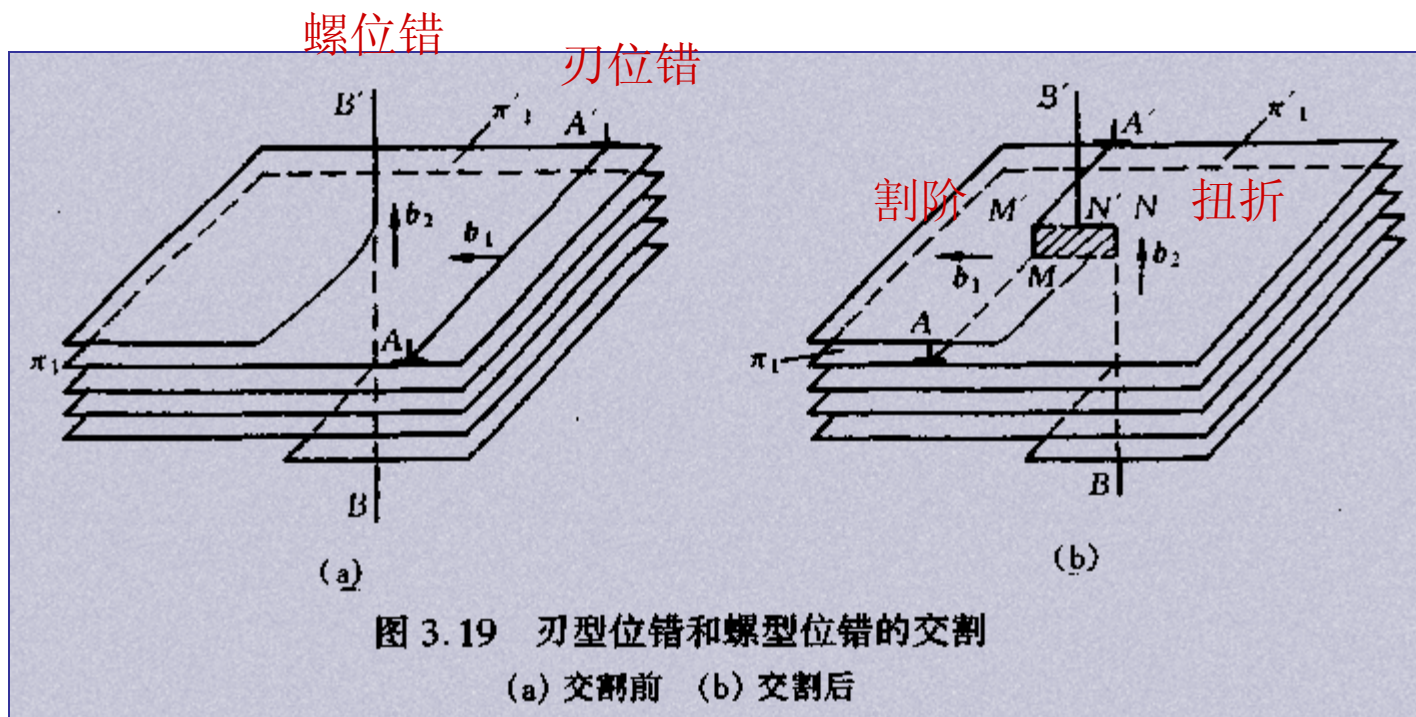


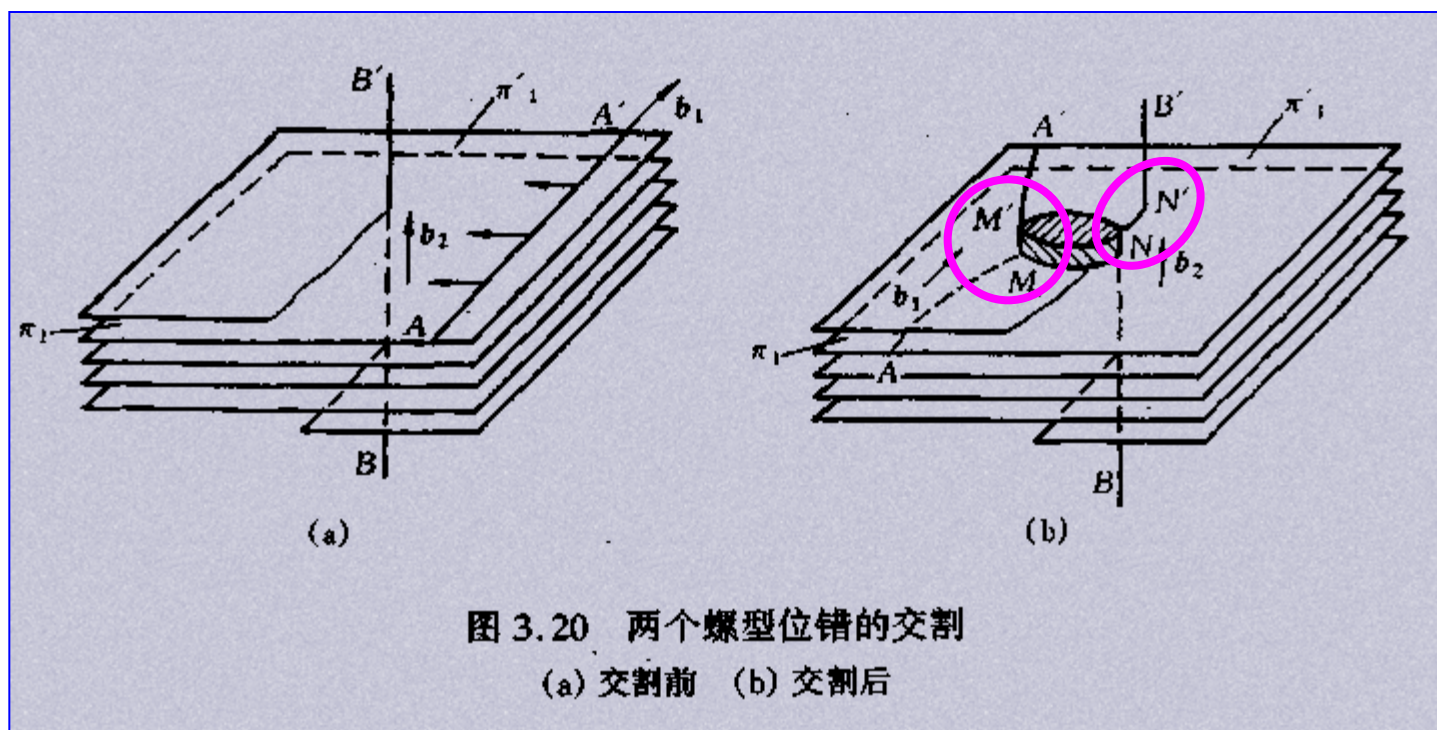
图 3.18 两根互相垂直的刃型位错的交割
(a) 柏氏矢量互相垂直 (b) 柏氏矢量互相平行

位错的交割 (二)



2。刃位错和螺位错的交割：割阶+扭折

位错的交割 (三)



3. 两个互相垂直的螺位错的交割

产生两个刃型割阶，大小和方向各等于对方 \mathbf{b} 矢量

割阶与纽折 (Jog and Kink)

所有的割阶都是刃型位错，
纽折可以是刃位错也可以是螺位错

割阶：攀移，硬化

割阶的三种情况：

1. 高度 $1-2b$ ，拖着走，一排点缺陷
2. 几个 $b-20\text{nm}$ ，形成位错偶。
3. $\rangle 20\text{nm}$ ，各自旋转

