

# 3. 晶体缺陷

## Defects in crystals

\*本课程的课件及其他授课材料大量借鉴了中国石油大学（北京）高万夫教授、西安交通大学范群成教授、美国Purdue University Prof. Xinghang Zhang的课件和习题集，以及诸多来自于其他出版社、学者、往届学生的资源，特此致谢。引用文献暂未能一一列出，在此表达歉意。



# 3.1 概述

- 实际晶体并非是理想晶体，原子排列很难完全规则，晶体内部存在大量缺陷。
- 按照几何特征，晶体缺陷分为三类：
  - 点缺陷
  - 线缺陷
  - 面缺陷
- 晶体缺陷产生原因
  - 在材料制备、加工过程中由于原子热运动产生
- 缺陷对材料性能影响
  - 影响材料的许多性能，合理的利用缺陷，会改善材料的性能。

不完美铸就完美！

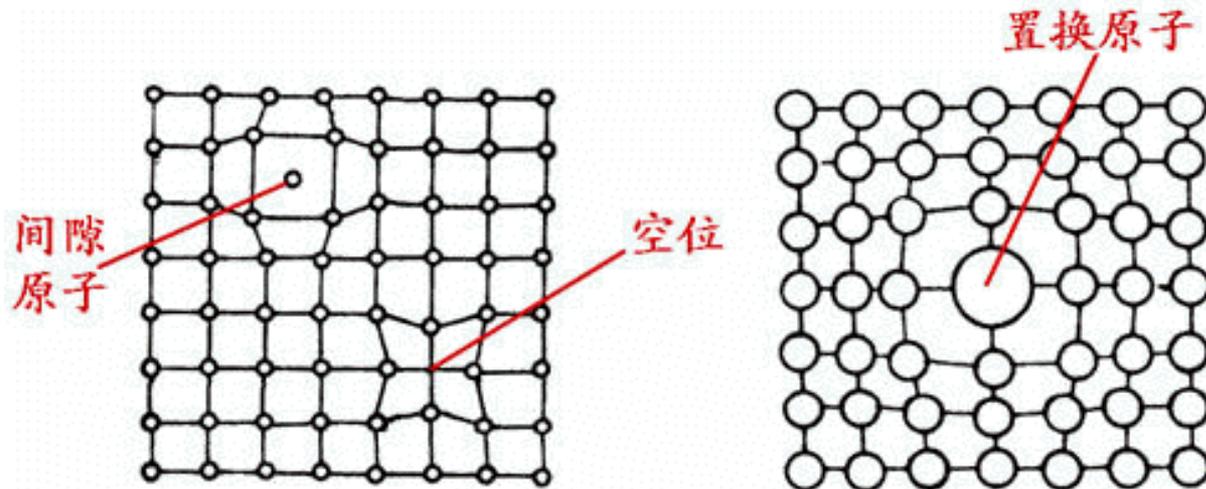
## 3.2 点缺陷

### 1. 定义

点缺陷：在晶格节点或邻近区域偏离周期性的缺陷。其尺寸与原子尺寸同量级。

### 2. 分类

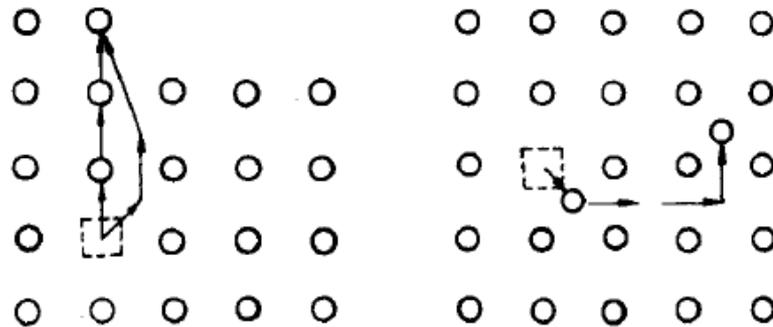
空位、间隙原子、置换原子



晶体中的点缺陷

### 3. 空位

- 原子热运动，使其跳离正常位置，留下未被原子占据的晶格结点，产生晶格负畸变（拉应力场）。
- 平衡原子跳至三个去处
  - ①跳至晶格间隙中形成间隙原子→弗兰克尔空位（Frenkel vacancy）
  - ②跳至晶体表面或内部其他缺陷 →肖脱基空位（Schottky vacancy）
  - ③跳至其它空位处→不产生多余空位



(a)

(b)

(a) 肖脱基空位 (b) 弗兰克尔空位

- 空位的平衡数量 ( $N_v$ ) 和平衡浓度

$$N_v = Ne^{-\frac{E_v}{kT}} = Ne^{-\frac{E_f}{RT}}$$

$E_v$  = 空位生成能 (破坏化学键, 使一个原子移出所需能量, eV/atom)

$E_f$  = 摩尔空位生成能 (J/mol)

$N_v$  空位数;  $N$  原子个数;  $k$  波尔兹曼常数;  
 $R$  气体常数;  $T$  绝对温度;  $A$  常数

上述能量往往统称为激活能 (activation energy)

# 拓展：类Arrhenius公式推导

由热力学原理可知,在恒温下,系统的自由能  $F$  为

$$F = U - TS。 \quad (3.1)$$

式中  $U$  为内能,  $S$  为总熵值(包括组态熵  $S_c$  和振动熵  $S_f$ ),  $T$  为绝对温度。

设由  $N$  个原子组成的晶体中含有  $n$  个空位,若形成一个空位所需能量为  $E_v$ ,则晶体中含有  $n$  个空位时,其内能将增加  $\Delta U = nE_v$ ,而几个空位造成晶体组态熵的改变为  $\Delta S_c$ ,振动熵的改变为  $n\Delta S_f$ ,故自由能的改变为:

$$\Delta F = nE_v - T(\Delta S_c + n\Delta S_f)。 \quad (3.2)$$

根据统计热力学,组态熵可表示为:

$$S_c = k \ln W, \quad (3.3)$$

式中  $k$  为玻尔兹曼常数( $1.38 \times 10^{-23} \text{J/K}$ );  $W$  为微观状态的数目。因此,在晶体中  $N+n$  阵点位置上存在  $n$  个空位和  $N$  个原子时可能出现的不同排列方式数目为

$$W = \frac{(N+n)!}{N!n!}。 \quad (3.4)$$

于是,晶体组态熵的增值为

$$\Delta S_c = k \left[ \ln \frac{(N+n)!}{N!n!} - \ln 1 \right] = k \ln \frac{(N+n)!}{N!n!}。 \quad (3.5)$$

当  $N$  和  $n$  值都非常大时,可用 Stirling 近似公式( $\ln x! \approx x \ln x - x$ )将上式改写为:

$$\Delta S_c = k[(N+n) \ln(N+n) - N \ln N - n \ln n]。$$

于是

$$\Delta F = n(E_v - T\Delta S_f) - kT[(N+n) \ln(N+n) - N \ln N - n \ln n]。$$

在平衡时,自由能为最小,即  $\left(\frac{\partial \Delta F}{\partial n}\right)_T = 0$ 。

$$\left(\frac{\partial \Delta F}{\partial n}\right)_T = E_v - T\Delta S_f - kT[\ln(N+n) - \ln n] = 0。$$

当  $N \gg n$  时,  $\ln \frac{N}{n} = -\frac{E_v - T\Delta S_f}{kT}$ 。

故空位在  $T$  温度时的平衡浓度为

$$C = \frac{n}{N} = \exp\left(\frac{\Delta S_f}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) = A \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right)。 \quad (3.6)$$



# 思考

计算不同温度下Cu内的空位浓度 ( $N_v/N$ ) ( $E_f = 83,600 \text{ J/mol}$ )  
 $T = 0\text{K}$ , 室温,  $1000^\circ\text{C}$ ,  $1080^\circ\text{C}$

$$N_v = N e^{-\frac{E_v}{kT}} = N e^{-\frac{E_f}{RT}}$$

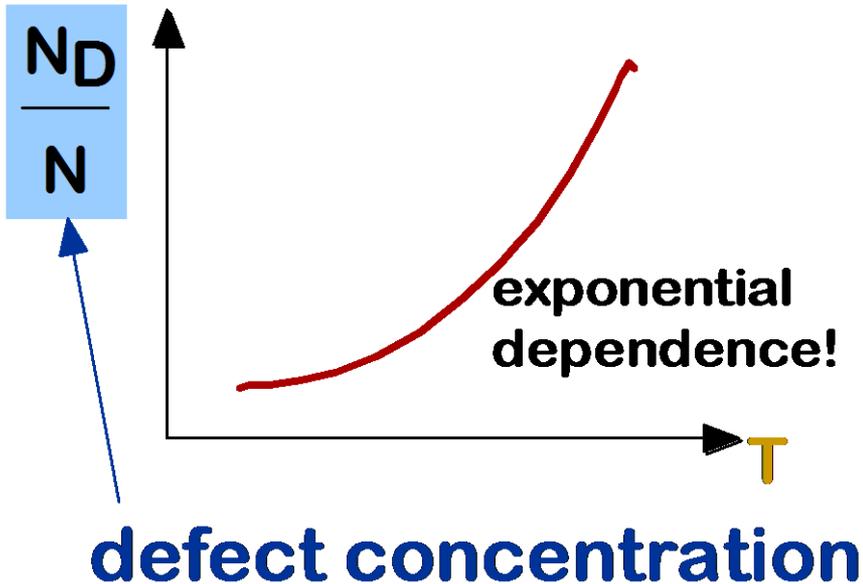
$$N_v / N = \exp\left(\frac{-83,600 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8.31 \frac{\text{J}}{\text{mol} \times \text{K}} \times 298\text{K}}\right)$$
$$= 2 \times 10^{-15} \text{ vacancies / atom}$$

# 思考

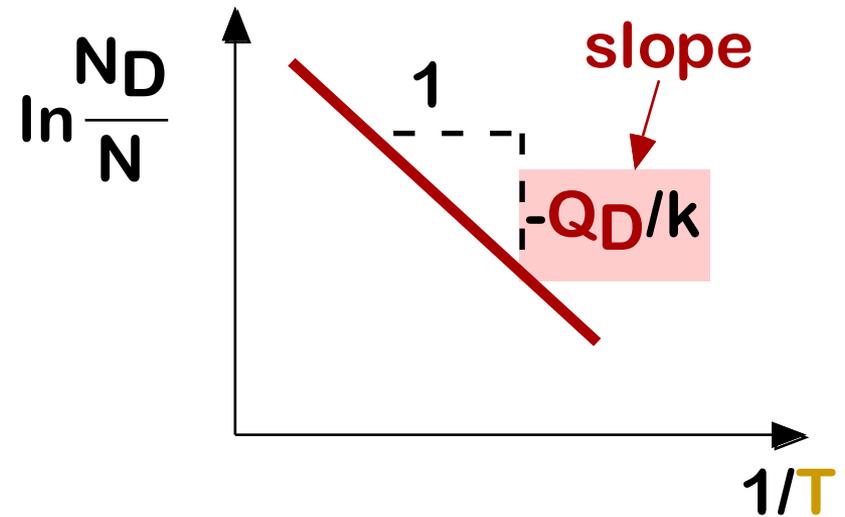
如何测量激活能？

$$\frac{N_D}{N} = \exp\left(\frac{-Q_D}{kT}\right)$$

测量结果

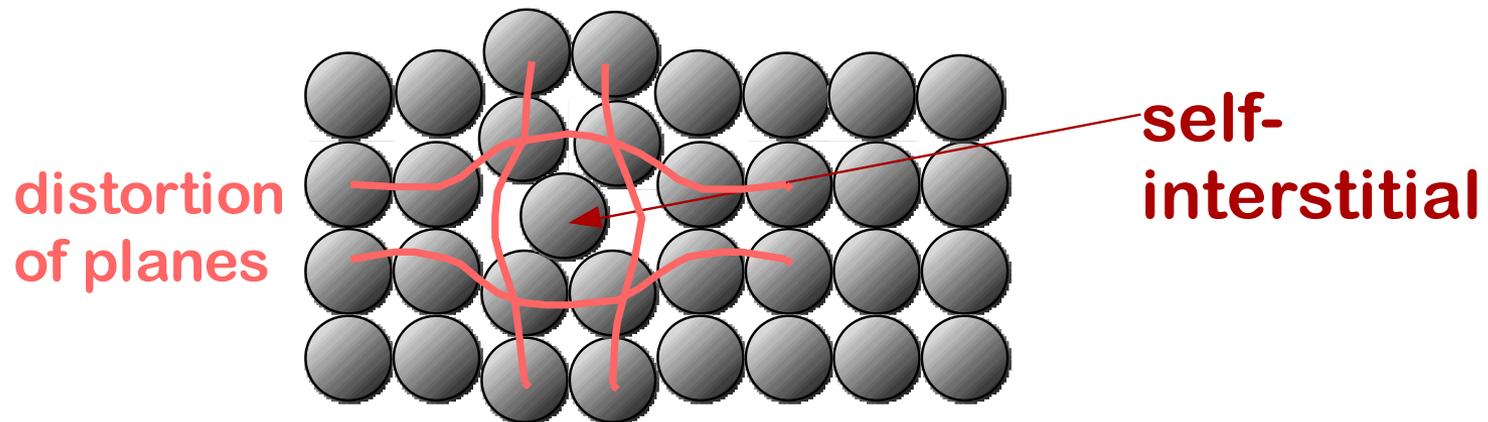


数据处理



## 4. 间隙原子

- 占据晶格间隙的原子，产生晶格正畸变（压应力场）。
- ①同类间隙原子：产生一个弗兰克尔空位，则产生一个间隙原子，其浓度远低于空位浓度。
- ②异类间隙原子：原子半径小的非金属元素 C、N、B.....溶于晶格间隙中。



## 5. 置换原子

- 占据晶格结点的异类原子，如：Fe中溶有Mn、Si、Cr等，产生正畸变（大尺寸置换原子）或负畸变（小尺寸置换原子）。

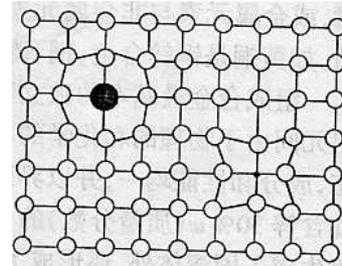
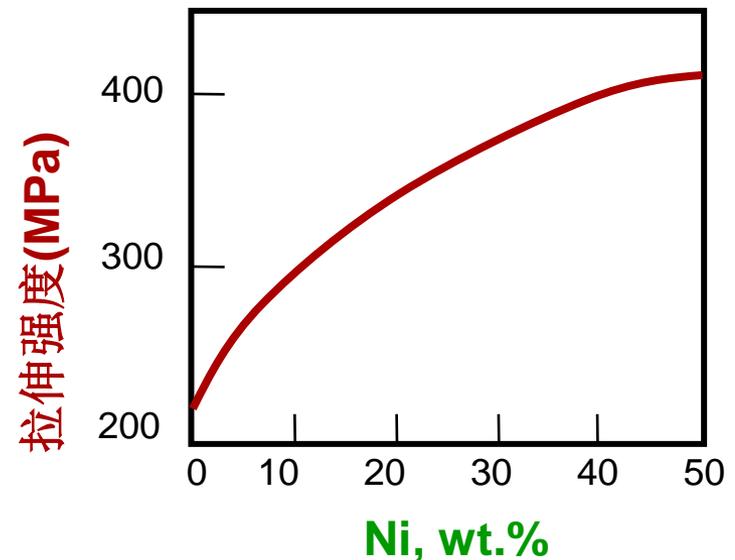


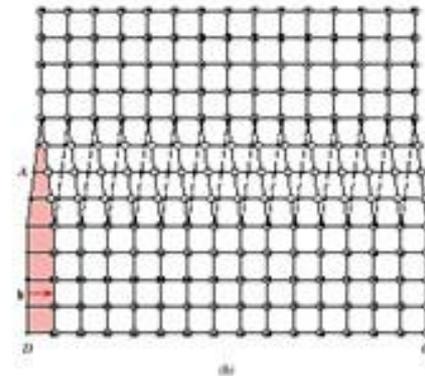
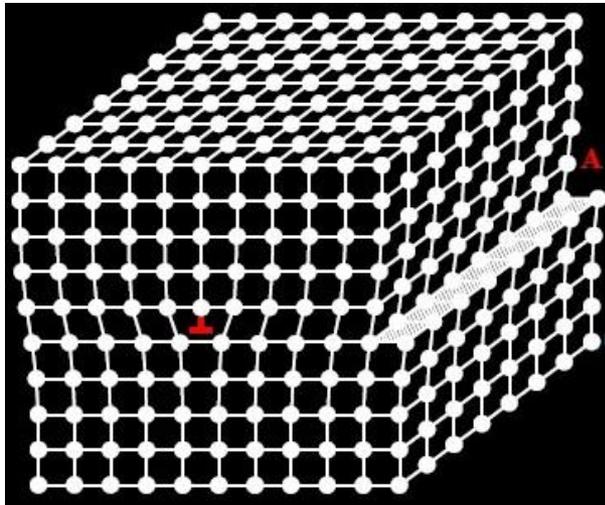
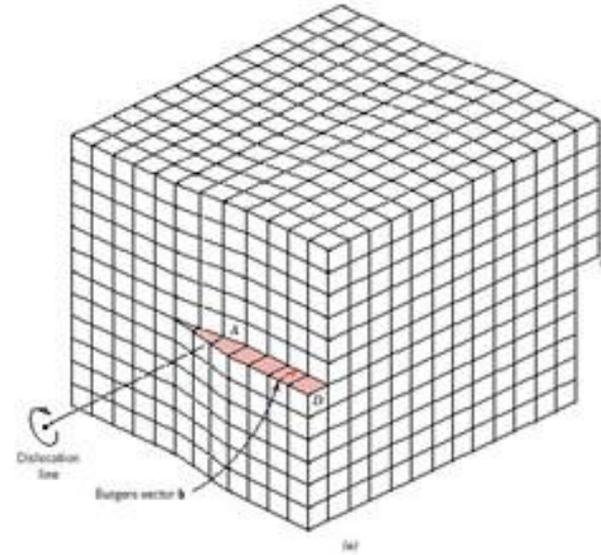
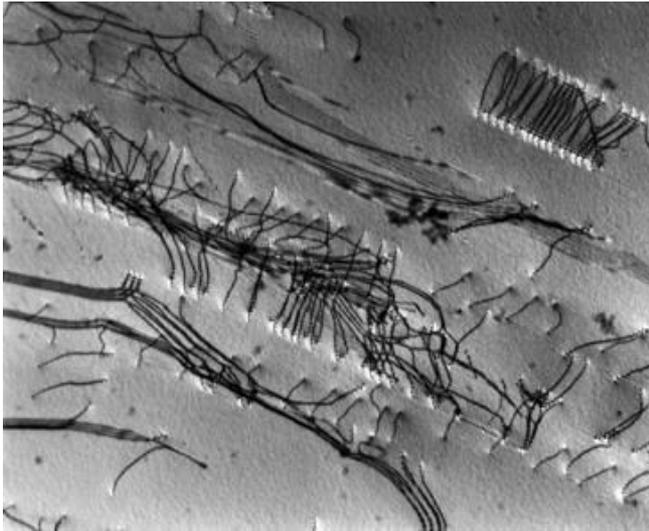
图 1-33 形成置换固溶体时的点阵畸变

