$$\frac{2\alpha}{1-2\alpha-\alpha}=\beta;\qquad \alpha=\frac{\beta}{2+3\beta}$$

所以

$$x = 2\alpha + (1 - 2\alpha - \alpha) = 1 - \alpha = \frac{2 + 2\beta}{2 + 3\beta}$$

再考虑到每摩尔 Fe_xO 中的正常格点数,也即铁与氧实际所占总格点数 N 为

$$N = 1 + x = \frac{4 + 5\beta}{2 + 3\beta}$$
(2-52)

而铁空位所占格点数为

$$\langle V''_{\rm Fe} \rangle = \alpha = \frac{\beta}{2+3\beta}$$
 (2-53)

忽略热缺陷引起缺陷浓度并考虑空位格点为正常格点的极少部分,可以得出空位的浓度为

$$\frac{\langle V''_{\text{Fe}} \rangle}{N} = \frac{\beta}{2+3\beta} \cdot \frac{2+3\beta}{4+5\beta} = \frac{\beta}{4+5\beta}$$
(2-54)

第二节 位 错

晶体在结晶时受到杂质、温度变化或振动产生的应力作用,或由于晶体受到打击、切 削、研磨等机械应力的作用,使晶体内部质点排列变形,原子行列间相互滑移,而不再符合 理想晶格的有秩序的排列,由此形成的缺陷称位错。位错是原子的一种特殊组态,是一种具 有特殊结构的晶格缺陷,因为它在一个方向上尺寸较长,所以被称为线状缺陷。位错的假说 是在 30 年代为了解释金属的塑性变形而提出来的,50 年代得到证实。位错的存在对晶体的 生长、相变、扩散、形变、断裂以及其他许多物理化学性质都有重要影响,了解位错的结构 及性质,对研究和了解金属尤为重要,对了解陶瓷等多晶体中晶界的性质和烧结机理,也是 不可缺少的。

一、位错的结构类型

位错最重要、最基本的形态有刃型位错和螺型位错两种,也有介于它们之间的混合型位错,这些可归结为平移位错;另外还有旋转位错,旋转位错的弹性能很高,只能产生于非常特殊的情况。

(一) 刃型位错

位错相当于局部滑移区的边界,如晶体的某一区 域受到压缩作用后,造成质点滑移,滑移面和未滑移 面的交界处有一条交界线,在这条线上的原子配位就 和其他原子不同了。位错上部原子间距密,下部疏, 原子间距离出现疏密不均匀现象。图2-6表示一块单 晶体,其中 ABDC 为滑移面, ABFE 为已滑移区, ABFE 上边的晶体相对下边向左移动一个原子间距.



图 2-6 含有刃型位错的晶体

EFDC 为未滑移区, EF 是已滑移区和未滑移区的边界, 在现有情况下它与滑移方向垂直。

为了弄清 EF 线周围的原子排列状态,想 象地把晶体放大到能看见其中的原子,如图 2-7所示。图中右下侧表示滑移面上已经发生 滑移的部分,上下相对移动一个原子间距,而 左半晶体尚未滑移,结果在晶体内部出现了一 个多余的半原子面,多余半原子面与滑移面的 交线即滑移区边界 EF。显然沿着 EF 线原子 失掉了正常的相邻关系,因而是一种晶格缺 陷。由于它位于多余半原子面边缘,好像刀 刀,所以称为刃型位错。图 2-8 中画出了包 含位错线并与滑移面垂直的一组原子面,通过 它可以进一步看清与刃型位错相联系的多余半 原子面。习惯上把多余半原子面在滑移面上边 的刃型位错称为正刃型位错,反之称为负刃型 位错。



图 2-7 刃型位错的原子组态

刀型位错在晶体中引起畸变。在多余半原子面这一边,原子间距缩小,受到压缩变形; 在另一边原子间距增大,受到膨胀变形。位错两侧的晶面稍有倾斜,形成剪切变形。畸变在 位错中心处最大,随着距离的增大逐渐减小。一般把原子错排严重到失掉正常相邻关系的区 域称为位错核心,从微观看,这是一个细长的管形区域;而其他地方,除了弹性畸变外,原 子排列接近于完整晶体,仍然可视为晶体的好区。





图 2-8 与刃型位错相联系的多余半原子面

图 2-9 含有螺型位错的晶体

(二) 螺型位错

参看图 2-9 并仿照上面的讨论,晶体在滑移面的一部分 ABFE 上相对滑移一个原子间距,在另一部分 CDFE 上没有滑移。不同的是,这一次局部滑移区边界 EF 与滑移方向平

· 76 ·

行。

为了分析 EF 线附近的原子排列,取出滑 移面上下相邻的两个晶面,并且投影到与它们 平行的平面上,如图 2-10 所示。图中小圆圈 代表上层晶面的原子,小黑点代表下层晶面的 原子。不难看出 EF 线周围的原子也失掉了正 常的相邻关系,它们围绕着 EF 线连成了一个 螺旋线,而被 EF 线所贯穿的一组原来是平行 的晶面则变成了一个以EF 为轴的螺旋面(图 2-11)。鉴于原子排列的这种特点,此种晶格 缺陷被称为螺型位错。根据旋进方向,螺型位 错分为左旋的与右旋的,图 2-9 中的螺型位 错是右旋的。螺型位错只引起剪切畸变,而不 引起体积的膨胀和收缩。同样,随着距离的增 大,畸变逐渐减小。

从图 2-9 可以看到,在晶体表面上,与 螺型位错露头点 E 连接着一个台阶 EA,这是 螺型位错固有的特点。如果沿着 EA 向晶体表 面添加原子,台阶将绕 E 点转动,每转一周,



图 2-10 螺型位错的原子组态

晶体表面增加一层原子,但台阶本身永远不会被填平。从气相或溶液生长晶体,如果按照完整晶体的方式,即每长满一层晶面之后,要等到在它上面形成二维核心后方能继续生长新的 一层晶面(图 2-12)。根据理论上的分析,为了得到可观察的生长速度所需要的过饱和度 应该达到 50%;实际上,在仅有 1% 过饱和度的情况下晶体就能以显著的速度长大,这个现 象可以用螺型位错来解释。由于在螺型位错露头处有一个表面台阶,它能够起晶体生长前沿



图 2-11 被螺型位错所贯穿的一组晶面



图 2-12 完整晶体的生长

的作用,而且随着晶体长大,这个台阶永不消失,这就免除了每生长一层晶面之后重新产生 二维核心的必要性,因此,大大降低了晶体生长所需的过饱和度。在均匀介质中,台阶上各 点接受原子的机会相同,前进的线速度相同,然而角速度却是近位错端大于远位错端,于是 台阶最后变成如图 2-13 的蜷线形状,并称为生长蜷线。在很多天然和人工生长的晶体表面 都发现了生长蜷线,蜷线台阶的高度恰好等于晶面间距或其整数倍,说明它们的确是螺型位 错露头引起的。