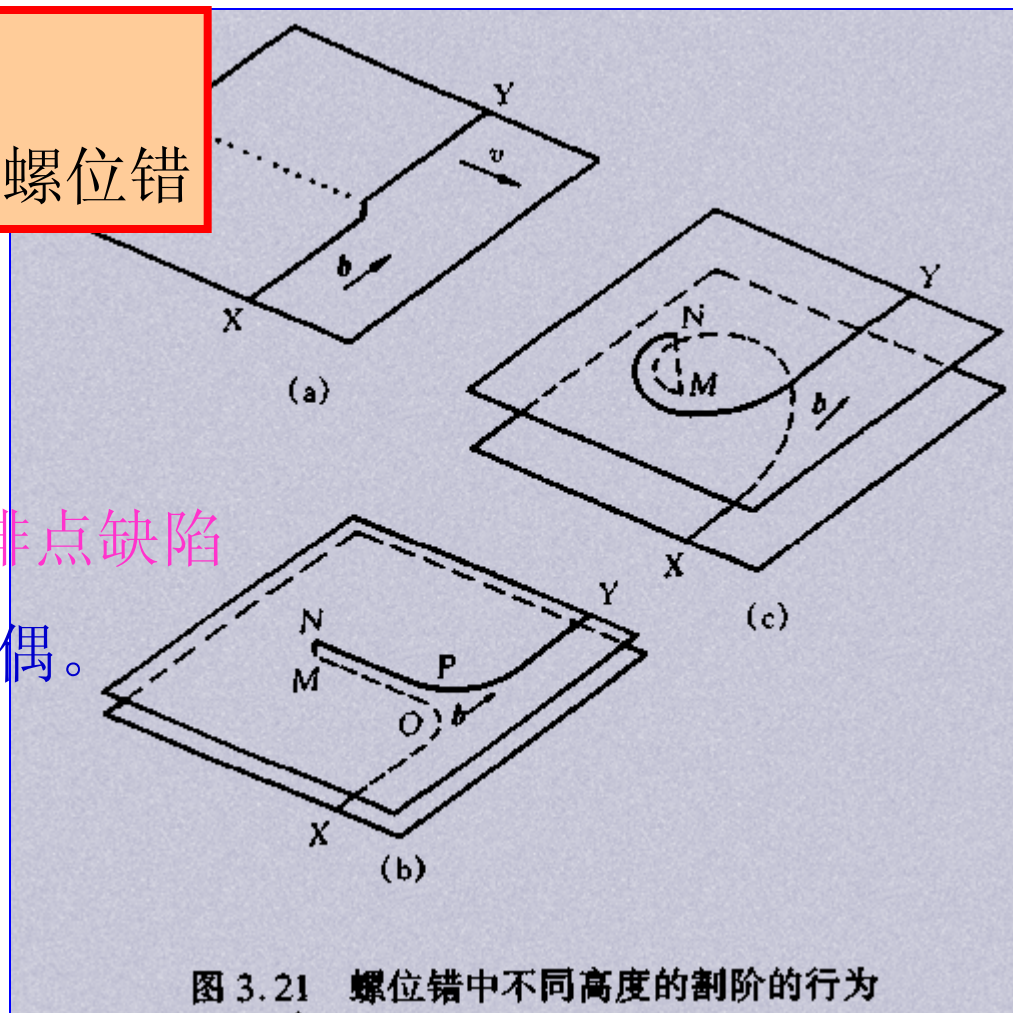


图 3.21 螺位错中不同高度的割阶的行为

位错密度

- 位错密度：单位体积中的位错线的总长度。

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

$$\rho = n/l/A = n/A \quad (2)$$

（面积A中所见的位错线数目）

$$(2) < (1)$$

- 金属晶体中的位错密度：

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

超纯金属单晶体： $\geq 10^3/\text{cm}^2$

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

宏观应变率 与位错运动速率及密度的关系

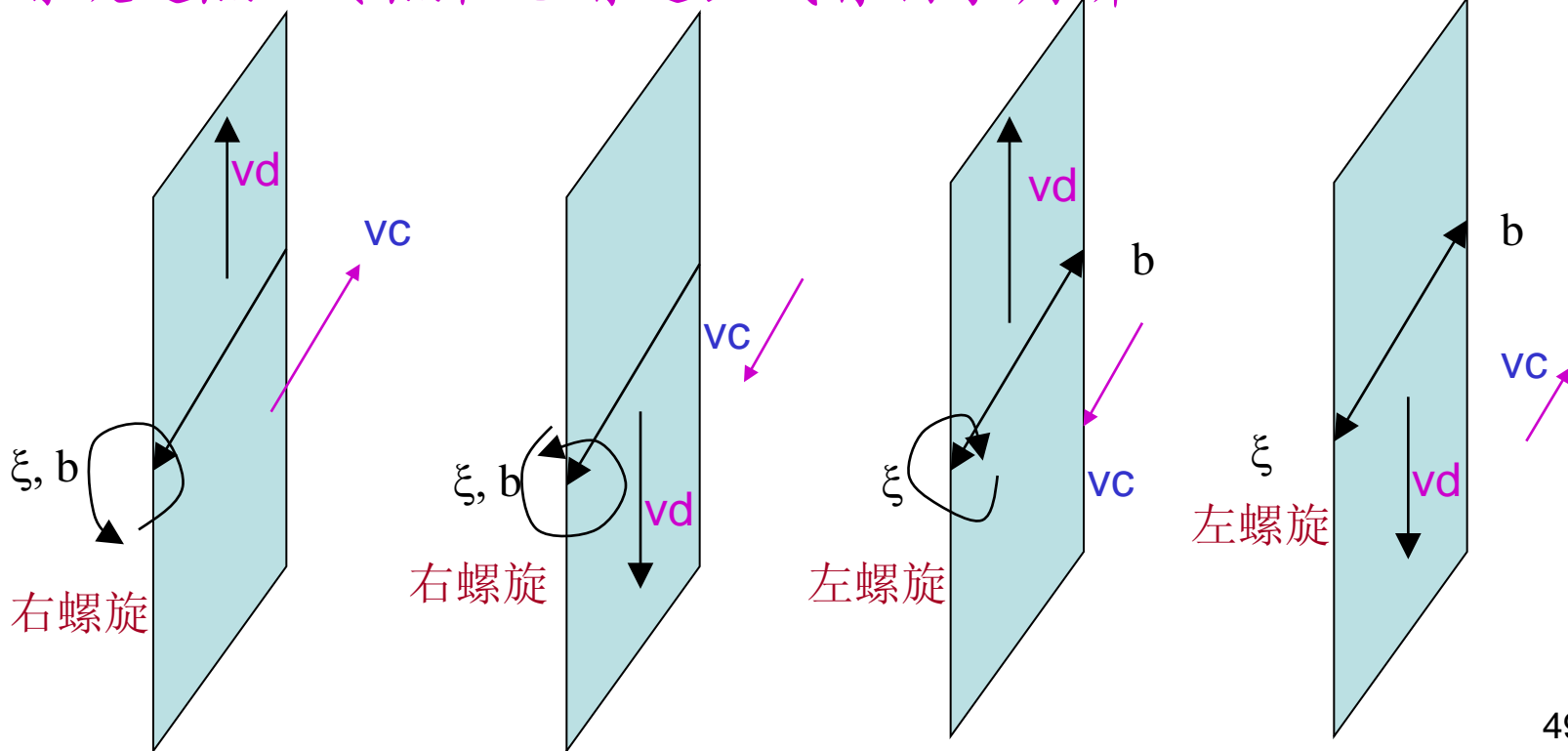
$$\dot{\varepsilon} = \rho v b$$

考虑正应变的情形，分为三步：

1. 一个位错滑过整个滑移面对正应变的贡献
2. 一个位错滑过部分滑移面对正应变的贡献
3. 全部位错在 Δt 时间内的滑移对正应变的贡献
4. 剪应变方法相同

螺位错运动过后晶体两部分的 相对运动方向

- 假设滑移面左侧晶体不动，请判断正负螺位错在不同的方向运动后，右侧晶体的运动方向。
- v_c : 晶体右侧运动方向； v_d : 位错运动方向
- 螺旋起点、终点在已滑过区域有利于判断。



位错的生成

- 晶体生长过程中产生的位错：
 - 1。成分不同 \Rightarrow 晶块点阵常数不同 \Rightarrow 位错过渡
 - 2。晶块偏转、弯曲 \Rightarrow 位相差 \Rightarrow 位错过渡
 - 3。晶体表面受到影响 \Rightarrow 台阶或变形 \Rightarrow 产生位错
- 快速凝固 \Rightarrow 过饱和空位 \Rightarrow 聚集 \Rightarrow 位错
- 热应力和组织应力 \Rightarrow 界面和微裂纹处应力集中 \Rightarrow 局部滑移 \Rightarrow 位错

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
位错必有增殖！

- 主要增殖机制：
- Frank-Read 位错源

$$\tau_c = \frac{Gb}{2r} \leq \frac{Gb}{L}$$

已为实验所证实：Si, Al-
Cu…晶体中观察到

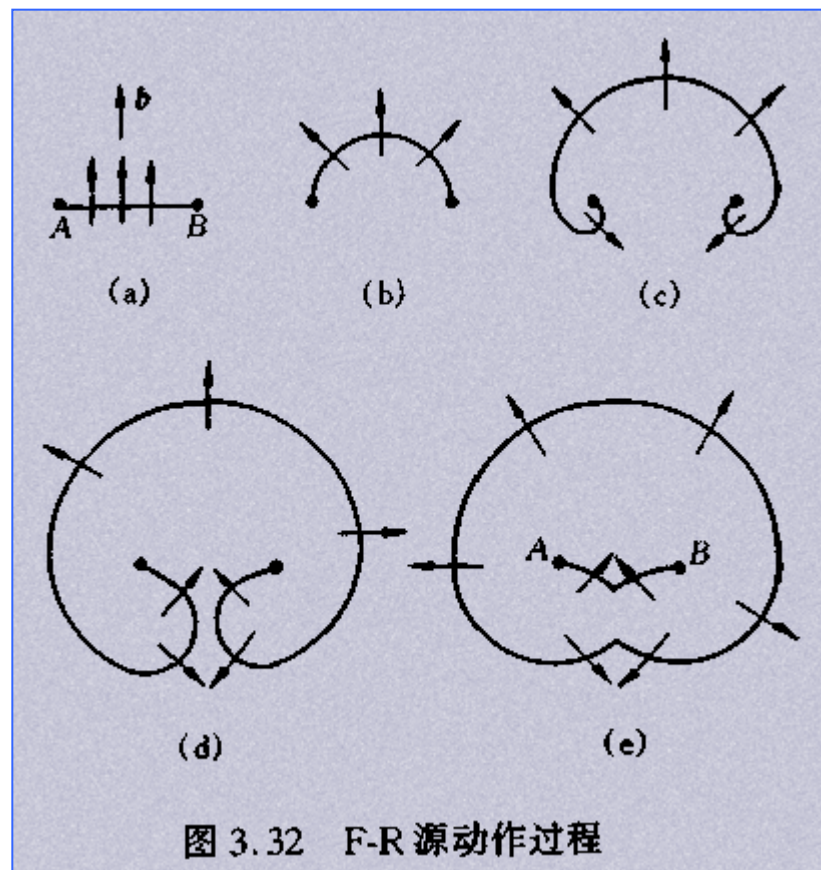
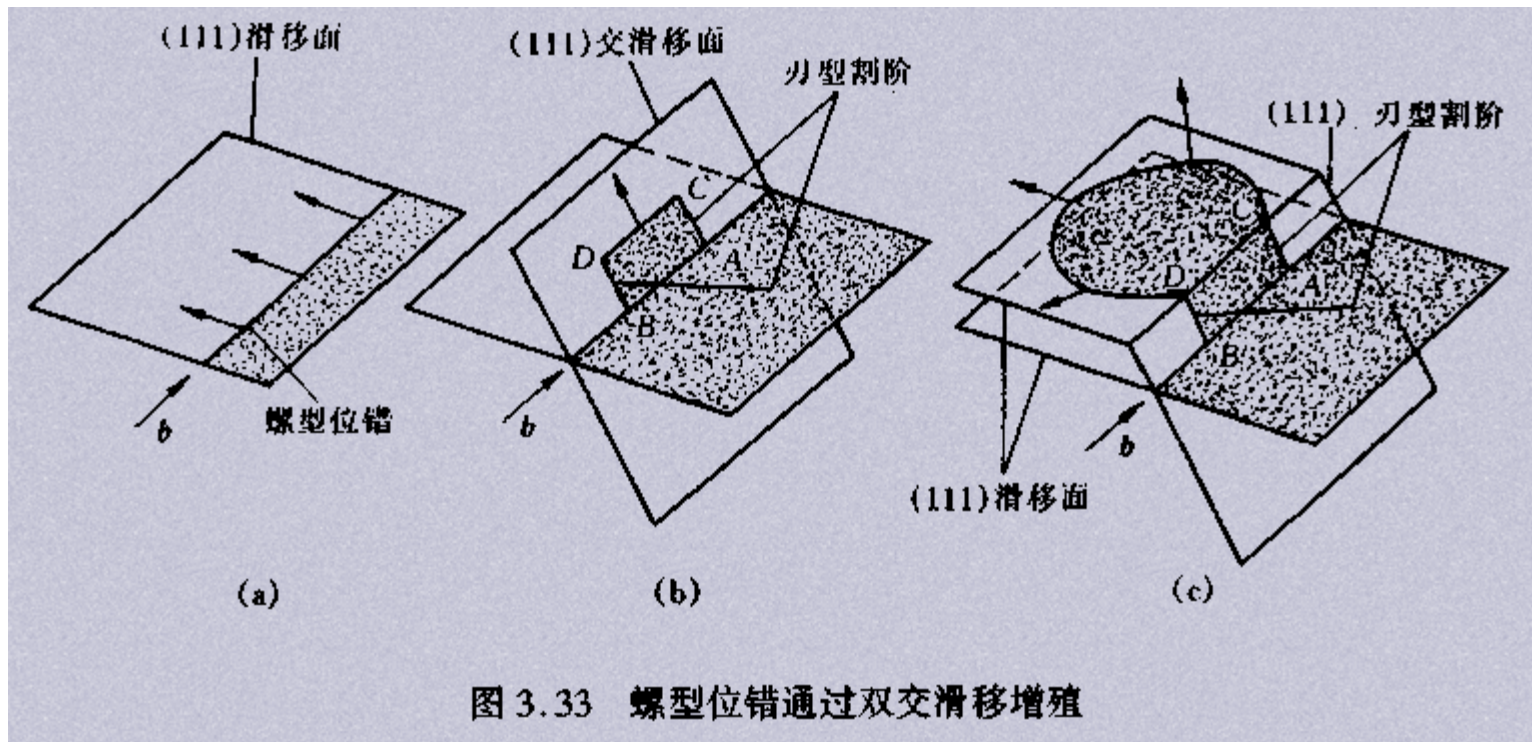


图 3.32 F-R 源动作过程

螺位错双交滑移增殖



- 比Frank-Read源更有效!