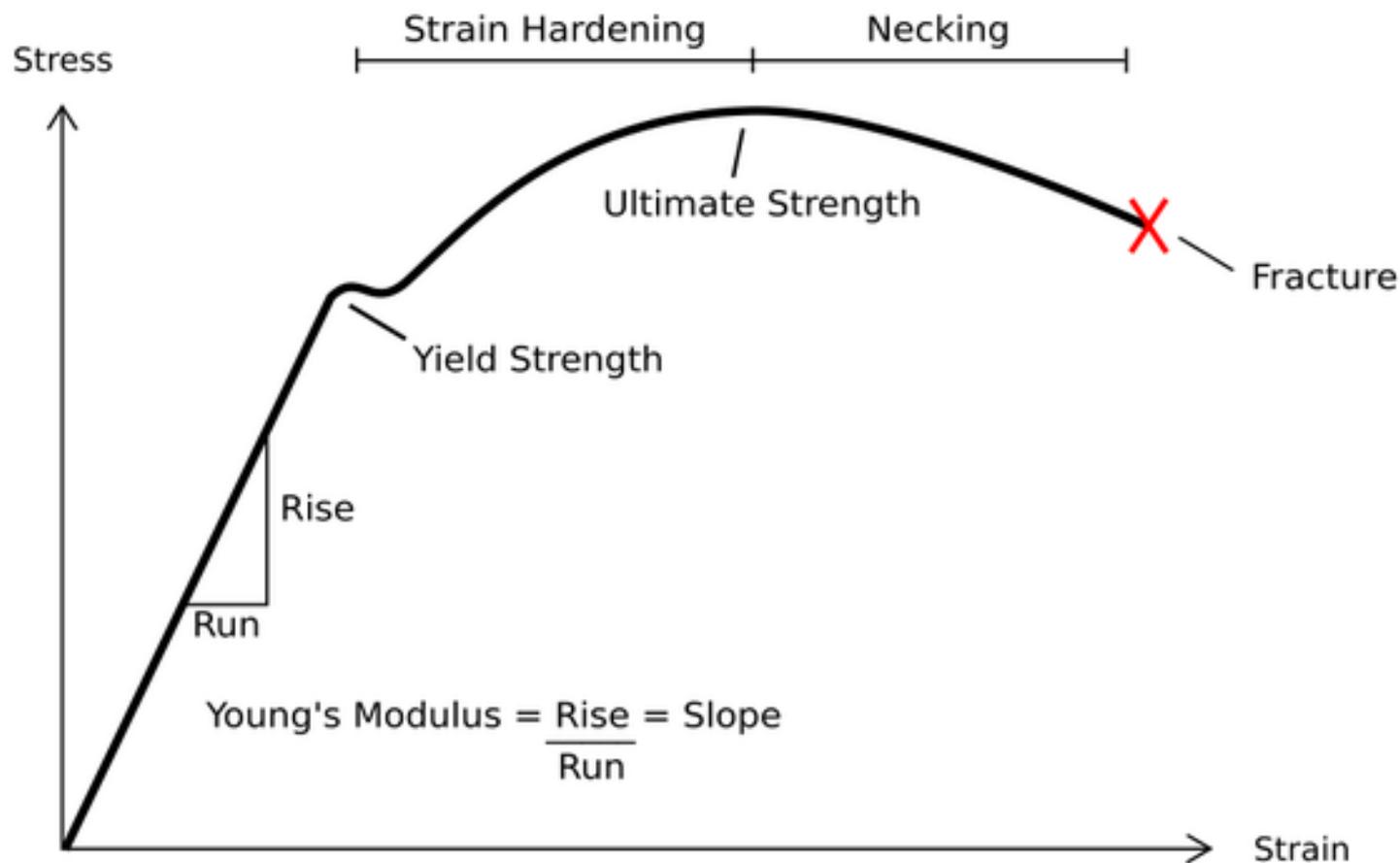
## 6. 点缺陷对材料的性能影响

- 点缺陷产生晶格畸变
  - ①使金属强度、硬度升高
  - ②使电阻升高
  - ③对相变形核有利

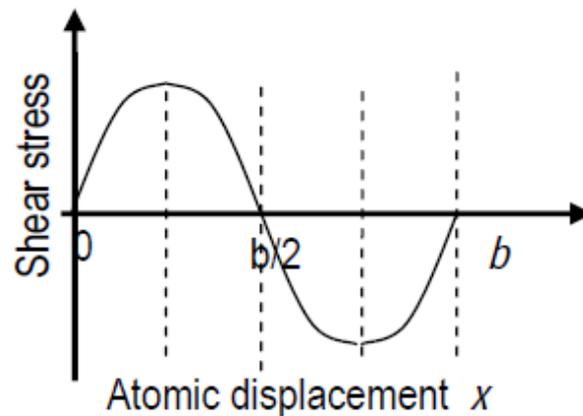
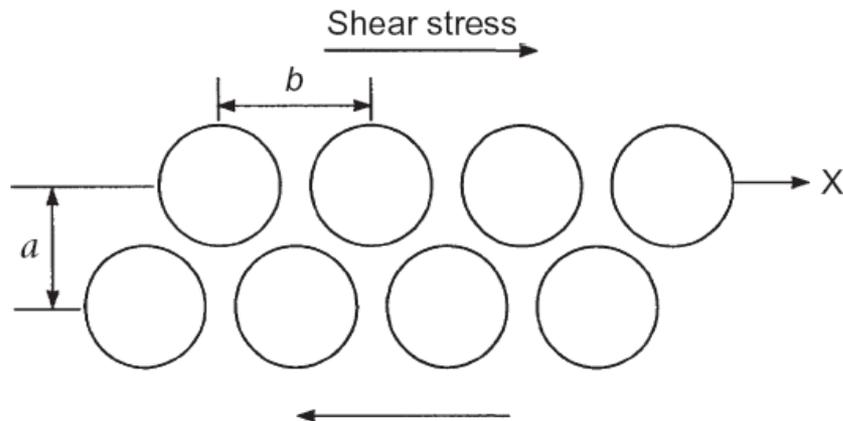


# 3.3 位错





应力-应变曲线的各阶段材料内部发生了什么？



从力与位移的函数关系估计：

$$\tau = \tau_{\max} \cdot \sin \frac{2\pi x}{b}$$

从胡克定律估计：

$$\tau = G \cdot \frac{x}{a}$$

$$G \cdot \frac{x}{a} = \tau_{\max} \cdot \sin \frac{2\pi x}{b} \Rightarrow \tau_{\max} = \frac{Gb}{2\pi a}$$

经修正：  
 理论剪切强度 =  $G/30$   
 理论拉伸强度 =  $G/10$

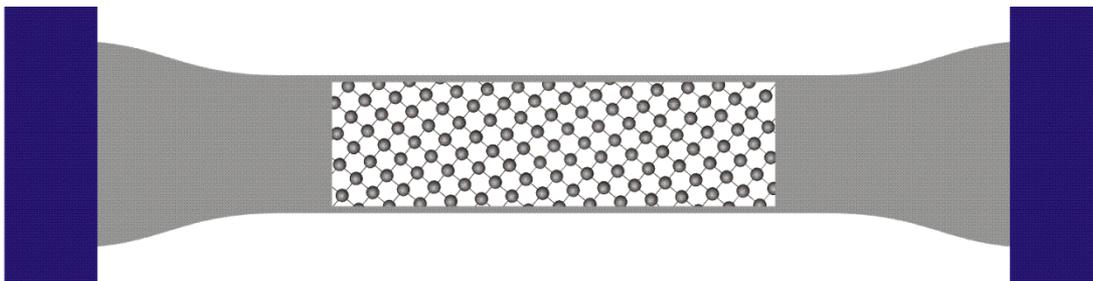
# 3.3.1 为什么要研究位错?

## 1. 位错与材料的强度密切相关

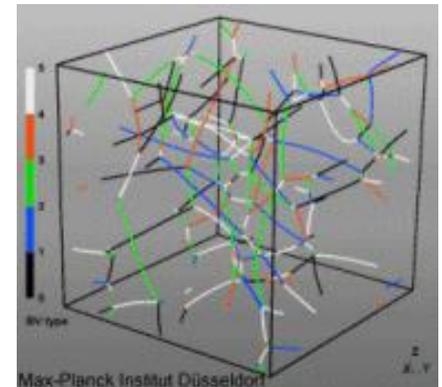
- 理想晶体的理论剪切强度比实际高2~4个数量级，原因是实际晶体中存在位错，位错在较低应力下开始滑移，使强度降低。

## 2. 位错与金属材料的塑性变形密切相关

- 多数金属的塑性变形是由于位错滑移造成的；
  - ① 滑移系多的金属塑性好（如 fcc 的 Cu、Al、Ni、奥氏体不锈钢）
  - ② 滑移系少的金属塑性差（如 hcp 的 Mg、Zn、Cd 等合金）



© D. M. Kochmann (2009)



### 3. 位错与金属材料的强化理论密切相关

- 凡是阻碍位错滑移的因素都提高塑性变形抗力，从而提高材料的屈服强度：
  - ① 细晶强化（位错滑移到晶界处塞积）
  - ② 固溶强化（溶质原子“钉扎”位错）
  - ③ 加工硬化（产生高密度位错，位错缠结、交割）
  - ④ 第二相强化（第二相阻碍位错滑移）

## 4. 位错与材料的固态相变、扩散密切相关

- 位错附近原子排列紊乱，因此：
  - ①新相优先在位错处形核；
  - ②位错处原子扩散速度快。

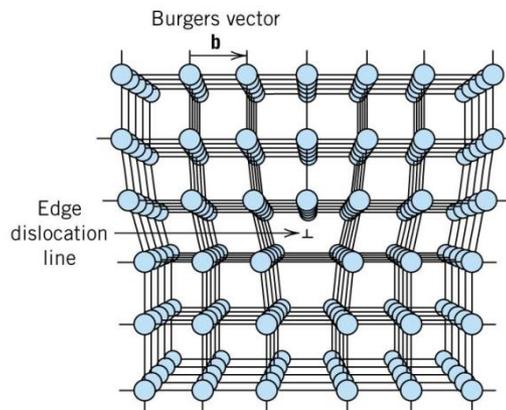
## 5. 位错与材料的电、光、磁、热等性能密切相关

- 位错阻碍电子、光子的迁移。

## 3.3.2 位错的基本概念

### 1. 定义

- 一般定义：晶体中某处有一列或若干列原子发生有规律的错排现象。
- 准确定义：晶体中滑移面上的已滑移区与未滑移区的交界。
- 位错是线缺陷（在一个方向上尺寸较大，而另外两个方向尺寸较小。）

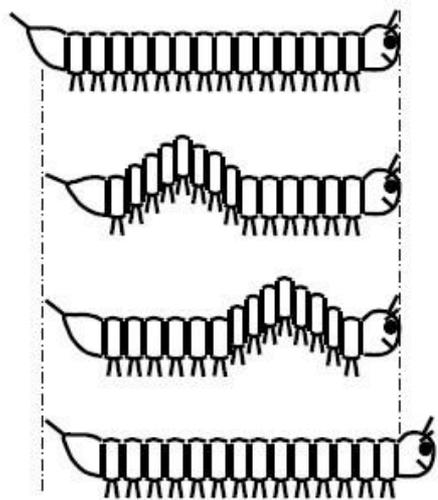


## 2. 位错学说的产生

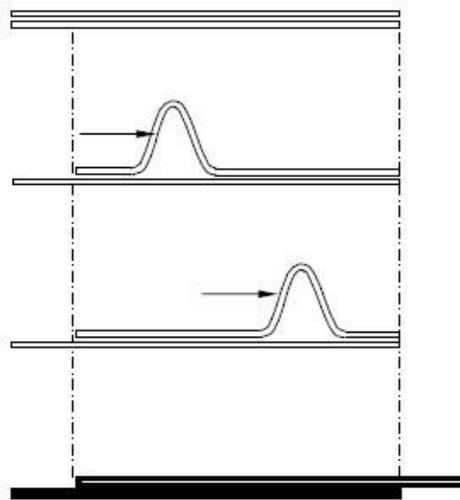
- 1926年弗兰克尔(Frenkel)计算无缺陷晶体的理论强度： $\tau_{\max} = G/2\pi$  (MPa)，经过修正， $\tau_{\max} \approx G/30$ ，而实际金属的剪切强度比理论低 $10^2$ - $10^4$ 数量级
- 1934年泰勒(Taylor)等提出晶体中位错的概念，并与晶体塑性变形联系起来。

Element	G (GPa)
Iron	60.0
Silver	19.7
Gold	19.0
Copper	30.8
Tungsten	150.0
Diamond	505.0
NaCl	23.7

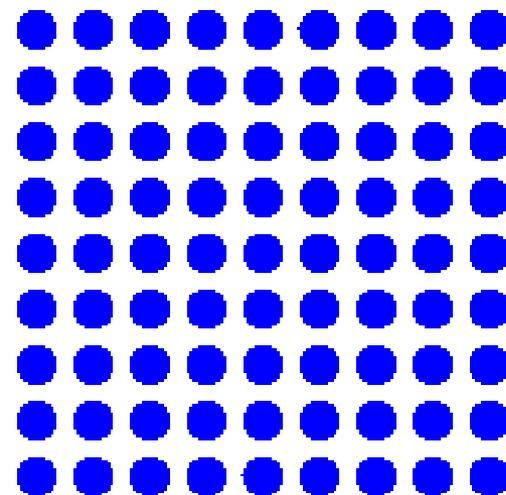
Materials	Shear Modulus (GPa)	Observed Ultimate Shear Strength* (MPa)	Calculated Ultimate Shear Strength (GPa)
Copper	48	220	7.7
Iron	80	290	12.4
Nickel	76	480	—



毛毛虫爬行过程示意图



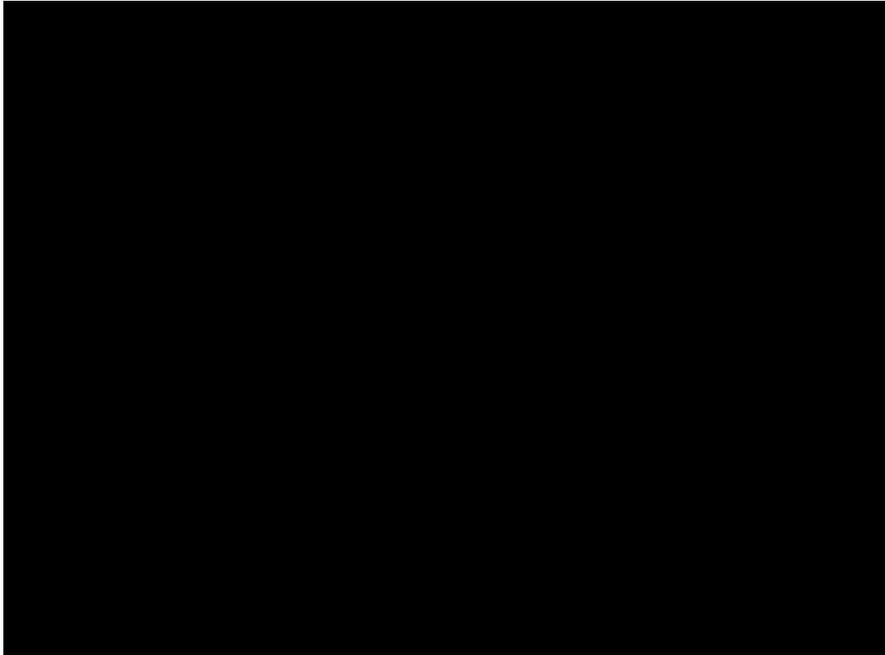
挪动地毯过程示意图



假说提出，理想晶体是刚性滑移，形变抗力极高（类似在地板上整体拖拽地毯）。实际晶体存在位错，滑移相当于毛毛虫爬行或卷曲地毯，抗力低。

### 3. 位错学说简史

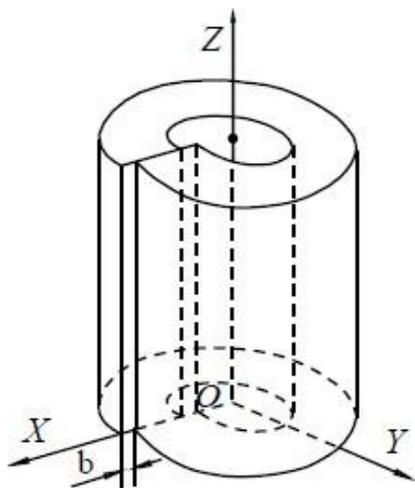
- 1934年，Taylor将该类晶体缺陷命名为“dislocation”。
- 1939年，Burgers提出描述位错的重要特征——柏氏矢量，并引入螺位错。
- 1940年，Peierls提出位错点阵模型，突破了一般弹性力学的行为。
- 1947年，Nabarro修正了Peierls的模型。后称为P-N模型。该模型估算了位错的开动应力，其与晶体屈服应力为同一数量级。
- 1947年，Cottrell阐明溶质原子与位错相互作用，解释低碳钢屈服。
- 1947年，Shockley提出扩展位错。
- 1950年，Frank和Read提出位错增殖。  
至此，单个位错的运动规律，位错交互作用等理论基本已经解决。
- 1955年，Meter直接观察到位错的存在。
- 1956年，Hirsch观察到了位错的运动。  
至此，位错学说正式确立。
- 1953年，柯俊先生从英国归来，钱临照先生与其谈及该学说，一同商议将“dislocation”译为“位错”。



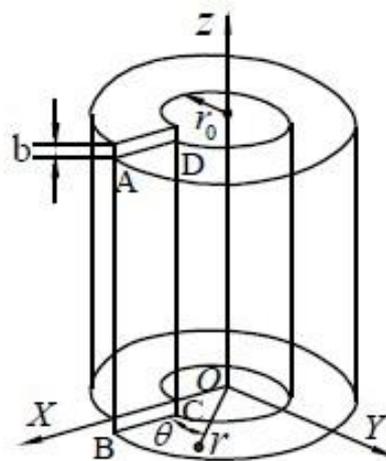
# 3.3.3 位错的类型及柏氏矢量

位错	{	刃型位错	Edge dislocation
		螺型位错	Screw dislocation
		混合位错	Mixed dislocation

思考：让一个圆筒发生错位哪些方式？



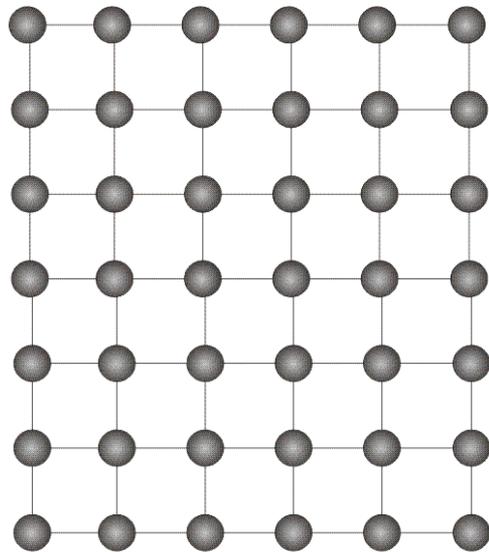
刃位错的连续介质模型



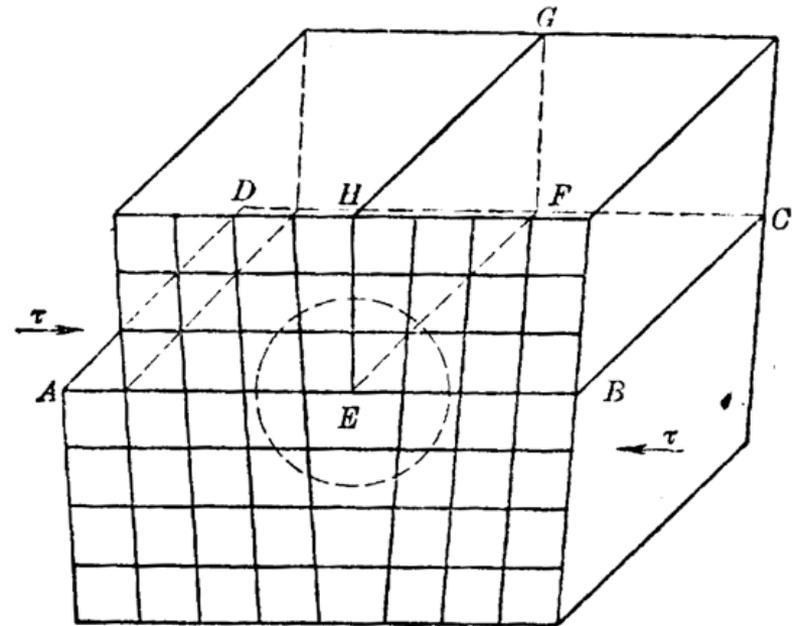
a) 螺位错的连续介质模型

# 1. 刃位错

- 在完整晶体中，如刀刃般垂直插入半个原子面
- EF 为位错线；ABCD 面为滑移面
- 准确定义：柏氏矢量与位错线相垂直的位错为刃位错。
- 柏氏矢量是人为规定的一个矢量，用来描述位错处晶格畸变的大小以及晶体相对运动的大小和方向