图 2-13 螺型位错露头处生长蜷线的形成

(三) 混合型位错

前面讨论的两种位错都是直线形的,而且它们与 局部相对滑移方向的夹角,一个垂直,一个平行,这 都是特殊情况,现在考虑滑移面上曲线形状的位错。 设想图 2-14 所示晶体中滑移面 ABDC 上的 AEF 部分 发生了局部滑移,滑移区的边界 EF 是一曲线。采取 与螺型位错相同的方法分析 EF 线附近的原子排列, 即取出与滑移面相邻的两个原子面,并把它们投影到 平行的平面上,如图 2-15 所示。从图 2-15 可以看 出,在 E 处,由于曲线与滑移方向平行,原子排列与



图 2-14 含有混合型位错的晶体

图 2-10 相同,是纯螺型位错;在 F 处,由于曲线与滑移方向垂直,原子排列与图 2-7 相同,是纯刃型位错,不过现在是垂直于滑移面而不是沿着位错线观看。图中 F 端附近有三列小圆圈与两列小黑点相配合,中间一列小圆圈即相当于多余半原子面边缘。在 EF 上的其他各点,曲线与滑移方向既不平行也不垂直,原子排列介于螺型位错与刃型位错之间,所以称为混合型位错。

(四)柏格斯 (Burgers) 回路与位错的结构特征

取含有位错的实际晶体,从好区中任一原子出发,围绕位错作一闭合回路,回路的每一步都连接相邻的同类原子,并且始终保持在晶体的好区,这个回路称为柏格斯(Burgers)回路,如图 2-16(a)所示。然后在完整晶体中作一个对应的参考回路,即在相同的方向上走同样多的步数,结果这次回路不能闭合。为了使参考回路也闭合,要从它的终点到始点补加一个矢量 b,如图 2-16(b)所示。矢量 b 集中地反映了两个晶体的差别,体现了实际



图 2-15 混合位错的原子组态

晶体中所含位错的特征,被称为该位错的柏格斯矢量。

用同样的方法可以确定螺型位错的柏格斯矢量,如图 2-17 所示。

位错的柏格斯矢量通常用其沿晶体主轴的分量来表示,例如图 2-16 中刃型位错的矢量 可表示为 0, *a*, 0, 或者写为 *a* [010], 其中 *a* 为点阵常数。同理,图 2-17 中螺型位错的 矢量为 *a* [100]。将这两个位错的矢量相对比,可得到一个重要的结果,即刃型位错与其柏 格斯矢量互相垂直,而螺型位错与其柏格斯矢量互相平行。不难证明,混合型位错和它的柏 格斯矢量既不垂直也不平行。柏格斯矢量的大小称为位错的强度,图 2-16 与图 2-17 中两 个位错的强度都是 *a*。









对于一个特定的位错,其柏格斯矢量的方向是确定的,但是矢量的指向却取决于怎样选 择柏格斯回路的正方向。为了避免混乱,一般遵循回路的正向与位错线正向组成右手螺旋关 系的惯例。在作回路之前首先规定位错线的正向,一般取从纸背到纸面为位错正向。显然,

· 79 ·

如果位错线正向改变,其柏格斯矢量的指向也要随着改变。

可以直接看出,只要柏格斯回路保持在晶体的好区而不切割位错,那么无论其位置怎样移动,形状怎样变化,它所对应的柏格斯矢量是不变的,因为在此条件下回路中沿正 x、 y、z方向增加多少步,沿负 x、y、z方向也必然增加多少步。利用柏格斯回路的这一特性,只要令其沿着位错线运动或者随着位错一起运动,就可以推出下列三个重要结论。

(1) 一个位错, 沿其长度各处柏格斯矢量相同; 位错在晶体中运动或者改变方向, 其矢 量不变, 换句话说, 一个位错只具有唯一的柏格斯矢量。因此, 一个位错的形态可以在刃 型、螺型和混合型之间变化, 只要看位错线与柏格斯矢量交成什么样的角度。

(2) 位错线不能在晶体内部中断。因而它们只能 或者连接晶体表面,或者形成封闭位错环,或者连接 于其他位错。

(3) 当位错与其他位错相联,指向节点(即位错 线交点)的诸位错的柏格斯矢量之和,必然等于离开 节点的诸位错的柏格斯矢量之和。这可以利用图 2-18来证明。图中位错线 L_1 的正向指向节点,位错 线 L_2 和 L_3 的正向离开节点。分别绕 L_1 、 L_2 和 L_3 作三个柏格斯回路 C_1 、 C_2 、 C_3 ,确定它们的柏格斯 矢量为 b_1 、 b_2 和 b_3 。以虚线 AB、CD 连接三个回 路,构成一个大复合回路。可以这样来看这个复合回 路:从 A 开始,转 C_3 一周,经 AB,沿 C_2 由 B 至



图 2-18 位错的节点

D, 经 DC, 沿反向转 C_1 一周, 经 CD, 沿 C_2 由 D 到B, 经 BA 回到起点A。在此过程中, AB、CD 两段均往返各走一次, 自行抵消, 所以复合回路之柏格斯矢量应决定于三个小回路所对应之柏格斯矢量。其次, 因为 C_2 、C₃ 两回路是沿正向通过, 而 C_1 是逆正向通过, 所以复合回路之柏格斯矢量为 $b_2 + b_3 - b_1$ 。另一方面, 复合回路可以在不切割任何位错的 情况下,逐渐改变形状, 缩小乃至消失, 即其对应的柏格斯矢量应为零。两方面相结合,得 到

$$\boldsymbol{b}_2 + \boldsymbol{b}_3 - \boldsymbol{b}_1 = 0 \tag{2-55}$$

正是所要证明的。如果取所有位错线的正向都指向节点,即把 L_2 和 L_3 反向,结果 b_2 与 b_3 也改变符号,于是式 (2-55) 变成更简单的形式

$$\sum \boldsymbol{b}_i = 0 \tag{2-56}$$

上述三点构成了位错柏格斯矢量的守恒性。

总括起来可以说,柏格斯矢量的出现是由于位错的存在,一个位错只有唯一的柏格斯矢量,矢量的大小及方向完全决定于位错本身,而与回路之大小及形状无关,位错运动或其形态发生变化时,其矢量不变。可见,柏格斯矢量是位错的最根本的特征。

· 80 ·

柏格斯矢量的重要意义还在于它给了我们一种描述位错的抽象方法,通过柏格斯矢量有可能更完全、更简明地反映位错的性质。

(五) 位错密度

晶体中位错的量通常用位错密度表示,在单位体积晶体中所包含的位错线的总长度称为 位错密度 ρ,即

$$\rho = \frac{S}{V} \tag{2-57}$$

式中 V 是晶体的体积, S 为该晶体中位错线的总长度, ρ 的单位为 cm/cm³ 或 1/cm²。

在有些情况下,为了简便起见可以把位错线当作直线,而且是接近平行地从晶体试样的 一面延伸到另一面。这样,位错密度就等于穿过单位截面积的位错线数目,即

$$\rho = \frac{n \times l}{l \times A} = \frac{n}{A} \tag{2-58}$$

式中 *l* 为每根位错线的长度(假定是晶体的厚度), *n* 为在面积 A 中所见到的位错数目。显然,按此求得的位错密度将小于按式(2-57)求得的值,因为大多数位错线并不垂直于截面。