实际晶体中的位错

- 简单立方晶体：柏氏矢量 = 点阵矢量
实际晶体：柏氏矢量 = , >, < 点阵矢量
- 全位错 (perfect dislocation: 柏氏矢量 = $n \times$ 点阵矢量
 $n=1$: 单位位错
不全位错 (imperfect dislocation):
柏氏矢量 $\neq n \times$ 点阵矢量
 $n<1$: 部分位错 (partial dislocation)
- 实际晶体中的位错须满足两大条件:
结构条件: 连接一个平衡位置与另一个平衡位置
能量条件: b 越小越稳定

典型晶体结构中的单位位错的柏氏矢量

表 3.1 典型晶体结构中单位位错的柏氏矢量

结 构 类 型	柏 氏 矢 量	方 向	$ b $	数 量
简 单 立 方	$a\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	a	3
面 心 立 方	$\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\frac{1}{2}\sqrt{2}a$	6
体 心 立 方	$\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\frac{1}{2}\sqrt{3}a$	4
密 排 六 方	$\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	a	3

滑移面：密排面、

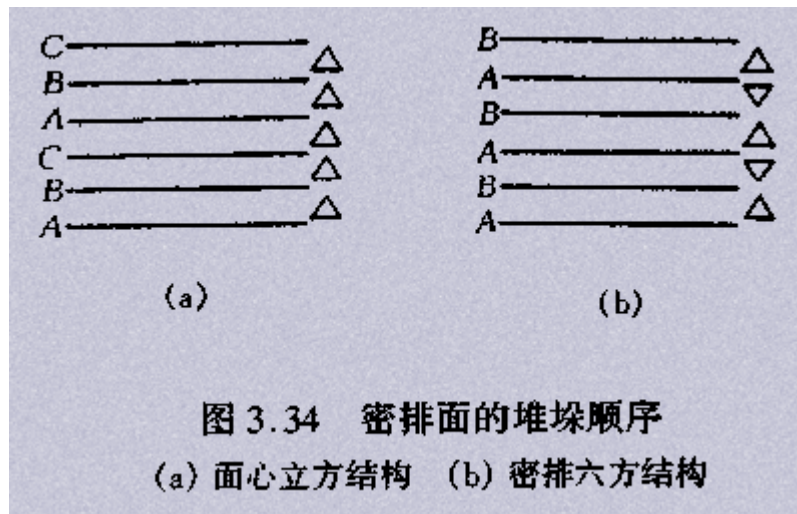
b 矢量：密排方向

实际晶体中的堆垛顺序

- 不全位错：与堆垛层错有关
- 堆垛层错：实际晶体中的密排面的正常堆垛顺序遭到破坏
- 实际晶体中的堆垛顺序：密排原子面按一定顺序堆垛而成。

面心立方：ABCABCABC...; $\Delta\Delta\Delta\Delta\Delta...$

密排六方：ABABABAB...; $\Delta\nabla\Delta\nabla...$



堆垛层错 (一)

- 堆垛层错: 实际晶体中的密排面的正常堆垛顺序遭到破坏
- 面心立方晶体中存在的层错
抽出型:
插入型:
- 特点: 一个插入型层错相当于两个抽出型层错
- 面心立方晶体中存在层错时相当于在其间形成了一薄层的hcp晶体结构

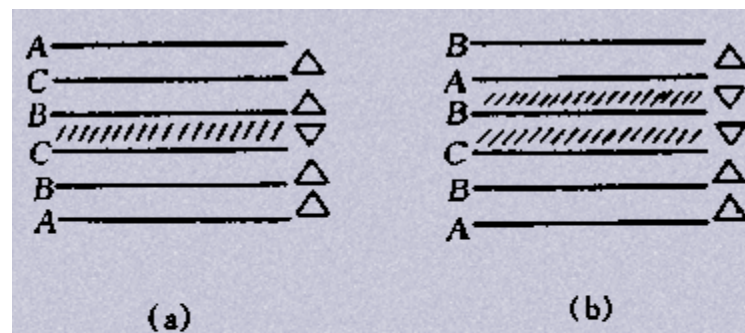
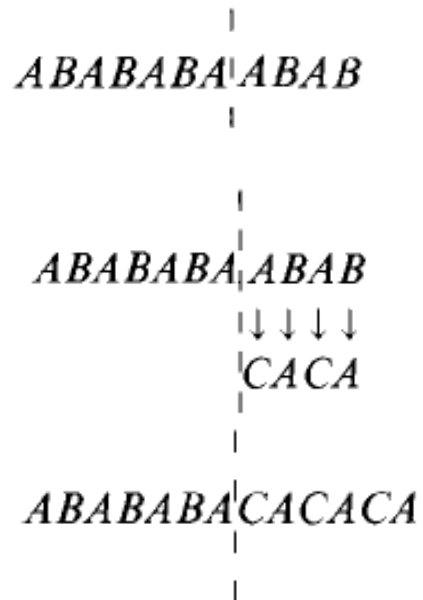


图 3.35 面心立方结构的堆垛层错
(a) 抽出型 (b) 插入型

堆垛层错 (二)

密排六方晶体中的层错

抽出型层错



插入型层错

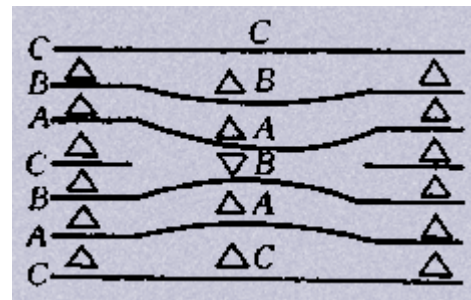


层错能

- 形成层错几乎不产生点阵畸变，但会破毁晶体的正常周期完整性=> 晶体能量升高
- 增加的能量称为“堆垛层错能”或“层错能”
(J/m²)
- 层错能越低，层错出现的几率越大，越易观察到，例如奥氏体不锈钢中。

不全位错

- 不全位错：堆垛层错与完整晶体的分界线 (b 矢量不等于点阵矢量)



Fcc晶体中两种重要的不全位错

- 肖克莱 (Schckley) 不全位错: $(a/6)[1, -2, 1]$ (在(111)面上)
- 特点:**
 - 1) b 矢量永远平行于层错面
 - 2) 层错为一平面 \Rightarrow 其边界在一平面内
 - 3) 可以为刃型、螺形、混和位错
 - 4) 滑移的结果是层错面的扩大或缩小。但不能攀移, 因它必须和层错始终相连

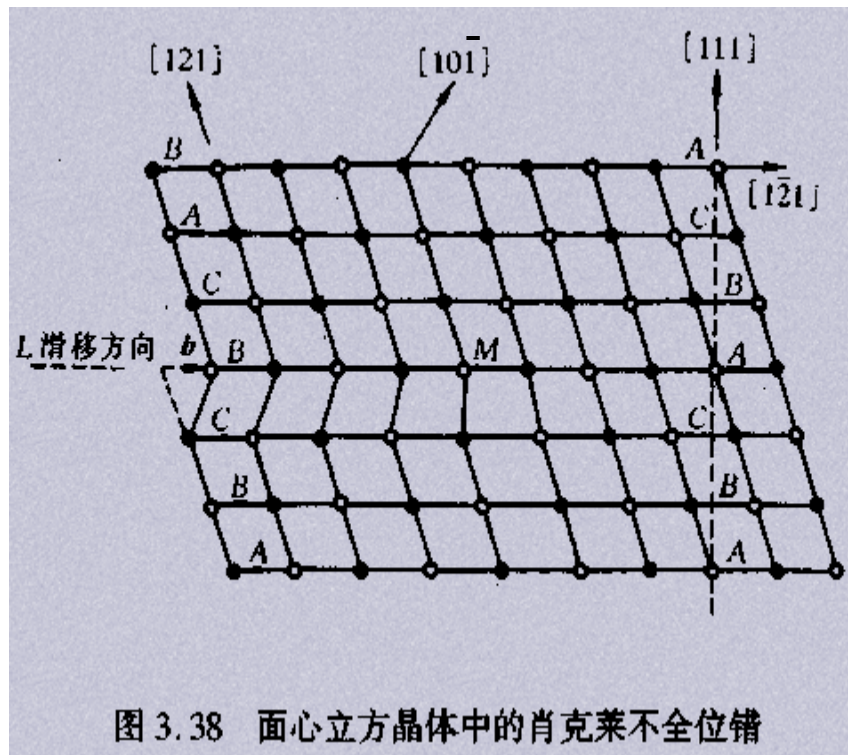
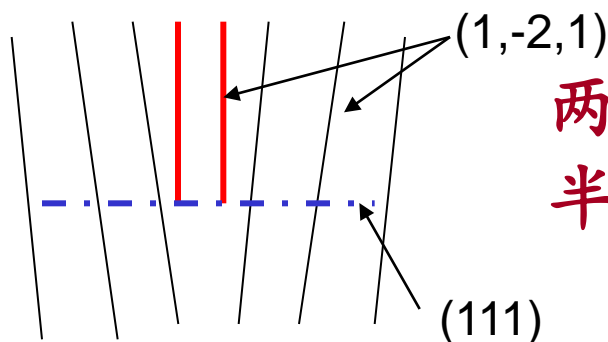
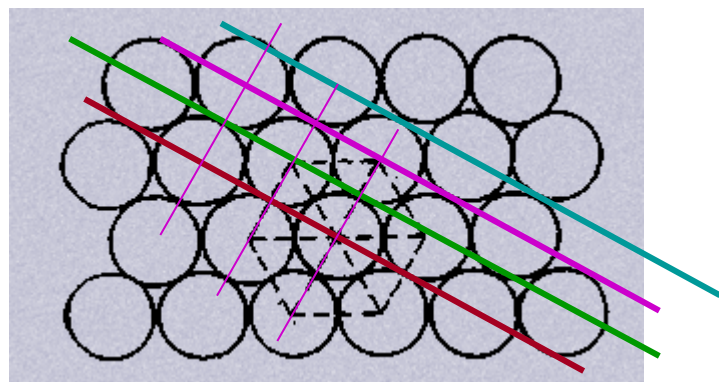
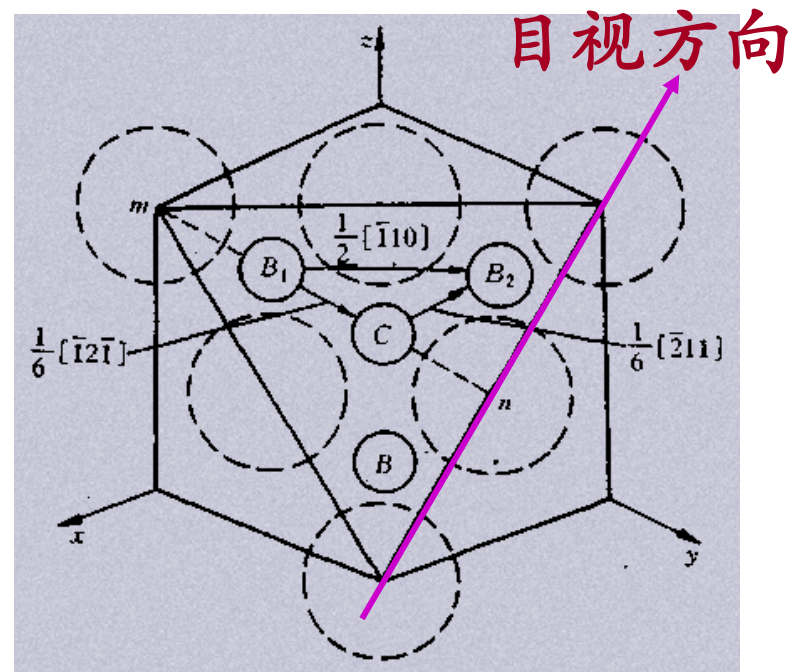
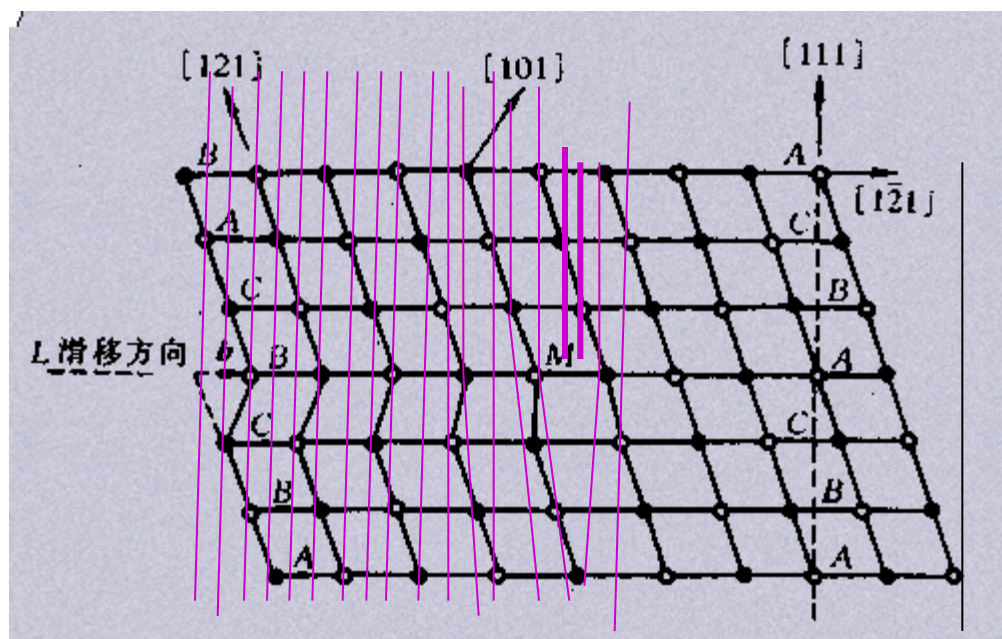