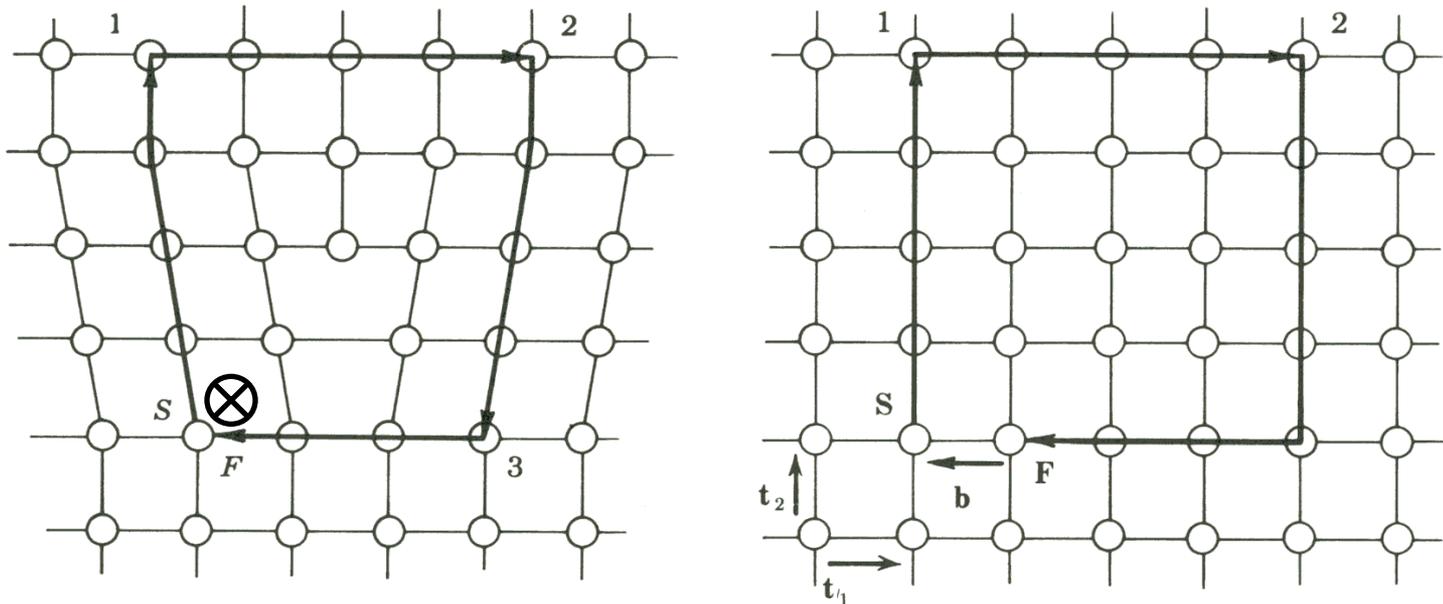


© D. M. Kochmann (2009)



## 2. 刃位错的柏氏矢量

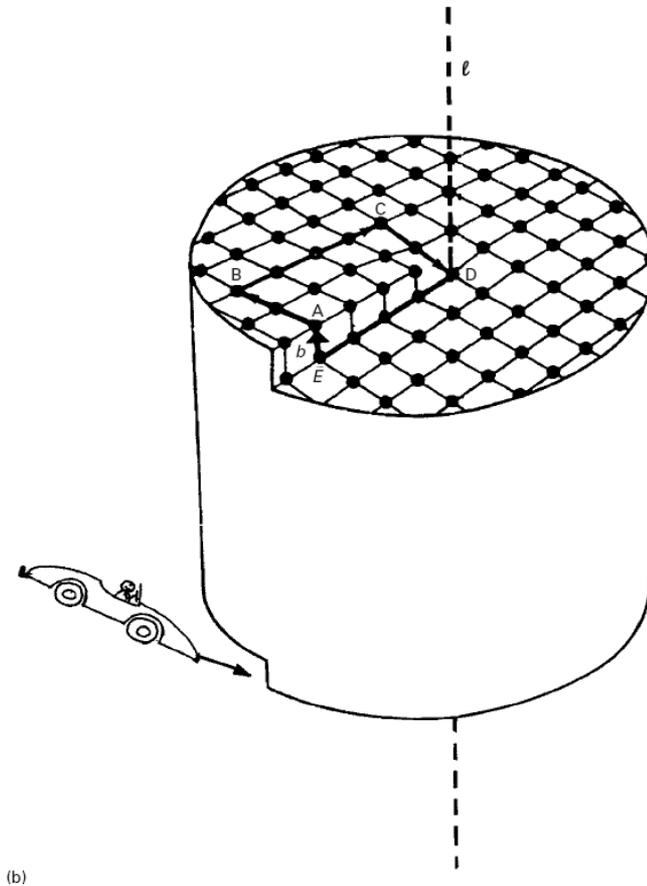
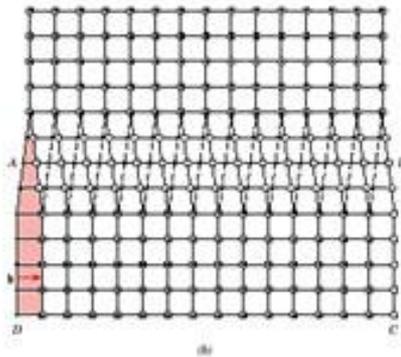
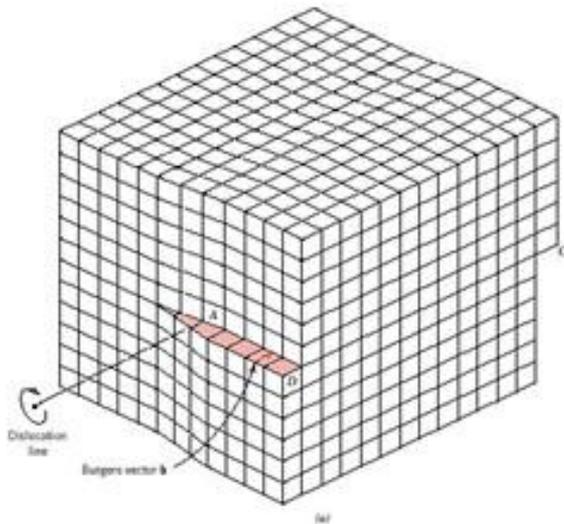
- 绕刃位错确定一个闭合回路，之后在完整晶体中做同样回路，最后产生的未闭合的矢量即为柏氏矢量 $b$  (Burgers vector)
- 或，先在完整晶体中做一闭合回路，后环绕含位错晶体做同样回路，未闭合处始点向终点连线。



自学：正刃位错、负刃位错

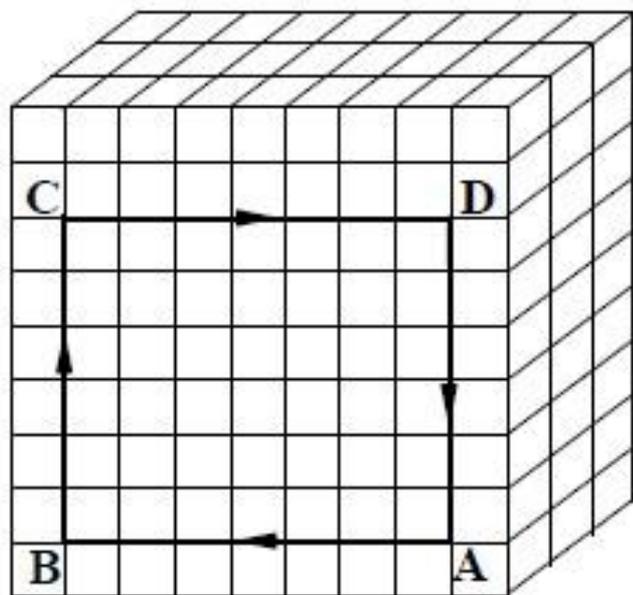
### 3. 螺位错

- 准确定义：柏氏矢量 $b$ 与位错线平行的位错。

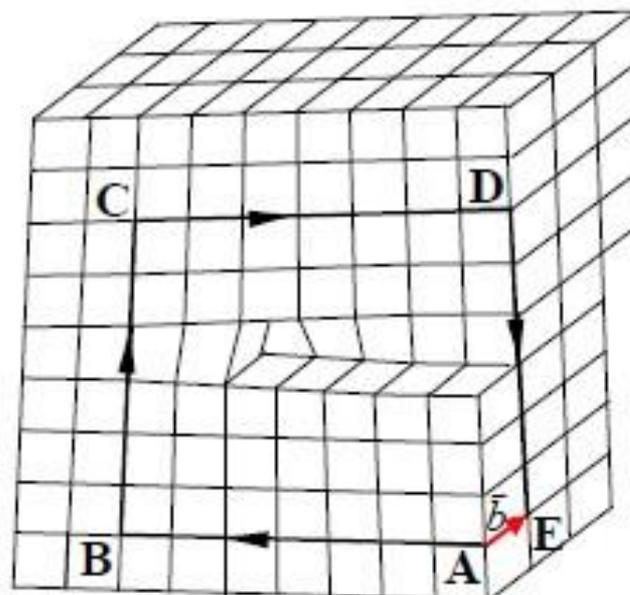


## 4. 螺位错的柏氏矢量

- 寻找回路（方法与前述完全相同）



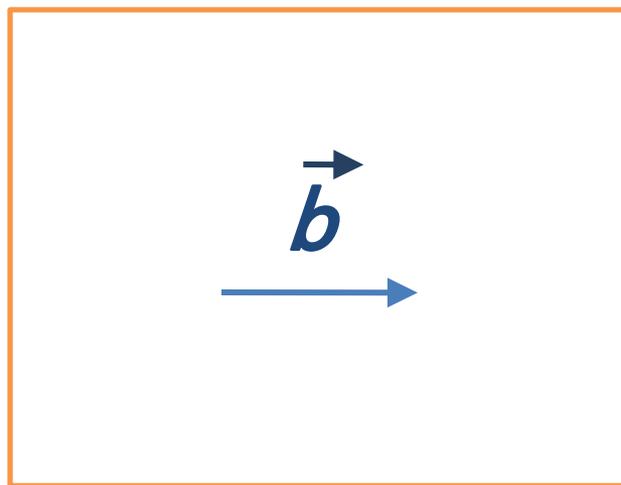
a) 完整晶体中的柏氏回路



b) 环绕位错的柏氏回路

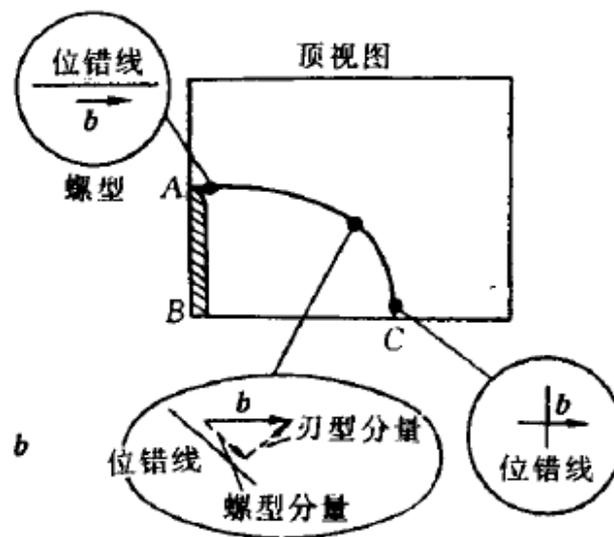
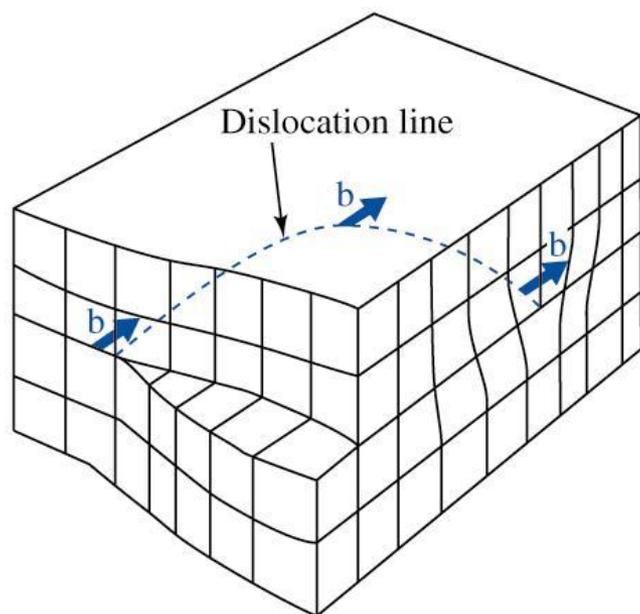
自学：左螺位错、右螺位错

思考：根据位错线方向判断下图中位错环各段位错的类型



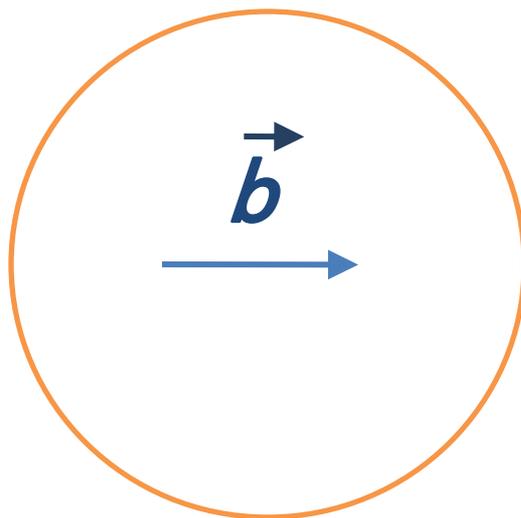
## 5. 混合位错

- 准确定义：位错线与柏氏矢量既不垂直也不平行的位错为混合位错



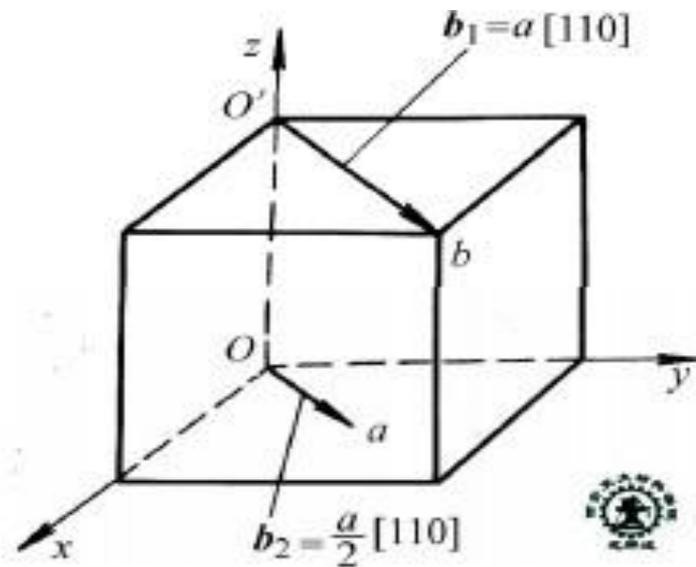
晶体中，单条位错线不论形状如何，总有唯一的柏氏矢量！

思考：根据位错线方向判断下图中位错环各段位错的类型



## 6. 柏氏矢量表示方法

- 表示方法与晶向指数相似，但是晶向指数只表示方向，而柏氏矢量既要表示出方向，又要表示出大小。
- 大小=某原子与该方向上最邻近原子的距离。



思考：从能量的角度，sc、bcc、fcc中最可能的柏氏矢量是？

## 思考

在滑移面  $(1\bar{1}1)$  上有一个柏氏矢量为  $a/2[110]$  的刃位错，试求其位错线方向。

## 7. 柏氏矢量小结

- ① 柏氏矢量表示位错处晶格畸变大小,  $|b|$  越大, 畸变越大
- ② 柏氏矢量表示晶体滑移的大小和方向
- ③ 刃型位错位错线  $\perp b$ , 螺型位错位错线  $\parallel b$
- ④ 一条不分叉的位错的柏氏矢量唯一, 且大小和方向不变
- ⑤ 柏氏矢量和位错线构成滑移面
  - 刃型位错位错线  $\perp b$ , 一个位错对应一个滑移面
  - 螺型位错位错线  $\parallel b$ , 可在多个滑移面上滑移

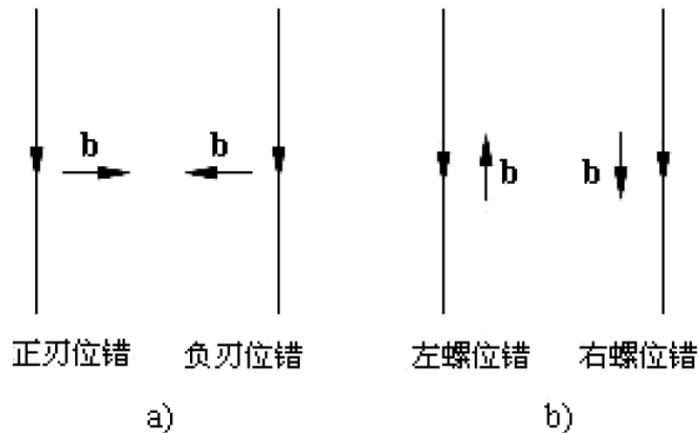
判断刃位错符号的右手定则：右手拇指、食指、中指互相正交；右手食指指向位错线方向，右手中指指向柏氏矢量 $b$ 方向，拇指指向的即为半原子面。



## 侧视图

半原子面位于滑移面上方的定义为正刃型位错，用符号“**L**”表示；半原子位于滑移面下方的定义为负刃型位错，用符号“**T**”表示

## 顶视图

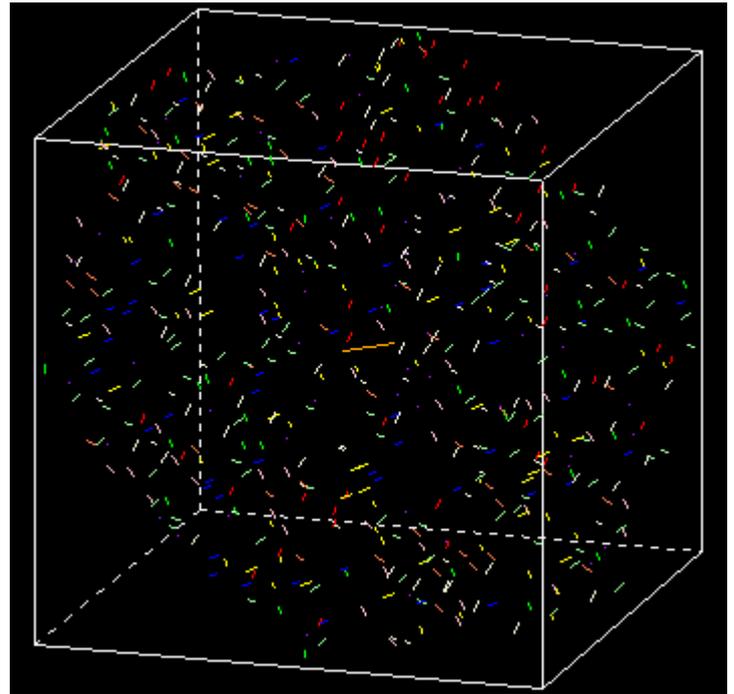


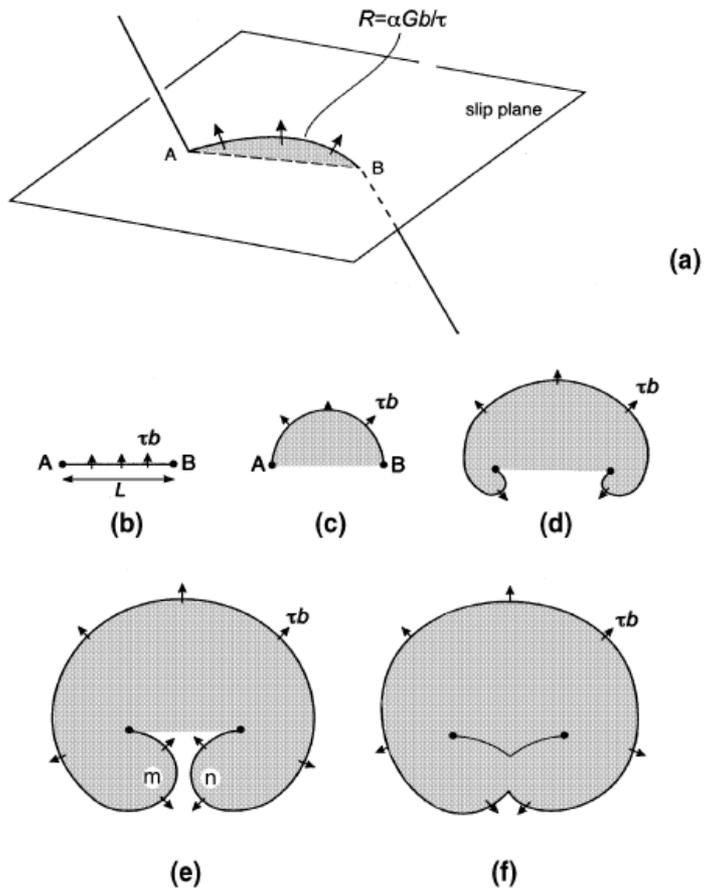
拇指指向纸外为正刃位错，拇指指向纸内为负刃位错

螺位错的符号判断很简单：位错线与 $b$ 相反为左螺，相同为右螺。

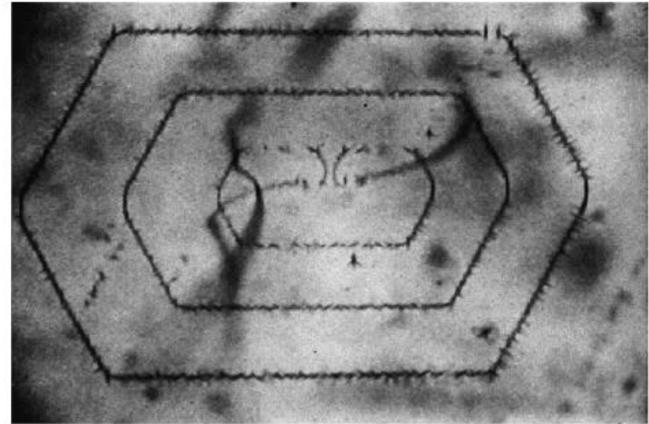
## 3.3.4 位错的增殖

- 从完美晶体中很难“无中生有”
- 位错一般从其他缺陷处形核并扩张（弗兰克-瑞德源）

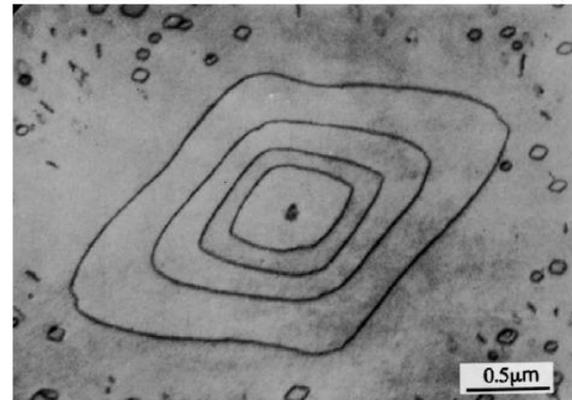




**Figure 8.5** Diagrammatic representation of the dislocation movement in the Frank-Read source. Unit slip has occurred in the shaded area. (After Read (1953), *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill.)