在充分退火的金属晶体内,位错密度一般为 $10^5 \sim 10^8$ /cm²;但经仔细控制其生长过程的 纯金属单晶,位错密度可低于 10^3 /cm²;而经过剧烈冷变形的金属,位错密度可增至 $10^{10} \sim 10^{12}$ /cm²。

二、位错的应力场

定量地分析位错在晶体中引起的畸变的分布及其能量,这是研究位错与位错,位错与其 他晶体缺陷之间的相互作用进而说明晶体的力学性能所不可缺少的。讨论位错时,一般把晶 体分作两个区域:在位错中心附近,因为畸变严重,必须直接考虑晶体结构和原子间的相互 作用;在远离位错中心的更广大的地区,由于畸变较小,可以简化成为连续弹性介质,用线 弹性理论进行处理,把相当于位错的畸变以弹性应力场和应变能的形式表达出来。事实上, 弹性力学早在晶体位错被提出之前就已经研究过弹性体中这种类型的畸变,现在只要把结果 借用过来就可以了。晶体的弹性是有方向性的,但是因为在各向异性条件下推导应力场公式 复杂得多,并且对许多计算结果影响不大,所以通常都采用形式比较简单的各向同性 近似。

(一) 位错的应力场

1. 应力分量

物体中任意一点的应力状态均可用九个应力分量描述。图 2-19 分别用直角坐标和圆柱 坐标说明这九个应力分量的表达方式,其中 $\sigma_{xx} 、 \sigma_{yy} 、 \sigma_{zz} (\sigma_{rr} 、 \sigma_{\theta} 、 \sigma_{zz}) 为正应力分量,$ $<math>\tau_{xy} 、 \tau_{yx} 、 \tau_{zx} 、 \tau_{yx} 、 \tau_{zy} 、 \tau_{zz} (\tau_{r\theta} 、 \tau_{\theta} \times \tau_{\theta} \times \tau_{z\theta} \times \tau_{zz} , \tau_{rz}) 为切应力分量。下角标中第一$ 个符号表示应力作用面的外法线方向,第二个符号表示应力的指向。

在平衡条件下, $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ 、 $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ 、 $\tau_{zx} = \tau_{xz}$ ($\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r}$ 、 $\tau_{\theta z} = \tau_{z\theta}$ 、 $\tau_{zr} = \tau_{rz}$), 实际只用 • 81 • 六个应力分量就可以充分表达一个点的应力状态。与这六个应力分量相应的应变分量是 ϵ_{xx} 、 ϵ_{yy} 、 ϵ_{zz} (ϵ_{rr} 、 ϵ_{θ} 、 ϵ_{zz}) 和 γ_{xy} 、 γ_{yz} 、 γ_{zz} ($\gamma_{r\theta}$ 、 γ_{tx} 、 γ_{zz})。



图 2-19 物体中一点(图中放大为六面体)的应力分量 (a) 直角坐标;(b) 圆柱坐标

2. 刃型位错

设想有一内半径为 r_c, 外半径为 R 的无限长的 空心弹性圆柱, 圆柱轴与 z 轴重合。将它沿径向切 开至中心, 将切面两侧沿 x 轴相对移动一个距离 b, 然后再粘合起来如图 2 - 20 所示。显然, 经过这样 处理, 弹性圆柱的畸变状态与含有一个正刃型位错 的晶体相似, 其位错线沿 z 轴, 而柏格斯矢量沿 x 轴。可通过它求出刃型位错的应力场。在这里, 圆 柱中心被挖空是因为这里应变太大, 已经超出线弹 性力学所能处理的范围之故。

以u、v、w 表示沿x、y、z 轴的位移分量, 由于w=0, $\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial v}{\partial z} = 0$,所以这是一个平面应变 问题。需要解的应力分量只有 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 $\sigma_{zz} =$



图 2-20 刃型位错的连续介质模型

 $u (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \cdot \mathcal{D}\sigma_{xy} = \sigma_{yx}, 其他应力分量为零。如果采用圆柱坐标,要解的应力分量为 <math>\sigma_{rr}$ 、 σ_{θ} 、 $\sigma_{zx} = \nu (\sigma_{rr} + \sigma_{\theta})$ 及 $\sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta}$ 。应力符号的第一个下标表示应力作用面的外法线,第二 个下标表示应力的指向; ν 为泊松比。

· 82 ·

经过具体推导,得到上述刃型位错应力场的解,在直角坐标中为

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

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

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

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

$$(2-59)$$

在圆柱坐标中为

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

$$\sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta r} = D \frac{\cos \theta}{r}$$

$$\sigma_{zz} = \nu (\sigma_{rr} + \sigma_{\theta})$$

$$(2-60)$$

式中 $D = \mu b/2\pi (1 - \nu), \mu$ 为切变模量。

需要说明,式(2-59)和式(2-60)给出的应力分量是一种简化形式,它们不满足圆 性体内外表面应力为零的边界条件。但考虑在离位错中心和晶体表面较远的区域,公式是适 用的。

3. 螺型位错

依照处理刃型位错的方法,将图 2-21 中的弹 查圆柱切开至中心,然后将切面两侧沿 z 轴相对移 动 b,再粘合起来,就得到沿 z 轴的螺型位错的连 卖弹性介质模型。

这里的位移条件为 u = v = 0, $\frac{\partial w}{\partial z} = 0$ 。解出的 室力分量在直角坐标中为

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}$$

$$(2-61)$$

在圆柱坐标中为

$$\sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{1}{r} \qquad (2-62)$$



图 2-21 螺型位错的连续介质模型

其他应力分量均为零。

螺型位错应力场的特点是只有切应力分量,没有正应力分量;应力分量与θ无关,是 轴对称的;应力的大小也与r成反比。这些性质与螺型位错的结构特点也是符合的。 由于 $\sigma_{rr} = \sigma_{re} = \sigma_{rz} = 0$, 内外柱面上应力为零的边界条件得到满足, 但是 σ_{st} 在圆柱端面 上要产生一个力矩, 平衡这个力矩的附加应力 σ'_{st} 由附加形变产生; 但在离表面较远的地 方, 与 σ_{st} 相比, 它也小得可以忽略不计。根据计算, 当晶体外半径很小时, 端面应力 σ_{st} 引 起的附加扭转变形高达每厘米数十度, 并且已在沿轴线含有一个螺型位错的晶须上得到证 实。但是大块晶体中的螺型位错所引起的附加扭转变形是很有限的。

(二) 位错的应变能与线张力

位错在晶体中引起畸变,因而具有能量。与处理位错畸变相对应,位错的能量也可以分 作两部分,一是位错核心的能量,一是核心以外的能量,后者一般称为应变能。下面首先计 算位错的应变能。

由弹性力学可知,应变能密度 = $\frac{1}{2}$ 应力×应变。所以若已知弹性体中应力或应变的分布, 就可以用在整个体积上对应变能密度积分来求总应变能: $\frac{1}{2}\int_{v}$ (应力×应变) dV。但是计 算位错的应变能还可以通过比较简便的方法,这就是利用在连续介质模型中制造一个位错时 所作的功,位错形成后,此功就转变为位错的应变能。