图 3.38 面心立方晶体中的肖克莱不全位错

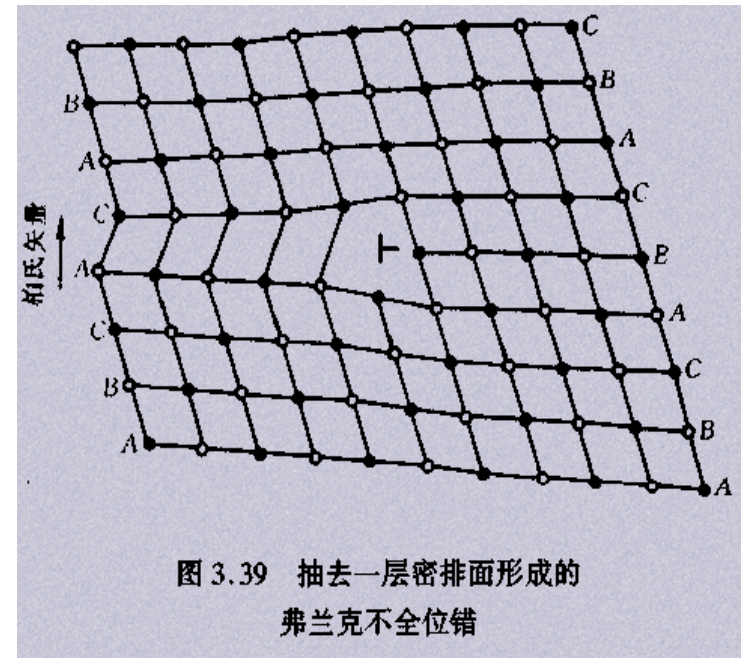
面心立方晶体中的肖克莱不全位错： 再看仔细点！



两个多余的
半原子面！

弗兰克 (Frank) 不全位错

- 弗兰克 (Frank) 不全位错：插入或抽出半原子面所形成的层错与完整晶体的边界， $(a/3)*\langle 111 \rangle$ 。
- 抽出：负弗兰克 (Frank) 不全位错
插入：正弗兰克 (Frank) 不全位错
- **特点：** a) $(a/3)*\langle 111 \rangle$ ，纯刃型位错
b) 不能在滑移面上滑移，只能攀移
c) 属不动位错 (sessile dislocation)



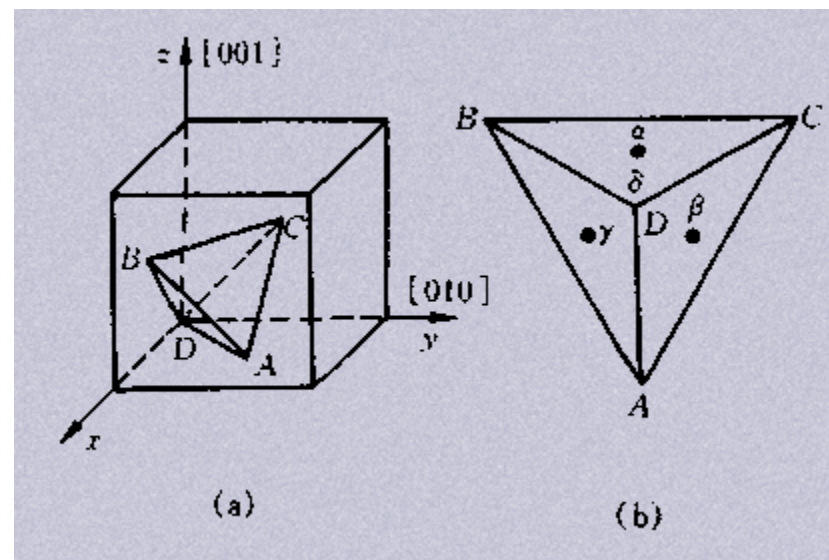
面心立方晶体中的位错

- 汤普森 (Thompson) 四面体

FCC 中所有重要的位错和位错反应均可用 Thompson四面体表示。

(1) 四个面即为4个可能的滑移面
(111), (-1,1,1), (1,-1,1), (1,1,-1)

(2) 6条棱边代表12个晶向，即FCC中所有可能的12个全位错的b矢量

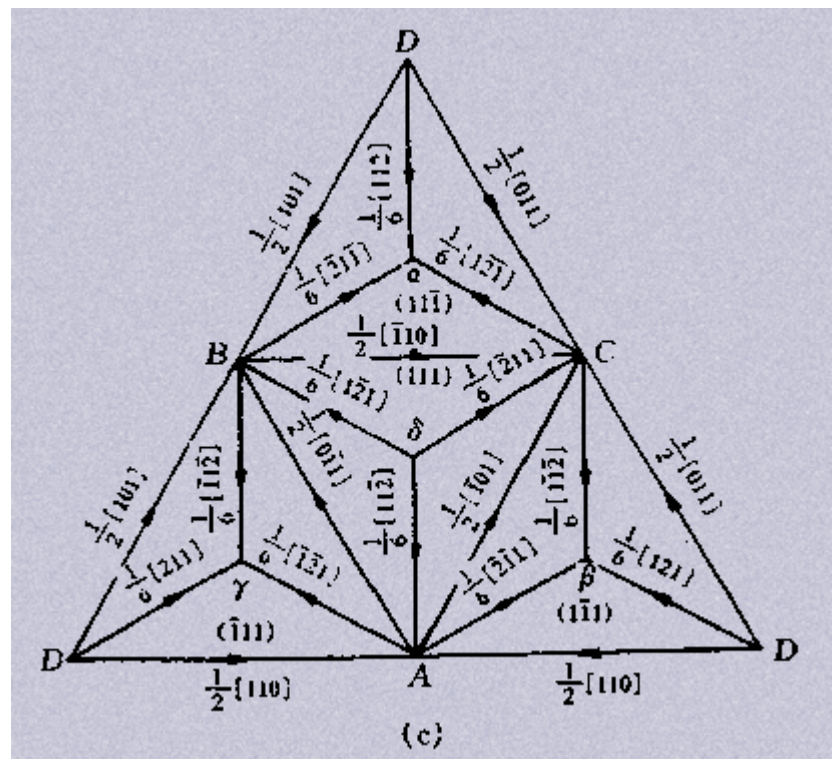


汤普森四面体的展开

**每个顶点与其中心的连线共代表24个 $(a/6)\langle 112 \rangle$ 肖克莱不全位错的b矢量

**4个顶点到它所对的三角形中点连线代表8个 $(a/3)\langle 111 \rangle$ 弗兰克不全位错的b矢量

**4个面中心相连即为 $(a/6)\langle 110 \rangle$ 压杆位错



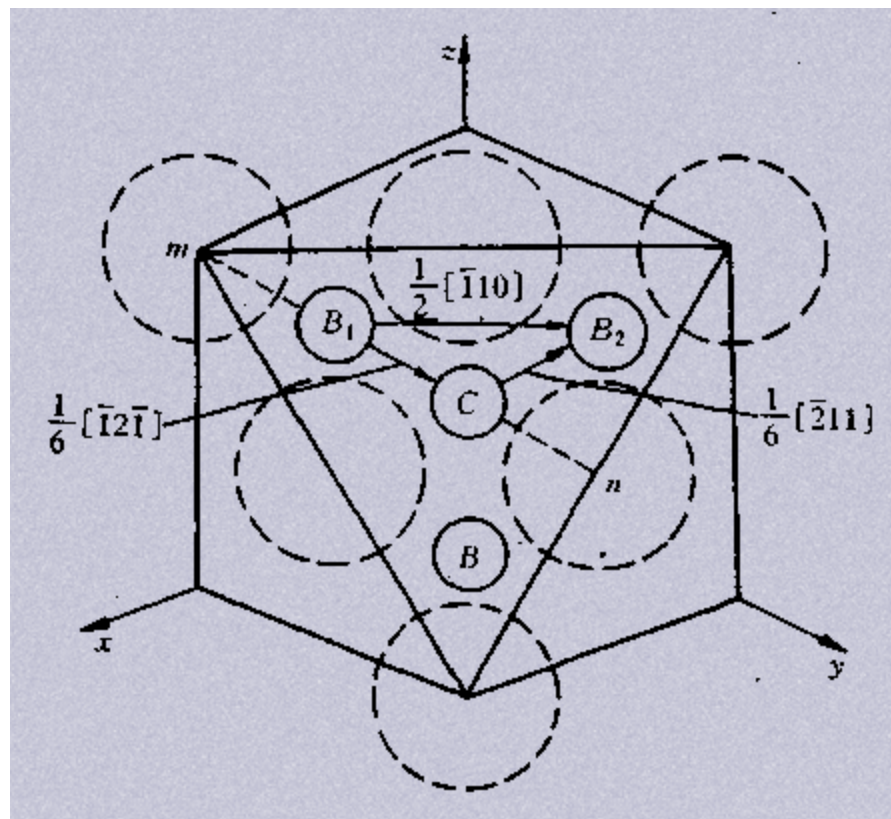
FCC中的位错反应

- 位错反应：位错之间的合并与分界

1) 几何条件：b矢量
总和不变

2) 能量条件：反应降低位错总能量

$$\sum |b_{before}|^2 > \sum |b_{after}|^2$$



$$\frac{a}{2}[10\bar{1}] \leftrightarrow \frac{a}{6}[11\bar{2}] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$$