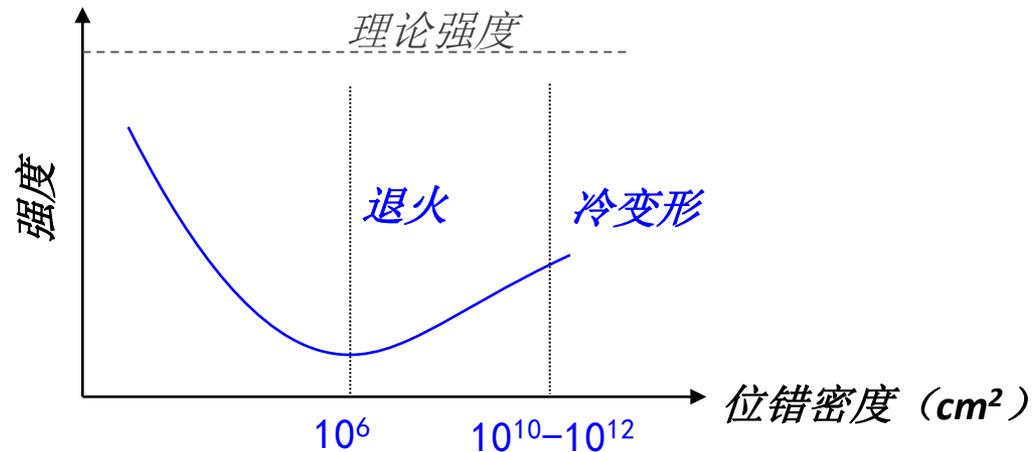
**Figure 8.6** Frank-Read source in a silicon crystal. The dislocations have been revealed by the decoration technique described in section 2.3. (From Dash (1957), *Dislocation and Mechanical Properties of Crystals*, Wiley.)



**Figure 8.8** Transmission electron micrograph of concentric loops formed at a climb source in aluminum-3.5 per cent magnesium alloy quenched from 550 °C. (From Westmacott, Barnes and Smallman, *Phil. Mag.* 7, 1585, 1962.)

## 3.3.5 位错密度

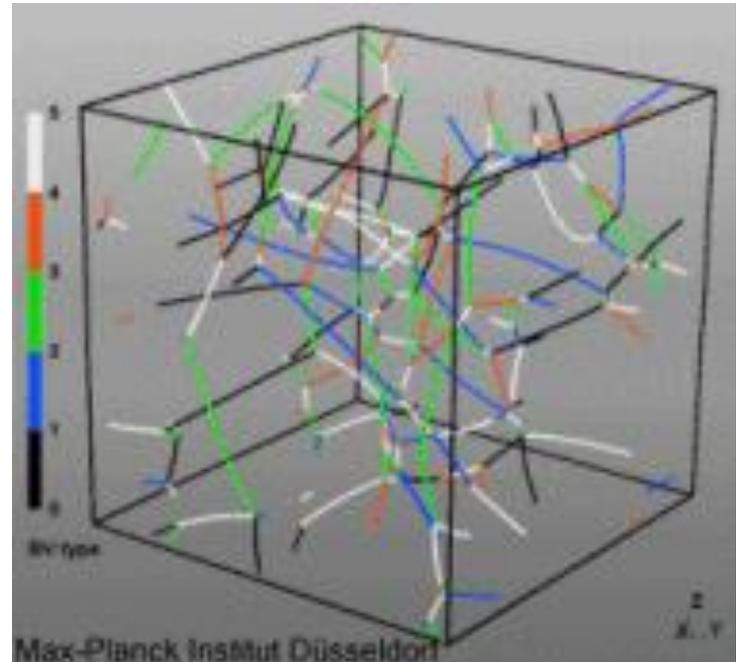
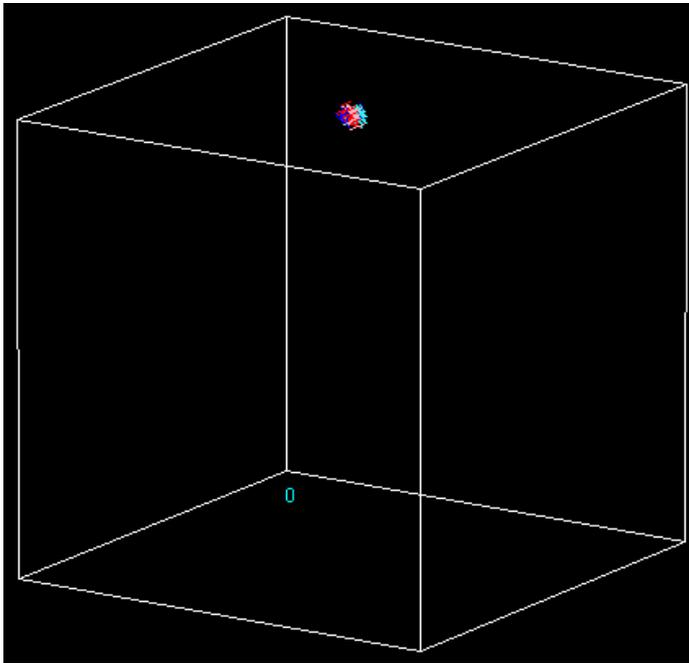
- 实际晶体存在大量位错
- 位错密度：单位体积中包含位错线总长度（单位一般为 $\text{cm}^{-2}$ 或 $\text{m}^{-2}$ ）



思考：退火（加热）为什么会降低位错密度？  
地球至月球的距离？

## 3.3.6 位错的运动

- 位错可产生两类运动：滑移、攀移
- 无论滑移攀移，位错运动方向都垂直于位错线。



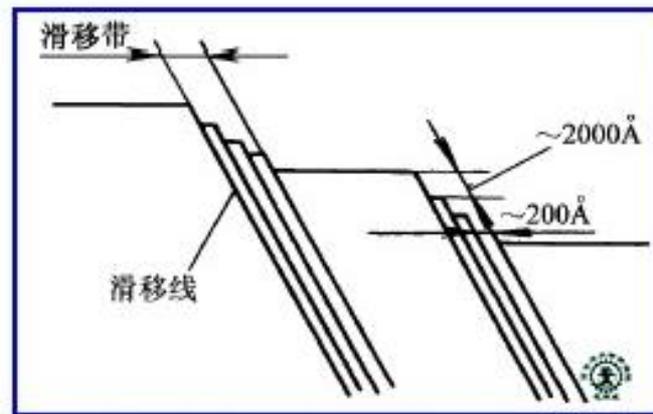
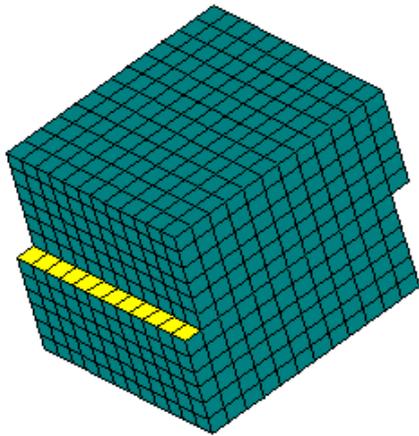
# 1. 位错滑移概述

- 滑移：切应力作用下，位错线在其滑移面内的运动，造成材料塑性变形。
- 滑移面：由位错线与柏氏矢量确定的晶面。刃位错只有一个滑移面，位错线 $\perp$ b决定晶面；螺位错有多个滑移面。
- 交滑移：螺位错的位错线与柏氏矢量平行，故一螺位错有多个滑移面。螺位错从一个滑移面转移到另一个滑移面的滑移称为交滑移。

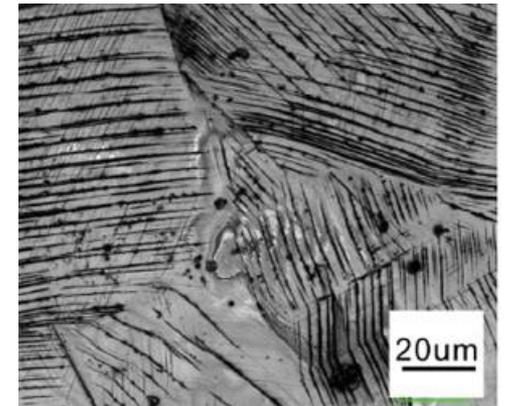
注意通过视频演示加强理解！

## 2. 滑移台阶、滑移线、滑移带

- 一条位错线的滑移结果是在晶体表面上形成一个柏氏矢量 $b$ 大小的滑移台阶。
- 大量位错滑移到晶体表面，形成滑移线；大量滑移线组成滑移带。晶体在宏观上产生塑性变形。



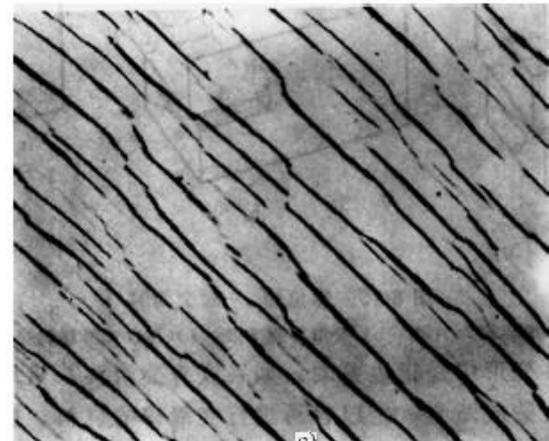
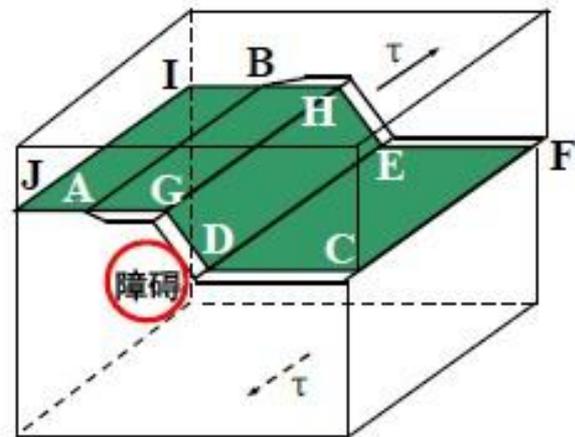
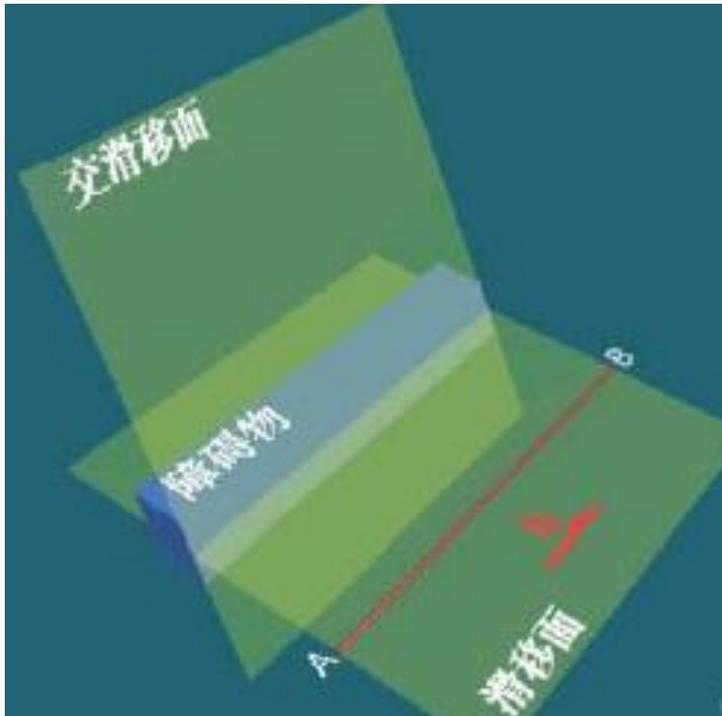
滑移线及滑移带示意图



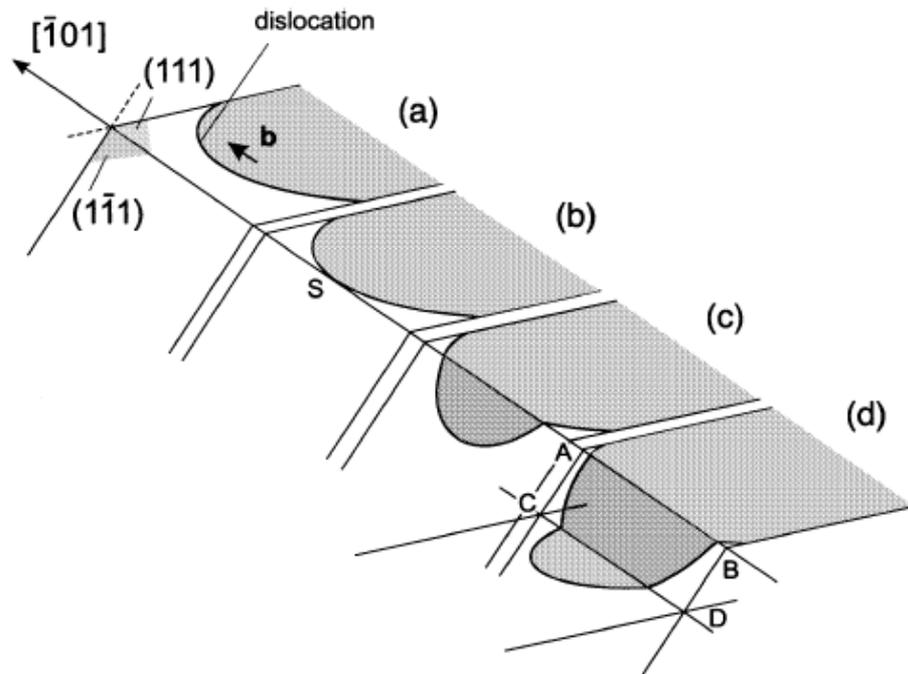
注意通过视频演示加强理解!

### 3. 交滑移

- 螺位错在某个滑移面滑移受阻时，会转到另一个滑移面沿原来的滑移方向继续滑移，滑移带呈波纹状。



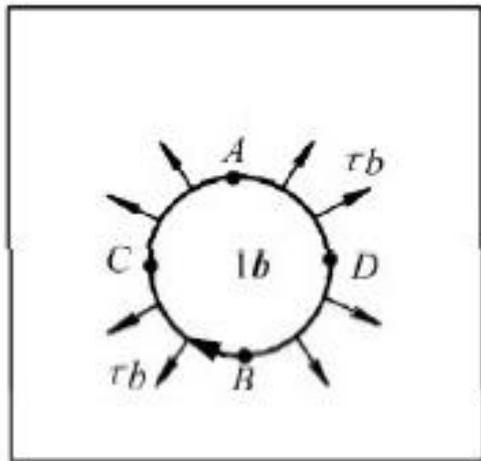
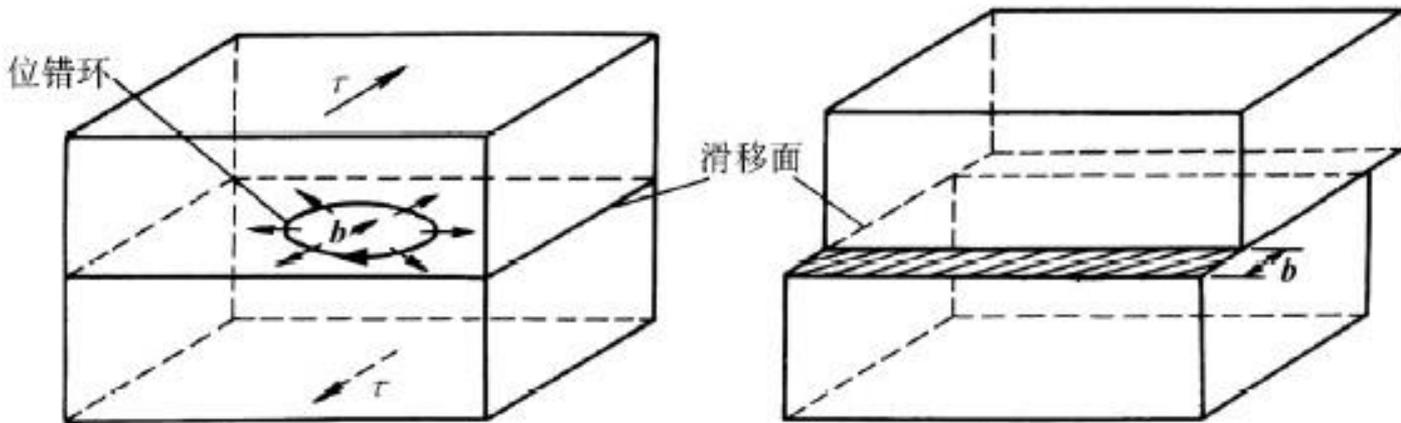
注意通过视频演示加强理解!



**Figure 3.9** Sequence of events (a), (b), (c) in cross slip in a face-centred cubic metal. The  $[\bar{1}01]$  direction is common to the (111) and  $(1\bar{1}\bar{1})$  close-packed planes. A screw dislocation at  $S$  is free to glide in either of these planes. Cross slip produces a non-planar slip surface. Double cross slip is shown in (d).