以刃型位错为例,圆柱体(图 2-20)沿 xoz 面剖至中心后,在两剖面上加切应力 σ'_{sx} , 使它们沿 x 轴方向相对移动。 σ'_{sx} 的起始值为零,然后逐渐增大,这是因为它必须克服弹性 体中随变形而增长起来的内应力。最后,当两剖面相对位移达到 b (即刃型位错的强度) 时, σ'_{sx} 恰好增大到等于刃型位错的应力分量 σ_{sx} 。其次,考虑到 σ_{sx} 在剖面上不是常数,而 是 x 的函数,所以先在距位错线 x 处取一面积元,令其沿 z 轴的长度为 1,沿 x 轴的长度 为 dx,在这个面积元上 σ_{sx} 可以看作常数。于是,变形过程中外力在此面积元上所作的功应 为 $\frac{1}{2}b\sigma_{sx}dx$ 。系数 $\frac{1}{2}$ 是因为应力 σ'_{sx} 开始为零,最后才达到 σ_{sx} 之故。将此式在 r_{c} 到 R 的范 围内对 x 积分,便得到单位长度圆柱体剖面上的总功,亦即单位长度刃型位错的位错线应变 能 E_{c} 为

$$E_{\rm e} = \frac{1}{2} \int_{r_{\rm e}}^{R} b\sigma_{\rm yx} \,\mathrm{d}x \qquad (2-63)$$

把刃型位错应力分量 σ_{yx} 代人式 (2-63),并且注意到当 y=0 时,有 $\sigma_{yx} = \frac{\mu b}{2\pi (1-\nu)x}$,于 是式 (2-63) 变为

$$E_{\rm e} = \frac{\mu b^2}{4\pi (1-\nu)} \ln\left(\frac{R}{r_{\rm c}}\right) \tag{2-64}$$

同样可以求出单位长度螺型位错的应变能 E_s为

$$E_{s} = \frac{1}{2} \int_{r_{c}}^{R} b\sigma_{\theta z} dr = \frac{\mu b^{2}}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_{c}}\right) \qquad (2-65)$$

· 84 ·

分析混合型位错时,常常把它看作是在同一位置重叠起来的一个刃型位错与一个螺型位 错之和,或者说,混合型位错可以想象地分解为一个刃型位错分量和一个螺型位错分量,如 图2-22所示。当然它们的柏格斯矢量必须满足守恒关系,即

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_{\mathrm{e}} + \boldsymbol{b}_{\mathrm{s}} \tag{2-66}$$

其中 b_e 与 b_s 分别为刃型分量与螺型分量之柏格斯矢量。

由于 b_e 与 b_s 互相垂直,所以

$$\begin{array}{c} b_{\rm s} = b\cos\theta \\ b_{\rm e} = b\sin\theta \end{array}$$
 (2-67)

θ为混合型位错与其柏格斯矢量的夹角。





图 2-22 混合型位错的分解示意图



计算直线混合型位错的应变能,就是采取把它分解成分量的办法。由于互相平行的刃型 位错和螺型位错之间没有相同的应力分量,它们之间没有相互作用能,所以分别算出两个位 错分量的应变能再叠加起来,就得到混合位错的应变能

 $\frac{\mu(b\sin\theta)^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\left(\frac{R}{r_c}\right) + \frac{\mu(b\cos\theta)^2}{4\pi}\ln\left(\frac{R}{r_c}\right) = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\left(\frac{R}{r_c}\right)(1-\nu\cos^2\theta) \quad (2-68)$ 式 (2-64)、式 (2-65)、式 (2-68) 指出位错的应变能与 b^2 成正比。由于 ν 约为 0.3, 所以刃型位错的应变能比螺型位错约大 50%。

估计实际晶体中位错应变能的数值,首先要确定 R 和 $r_{\rm e}$ 。对于一般的金属晶体,位错 应力场的范围应该受到亚晶界的限制,因而可以取 R 大约为 10⁻⁴ cm,即一般亚晶的尺寸。 至于 $r_{\rm e}$,根据点阵模型的估计,数量级为 10⁻⁸ cm。因此,按照式 (2-68),单位长度位错 的应变能约为 μb^2 。对于铜晶体, $\mu = 4 \times 10^{11}$ dyn/cm², $b = 2.5 \times 10^{-8}$ cm,于是得到位错的 应变能约为 2.5×10⁻⁴ erg/cm 或者 4 eV/原子间距。

位错的全部能量还要包括 r。以内的核心能,经点阵模型估计,位错核心能量约等于其 应变能的 1/10。与铜晶体中一个空位的形成能约 1 eV 比较,可见位错的能量是很大的。

位错的应变能、核心能都使自由能增加。虽然位错也增大晶体的熵,从而使自由能降低,但是对比起来,熵的增加小到可以忽略不计的程度,所以位错的自由能基本上决定于其

· 85 ·

应变能,直到晶体熔点仍具有正值。因此,它是热力学不稳定的晶格缺陷。

因为位错能量与其长度成正比,所以它有尽量缩短其长度的趋势。与液体的表面张力相 似,这种趋势可以用位错的线张力 T 来描述。位错线张力的定义为位错线长度增加一个单 位时,晶体能量的增加。因此,根据前面的讨论,对于直线形的位错,T 应该大约等于 μb^2 ;如果位错线是弯曲的,如图 2-23,在A 处是正刃型位错,B 处是负刃型位错,它们 的应力场符号相反,在远处会部分抵消,这时当位错长度发生单位变化时,系统能量的变化 将小于 μb^2 。所以,在作粗略估计的时候,常取位错的线张力 T 为

$$T = \frac{1}{2}\mu b^2 \qquad (2-69)$$

(三) 位错核心

连续介质模型避开了位错核心,因为那里原子错排严重,不能再简化为连续弹性体。解 决位错核心问题需要借助于点阵模型,直接考虑晶体结构和原子间相互作用力。一种引用较 广的点阵模型是所谓的派-纳(Peierls-Nabarro)模型。派-纳模型假设晶体由被滑移面隔 开的两个半块晶体组成。在两半晶体的衔接处直接考虑原子间的相互作用,但是两个半晶体 内部仍然简化成为连续弹性介质,因此,实际上它还不是完全的点阵模型。

设想两半晶体在接合之前先沿滑移面相对错开半个原子 间距(即 *b*/2),然后沿侧方向适当压缩上半块晶体,拉伸下 半块晶体,使它们靠 *A*、*B*两个面上原子间的相互作用合并 到一起的时候形成一个如图 2-24 所示的刃型位错。滑移面 两侧原子在 *x* 轴方向上的最终位置决定于两种因素之间的平 衡,一方面是 *A* 面与 *B* 面上的原子由于原子之间的相互作用 力图上下对齐,另一方面是简化成连续弹性介质的两半块晶 体对变形的反抗。



由于存在位错,滑移面上下的原子不能对齐,它们在水 平方向上的偏离称为错排。从图 2 - 24 可见,在位错中心错 图 2 - 24 刃型位错的派 – 纳模型 排值最大,为 *b*/2。随着与位错中心距离的增大,错排值逐