扩展位错的宽度

□ **扩展位错**：一种特殊的位错组态，系由两个不全位错以及在两个不全位错之间的一片层错所构成。一般由全位错分解而成

吸引力：层错能， γ

排斥力：两位错间的斥力

$$F = \frac{G(\bar{b}_1 \bullet \bar{b}_2)}{2\pi d} \quad d = \frac{G(\bar{b}_1 \bullet \bar{b}_2)}{2\pi\gamma}$$

可见： d 与 γ 成反比，

与 G 成正比

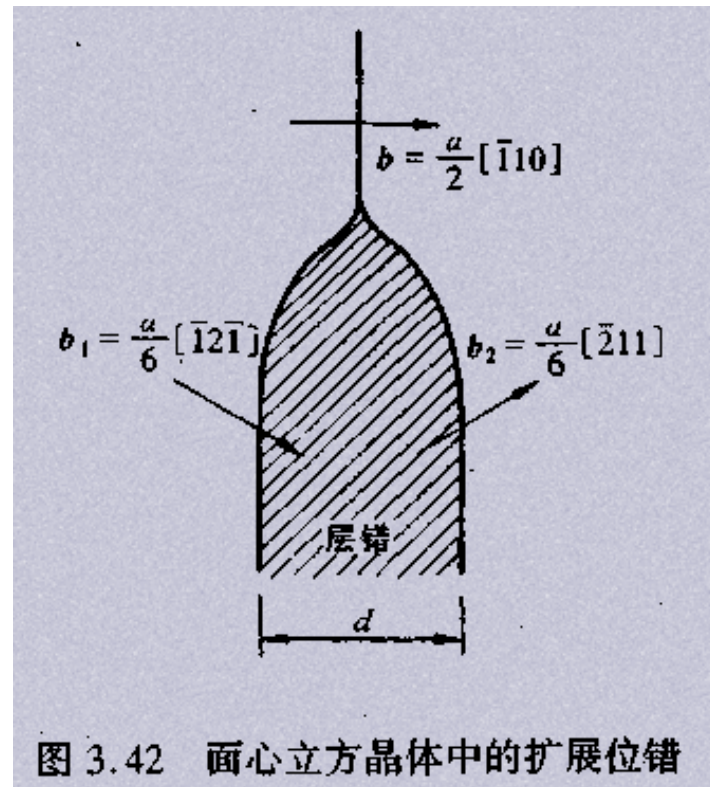
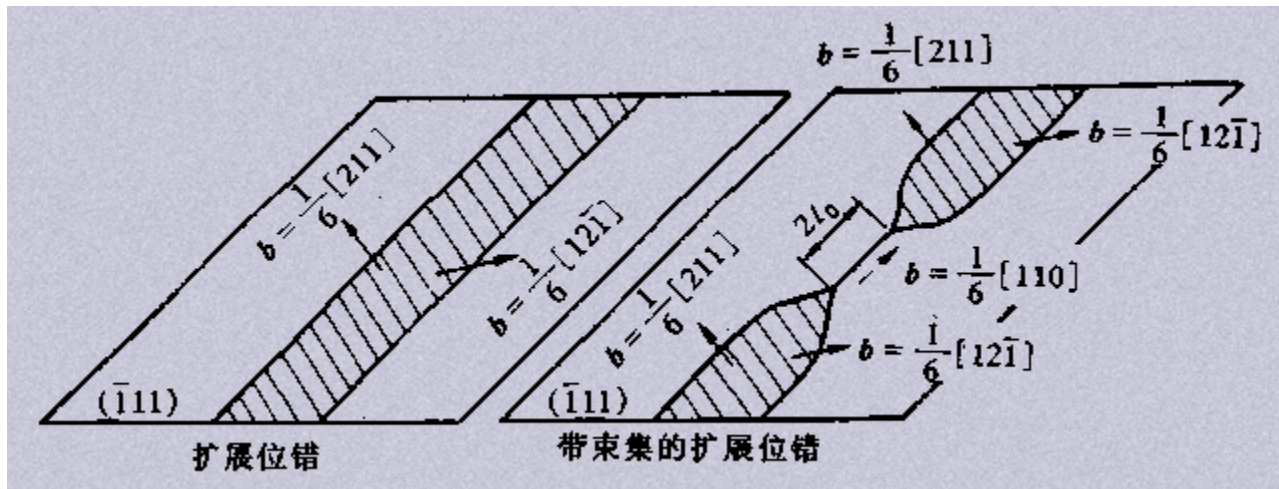
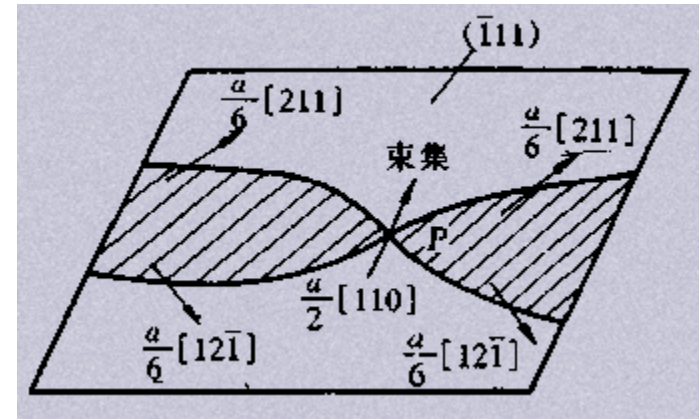


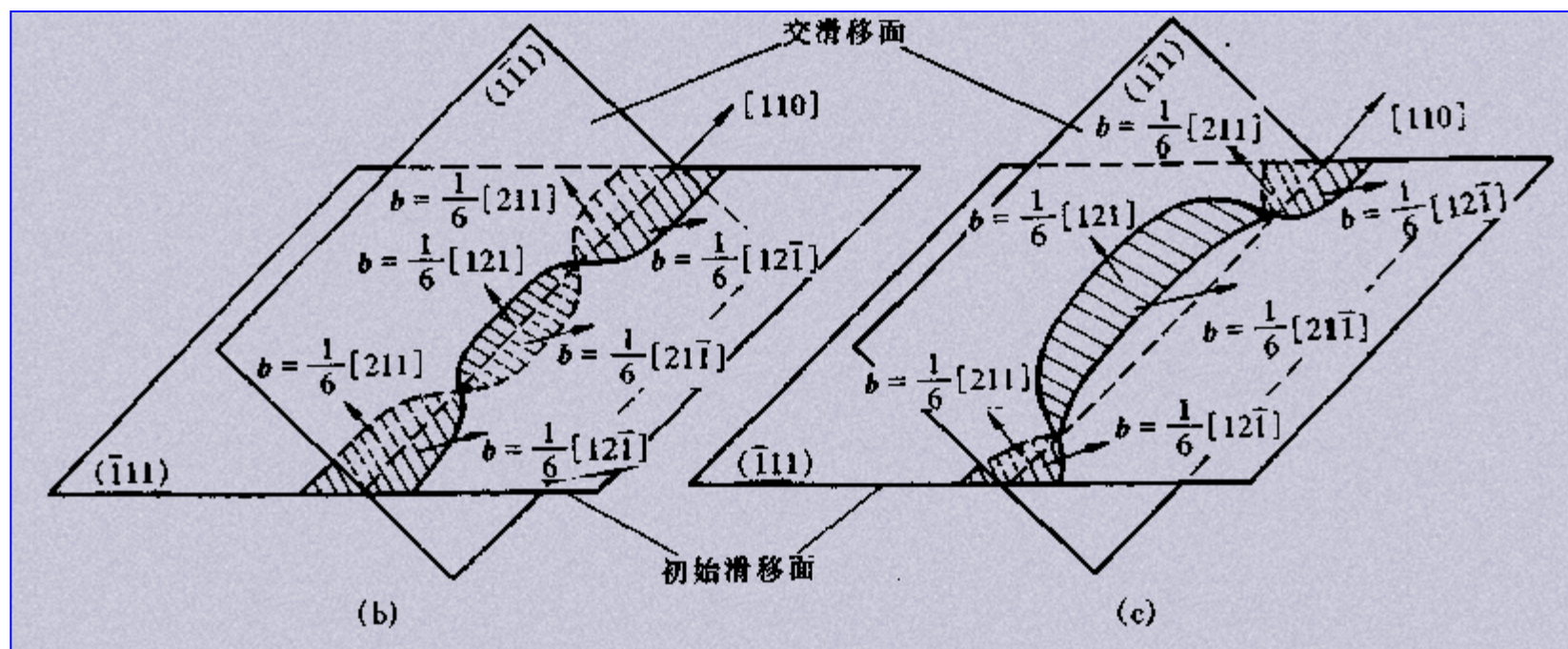
图 3.42 面心立方晶体中的扩展位错

扩展位错的束集

- 束集：在外切应力作用下，层错宽度减小至零，局部收缩成原来的全位错：位错扩展的 reverse 过程



扩展位错的交滑移



- 扩展位错=>束集=>交滑移=>重新扩展（在新滑移面上）

- 扩展位错的交滑移比全位错困难，层错能越低，扩展位错越宽，交滑移越困难

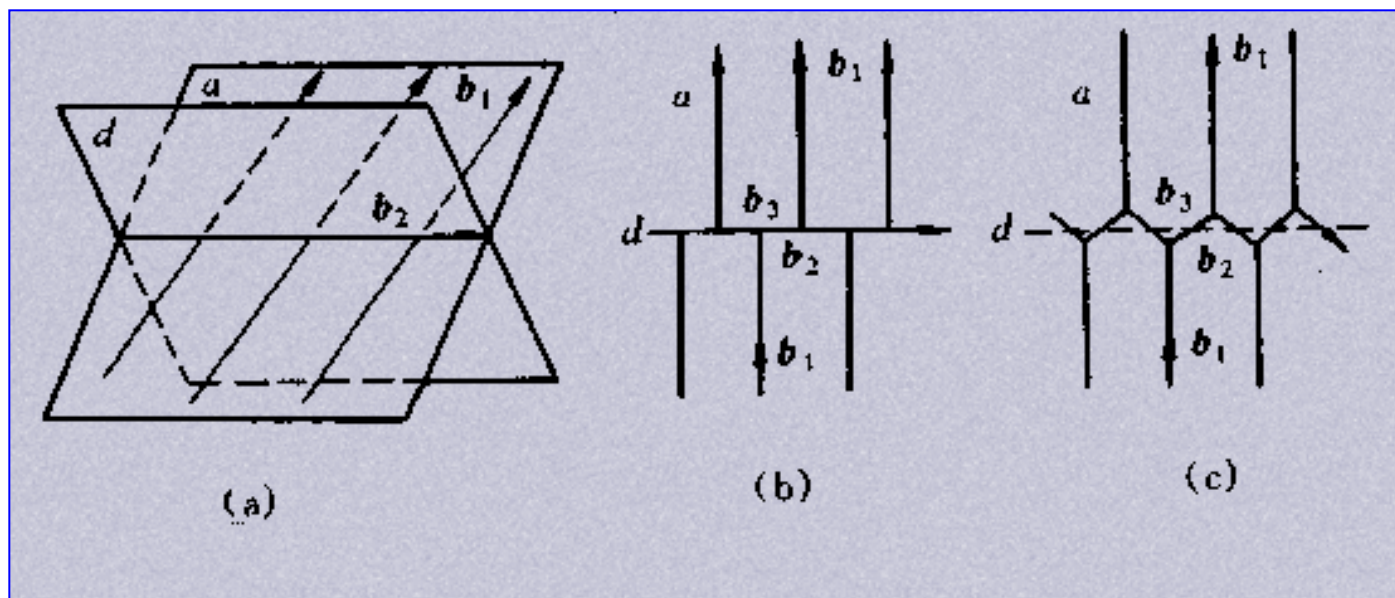
位错网络

- 实际晶体中的不同b矢量的位错可组成二维或三维的位错网络

b_1 : 一组位错

b_2 一个螺型位错

b_1 与 b_2 成 120° 夹角, 相互吸引



面角位错 (Lomer-Cottrell 位错)