## 4. 位错环的滑移

- 位错环滑移的结果为环面积的增大或缩小。



刃位错运动方向：先找到半原子面，  
然后观察半原子面的受力情况

螺位错运动方向：刃位错朝外螺位  
错朝外；刃位错向内，螺位错向内。

## 5. 位错滑移的阻力

- 滑移需要克服晶格阻力（派-纳力）

$$\tau_p = \frac{2G}{1-\nu} e^{-\frac{2\pi a}{b(1-\nu)}} \quad \text{其中: } \begin{cases} G - \text{切变模量} \\ \nu - \text{柏松比} \\ a - \text{晶面间距 } d_{hkl} \\ b - \text{滑移方向原子间距} \end{cases}$$

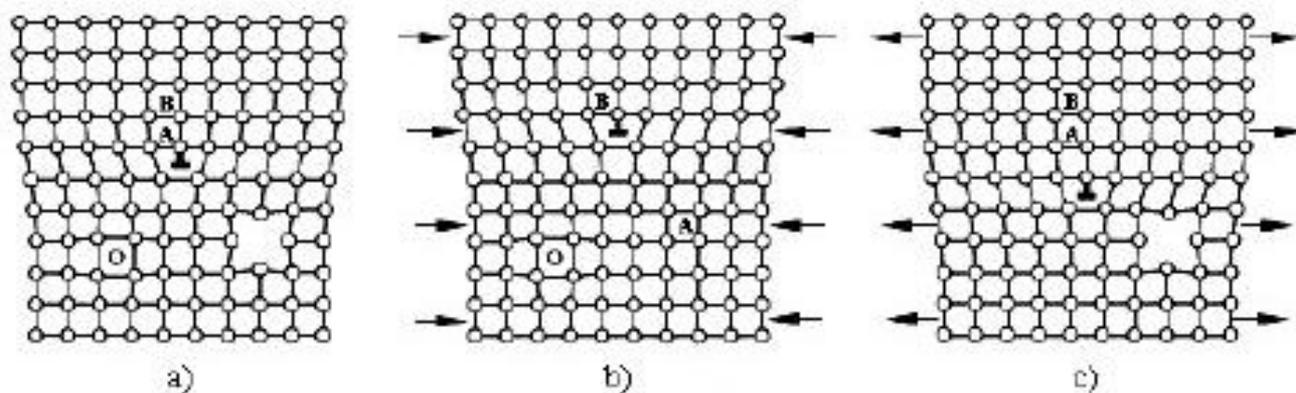
可见， $a$ 越大、 $b$ 越小，则滑移阻力越小

- 因此，晶体中的位错总是倾向于在密排晶面上，沿着密排晶向进行滑移。

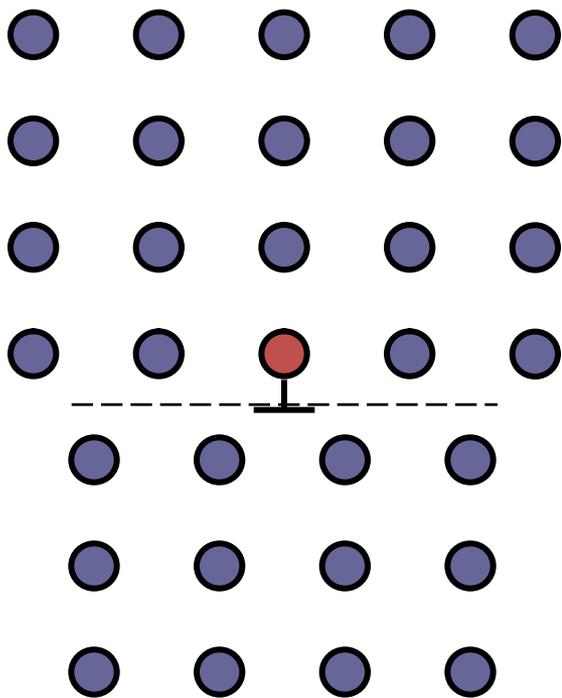
思考：不管公式，仅从几何角度推断是否能得出同样的结论？

## 6.位错的攀移

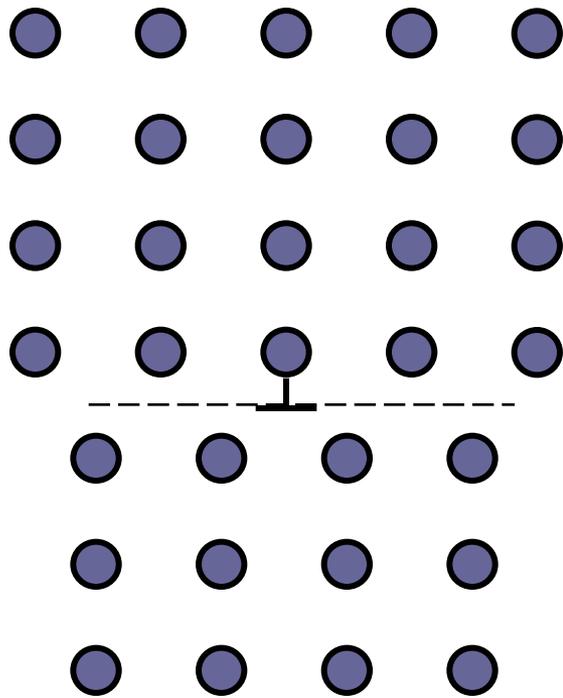
- 刃位错在垂直于滑移面的方向（同时也垂直于柏氏矢量）运动称为攀移。螺位错不能攀移。
- 攀移实际是半原子面的伸长或缩短；缩短为正攀移，伸长为负攀移
- 攀移是原子扩散的结果，高温下易攀移



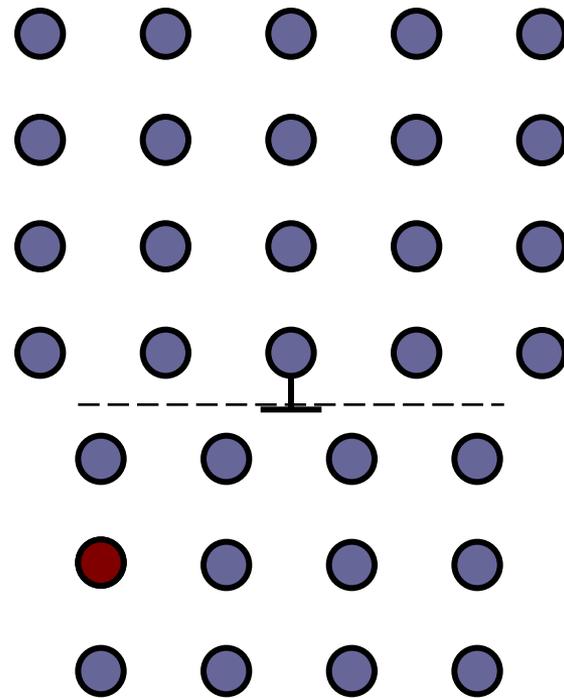
刃位错的攀移 a) 攀移前； b) 正攀移； c) 负攀移



(a) 正攀移



(b) 未攀移



(c) 负攀移

# 拓展：位错割阶与扭折

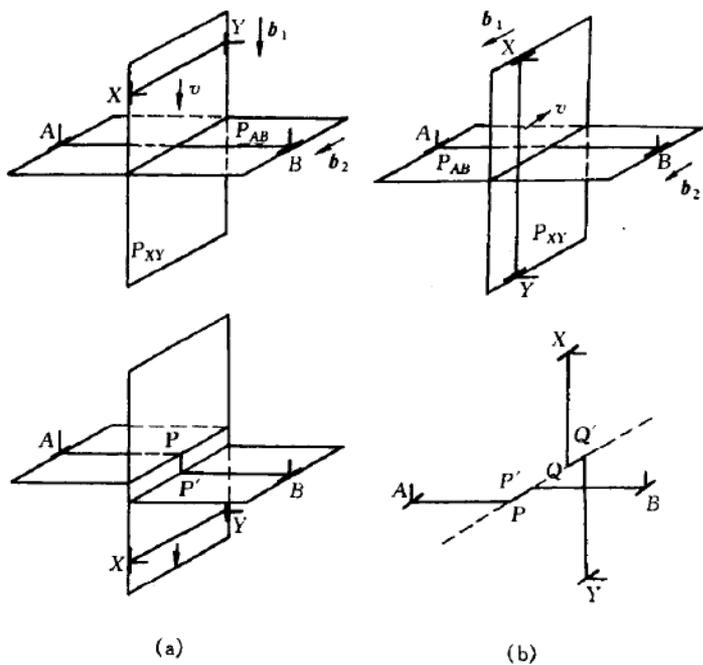


图 3.18 两根互相垂直的刃型位错的交割  
(a) 柏氏矢量互相垂直 (b) 柏氏矢量互相平行

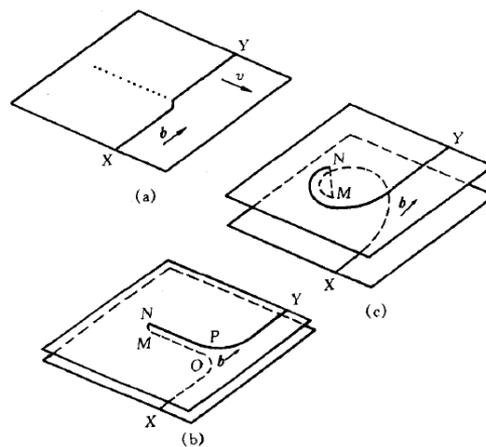
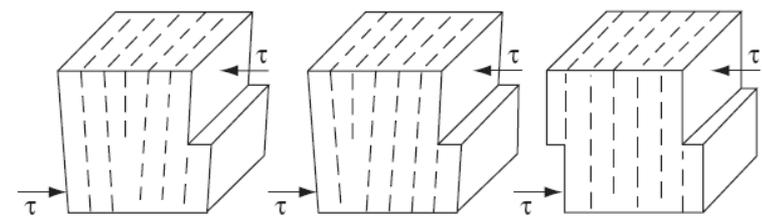


图 3.21 螺位错中不同高度的割阶的行为  
(a) 小割阶被拖着一起走, 后面留下一串点缺陷 (b) 中等割阶——位错 NP 和 MO 形成位错偶  
(c) 非常大的割阶——位错 NY 和 XM 各自独立运动

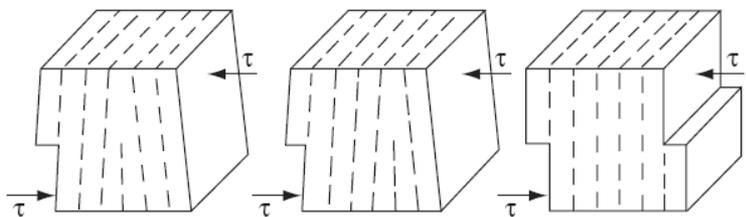
## 6. 位错运动小结

- 位错的滑移是在切应力下进行的，当应力达到 $\sigma_s$ 时，位错滑移，塑性变形开始。
- 一条位错线滑移过后，滑移面两侧晶体产生一个柏氏矢量的相对位移。
- 位错线滑移出晶体，晶体表面产生一个柏氏矢量的台阶。
- 一个刃位错只有一个滑移面，不能交滑移；螺位错可在多个滑移面滑移，能够交滑移。
- 位错滑移是保守运动，只改变晶体形状，不改变晶体体积。
- 位错攀移是原子扩散运动的结果，是非保守运动，改变晶体的体积。正攀移使空位减少而体积收缩，负攀移使空位增大而体积膨胀。
- 位错攀移是在正应力作用下进行的，起作用的是垂直于半原子面的正应力分量，压应力使其正攀移，拉应力使其负攀移；
- 位错攀移需要原子的长程迁移，因而比位错滑移困难，需要热激活，需要在较高温度下进行；
- 对于刃位错，滑移方向与滑移面、柏氏矢量平行；攀移方向与滑移面、柏氏矢量垂直。
- 无论位错做何种运动，其运动方向都垂直于位错线。

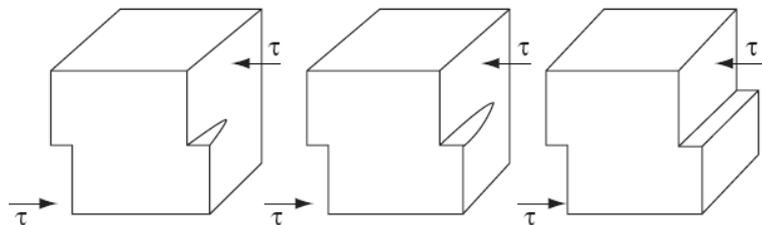
# 思考：自行定义位错线和**b**方向，确定各位错符号



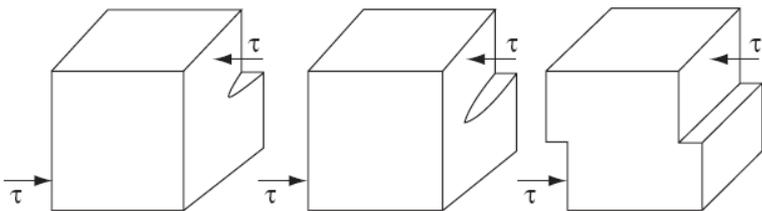
(A)



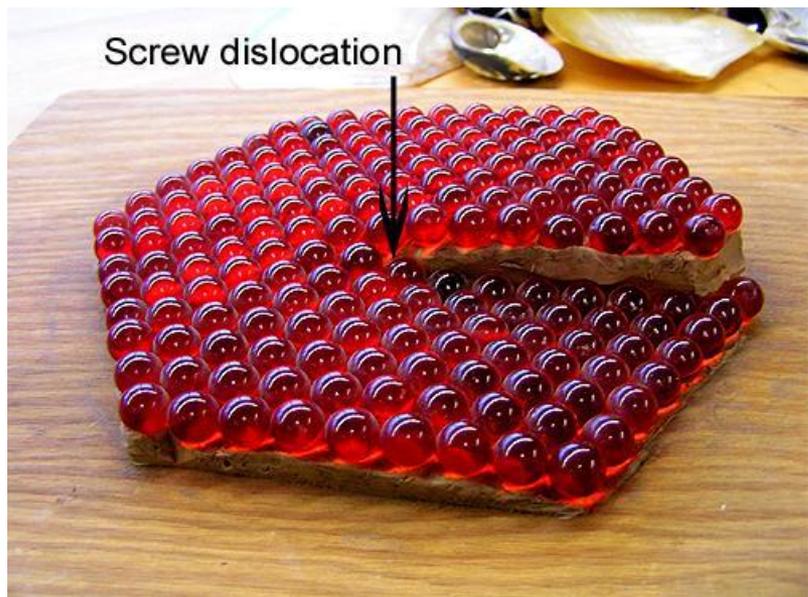
(B)



(C)



(D)

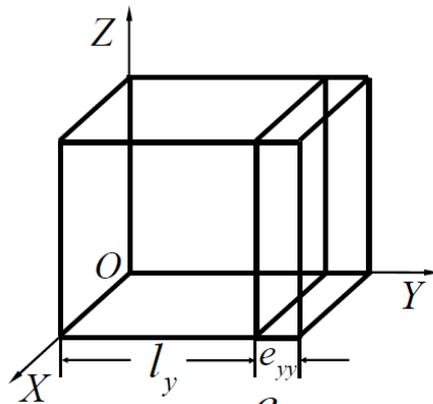


# 3.3.7 位错的弹性性质

## 1. 应变分量

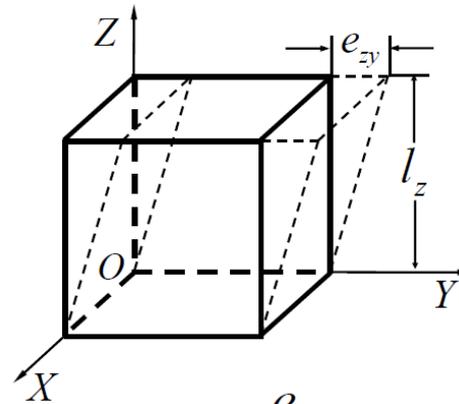
- 直角坐标系

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{yx} \\ \varepsilon_{xz} &= \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{yz} &= \varepsilon_{zy} \end{aligned}$$



$$\varepsilon_{yy} = \frac{e_{yy}}{l_y}$$

a) 正应变

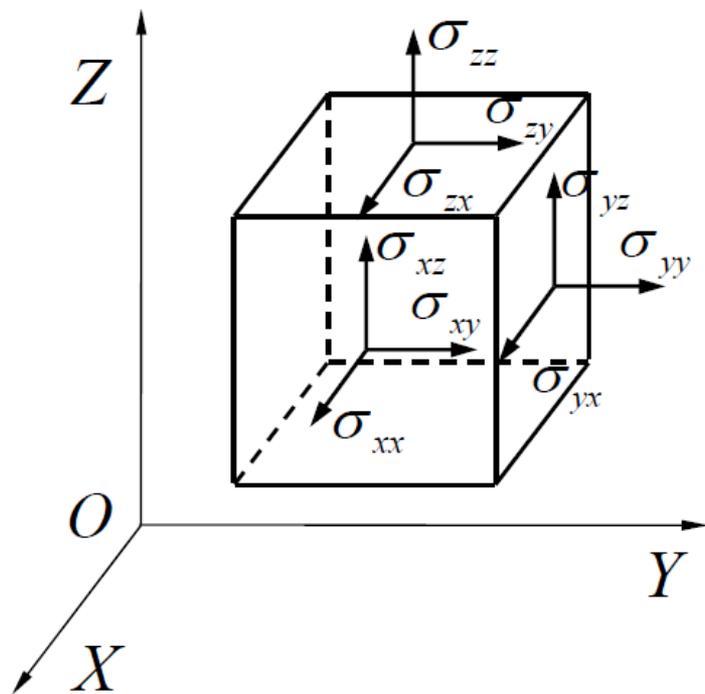


$$\varepsilon_{zy} = \frac{e_{zy}}{l_z}$$

b) 切应变

## 2. 应力分量

- 直角坐标系



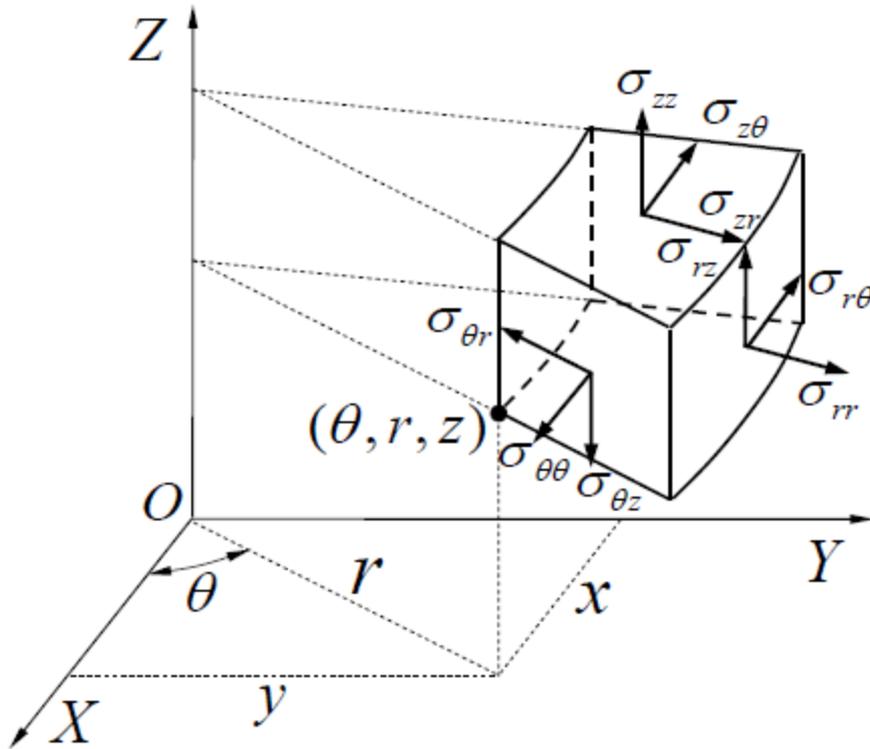
$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$$