渐减小。如果晶体无限大,那么在无限远处错排值将下降为零。错排值沿滑移面的分布可以 示意地表示如图 2-25。其中纵坐标 $|\phi|$ 为错排的绝对值,横坐标 x为距离。为了对错排随 距离的增大而下降的速度有一个定量的估计, 把 $|\phi| \ge b/4$ 的区域定义为位错宽度 w。位错 宽度标志着位错畸变集中的程度。可以认为,在派 - 纳模型中位错核心是通过位错宽度的形 式表现出来的。根据具体计算,位错宽度的大小约为几个原子间距。对于一种给定的晶体, 由于密排面的间隔大,相邻晶面上原子对齐的作用力较弱,所以密排面上的位错具有较大的 宽度。如果晶体的结合键具有明显的方向性,原子间对齐的作用力强,位错宽度会因之缩 小,共价键晶体就是这样。

在派 - 纳模型中位错的能量也由两部分组成: 一是贮存于上下两半晶体中的弹性应变 · 86 ·



图 2-25 错排值沿滑移面的分布

能;另一是滑移面两侧原子间的相互作用能或者称为错排能,因为它是滑移面两岸原子没有 对齐引起的。前者主要分布于位错核心之外,后者基本上集中于位错核心范围之内。所以错 排能即相当于位错核心能,据估计,它大约为位错弹性应变能的 1/10。

三、位错的运动

位错最重要的性质之一是它可以在晶体中运动。刃型位错的运动可有两种方式,一种是 位错线沿着滑移面的移动,称为位错的滑移;另一种是位错线垂直于滑移面的移动,称为位 错的攀移。对螺型位错来说,它只作滑移而不存在攀移。

(一) 位错的滑移

1. 刃型位错

图 2-26(a) 表示含有一个正刃型位错的晶体点阵。图中实线表示位错(半原子面 PQ)原来的位置,虚线表示位错移动一个原子间距(如 P'Q')后的位置。可见,位错虽然 移动了一个原子间距,但位错附近的原子却只有很小的移动。故这样的位错运动只需加一个





âl i a

(a)

图 2-26 刃型位错的滑移 (a) 正刃型位错;(b) 负刃型位错 很小的切应力就可以实现。图 2-26(b)表明,对于晶体中的负刃型位错,在同样的切应 力(方向不变)作用下,负位错的移动方向与正位错相反(在图中为向右移动)。但应注意, 这两者的移动方向虽然相反,当它们分别从晶体的一端移到晶体的另一端时,所造成的晶体 滑移是完全相同的。

当一个刃型位错沿滑移面滑过整个晶体,就会在晶体表面产生宽度为一个柏格斯矢量 b 的台阶,即造成了晶体的塑性变形,如图 2-27 所示。图 2-27 (a)为原始状态的晶体及所 加切应力方向; (b)、(c)图为正刃型位错滑移的中间阶段,可以看到位错线 AB 逐渐向后 移动; (d)图为位错移到晶体边缘后形成的台阶。应当注意,在滑移时,刃型位错的移动方 向一定是与位错线相垂直,即与其柏格斯矢量相一致。因此,刃型位错的滑移面应是由位错 线与其柏格斯矢量所构成的平面。



图 2-27 刃型位错的滑移过程

(a) 原始状态的晶体; (b)、(c) 位错滑移中间阶段; (d) 位错移出晶体表面形成一个台阶

图 2-27 还表明,位错线沿着滑移面移动时,它所扫过的区域 ABCD 是已滑移区,而 位错线未扫过的区域为未滑移区。故随着位错的移动,已滑移区逐渐扩大,未滑移区逐渐缩 小,此两个区域由位错线划分开来。因此,也可以把位错定义为:晶体中已滑移区和未滑移 区的分界。

2. 螺型位错

螺型位错沿滑移面的移动情况如图 2-28,设图面平行于滑移面,图中小圆圈表示滑移 面以下的原子,小黑点表示滑移面以上的原子。由图可见,螺型位错使晶体右半部沿滑移面 上下相对地移动了一个原子间距。这种位移随着螺型位错向左移动而逐渐扩展到晶体左部分 的原子列。位错线向左移动一个原子间距(从图中第6原子列移到第7列),则晶体因滑移 而产生的台阶亦扩大了一个原子间距。和刃型位错一样,由于原子的移动量很小,所以使螺 型位错移动所需的力也是很小的。

晶体因螺型位错移动而产生的滑移过程如图 2 - 29。显然,此过程与刃型位错的情况不同,在切应力作用下,螺型位错的移动方向是与其柏格斯矢量相垂直,即与切应力及晶体滑移的方向相垂直。但当螺型位错移过整个晶体后,在晶体表面形成的滑移台阶宽度也等于柏格斯矢量 b,图 2 - 29 (d)。故其滑移的结果与刃型位错是完全一样的。对于螺型位错,由

· 88 ·

于位错线与柏格斯矢量平行,所以它不像刃型位错那样具有确定的滑移面,而可在通过位错线的任何原子平面上滑移。



图 2-28 螺型位错的移动 (a) 原始位置; (b) 位错向左移动了一个原子间距



图 2-29 螺型位错的滑移过程

(a) 原始状态晶体; (b)、(c) 滑移的中间阶段; (d) 位错移出晶体表面形成一个台阶

3. 混合型位错

设位错在晶体中形成圆环形,位于滑移面上,如图 2-30 (a)所示。此位错的柏格斯 矢量为 b,则位错线上除了 A、B、C、D 四点之外,其余部分皆属混合型位错。其中 A、 B 两处与柏格斯矢量垂直是刃型位错;C、D 两处与柏格斯矢量平行故是螺型位错。若沿其 柏格斯矢量方向对晶体加上外切应力 τ ,则位错线将发生移动,在此图中已表示出位错线的 移动方向是按法线方向向外扩展,如箭头所示;这样,当位错移动到达晶体边缘以后,就造 成晶体上半部相对于下半部滑移了一个柏格斯矢量 b,如图 2-30 (b)所示。上述情况可从 位错环的顶视图 (图 2-31)来解释:按位错线的方向与柏格斯矢量的关系可知,由于 A 处 的位错线方向与 B 处相反,如果 A 为正刃型位错,则 B 必为负刃型位错;同样, C 处与 D

· 89 ·



图 2-30 位错环的滑移 (a) 位错环; (b) 位错环运动后产生的滑移

处的方向亦相反,故 C 为左旋螺型位错,D 为右旋螺型位 错。如前所述,在同样的切应力作用下,负刃型位错线的运 动方向与正刃型位错线运动方向相反,则刃型位错 A 向后移 动的话,刃型位错 B 就应向前移动。同样,右旋螺型位错 C 向左移动的话,左旋螺型位错 D 就向右移动。这样,各位错 线分别向外扩展,一直到达晶体边缘。虽然各位错线的移动 方向不同,但它们所造成的晶体滑移却是由其柏格斯矢量 b 所决定的,故位错环扩展的结果使晶体沿滑移面产生了一个 b 的滑移。