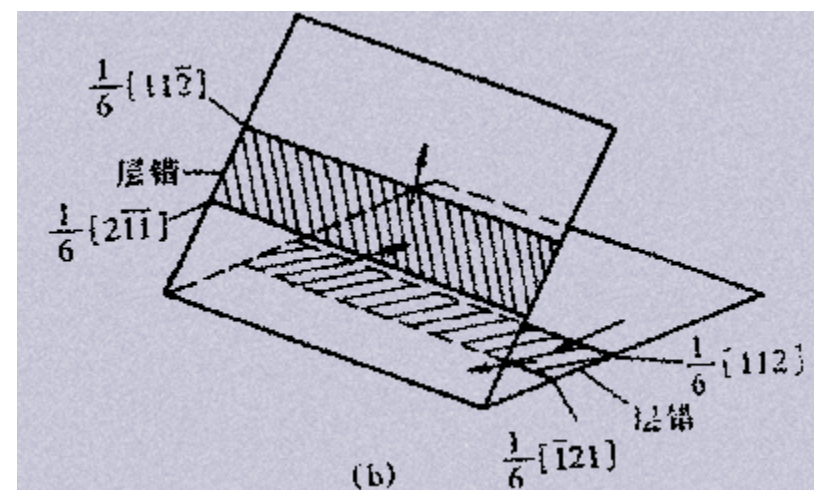
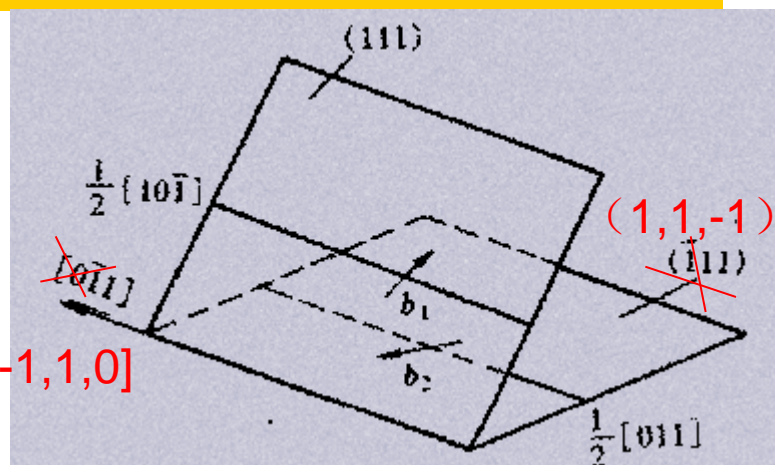
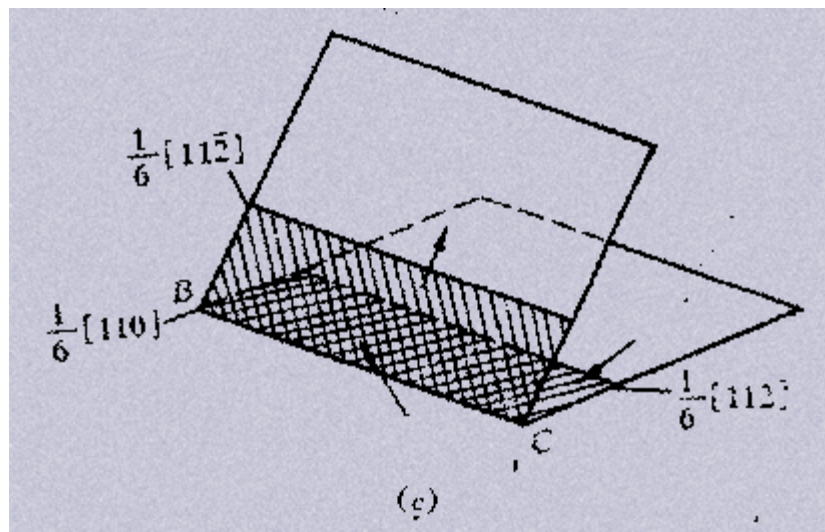
(111) 面上

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{a}{2}[10\bar{1}] &= \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[11\bar{2}], \text{ 即 } CA = C\delta + \delta A \\ \frac{a}{2}[011] &= \frac{a}{6}[112] + \frac{a}{6}[\bar{1}21], \text{ 即 } DC = Da + aC \end{aligned} \right.$$

(1,1,-1) 面上

$$\frac{a}{6}[\bar{1}21] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[110], \quad \text{即 } \alpha C + C\delta \rightarrow \alpha\delta$$

滑移面: (001)

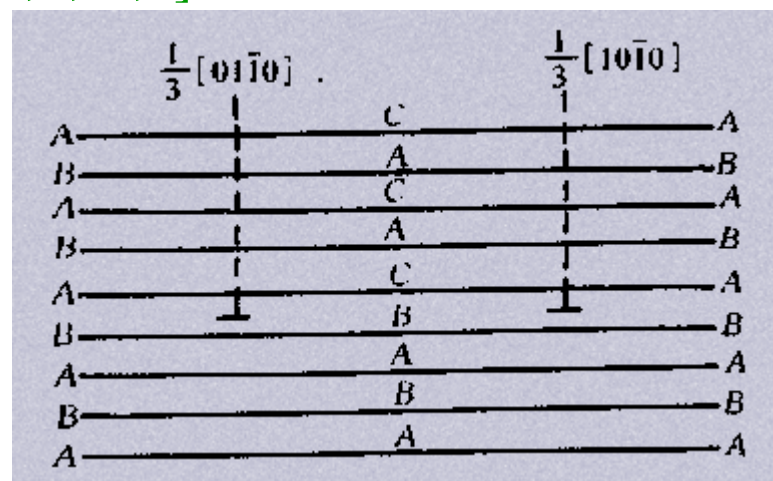


体心立方晶体中的位错

- **单位位错**： $(a/2)\langle 111 \rangle$ ，滑移方向 $\langle 111 \rangle$ ，通常可能的滑移面有 $\{110\}$ ， $\{112\}$ ， $\{123\}$ ，随成分、温度及变形速度而异。
- 交滑移 \Rightarrow 滑移线呈波纹形 \Leftarrow 层错能高，不易出现扩展位错
- 滑移切应力的不对称性
- $\langle 111 \rangle$ 螺位错的核心具有独特的性质

密排六方晶体中的位错

- 最短的点阵矢量沿 $\langle 1,1,-2,0 \rangle$, 次短的点阵矢量 $\langle 0001 \rangle$
- 单位位错: $(a/3)\langle 1,1,-2,0 \rangle, c\langle 0001 \rangle, (1/3)\langle 1,1,-2,3 \rangle$
- 滑移面: (0001) (当 $c/a \geq 1.633$ 时)
 $\{1,0,-1,0\}, \{1,0,-1,1\}$ (当 $c/a < 1.633$ 时)
- 扩展位错:
 $(1/3)[1,1,-2,0] \rightarrow (1/3)[1,0,-1,0] + (1/3)[0,1,-1,0]$
 全位错 \rightarrow 肖克莱不全位错



第五部分

表面与界面

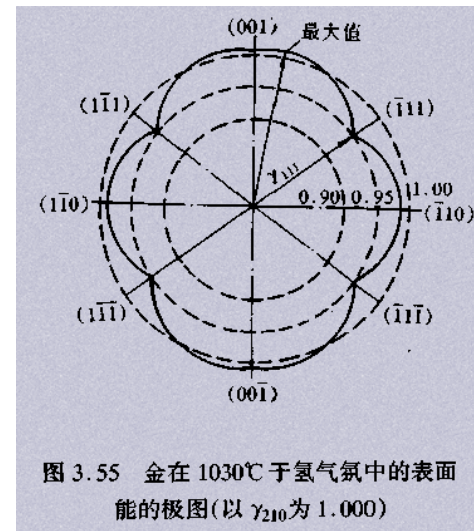
表面及界面

- 界面包括：外表面（自由表面）和内界面
- 表面：固体与气体或液体的分界面
- 界面：几个原子层厚，原子排列于成分不同于内部

表面能： γ 定义为形成单位面积的新表面所需做的功

[illegible]

$$\gamma = \frac{\text{被割断的化学键数目}}{\text{形成了新的表面}} \times (\text{能量} / \square \square \square)$$



**晶体中的表面张力是各向异性的

****原子密度最大的面具有最低的 γ 值 \rightarrow 晶体表面一般为原子密度最大的面**

****表面能与曲率有关：曲率越大，表面能越大**

晶界

- **晶界**：取向不同的晶粒之间的界面（内界面）
- **晶界具有5个自由度**：两晶粒的位相差（3），界面的取向（2）

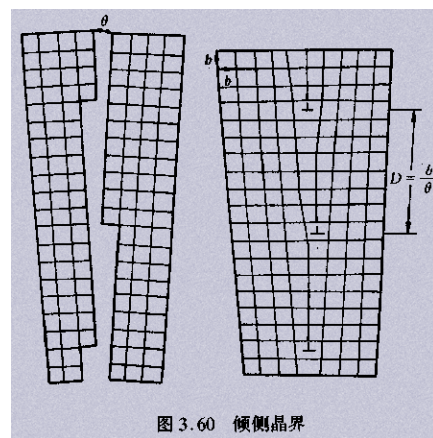
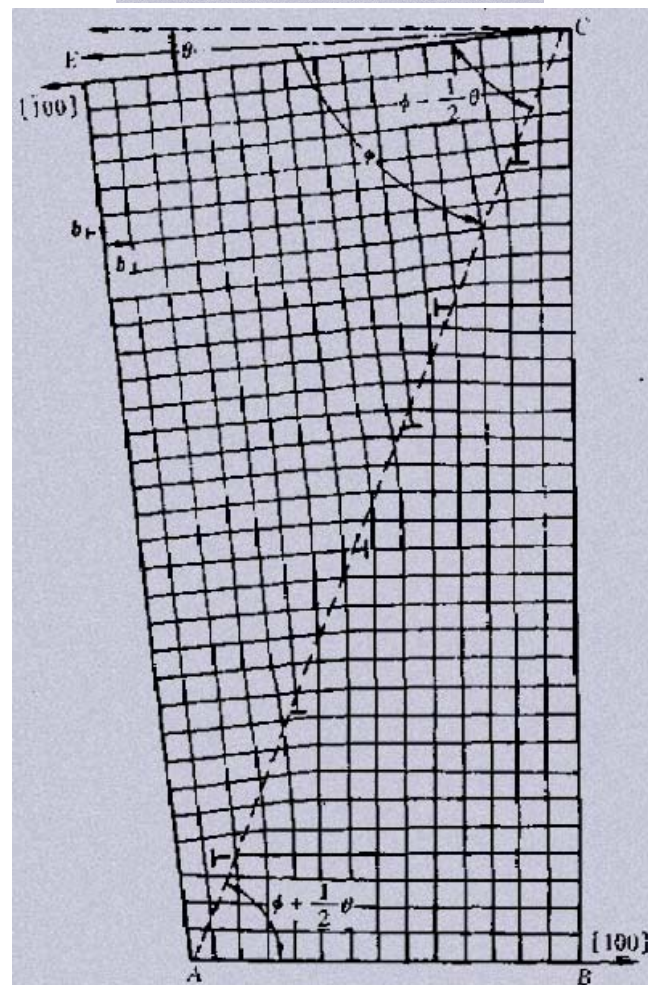


