

第六讲 线缺陷

主讲人：张骞

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

线缺陷

位错模型的提出

背景

完整晶体塑性变形—滑移的模型→金属晶体的理论强度→理论强度比实测强度高出几个数量级→晶体缺陷的设想—线缺陷（位错）的模型→以位错滑移模型计算出的晶体强度，与实测值基本相符。

应用

位错的来源与增殖

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

- 一、晶体的塑性和强度
- 二、位错的类型
- 三、位错的伯格斯矢量（Burgers vector）及位错的性质
- 四、位错的应力场与应变能
- 五、位错的运动
- 六、位错的反应

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

一、晶体的塑性和强度

（一）完整晶体的塑性变形方式

1. 晶体在外力作用下的滑移
2. 晶体在外力作用下的孪生

（二）完整晶体的理论切变强度

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

（一）完整晶体的塑性变形方式

1. 晶体在外力作用下的滑移

滑移的定义

滑移的结果

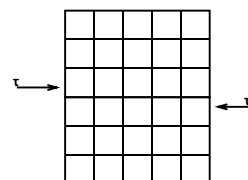
滑移的可能性（滑移系统）：在最密排晶面（称为滑移面）的最密排晶向（称为滑移方向）上进行

晶体滑移的临界分切应力（ τ_0 ）：开动晶体滑移系统所需的最小分切应力

2. 晶体在外力作用下的孪生

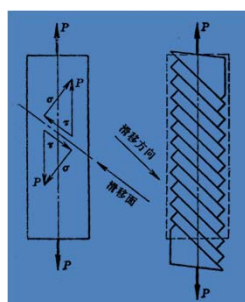
在外力作用下，晶体的一部分相对于另一部分，沿着一定的晶面和晶向发生切变，切变之后，两部分晶体的位向以切变面为镜面呈对称关系。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



外力作用下晶体滑移示意图（微观）

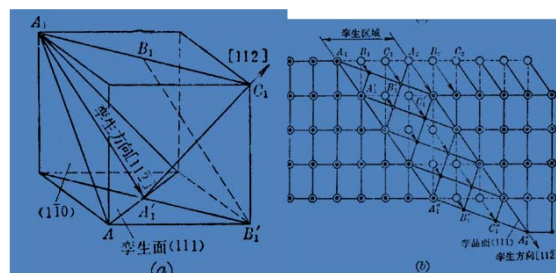
材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



(a) 变形前 (b) 变形后

单晶试棒在拉伸应力作用下的变化（宏观）

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



(a) 孪生面、孪生方向的方位

(b) (111)晶面：孪生过程中 (111) 晶面的移动情况

面心立方晶体 (111) 孪生示意图 [112]

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(二) 完整晶体的理论切变强度

按照完整晶体滑移模型，使晶体滑移所需的临界切应力，即使整个滑移面的原子从一个平衡位置移动到另一个平衡位置时，克服能垒所需要的切应力，晶面间的滑移是滑移面上所有原子整体协同移动的结果，这样可以把晶体的相对滑移简化为两排原子间的滑移，晶体的理论切变强度 τ_m 为：

$$Gx/a = \tau_m \sin(2\pi x/\lambda) = \tau_m 2\pi x/\lambda$$

当 x 很小时，于是，

$$\tau_m = G\lambda / (2\pi a)$$

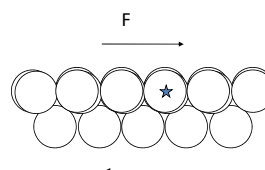
对于简单立方晶体， $a = \lambda$ ，则

$$\tau_m = G / (2\pi)$$

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

滑移机理

所施加的力必须足以使原子间的键断裂，才能产生滑移压力大小约为 $E/15$



材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

二、位错的类型

晶体在不同的应力状态下，其滑移方式不同。根据原子的滑移方向和位错线取向的几何特征不同，位错分为刃位错、螺位错和混合位错。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(一)、刃位错

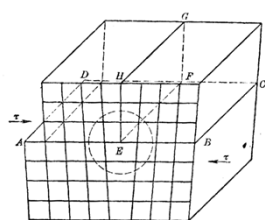
形成及定义：

晶体在大于屈服值的切应力 τ 作用下，以 ABCD 面为滑移面发生滑移。EF 是晶体已滑移部分和未滑移部分的交线，犹如砍入晶体的一把刀的刀刃，即刃位错（或棱位错）。

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。

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

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



刃位错示意图

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(二)、螺位错

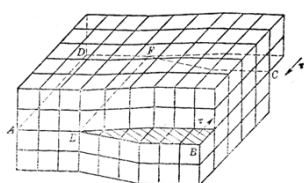
形成及定义:

晶体在外加切应力 τ 作用下,沿ABCD面滑移,图中EF线为已滑移区与未滑移区的分界处。由于位错线周围的一组原子面形成了一个连续的螺旋形坡面,故称为螺位错。

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。

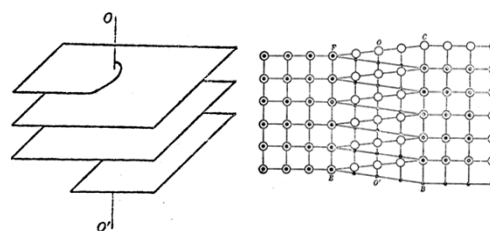
分类: 有左、右旋之分,分别以符号“ \cup ”和“ \cap ”表示。其中小圆点代表与该点垂直的位错,旋转箭头表示螺旋的旋转方向。它们之间符合左手、右手螺旋定则。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



螺位错形成示意图

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



(a) 与螺位错垂直的晶面的形状

(b) 螺位错滑移面两侧晶面上原子的滑移情况

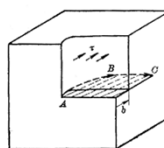
材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(三)、混合位错

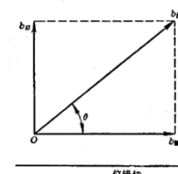
在外力 τ 作用下,两部分之间发生相对滑移,在晶体内部已滑移和未滑移部分的交线既不垂直也不平行滑移方向(伯氏矢量 b),这样的位错称为混合位错。

位错线上任意一点,经矢量分解后,可分解为刃位错和螺位错分量。晶体中位错线的形状可以是任意的,但位错线上各点的伯氏矢量相同,只是各点的刃型、螺型分量不同而已。

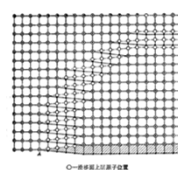
材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



(a) 混合位错的形成



(b) 混合位错分解为刃位错和螺位错示意图



(c) 混合位错线附近原子滑移透视图

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

三、位错的伯格斯矢量 (Burgers vector) 及位错的性质

伯格斯矢量：晶体中有位错存在时，滑移面一侧质点相对于另一侧质点的相对位移或畸变。

性质：大小表征了位错的单位滑移距离，方向与滑移方向一致。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

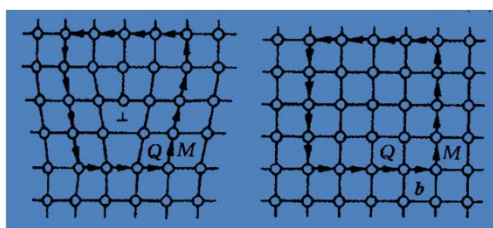
(一)、伯格斯矢量的确定及表示

1. 确定伯格斯矢量的步骤

- (1) 对于给定点的位错，人为规定位错线的方向，
- (2) 用右手螺旋定则确定伯格斯回路方向。
- (3) 按照规律走回路，最后封闭回路的矢量即要求的伯氏矢量。

2. 伯氏矢量的表示方法 $b=ka[uvw]$

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



简单立方结构中，围绕刃位错的伯格斯回路

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(二)、伯氏矢量的守恒性

对一条位错线而言，其伯氏矢量是固定不变的，此即位错的伯氏矢量的守恒性。

推论：

1. 一条位错线只有一个伯氏矢量。
2. 如果几条位错线在晶体内部相交（交点称为节点），则指向节点的各位错的伯氏矢量之和，必然等于离开节点的各位错的伯氏矢量之和。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(三)、位错线的连续性及位错密度

1. 位错线的连续性

位错线不可能中断于晶体内部。在晶体内部，位错线要么自成环状回路，要么与其它位错相交于节点，要么穿过晶体终止于晶界或晶体表面。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

2. 位错密度：单位体积内位错线的总长度 $\rho = L/V$

$$\rho = \frac{n \cdot l}{S \cdot l} = \frac{n}{S}$$

式中 L 为晶体长度， n 为位错线数目， S 晶体截面积。

一般退火金属晶体中 ρ 为 $10^4 \sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$ 数量级，经剧烈冷加工的金属晶体中， ρ 为 $10^{12} \sim 10^{14} \text{ cm}^{-2}$

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

四、位错的应力场与应变能

理论基础：连续弹性介质模型

假设：1. 完全服从虎克定律，即不存在塑性变形；2. 各向同性；3. 连续介质，不存在结构间隙。

位错的应力场：

刃位错上面的原子处于压应力状态，为压应力场，刃位错下面的原子处于张应力状态，为张应力场。

围绕一个螺位错的晶体圆柱体区域也有应力场存在。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

位错的应变能 W_{tot}

位错使其周围点阵畸变，点阵能量增加，点阵所增加的能量即为位错的应变能。包括两部分： $W_{tot}=W_{core}+W_{el}$

(1) 位错核心能 W_{core} ，在位错核心几个原子间距 $r_0=2|b|=2b$ 以内的区域，滑移面两侧原子间的错排能即相当于位错核心能。错排能约占位错能的1/10，可忽略。

(2) 弹性应变能 W_{el} ，在位错核心区以外，长程应力场作用范围所具有的能量，约占位错能的9/10。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