- 圆柱坐标系



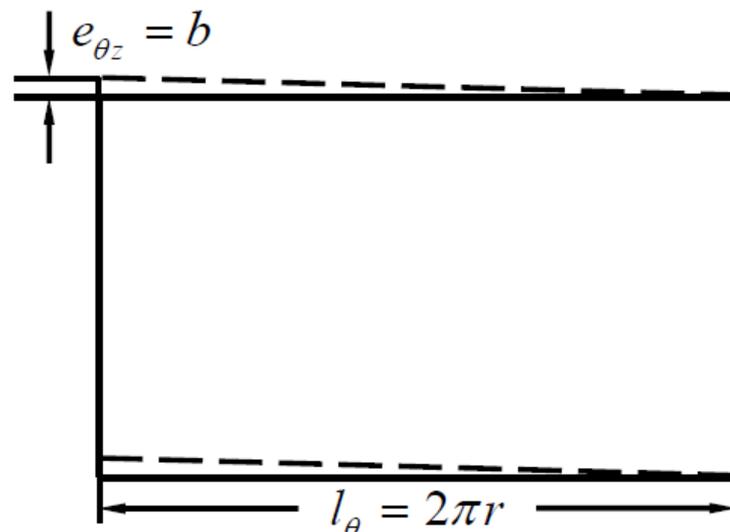
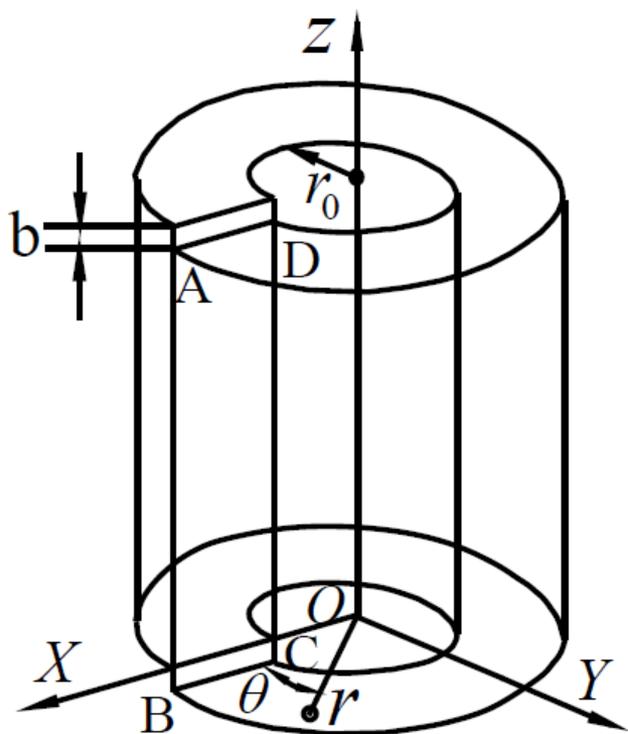
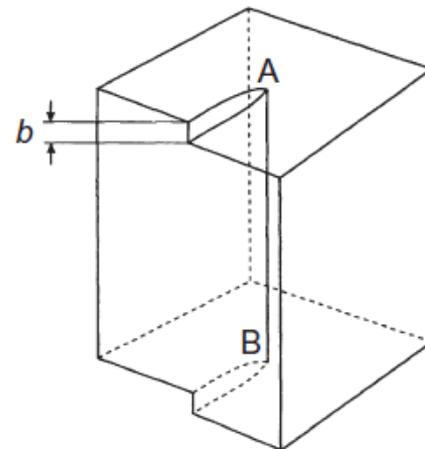
$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{\theta\theta} & \sigma_{\theta r} & \sigma_{\theta z} \\ \sigma_{r\theta} & \sigma_{rr} & \sigma_{rz} \\ \sigma_{z\theta} & \sigma_{zr} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_{\theta r} = \sigma_{r\theta}$$

$$\sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta}$$

$$\sigma_{rz} = \sigma_{zr}$$

### 3. 螺位错应变、应力场\*



$$\varepsilon_{\theta z} = \frac{e_{\theta z}}{l_{\theta}} = \frac{b}{2\pi r}$$

a) 螺位错的连续介质模型

b) 螺位错中任一r处的切应变

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

$$\varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\theta r} = \varepsilon_{r\theta} = \varepsilon_{rr} = \varepsilon_{rz} = \varepsilon_{zr} = \varepsilon_{zz} = 0$$

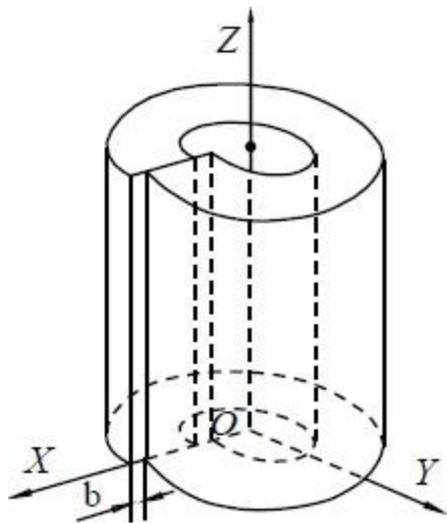
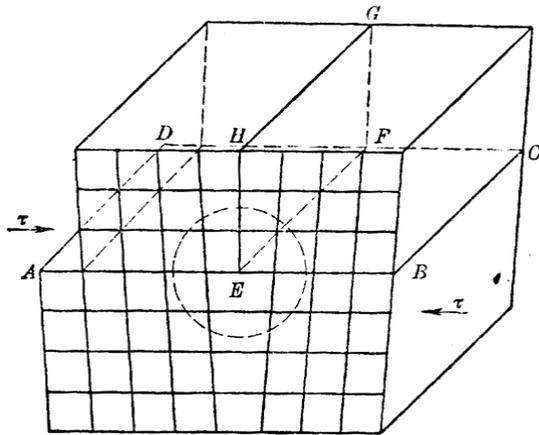
$$\sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta} = G\varepsilon_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r}$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\theta r} = \sigma_{r\theta} = \sigma_{rr} = \sigma_{rz} = \sigma_{zr} = \sigma_{zz} = 0$$

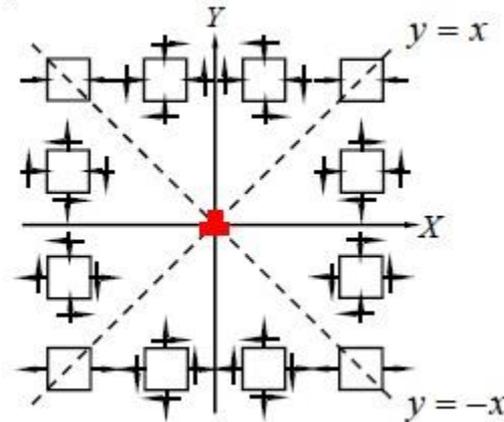
螺型位错应力场特点：

- (i) 只有切应力分量，无正应力分量
- (ii) 切应力分量在  $\theta$  面内，平行于位错线方向
- (iii) 切应力分量的大小， $\tau = \frac{Gb}{2\pi r}$

## 4. 刃位错应变、应力场\*



刃位错的连续介质模型



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

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

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

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

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0$$

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

### 刃型位错应力场特点:

- (i) 既有切应力分量，也有正应力分量
- (ii) 正应力分量有  $\sigma_{xx}$ 、 $\sigma_{yy}$ 、 $\sigma_{zz}$ ，其中  $\sigma_{xx}$ ：  
在滑移面上方为压；在滑移面下方为拉；  
在滑移面内为零
- (iii) 切应力分量  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ：  
在滑移面内，有最大值  $\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)x}$   
在  $x=0$  处及  $|x|=|y|$  处， $\tau=0$

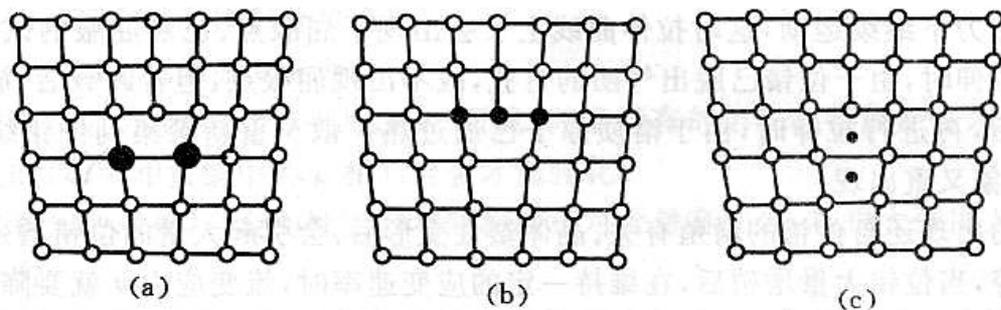


图 7-32 溶质原子在位错附近的分布

(a) 溶质原子大于溶剂原子的置换固溶体；(b) 溶质原子小于溶剂原子的置换固溶体；(c) 间隙固溶体

位错线下方为拉应力场，间隙原子和大尺寸置换原子聚集。  
 位错线上方为压应力场，小尺寸置换原子聚集。

异类原子对位错滑移起阻碍作用→提高金属强度（固溶强化）

## 5. 位错的应变能（弹性能）

- 定义：位错引起点阵畸变，导致弹性应变增加所产生的能量。
- 单位长度位错的应变能为：

$$\frac{W}{L} = \alpha G b^2$$

$\alpha$ : 常数  
 $G$ : 剪切模量  
 $b$ : 柏氏矢量  
 $L$ : 位错总长度

- (1) 混合位错的应变能为其刃分量和螺分量应变能之和
- (2) 位错总是使晶体的能量升高，所以位错是晶体中热力学不稳定的缺陷
- (3) 同一晶体中，柏氏矢量大小相同的刃位错的应变能高于螺位错的应变能， $E_e \approx 1.5E_s$
- (4) 位错的应变能与其柏氏矢量平方成正比，即  $E = \alpha G b^2$ ， $\alpha \approx 0.5 - 1.0$ ，螺位错取下限，刃位错取上限

# 拓展：螺位错应变能推导

The existence of distortion around a dislocation implies that a crystal containing a dislocation is not in its lowest energy state. The extra energy is the *strain energy*. The total strain energy may be divided into two parts

$$E_{\text{total}} = E_{\text{core}} + E_{\text{elastic strain}} \quad (4.18)$$

The elastic part, stored outside the core, may be determined by integration of the energy of each small element of volume. This is a simple calculation for the screw dislocation, because from the symmetry the appropriate volume element is a cylindrical shell of radius  $r$  and thickness  $dr$ . From equation (4.9), the elastic energy stored in this volume *per unit length* of dislocation is

$$\begin{aligned} dE_{\text{el}}(\text{screw}) &= \frac{1}{2} 2\pi r dr (\sigma_{\theta z} e_{\theta z} + \sigma_{z\theta} e_{z\theta}) \\ &= 4\pi r dr G e_{\theta z}^2 \end{aligned} \quad (4.19)$$

Thus, from equation (4.15), the total elastic energy stored (Fig. 4.5) per unit length of dislocation is

$$E_{\text{el}}(\text{screw}) = \frac{Gb^2}{4\pi} \int_{r_0}^R \frac{dr}{r} = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right)$$

where  $R$  is the outer radius.

$$\begin{aligned} e_{\theta z} = e_{z\theta} &= \frac{b}{4\pi r} \\ \sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta} &= \frac{Gb}{2\pi r} \end{aligned}$$

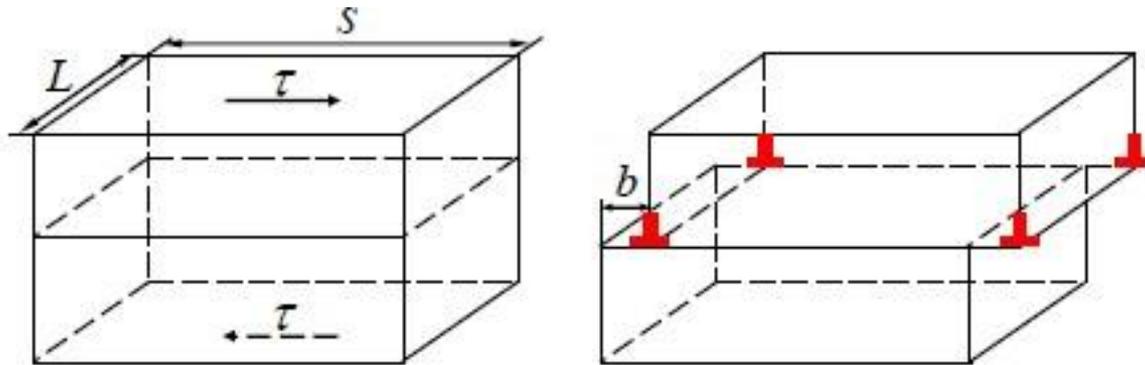
From the expressions for edge, screw and mixed dislocations it is clear that the energy per unit length is relatively insensitive to the character of the dislocation and also to the values of  $R$  and  $r_0$ . Taking realistic values for  $R$  and  $r_0$  all the equations can be written approximately as

$$E_{\text{el}} = \alpha Gb^2 \quad (4.24)$$

where  $\alpha \approx 0.5-1.0$ . This leads to a very simple rule (*Frank's rule*) for determining whether or not it is energetically feasible for two dislocations to react and combine to form another. Consider the

# 3.3.8 位错的相互作用力

## 1. 外加应力对位错的作用力



设使晶体变形所做的功为  $W'$ ，作用在位错线上的力使位错线运动所做的功为  $W$

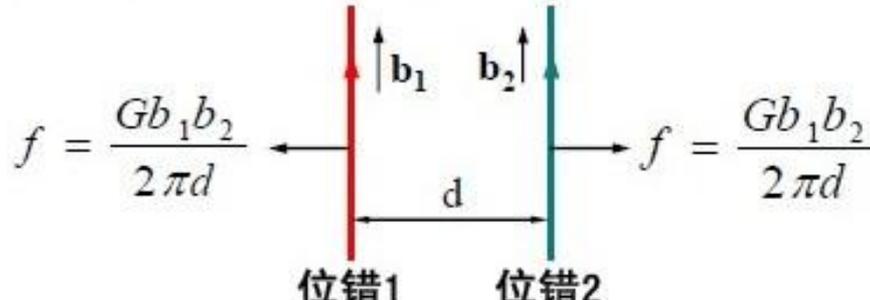
则，
$$W = \tau(L \cdot s)b \quad W' = f \cdot L \cdot S$$

根据虚功原理， $W = W'$

解得，
$$f = \tau b$$



## 2. 平行位错之间的相互作用力\*

$$\bar{f}_{12} = (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{b}_2) \times \bar{l}_{02} = \frac{Gb_1b_2}{2\pi d}$$


位错1      位错2

用Petch-Koehler公式计算

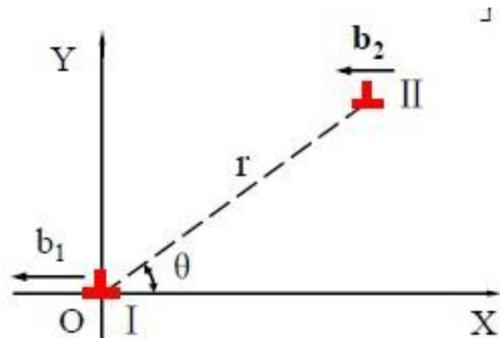
$$\bar{f} = (\bar{\sigma} \cdot \bar{b}) \times \bar{l}_0$$

式中， $\bar{\sigma}$  — 位错线 1 (位于坐标原点) 的应力场  
在位错线 2 处的应力

$\bar{b}$  — 位错线 2 的柏氏矢量

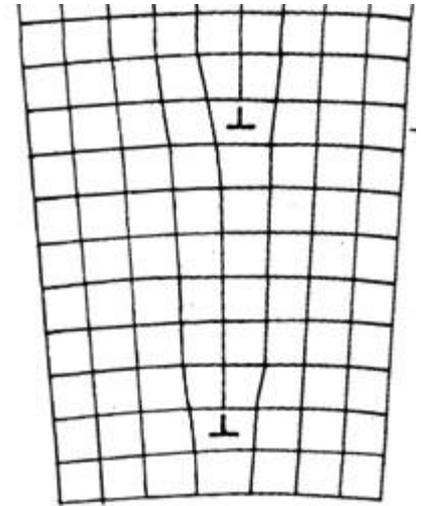
$\bar{l}_0$  — 位错线 2 的正方向单位矢量

• 例:



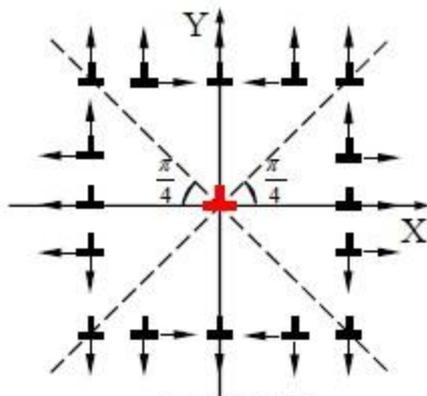
平行滑移面内两个平行正刃位错间的互作用力

$$\begin{aligned}\bar{f}_{12} &= (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{b}_2) \times \bar{l}_{02} \\ &= \sigma_{yx} b_2 i - \sigma_{xx} b_2 j \\ &= f_x + f_y\end{aligned}$$

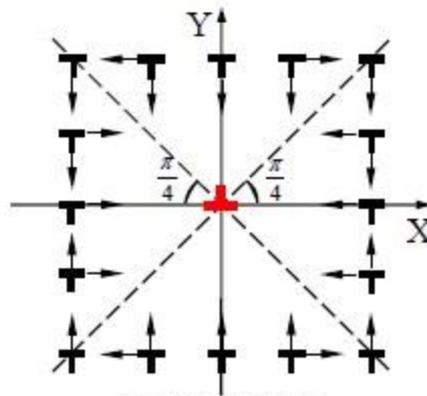


$$f_x = \sigma_{yx} \cdot b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos\theta \cos 2\theta}{r}$$

$$f_y = -\sigma_{xx} \cdot b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin\theta(2 + \cos 2\theta)}{r}$$



a) 同号位错



b) 异号位错

平行滑移面内两平行刃位错间的互作用力

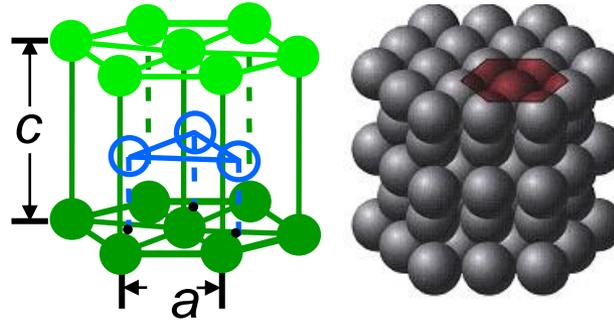
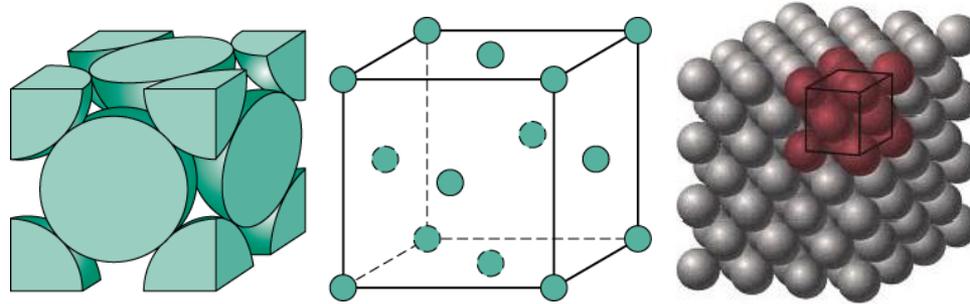
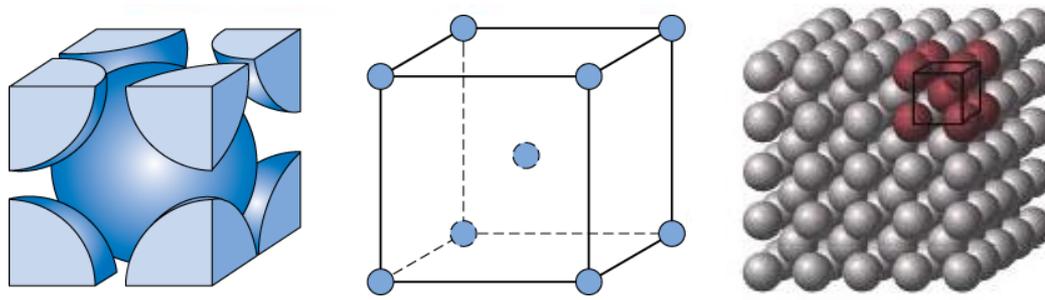
同号相斥，异号相吸。