图 3.60 倾斜晶界



对称倾斜晶界：由一系列平行的刃形位错所构成

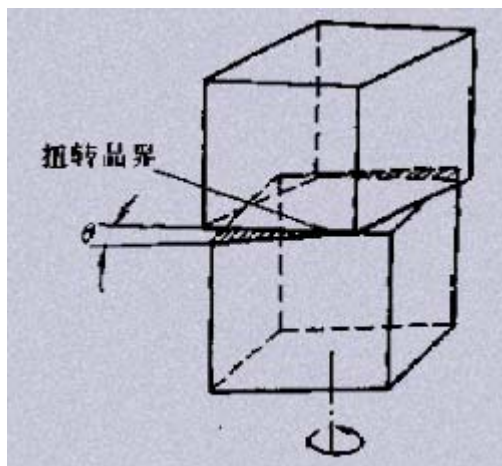
$$D = \frac{b}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \quad \text{当 } \theta \text{ 很小时, } \sin \frac{\theta}{2} \approx \frac{\theta}{2} \quad \therefore D = \frac{b}{\theta}$$

不对称倾斜晶界：可看成由两组柏氏向量 \perp 的位错交错排列而成

$$D_{\perp} = \frac{b_{\perp}}{\theta \sin \varphi} \quad D_{\parallel} = \frac{b_{\parallel}}{\theta \cos \varphi}$$

扭转晶界：可看成是由互相交叉的螺型位错所组成

扭转晶界



$$D = \frac{b}{\theta}$$

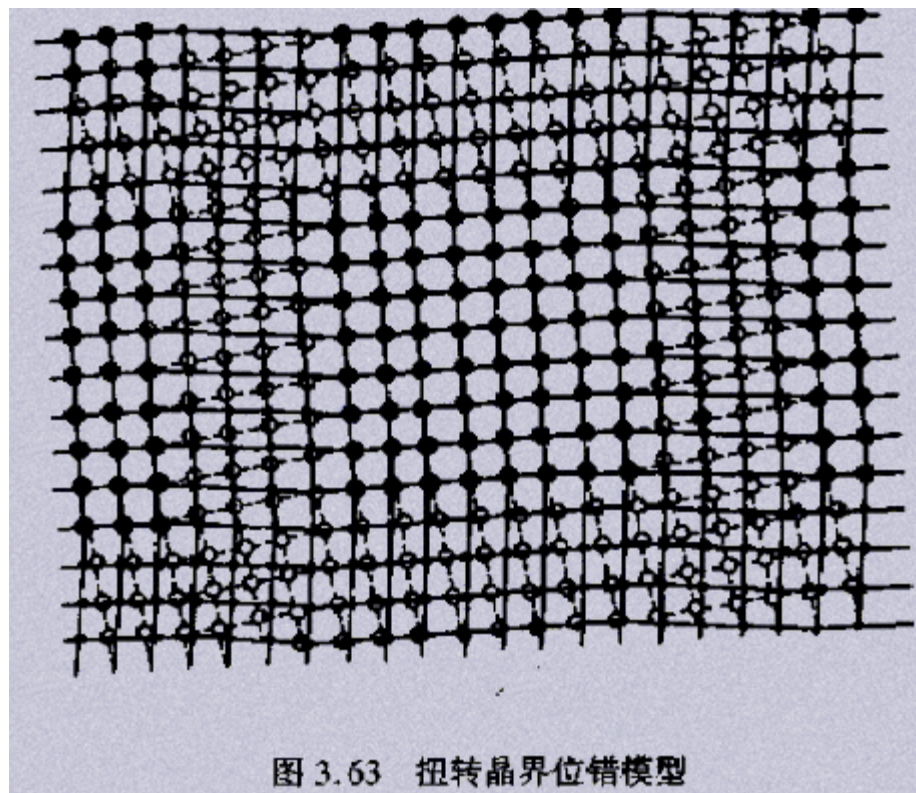


图 3.63 扭转晶界位错模型

*** 一般小角度晶界都可看成两部分晶体绕某一轴旋转一角度而形成，不过该转轴即不平行也不垂直晶界，故可看成一系列刃位错，螺位错或混合位错的网络组成。

大角度晶界

High-angle grain boundary

* 相邻晶粒在交界处的形状不是光滑的曲面，而是由不规则台阶组成的，A,B,C,D特征区域

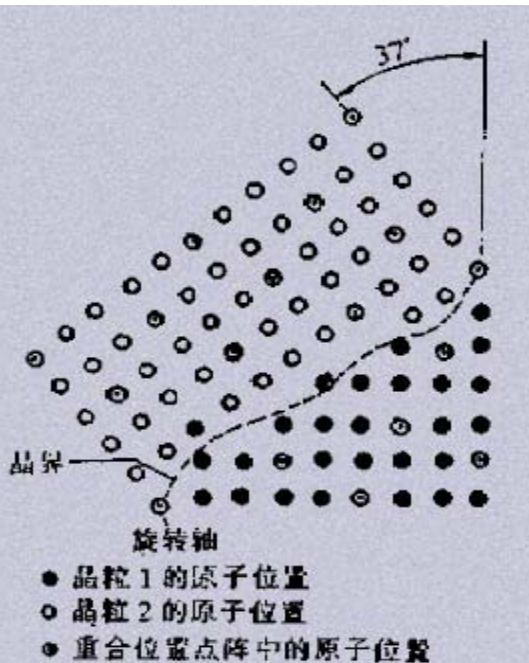


图 3.65 当两相邻晶位向差为 37° 时，存在的 $1/5$ 重合位置点阵

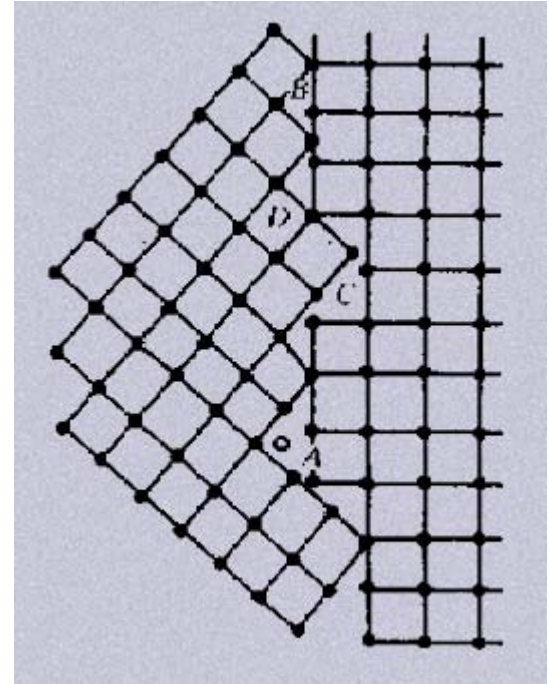
*晶界可看成是好区与坏区交替相间组合而成的。

*一般大角度晶界的宽度一般不超过三个原子间距。

• 重合位置点阵模型

**晶界能较低

**特殊位向



晶界能

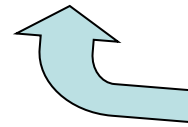
- 晶界能：形成单位面积晶面时，系统Helmholtz自由能的变化，即 dy/dA 。它等于接口区单位面积的能量减去无界面时该区单位面积的能量。
- 也可看成由于晶界上点阵畸变增加的那部分额外自由能。

在纯金属中

$$\gamma = dF/dA$$

在合金中

$$\gamma = dF/dA - \sum_i u_i \left(\frac{dn_i}{dA} \right)$$



晶介面积 A 改变而引起的晶粒内 i 组元原子数的改变

小角度晶界的界面能

单位长度刃型位错的能量： $E_{\text{刃}} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} + E_c$

$$D = b/\theta \quad \text{而} \quad \gamma = \frac{E \cdot 1}{D \cdot 1} = E/D$$

$$\therefore \gamma = \frac{Gb\theta}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} + \frac{\theta}{b} \cdot E_c$$

令 $r_0 = b$, $R = D$ 则

$$\gamma = E_0 \theta (A - \ln \theta) \quad \left\{ \begin{array}{l} E_0 = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)} \\ A = \frac{E_c^{\text{刃}} \cdot 4\pi(1-\nu)}{Gb^2} \end{array} \right.$$

故小角度晶界 γ 是相邻两晶粒之间位相差 θ 的函数

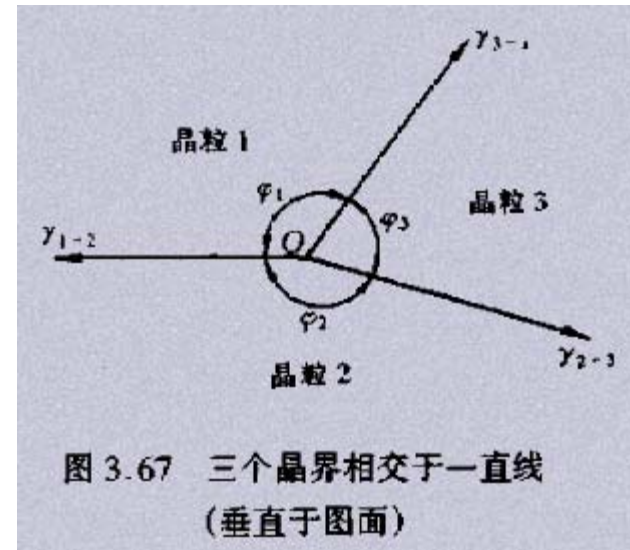
晶界的界面能的测量

晶界能可通过测定界面交角求出其相对值：

三个晶粒相遇，在达到平衡时，在o点处接口张力必须达到力学平衡

$$\frac{\gamma_{12}}{\sin \Phi_{12}} = \frac{\gamma_{23}}{\sin \Phi_{23}} = \frac{\gamma_{31}}{\sin \Phi_{31}}$$

故测得 $\Phi \rightarrow \gamma$



在平衡状态下，三叉晶界的各面角均趋于最稳定的 120° 。

晶界的平衡偏聚

- 晶界偏聚——内吸附（热力学平衡的偏聚）
- 特点：1) 溶质浓度不变时，一定的T对应一定平衡晶界偏聚量
- 2) $T \uparrow$ 偏聚量 \downarrow ,
$$C = C_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