图 2-31 位错环顶视图

4. 位错滑移的驱动力

晶体受到外力作用时,其中的位错要运动或趋于运动,通过位错的运动产生塑性形变。 位错是一种原子组态,并非物质实体,实际上力是作用于晶体中的原子,但是为了研究问题 方便,设想位错受到了一种力,在它的作用下,位错发生运动,所以把它称为位错运动的驱 动力。

根据前面的分析,滑移面上滑移区域的扩大要求位错作滑移运动。可是,为此需要有适 当的能够推动滑移面两侧的晶体沿着滑移方向相对移动的外加应力作用于晶体,如果没有这 样的外力,晶体将不发生滑移,位错也不会运动。更具体的来看,即使晶体受到某种外加力 的作用,但是倘若在外加应力中没有沿滑移面的切应力,或者有作用于滑移面的切应力但是 沿某特定的滑移方向没有切应力分量,那么沿此方向仍将没有滑移,同时,柏格斯矢量与此 方向平行的所有位错将不运动。因此,仅当有切应力作用在一个位错的滑移面上,并且平行 于它的柏格斯矢量方向的时候,这个位错才会运动或者趋于运动。应用位错受力的概念,只 有这时位错才受到滑移驱动力的作用。从效果来看,构成此驱动力的原因不必一定是外力, 晶体内部质点、界面或其他位错引起的应力如果满足同样的条件也能导致位错运动,也就是 说,决定位错是否运动的是位错所处的应力场的性质,与此应力场是从何而来没有关系。

为了定量地处理位错受力的概念,令 r 代表符合上述条件的切应力,令 F,代表作用在

· 90 ·

单位长度位错线上位于滑移面上并且与位错线垂直的力,即 位错所受的滑移力。这里不考虑沿位错线切向的力,因为位 错线上的任何一点总是在垂直于位错线的方向上运动,所以 切向力是没有意义的。其次,设想有柏格斯矢量为 b 的一小 段位错 dl 在应力场 τ 的作用下在滑移面上移动距离 ds,亦 即它扫过了一个面积 dlds (图 2-32)。根据位错滑移与晶体 变形的分析,这时 dlds 面积两侧的晶体沿着位错柏格斯矢量 的方向相对移动 b,于是可以算出切应力 τ 在这个过程中所 作的功为rdldsb。另一方面,在假定位错受滑移驱动力作用 的情况下, F, 所作的功为F, dlds。这两个功实质上描述的是 同一过程,因此它们相等,即



图 2-32 计算位错所受 滑移力示意图

从而有

$$F_t dl ds = \tau dl ds t$$

(2 - 70)

 $F_{\cdot} = \tau b$

(2 - 71)

式(2-70)、式(2-71)说明位错滑移驱动力 F, 决定于单位长度位错线滑移单位距离时所 作的功,它的大小等于作用在滑移面上而且沿柏格斯矢量的切应力分量与位错强度的乘积。

当晶体受到符合条件的切应力作用时,显然位错将沿如下的方向运动,即在因此而发生 的变形中,切应力 τ 作正功。因而 F,指向的确定应该使得当位错沿 F,的方向运动时, τ 作 正功。

位错滑移力 F, 的作用是引起滑移, 克服障碍和产生速度。事实上, 并不是任何大小的 切应力都能使晶体开始塑性形变,当有一定大小的滑移驱动力作用到位错上时,它是否能动 还要看存在着什么样的阻力。晶体中的各种缺陷对位错运动均能构成阻碍。然而,即使在除 掉所讨论的将要运动的位错之外没有任何其他晶格缺陷的情况下,此位错也不可避免地需要 克服滑移面两侧原子之间的相互作用力,这是由晶体结合力本身所造成的一项最基本的阻 力。前面已经谈到,由于位错附近原子排列破坏了正常的规则性,因而具有核心能,在 派一纳模型中表现为错排能。现在,当位错沿滑移面运动时,其核心的原子组态要发生周期 性的变化,因而位错核心的能量,即错排能,也要周期性地变化,如图 2-33 所示。在没有 外力时,位错两侧原子的排列呈对称状态,如图 2-26 (a)中的状态 "Q",这时位错的错 排能最小,即处在图 2-33 的能谷中。当位错从位置"Q"移动到位置"Q",即相邻的一 个等同位置时,两侧原子排列要经过不对称状态,在图 2-33 中则相当于要越过一个能峰, 这意味着位错运动要遇到一种阻力。此阻力来

源于晶格结构的周期性,所以称为点阵阻力。

应用派-纳模型,曾经定量地计算了为克 服点阵阻力推动位错前进所必须的滑移力和相 图 2-33 位错滑移时核心能量的变化



应的切应力,后者就是一般所说的派-纳应力。

$$\tau_{\rm p} = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp(-2\pi w/b)$$
 (2-72)

其中 w 为位错宽度, b 为位错强度。式(2-72)反映了很重要的规律。首先,位错强度越 小,派-纳力越小,所以柏格斯矢量小的位错容易滑移。其次,位错宽度越大,派-纳力越 小。这可以说明为什么位错容易沿密排面滑移,同时也回答了为什么金属具有良好的塑性而 共价晶体和离子晶体有些却呈脆性。因为根据前面的讨论,正是在密排面上位错宽度较大; 至于离子晶体和共价晶体的脆性则是由于它们具有方向性强得多的结合键,故位错宽度小, 点阵阻力大,以致位错滑移困难。

晶体中的各种缺陷,如点缺陷、其他位错、晶粒间界、第二相质点等等都能妨碍位错滑 移,特别在金属材料中,利用这些因素合理地为位错设置障碍物,是实现材料强化的基本手 段。

(二) 位错攀移

刃型位错除了可以在滑移面上滑移外,还可垂直于滑移面发生攀移(半原子面向上或向 下移动)。图 2-34 表示刃型位错的攀移,图 2-34 (b)为原先的位错位置;如果半原子面 向上移动称为正攀移,图 2-34 (a)表示向上移动了一个原子间距;相反,半原子面向下 移动称为负攀移,图 2-34 (c)为向下移动了一个原子间距。显然,位错发生正攀移时需 失去其最下面的一排原子,这可通过空位扩散到半原子层下端或者半原子层下端的原子扩散 到别处来实现。反之,当原子扩散到半原子层下端或者空位扩散到别处去时就可产生负攀 移。与滑移不同,位错攀移时伴随着物质的迁移,需要扩散才能实现。因此,位错攀移时需 要热激活,也就是比滑移需要更大的能量。通常称攀移为"非守恒运动",而滑移则称为 "守恒运动"。位错攀移的这种机制不可避免地要在位错线或多余半原子面边缘产生曲折,如 图 2-35 所示,它们称为位错的割阶。割阶是原子附着或脱离多余半原子面可能性最大的地 方。例如,图中 B 处的原子与多余半原子面的联结较其他原子为弱,所以容易离开;而在

结构的现在分	0000000	0000000	0000000	
的复数金属素	00000/0	000000	0000/00	
	0000000-	0000000	0000000	
	0000000	0000,000滑移面	0000000	
P →	000000 - p	000 <u>0</u> 000/	0000000	
	000000	000000	00000.0	
A Star I Marked A	0000,00 -	000000	000000	
	00000	000000	000000	
	000000	000000	000000	
	(9)	m in the second second	(c)	