# 3.3.9 实际晶体中的位错

## 1. 单位位错、全位错

- 实际晶体中的位错结构取决于晶体结构和能量条件。
- 实际晶体结构中的单位位错的应变能  $W \propto b^2$ 。
- 实际晶体中位错限于原子最短距离（柏氏矢量的模=1个原子直径），这样的位错称为单位位错，又叫最小全位错。
- 晶体滑移后，一个位错产生一个原子直径大小的滑移台阶。

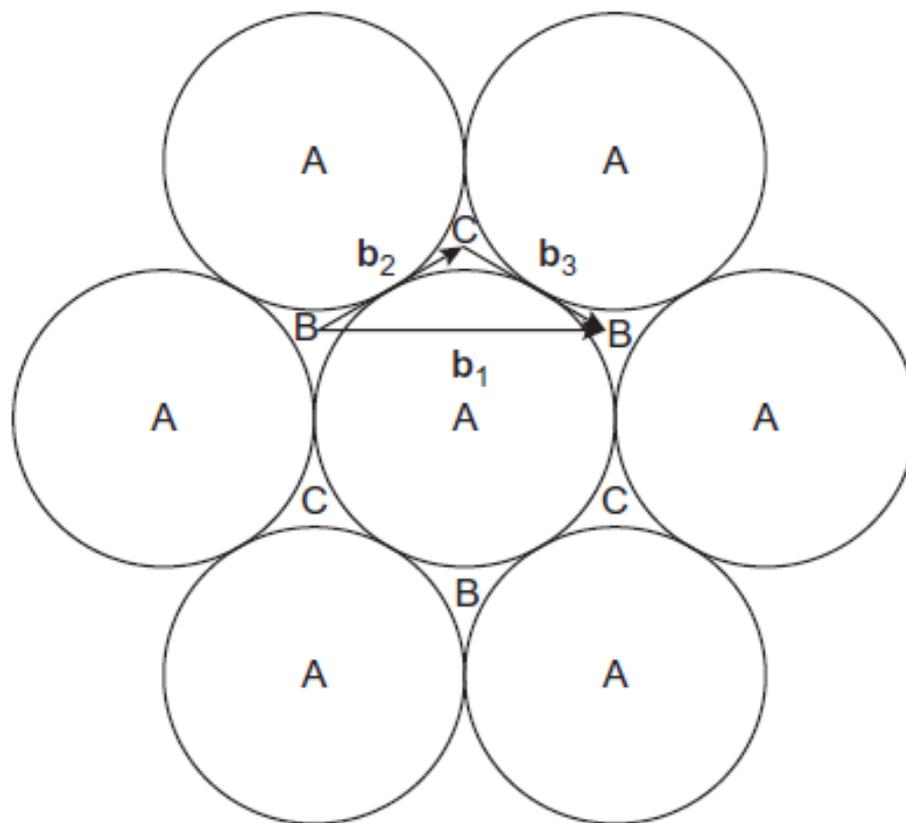




思考：bcc, fcc, hcp单位位错？大小？滑移面？滑移方向？

思考：位错滑移后原子堆垛是否发生了改变？

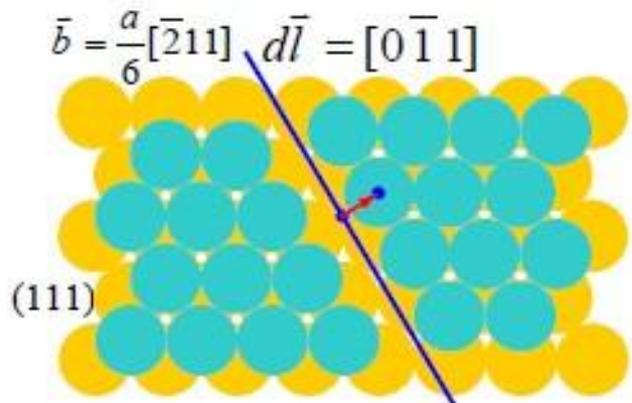
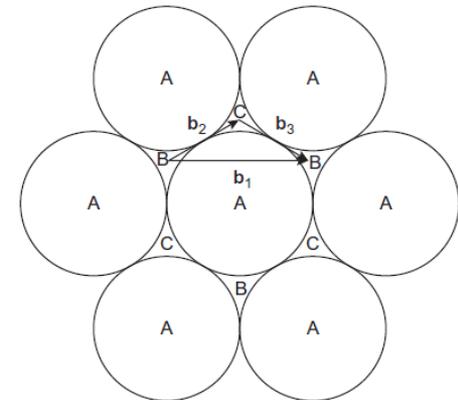
思考：晶体中只有单位位错和全位错吗？



思考：从图中看，位错每次滑移是否有更近的途径？

## 2. 不全位错 (分位错)

- 除了单位位错外，晶体中还可能形成一些柏氏矢量小于滑移方向的原子间距的位错，即柏氏矢量不是从一个原子到另一个位置，而是从原子位置到结点之间的某一位置，这类位错称不全位错。
- 面心立方晶体两个重要的不全位错：
  - (1)肖克莱不全位错:  $a/6 \langle 112 \rangle$
  - (2)弗兰克不全位错:  $a/3 \langle 111 \rangle$



名称	柏氏矢量	位错类型	运动方式
肖克莱不全位错	$a \langle 112 \rangle / 6$	刃型 螺型 混合型	只能滑移
弗兰克不全位错	$a \langle 111 \rangle / 3$	刃型	只能攀移

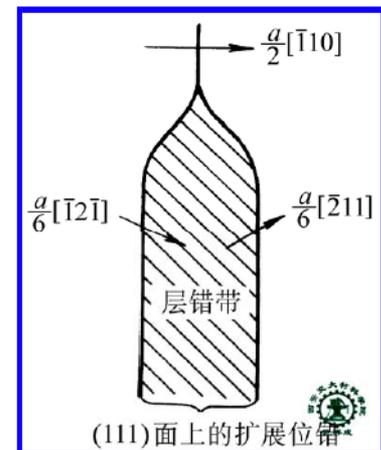
### 3. 位错的分解与合成

- 位错能量高，常发生自发反应
- 位错反应：一根位错分解成两根以上的位错，或，两根位错合并为一根位错
- 自发反应的位错必须满足**两个条件**
  - ①几何条件：反应前后柏氏矢量和相等。

$$b_1 = b_2 + b_3$$

- ②能量条件：反应后位错总能量不大于反应前位错的总能量

$$|b_1|^2 \geq |b_2|^2 + |b_3|^2$$



思考：下列位错反应能否进行？

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

$$(2) a[100] \rightarrow \frac{a}{2}[111] + \frac{a}{2}[1\bar{1}\bar{1}]$$

思考：在滑移面  $(1\bar{1}1)$  上有一个柏氏矢量为  $a/2[110]$  的刃位错，能否分解为两个肖克莱位错？

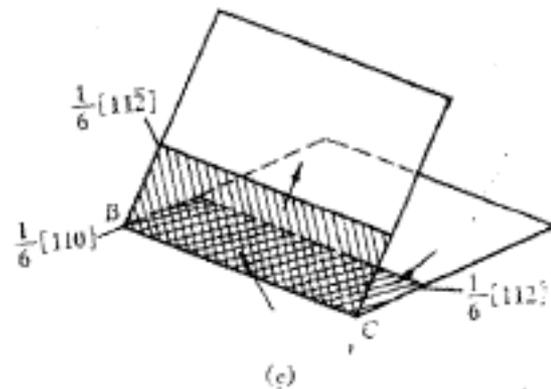
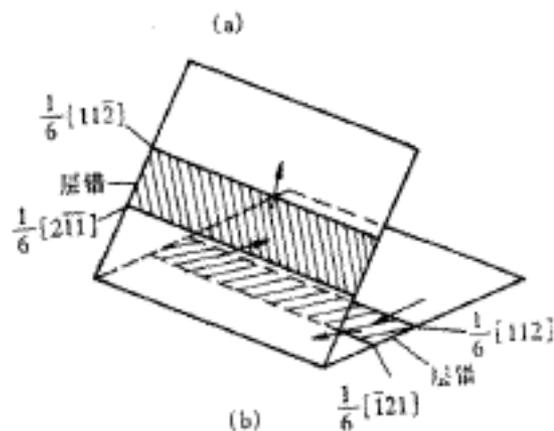
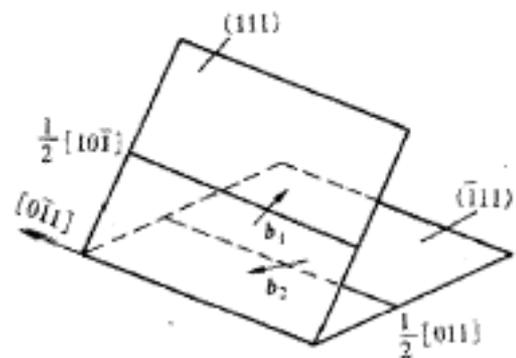
思考：在滑移面  $(1\bar{1}1)$  上有一个柏氏矢量为  $a/2[110]$  的刃位错，能否分解为一个肖克莱和一个弗兰克位错？

## 练习

- 柏氏矢量为 $a/2[110]$ 的全位错可以在面心立方晶体 $\{111\}$ 晶面族的哪些晶面上存在？试写出该全位错在这些面上分解为两个 $a/6\langle 112 \rangle$ 不全位错的反应式。

## 4. 面角位错 (位错锁)

- 两个可滑移的分位错通过位错反应生成一个不可滑移的位错。
- 是位错相互缠结，产生加工硬化的主要原因。





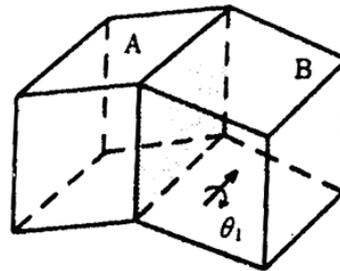
# 3.4 面缺陷

## 1. 晶界

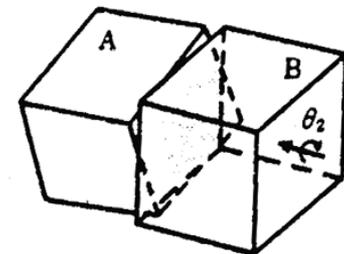
- 材料内晶体之间的界面称为晶界。晶界所包围的区域称为晶粒。由多个晶粒组成的材料称为多晶材料。

### ①小角度晶界

- 晶界的结构和性质与相邻晶粒的取向差有关，当取向差 $\theta$ 小于 $15^\circ$ 时，称为小角度晶界。
- 小角度晶界分为倾斜晶界和扭转晶界。



(a) 倾斜晶界



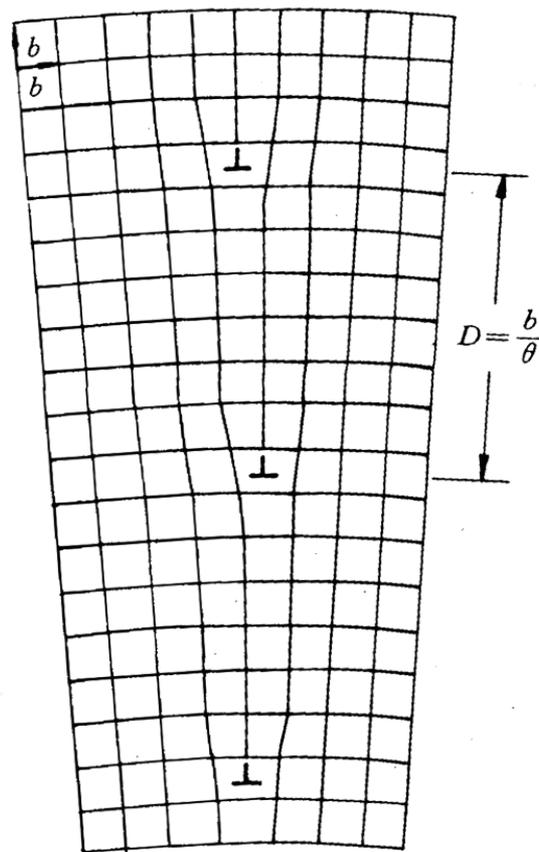
(b) 扭转晶界



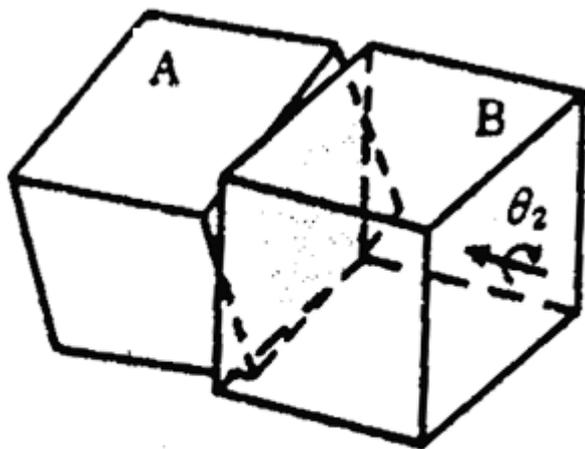
- 倾斜晶界由一系列同号刃型位错构成。
- 位错间距离 $D$ 、柏氏矢量 $b$ 与取向差 $\theta$ 之间，满足下列关系：

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{b}{D};$$

$$D = \frac{b}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \approx \frac{b}{\theta}$$



- 扭转晶界由一系列螺型位错构成。



(b) 扭转晶界

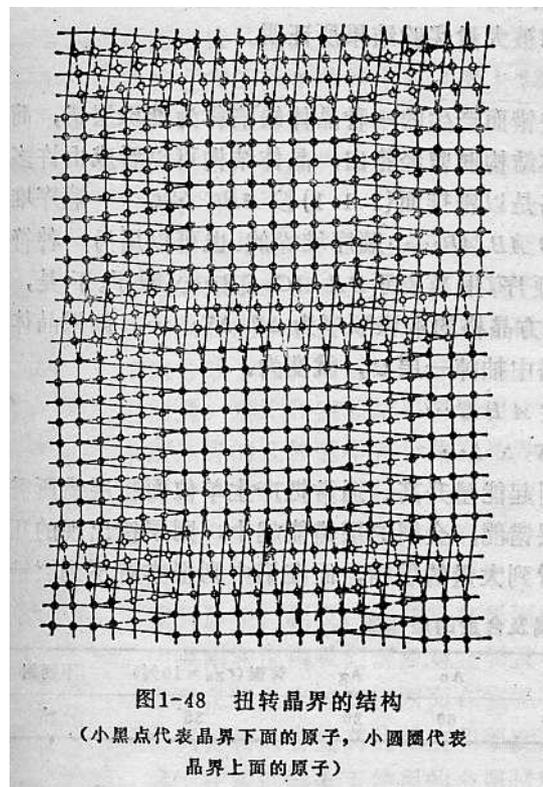
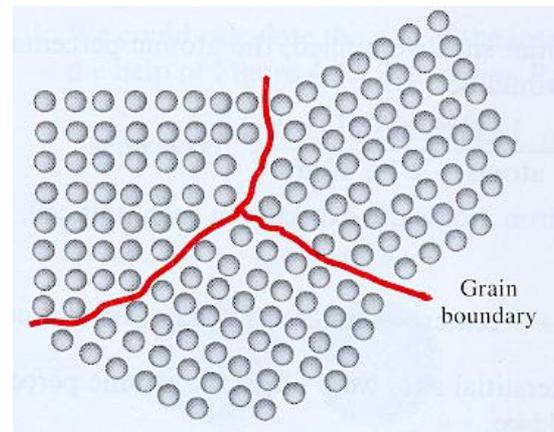
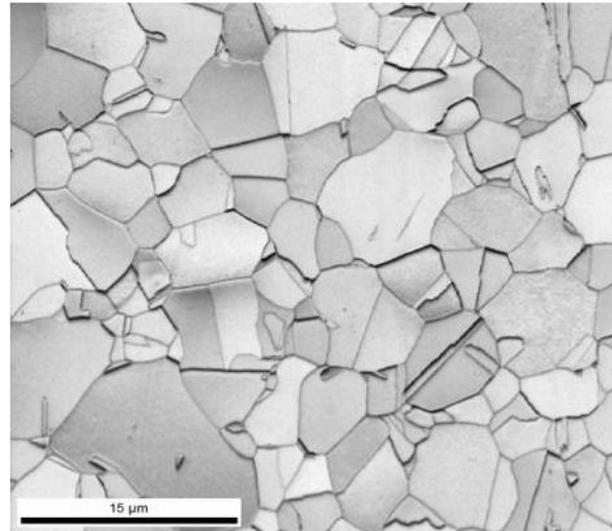
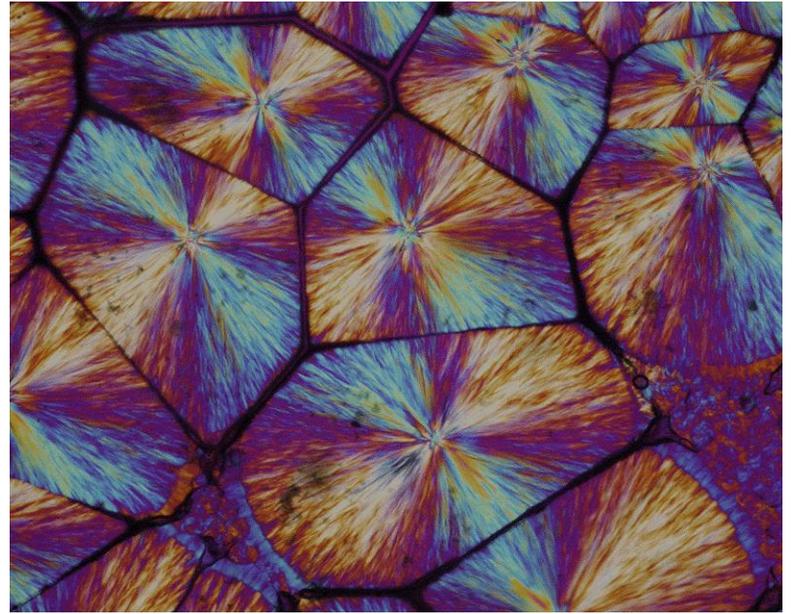


图1-48 扭转晶界的结构  
(小黑点代表晶界下面的原子, 小圆圈代表晶界上面的原子)

## ②大角度晶界

- 大角度晶界两侧晶粒的取向差大于 $15^\circ$
- 退火金属多为大角度晶界





# 晶界特性

(1)晶界处能量高,高温下晶粒自发长大.

(2)阻碍常温塑性变形(阻碍位错滑移)

-晶粒越细,材料强度越高,硬度越高,且塑性也高,韧性高。

(3)高温下,晶界处原子扩散速度快.

(4)晶界是新相优先形核部位

(5)晶界容易产生内吸附

-异类原子易在晶界处偏聚

(6)晶界处易于腐蚀和高温氧化.