ΔE : 溶质原子在晶界上的能量差, C : 晶界浓度
 C_0 : 晶内浓度
- 3) 晶界平衡偏聚量可以很显著 $\frac{C}{C_0} = 10 - 10^4$
- 4) 晶界偏聚区的范围约为4-几百埃
- 5) 在某种情况下可产生晶界上溶质原子的贫化——负吸附
- 6) 产生晶界偏聚的原因，有一种解释：固溶体中溶质原子和溶剂原子的尺寸不同，晶界偏聚可使系统能量降低

晶界特性

- 1) 晶界处点阵畸变大，存在晶界能，故晶粒长大和晶界平直化是一个自发过程
- 2) 晶界处原子排列不规则→阻碍塑性变形→ H_b , $\sigma_b \uparrow$ (细晶强化)
- 3) 晶界处存在较多缺陷 (位错、空位等)→有利原子扩散
- 4) 晶界能量高→固态相变先发生, $d \downarrow$ 形核率 \uparrow
- 5) 晶界能高→晶界腐蚀速度 \uparrow

亚晶界 (Sub-grain boundary)

- 事实上每个晶粒中还可分成若干个更为细小的亚晶粒 (0.001mm)，亚晶粒之间存在着小的位相差，相邻亚晶粒之间的界面成为亚晶界。亚晶粒更接近于理想的单晶体。
- 位相差一般小于 2° ，属于小角度晶界，具有晶界的一般特征。

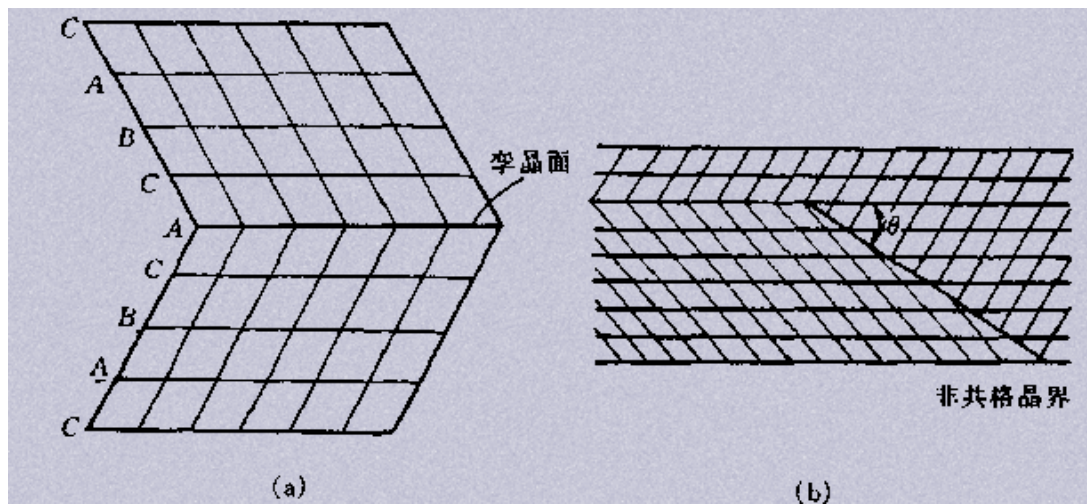
孪晶界 Twin boundary

- 孪晶——指两个晶体（或一个晶体的两部分）沿一个公共晶面构成对称的位相关系，这两个晶体就称为孪晶，这个公共的晶面即成为孪晶面

孪晶界

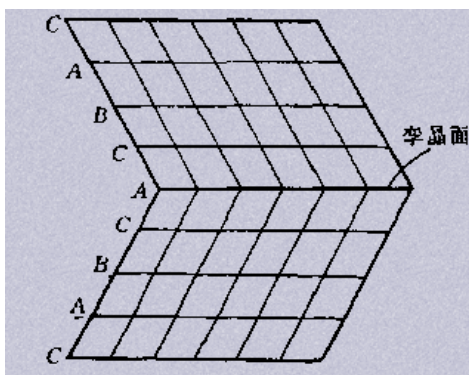
共格孪晶界：即孪晶面，其上的原子同时位于两侧晶体点阵的节点上，为两者共有。无畸变的完全共格界面，界面能（约为普通晶界能1/10）很低很稳定

非共格孪晶界：孪晶界相对于孪晶面旋转一角度，其上的原子只有部分为两者共有，原子错排较严重，孪晶能量相对较高，约为普通晶界的1/2



孪晶的形成

孪晶的形成 { 形变孪晶：连续的 $(1/6)\langle 112 \rangle$ 类型的滑移
生长孪晶
退火孪晶



ABCABCABCABC
↓↓↓↓↓
CABCA
↓↓↓↓↓
BCAB
↓↓↓
ABC
↓↓
CA
↓
B

- 孪晶的形成与堆垛层错密度相关，如fcc的 $\{111\}$ 面发生堆垛层错时为ABCACBACBA

△ △ △ △ △ △ △ → △ △ △ ▽ ▽ ▽ ▽ ▽

CAC处为堆垛层错

- 一般层错能高的晶体不易产生孪晶

相界Phase Boundary

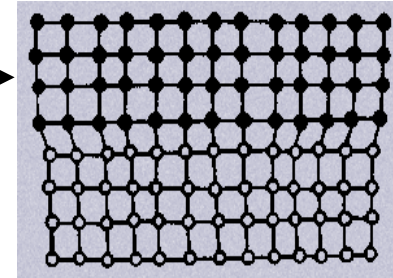
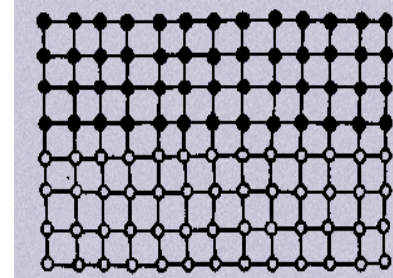
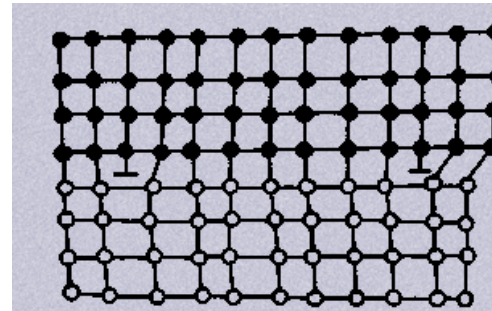
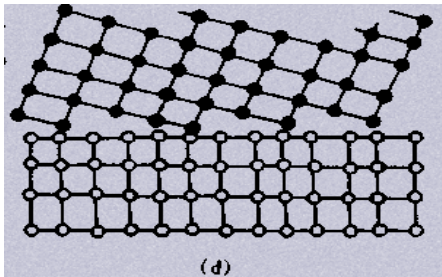
- 相界——具有不同结构的两相之间的分界面称为相界

共格界面：界面上的原子同时位于两相晶格的节点上，弹性畸变 $\delta > 0.05$

半共格相界：两相结构相近而原子间距相差较大时，部分保持匹配

错配度： $\delta = \frac{a_\alpha - a_\beta}{a_\alpha}$ 位错间距： $D = a_\beta / \delta$

非共格相界：两相在界面处的原子排列相差很大，相界与大角度晶界相似



相界能

弹性应变能：共格时以应变能为主

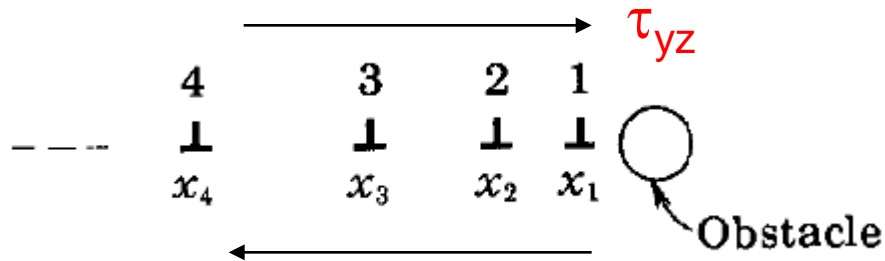
化学交互作用能：非共格时的化学能为主

第六部分

课堂讨论

习题与讨论

- 位错的塞集(Pile up)



- 每个位错的受力平衡及平衡位置
- 领先位错所受的阻力: $F=ntb$
- 计算远处的应力场时, 塞集位错可看成一个超位错 (nb)

位错的镜像力

- 靠近晶体表面的位错的应力场不同于其在晶体内部的情形（无限大晶体中的位错的应力场）：镜像力
- 螺位错的镜像-镜面位置上放置一负位错-简单构造。
- 刃位错没有这样的简单构造的镜像。

本章主要内容（总论）

- 缺陷在材料中具有重要地位：材料性质的决定性因素。 **“It is the defects that makes materials so interesting, just like the human being.”**
- 晶体缺陷的分类：按几何特征，在一、二、三维方向上“尺寸很小”而分为二维（界面）、一维（位错）、零维缺陷（点缺陷）。
- **“尺寸很小”？：一般与原子间距同一数量级**
- **通常情况下，位错是晶体强度与变形的决定性因素。点缺陷和界面通过对位错的影响而间接地起作用。**

本章主要内容（点缺陷）

- 缺陷在材料中有重要意义，在材料科学中占有重要地位。晶体中的缺陷：点缺陷、线缺陷、面缺陷
- 点缺陷是由于原子的热运动并存在能量起伏而产生的。
平衡浓度：

$$c = \frac{n}{N} = A \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right)$$

$$\nu = \nu_0 \exp(-\Delta E_m / kT) \exp(\Delta S_m / k)$$

本章主要内容（位错几何）

线缺陷：位错，已滑动区域与未滑动区域的边界

位错最初作为一种理论的提出有两方面的原因：理论计算和实验观察

位错分为：螺型、刃型、混合位错

柏氏矢量反应了位错周围点阵畸变的总合，也反映了晶体两部分相对滑动的方向和大小

柏氏矢量的确定：FS/RH 规则，表示：晶体学表示位错线的正向

本章主要内容（位错几何）

- 位错的运动、交割、割阶与扭折
- 位错的生成与增值
- 实际晶体中的层错
- 实际晶体中的位错：全位错与不全位错，扩展位错
- FCC晶体：汤普森四面体
- 交滑移，扩展位错，面角位错

本章主要内容（位错力学）

- 应力张量、应变张量
- 矢量、张量对坐标系旋转的变换规则
- 螺型、刃型、混合位错的**应力场**：连续介质模型、应力场特点
- 位错的**能量**：连续介质模型、
- 线张力概念
- 公式：作用在位错上的作用力
- 位错间的相互作用力

本章主要内容（面缺陷）

- 小角晶界的位错模型
- 低能大角晶界
- 共格与半共格相界
- 界面能的来源

本章重点

- 点缺陷的基本概念平衡浓度公式

位错的几何：位错的基本概念、柏氏矢量、柏氏回路，运动（滑移、攀移、交割）、增殖、合成与分解

- 位错的几何：实际晶体中的位错（层错、扩张位错、面角位错）（层错不是位错，其边缘才是位错），汤普森四面体
- 位错的力学：应力场、能量、作用在位错上的力
- 面缺陷：表面与界面的微观结构、能量特性及由其导致的其它性能
- 小角晶界的位错模型，大角晶界的重合位置点阵模型。
- 相界：共格，半共格（位错模型），非共格