总之：(1) 位错的弹性应变能 $W_{el} \propto \ln R$ ，即随 R 缓慢地增加，所以位错具有长程应力场。

(2) 位错的能量是以单位长度的能量来定义的，直线位错更稳定。

(3) 位错的弹性应变能可进一步简化为一个简单的函数式： $W=\alpha Gb^2$ 。

式中 W 为单位长度位错线的弹性应变能， G 是剪切模量， b 是柏氏矢量， $\alpha=1/4\pi \ln R/r_0$ ，其中 R 是晶体的外径， r_0 是位错核心的半径，系数 α 由位错的类型、密度 (R 值) 决定，其值的范围为 0.5~1.0。

意义：上式表明 $W \propto b^2$ ，故可用柏氏矢量的大小来判断晶体哪些地方最容易形成位错。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

五、位错的运动

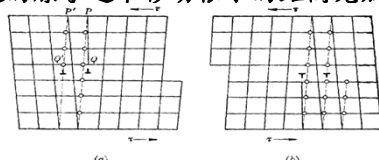
- **位错的滑移：**指位错在外力作用下，在滑移面上的运动，结果导致永久形变。
- **位错的攀移：**指在热缺陷的作用下，位错在垂直滑移方向的运动，结果导致空位或间隙原子的增值或减少。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(一)、位错的滑移

1. 位错滑移的机理

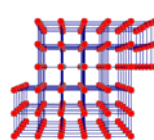
位错在滑移时是通过位错线或位错附近的原子逐个移动很小的距离完成的。



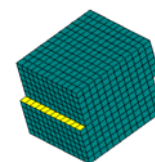
(a) 正刃位错滑移方向与外力方向相同 (b) 负刃位错滑移方向与外力方向相反

刃位错的滑移

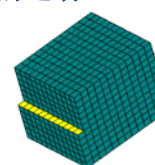
材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering



刃位错的运动



螺位错的运动



混合位错的运动

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

2. 位错的滑移特点

- (1) 刃位错滑移方向与外力 τ 及伯氏矢量 b 平行，正、负刃位错滑移方向相反。
- (2) 螺位错滑移方向与外力 τ 及伯氏矢量 b 垂直，左、右螺型位错滑移方向相反。
- (3) 混合位错滑移方向与外力 τ 及伯氏矢量 b 成一定角度（即沿位错线法线方向滑移）。
- (4) 晶体的滑移方向与外力 τ 及位错的伯氏矢量 b 相一致，但并不一定与位错的滑移方向相同。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

(二)、位错的攀移

位错的攀移指在热缺陷或外力作用下，位错线在垂直其滑移面方向上的运动，结果导致晶体中空位或间隙质点的增殖或减少。刃位错除了滑移外，还可进行攀移运动。

攀移的实质是多余半原子面的伸长或缩短。螺位错没有多余半原子面，故无攀移运动。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

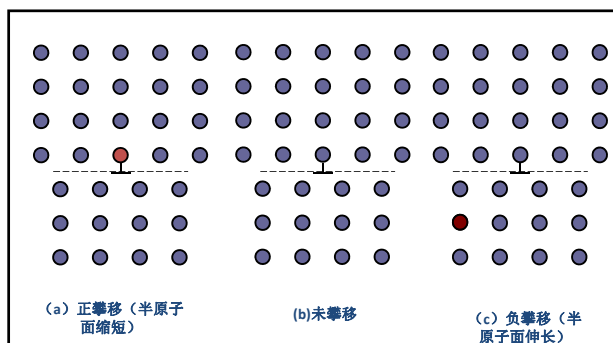


图2-17 刃位错攀移示意图

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

位错的攀移力（使位错发生攀移运动的力）包括：

- (1) **化学攀移力 F_c** ，是指不平衡空位浓度施加给位错攀移的驱动力。
- (2) **弹性攀移力 F_e** ，是指作用于半原子面上的正应力分量作用下，刃位错所受的力。

位错攀移的激活能 U_c 由割阶形成的激活能 U_j 及空位的扩散活化能 U_d 两部分所组成。常温下位错靠热激活来攀移是很困难的。但是，在许多高温过程如蠕变、回复、单晶拉制中，攀移却起着重要作用。位错攀移在低温下是难以进行的，**只有在高温下才可能发生。**

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

六、位错的反应

由于位错间相互作用力的存在，使得位错之间有可能发生相互转化或相互作用，此即位错反应。位错能否发生反应，取决于两个条件：

- 其一，必须满足伯氏矢量的守恒性；
- 其二，必须满足能量条件。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering

在同一滑移面的两个异向位错的相互作用，相互吸引、反应导致位错消失，变成完整晶体。

两个异向位错，在不同滑移面，上下错开一个原子间距，反应结果生成一排空位。

同向位错，在不同滑移面，当两者所成角度 $<45^\circ$ 时，压应力重叠，张应力重叠，结果互相排斥，导致远离；当两者所成角度 $>45^\circ$ 时，结果互相吸引，导致接近。

材料科学与工程学院
School of Material Science & Engineering