图 2-34 刃型位错的攀移 (a) 正攀移; (b) 未攀移时的位错; (c) 负攀移 A 处,外来原子则比较容易留住,因为这里可以在两个 方向与多余半原子面键合。此外,作用于攀移面的正应 力有助于位错的攀移过程 [从图 2 - 34 (a)可见,压应 力能促进正攀移];而晶体中的过饱和空位也有利于攀 移的进行。因此经淬火或冷加工后的金属在加热时,位 错的攀移起重要的作用。

由于位错的攀移需通过扩散来实现,低温时攀移是 比较困难的,而在较高温度下攀移就较易实现。在一定 温度下,晶体中的点缺陷有一定的平衡浓度,单位时间 内,跳到位错线上的原子数与离开位错线的原子数相



图 2-35 位错割阶

等,因而位错实际上并不攀移。假如晶体中有了过剩的点缺陷,譬如空位,这时单位时间内 跳到位错上的空位数就要超过离开位错的空位数,从而产生位错攀移的驱动力,这种力称为 化学力。假设在某一温度下,晶体中空位的平衡浓度为 C₀,而实际浓度为 C,则空位的化 学势,即与一个空位消失于位错相关的自由能变化为

$$\mu_{\rm v} = \frac{\partial F}{\partial n} = kT \ln \frac{C}{C_0} \tag{2-73}$$

单位长度位错攀移单位距离时牵涉到的空位数为 1/b²,相应的自由能变化就被定义为单位 长度位错线所受的化学攀移力,即

$$F_{s} = \frac{1}{b^{2}} k T \ln \frac{C}{C_{0}}$$
 (2-74)

另一方面,正刃型位错向上攀移,多余半原子面缩小, 引起局部体积收缩;反之,向下攀移引起局部体积膨 胀。在这个过程中,如果有垂直于多余半原子面的弹 性应力分量,它就要作功。假设垂直于多余半原子面 的应力分量为 σ (图 2 - 36),当单位长度位错线移动 dy时, σ 所作的功为 - $b\sigma$ dy。与前面的位错滑移驱动 力一样,可以定义单位长度位错线所受的弹性攀移驱 动力为

$$F_{\rm c} = -\frac{b\sigma \,\mathrm{d}y}{\mathrm{d}y} = -\sigma b \qquad (2-75)$$



其中 b 为位错强度, σ 为与柏格斯矢量方向平行的正 图 2-36 位错所受的弹性攀移力 应力分量。负号表示如果 σ 为拉应力,则 F_c 指向下;如果 σ 为压应力,则 F_c 指向上。

假若晶体中同时存在满足上述条件的应力和过饱和点缺陷,位错所受的攀移驱动力就是 F_s和 F_c二者之和。

位错攀移速度受到割阶浓度、割阶移动速度以及空位扩散速度的制约。

· 93 ·

四、位错与缺陷的相互作用

晶体中若同时含有多种缺陷,它们之间要发生相互作用,甚至相互转化。

(一) 位错之间的相互作用

1. 位错间的弹性相互作用

晶体中位错的弹性应力场之间要发生干涉和相互作用,并将影响到位错的分布和运动。

如图 2-37,为一对平行于 z轴的同号螺型位错。分别在坐标原点和 (r, θ) 处,它们的柏格斯矢量分别为 b_1 和 b_2 。位错 b_1 在 (r, θ) 处的应力场为

$$\sigma_{\theta z} = \frac{\mu b_1}{2\pi r} \tag{2-76}$$

对于位错 b_2 ,此应力分量作用在它的滑移面上并且平行于它的柏格斯矢量,即满足产生滑移力的条件,按照关于滑移力的计算,位错 b_2 受力为

$$F_{\rm r} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi r} \tag{2-77}$$

加于位错 b₂ 的这个力,要求它沿着两位错连线方向向外运动,力的大小随两位错间距的增大而降低。同理可证,位错 b₁ 也要受到位错 b₂ 加给它的力,大小相等,方向相反。如果两个位错一为左旋,一为右旋,它们之间的作用力仍可用式(2-77)表达,但要改变符号。 所以,两个平行的螺型位错之间的相互作用是中心力,同号相斥,异号相吸,大小与位错间 距成反比,和两条带电导线的相互作用相似。



图 2-37 平行螺型位错的相互作用 图 2-38 平行滑移面上两刃型位错的相互作用

如图 2-38,为平行滑移面上的两个沿着 z 轴的同号平行刃型位错。它们的柏格斯矢量 分别为 b_1 及 b_2 。位错 b_2 所在之处有位错 b_1 的应力场 [式 (2-59)],根据式 (2-71)和 式 (2-75),应力分量 σ_{yx} 使位错 b_2 受到滑移力,应力分量 σ_{xx} 使位错 b_2 受到攀移力,它们 分别为

$$F_x = \sigma_{yx}b_2 = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi (1-\nu)} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$
(2-78)

· 94 ·

$$F_{y} = -\sigma_{xx}b_{2} = \frac{\mu b_{1}b_{2}}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^{2}+y^{2})}{(x^{2}+y^{2})^{2}}$$
(2-79)

对得到的结果进行分析可知, F_y 与 y 同号。即当位错 b_2 在位错 b_1 滑移面上边时, 受到的 攀移力 F_y 指向上; 当它位于滑移面下边时, 受到的攀移力指向下, 所以沿 y 轴方向两位错 是互相排斥的。滑移力 F_x 的变化比较复杂, 当 $x^2 > y^2$, F_x 指向外, 所以两位错沿 x 轴方 向互相排斥; 当 $x^2 < y^2$, F_x 指向内, 所以两位错沿 x 轴方向互相吸引, 如图 2-39 所示。 在 x = 0 及 $x = \pm y$ 处, F_x 虽然都等于零, 但是这两种位置不同。x = 0 为稳定平衡位置, 因为当位错 b_2 稍许偏离这个位置, 它所受的力是使它返回原处; $x = \pm y$ 是不稳定平衡位 置,因为当位错 b_2 稍许偏离这个位置时,它所受的力是使它继续离开得更远。所以, 第二 个位错取 x = 0 的位置,或者说具有相同符号的刃型位错沿着与它们柏格斯矢量相垂直的方 向排列起来是稳定的。

后面将要看到,这样排列起来的位错构成 了一种晶粒间界。假若两个刃型位错的符号相 反,它们之间作用力的方向也要改变,于是 *x*=0变成不稳定平衡位置,*x*=±*y*成为稳定 平衡位置。符号相反的两个位错依靠弹性相互 作用在 45°方向上彼此束缚在一起,构成通常 所谓的位错偶极子。

当两个互相平行的位错,一个是纯螺型 的,另一个是纯刃型的,由于螺型位错的应力 场既没有可以使刃型位错受力的应力分量,刃 型位错的应力场也没有可以使螺型位错受力的 应力分量,所以这两个位错之间便没有相互作用。