-晶界处最后结晶,偏聚低熔点杂质。因而,腐蚀时,一般先看到晶界;高温时,一般晶界先熔化。

## 3. 晶界内吸附

——晶体内杂质或合金元素在晶界处富集的现象

1) 原因: 异类原子与晶界交互作用

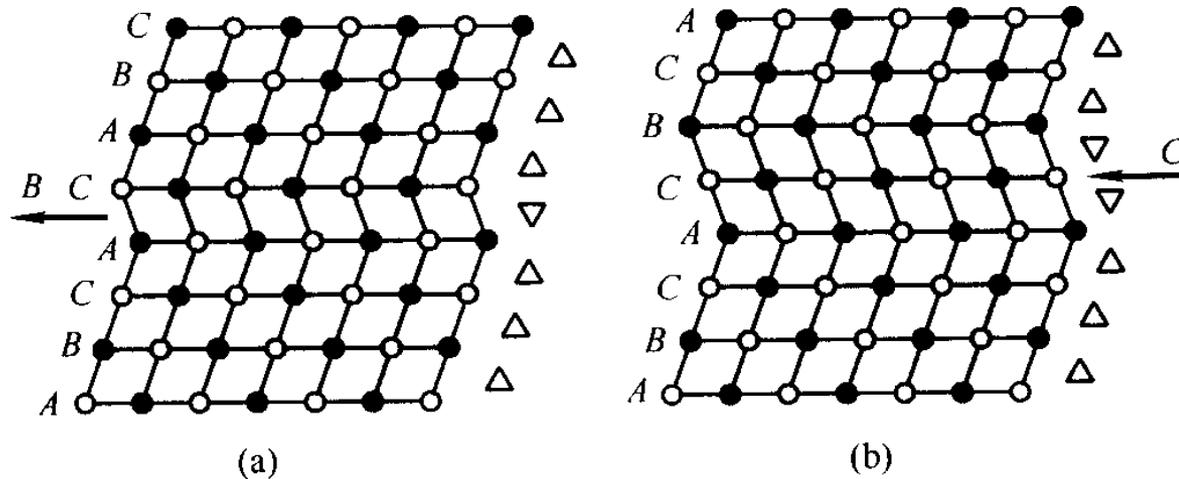
2) 晶界内吸附的作用

i) 有害作用: (P、Sb、Sn)使晶界脆化,奥氏体不锈钢的晶间腐蚀...

ii) 有益作用: 硼提高钢的淬透性,钛防奥氏体不锈钢的晶间腐蚀

## 2. 堆垛层错

- 堆垛层错（简称层错）是指正常堆垛顺序中引入不正常顺序堆垛的原子面而产生的一类面缺陷。
- 以面心立方结构为例，当正常层序中抽走一原子层，相应位置出现一个逆顺序堆层.....ABC**A**BC.....称抽出型层错；如果正常层序中插入一原子层，相应位置出现两个逆顺序堆层.....ABC**A**BC**A**B.....称插入型层错。



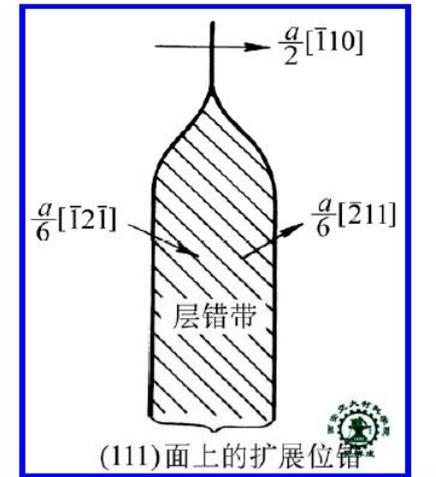
•肖克莱分位错所产生的层错

面心立方晶体中位于  $\{111\}$  面内的单  
位位错可分解为两个肖克莱不全位错及它们  
之间的层错区，称其为扩展位错

例如：
$$\frac{a}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{2}11] + \text{层错} + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$$

•弗兰克分位错所产生的层错

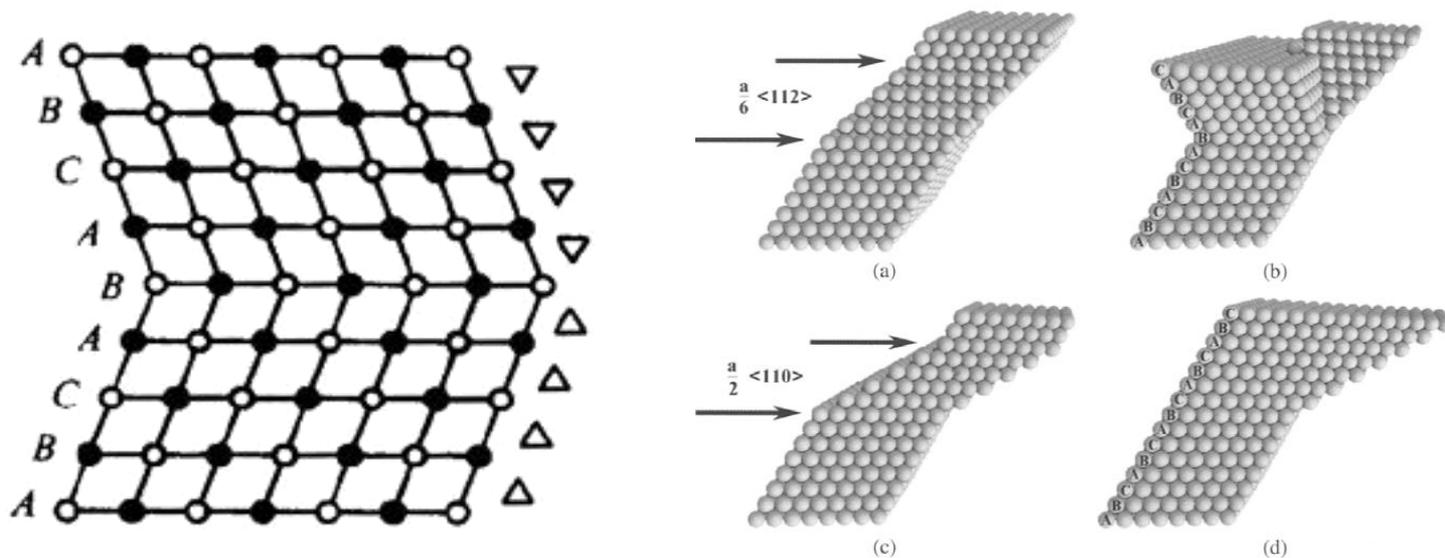
$$a/2[\bar{1}10] \rightarrow a/3 [\bar{1}11] + a/6 [\bar{1}12]$$



弗兰克位错环本身就是层错！

### 3. 孪晶界

- 一个晶粒内部相近两部分晶体沿一个公共界面，构成镜面对称的位向关系，界面上的原子为两部分晶体共有，这种界面称为孪晶界。
- 孪晶界两侧的晶体称为孪晶；产生孪晶的过程称为孪生。



思考：孪晶界实际是什么面缺陷？

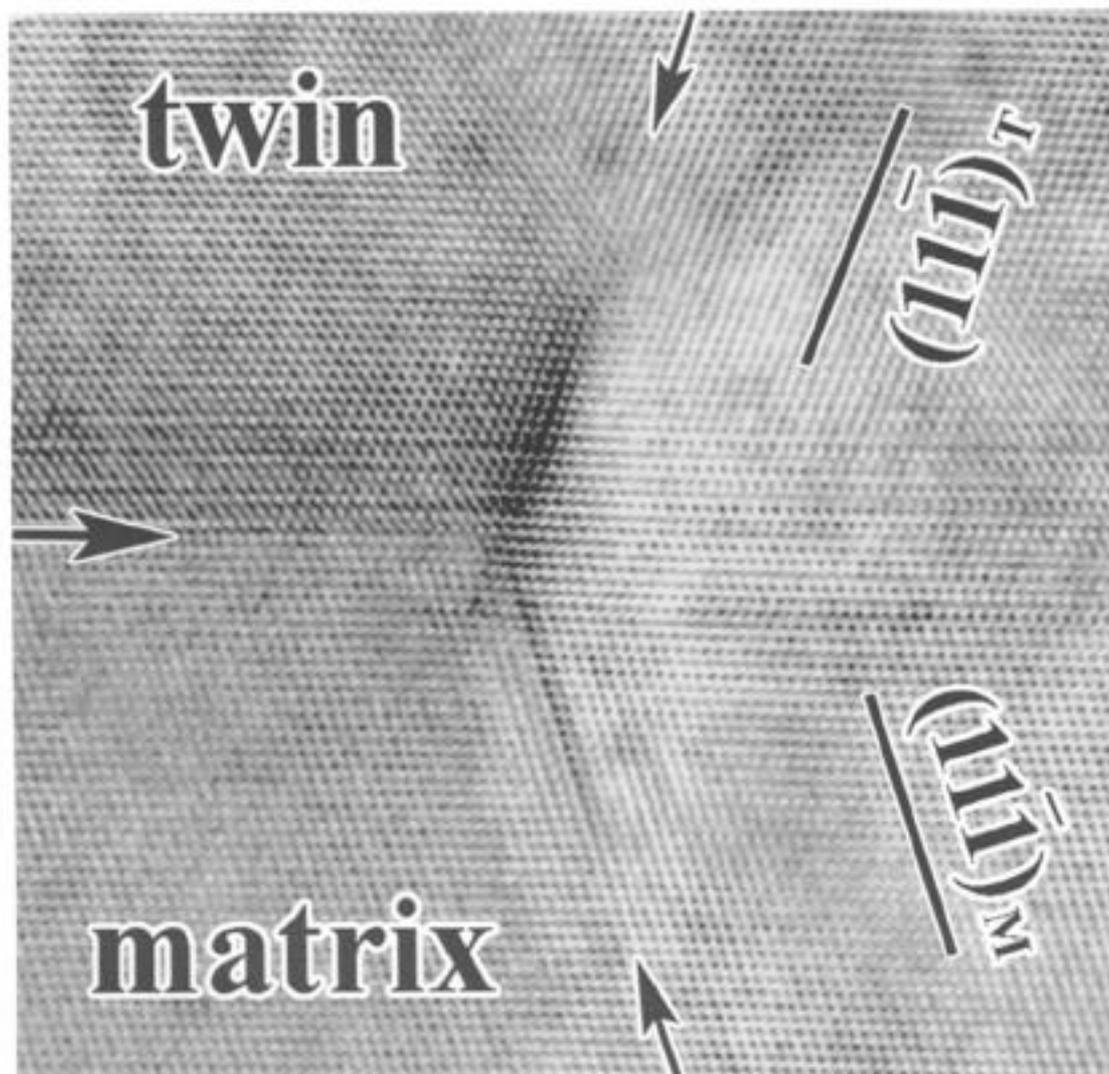
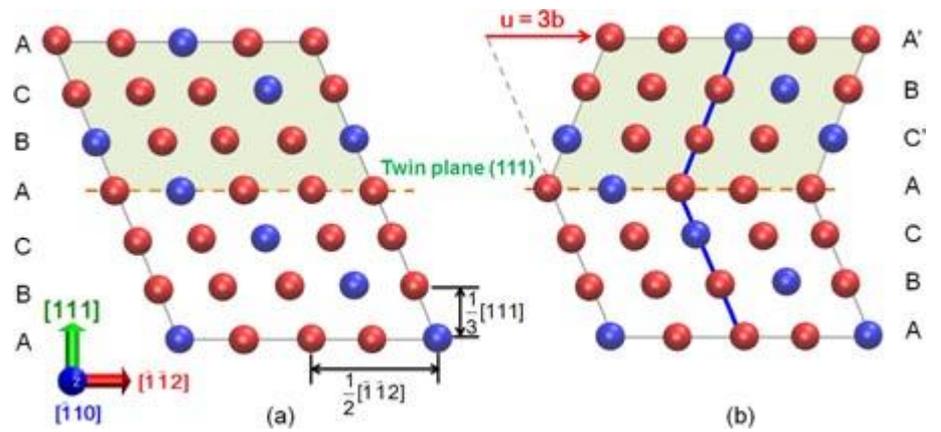
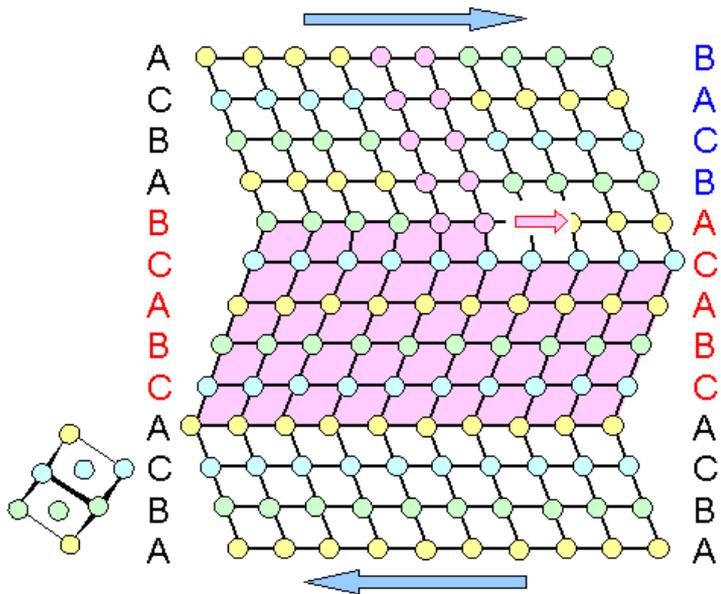


Fig. 40. High resolution micrograph of parent and twin crystals in Cu-4%Al in  $[011]_M$  projection revealing the intersection of  $\frac{a}{3}[111]_M$  Frank dipole by a twinning front. The figure shows that the upper part of the dipole is sheared and is incorporated into the twin lattice, whereas the lower part is still in the parent crystal.



## 4. 相界

- 两相之间的界面即为相界。
- 共有三类相界面
  - ①共格界面:两相结构相近,晶格常数、原子间距相近,界面能低。
  - ②半共格界面:界面处需要位错调整。
  - ③非共格界面:界面能高,原子不匹配。

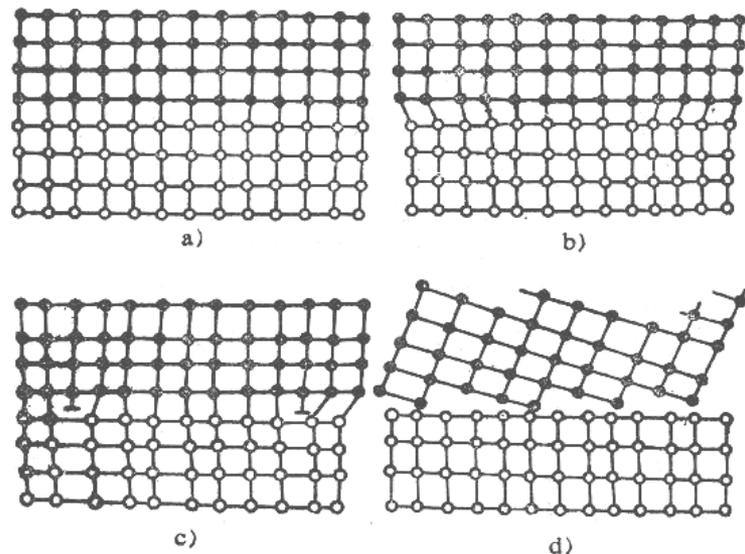
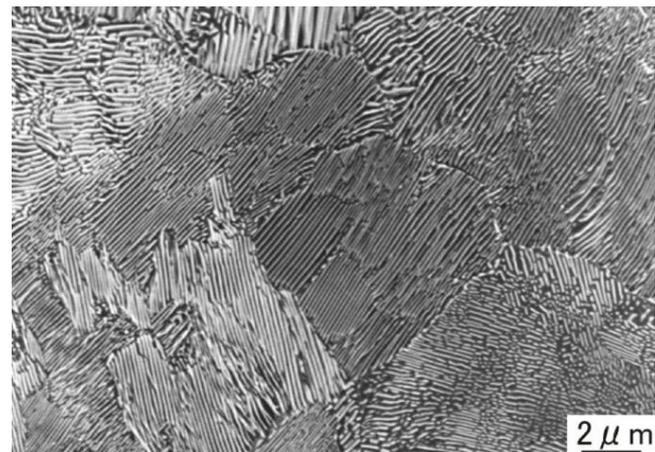


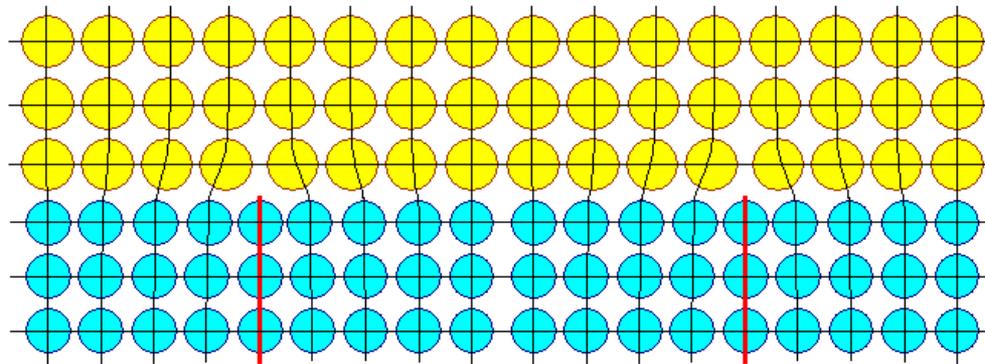
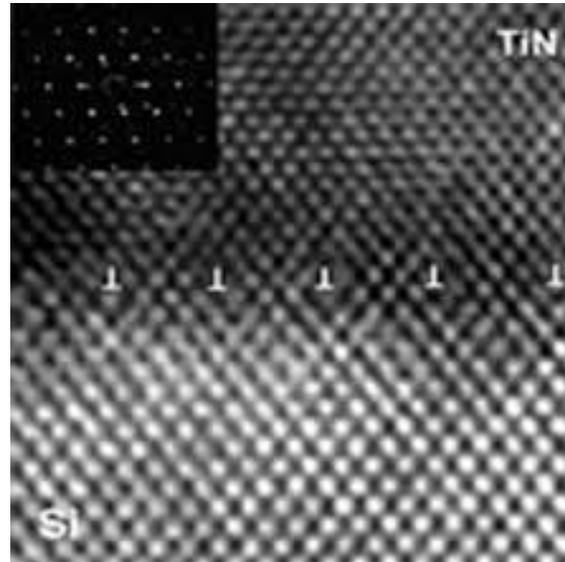
图1-52 各种相界面结构示意图

- a) 具有完善共格关系的相界    b) 具有弹性畸变的共格相界  
c) 半共格相界    d) 非共格相界



钢中的珠光体组织

思考：下图所示为什么类型的相界面？

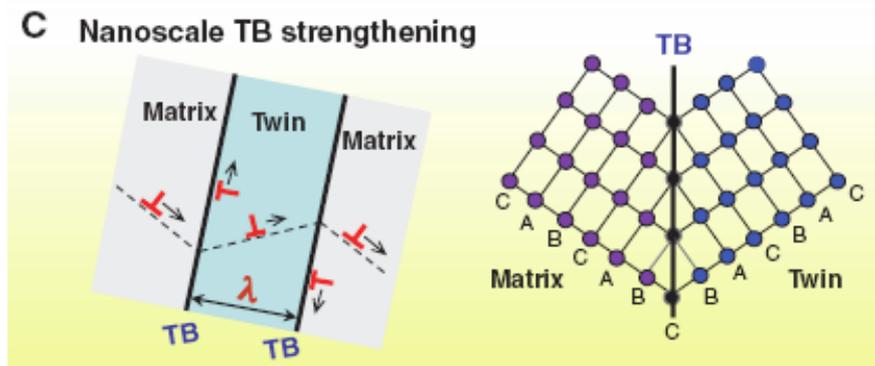
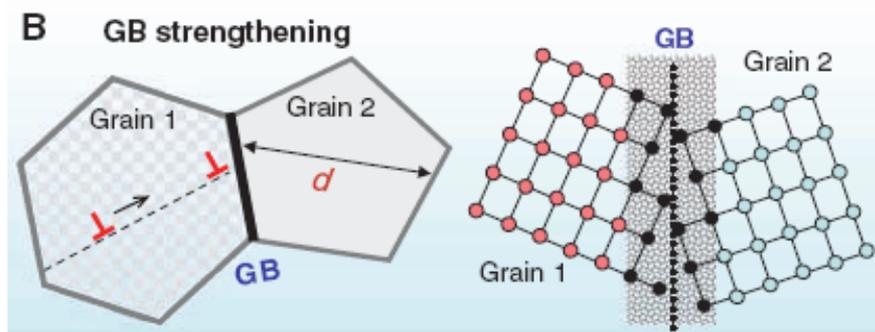
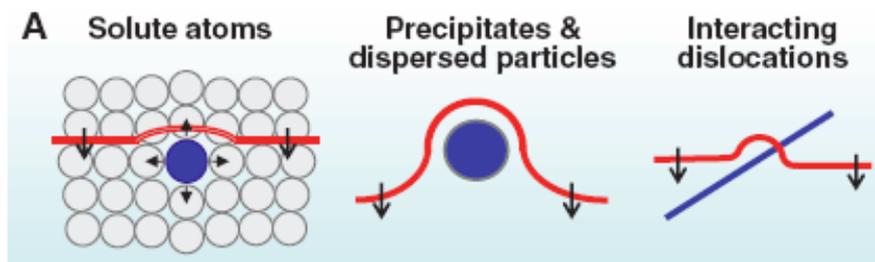


思考：通过调整界面两侧的晶格常数匹配度，可调控什么？

## 5. 面缺陷小结

- 晶体中所有的界面都是面缺陷。
- 通过控制界面结构，可以控制材料的力学、物理、化学等性能。
- 共格界面与非共格界面的能量。
- 单晶与多晶的各相同性与各相异性。
- 晶粒趋向于正六边形。

凡是能阻挡位错运动的缺陷，都可使材料增强！



- 固溶强化
- 细晶强化
- 加工硬化
- 第二相强化

将于第七章详述