图 2-39 两刃型位错在 x 轴方向的相互作用

对于具有任意柏格斯矢量的两个平行的直线位错,可以把每个位错都分解为刃型分量和 螺型分量,然后依次计算两个螺型分量和两个刃型分量之间的相互作用,并且叠加起来,就 得到两个任意位错之间的相互作用。所得结果可以近似地归纳为:若柏格斯矢量夹角<π/2,则两位错互相排斥;若柏格斯矢量夹角>π/2,则两位错互相吸引。

2. 位错塞积

晶体塑性形变时往住发生这样的情况,即在一个滑移面上有许多位错被迫堆积在某种障碍物前(如图2-40),形成位错群的塞积。这些位错由于来自同一位错源,所以具有相同的柏格斯矢量。晶粒间界是很容易想到的障碍物,有时障碍物可以由塑性形变过程中位错的相互作用产生。

从理论上分析位错塞积群的平衡分布,发现塞积群在垂直于位错线方向的长度,对于刃型位错为 $N\mu b/\pi\tau(1-\nu)$,对于螺型位错为 $N\mu b/\pi\tau$,其中N为塞积群中的位错总数, τ 为外

加切应力(实际上应为减掉晶格阻力之后的有效切应力)。可见塞积群的长度正比于 N,反比于 τ 。

位错塞积群的一个重要效应是在它的前端 引起应力集中。为了说明这个问题,需要考察 一下塞积群中诸位错所受的作用力。首先,每 个位错都要受到由外加切应力所产生的滑移力 *F_x = tb* 的作用,这个力把位错推向障碍物,



使它们在障碍物前尽量靠紧。其次,是位错之间的相互排斥力,这里,每个位错都要受到所 有其他位错的排斥,而每一对位错之间的排斥力都可以用式 (2-78) 求得,排斥力的作用 要求位错群沿着滑移面尽量散开。再次,是障碍物的阻力,这个力一般是短程的,仅作用在 塞积群前端的位错上。图 2-40 是位错群在这三种力的作用下达到平衡时的分布状态。因为 塞积群的领先位错不仅受外加应力的作用,而且同时受所有其他位错的作用,以致在领先位 错与障碍物之间因位错挤压而增长起来的局部应力 τ' 达到很高的数值。直接从位错之间的 相互作用求 τ' 会很复杂,但是利用虚功原理却可以方便地解出 τ' 来。为此,近似地假定障 碍物只与领先位错有作用,然后设想整个塞积群向前移动微小距离 δx ,在此过程中在沿位 错线方向上的单位宽度内外力作功为 $n \tau b \delta x$ (其中 n 为塞积位错数),而领先位错反抗障碍 物所作的功为 $\tau' b \delta x$ 。按照虚功原理,在平衡状态下这两个功应该相等,即 $n \tau b \delta x = \tau' b \delta x$, 从而得到领先位错前的切应力为

 $\tau' = n\tau \qquad (2-80)$

此式表明,当有 n 个位错被外加切应力 τ 推向障碍物时,在塞积群的前端将产生 n 倍于外 力的应力集中。晶粒边界前位错塞积引起的应力集中效应能够使相邻晶粒屈服,也可能在晶 界处引起裂缝。

3. 位错反应

位错之间的相互转化称为位错反应。最简单的情况是一个位错分解为两个位错,或者两 个位错合并为一个位错。譬如,柏格斯矢量为 2b 的位错会通过位错反应

$$2b \longrightarrow b + b \cdot (2 - 81)$$

分解成两个矢量为 b 的位错。

位错反应能否进行,决定于是否满足下列两个条件:

(1) 反应前的柏格斯矢量和等于反应后的柏格斯矢量和,即

$$\sum b_{
m in} = \sum b_{
m fi}$$

(2 - 82)

这是柏格斯矢量守恒性所要求的。

(2) 反应后各位错的总能量小于反应前各位错的总能量,这是热力学定律所要求的。由于位错能量正比于 *b*²,所以这个条件可以表达为

· 96 ·

 $\sum b_{n}^{2} = \sum b_{n}^{2}$ (2-83) 在上面所举的例子中,反应前后位错满足柏格斯矢量守恒的条件,而能量相当于从 4 b^{2} 变为 2 b^{2} 。所以,以 2b 为柏格斯矢量的位错是不稳定的,它要自发地分解为两个柏格斯矢 量为 b 的位错。在其他结构的晶体中将会看到更多位错反应的例子。

4. 位错交割

对于在滑移面上运动的位错来说,穿过此滑移面的其他位错称为林位错。林位错会阻碍 位错的运动,但是若应力足够大,滑动的位错将切过林位错继续前进。位错互相切割的过程 称为位错交割。

图 2-41 表示两个刃型位错的相互交割。 P_A 面中不动的刃型位错的柏格斯矢量为 b_A ; P_B 面中的刃型位错自上向下滑移,其柏格斯矢量为 b_B 。当位错 b_B 扫过后, P_B 面两侧的晶 体相对移动 b_B ,位错 b_A 随着晶体一起被切为两部分,它们的相对位移 PP'方向和大小都取 决于 b_B 。由于位错的连续性,即位错不能在晶体内部中断, PP'必然是一小段位错;又由于 柏格斯矢量的守恒性,它的柏格斯矢量必然也是 b_A 。这一小段位错 PP'称为位错割阶。产 生割阶需要供给能量,所以交割过程对位错运动是一种阻碍。粗略估计,割阶能量的数量级 为 $\mu b^3/10$,对于一般金属约等于十分之几电子伏特。



图 2-41 两个刃型位错交割

其次,考虑一个刃型位错与一个螺型位错的交割(图 2 - 42)。图中螺型位错的柏格斯 矢量为 b_c ,按照螺型位错的特点,被它贯穿的一组晶面连成了一个螺旋面。另一个位错的 柏格斯矢量为 b_D ,它是一个刃型位错,其滑移面恰好是螺型位错 b_c 的螺旋面。当位错 b_D 切过螺型位错后,变成了分别位于两层晶面上的两段位错,它们之间的联线 QQ'同理也是 一个位错割阶。割阶的大小及方向等于螺型位错的矢量 b_c ,而它自己的柏格斯矢量则是 b_D ,因此这是一小段刃型位错,它的滑移面如图中阴影线所示。割阶 $QQ'随位错 b_D$ 一起前 进的运动也是滑移。

一般情况下,两个位错交割时,每个位错上都要产生一小段位错,它们的柏格斯矢量与

· 97 ·

携带它们的位错相同,它们的大小与方向决定于另一位错的柏格斯矢量。当交割产生的小段 位错不在所属位错的滑移面上时,则成为位错割阶;如果小段位错位于所属位错的滑移面 上,则相当于位错扭折。



图 2-42 刃型位错与螺型位错交割

(二)位错与点缺陷的相互作用

所有的点缺陷如空位、间隙原子或溶质原子都能以多种方式与位错相互作用。其中之一 是由于点缺陷在晶体中引起弹性畸变,因而受到位错应力场的作用,也即在它们之间发生弹 性相互作用。例如,按照刃型位错应力场的特点,正刃型位错滑移面上边晶胞的体积较正常 晶胞小一些,而滑移面下边的晶胞较正常晶胞大一些。因此,滑移面上边的晶胞将吸引比基 体原子小的置换式溶质原子和空位,滑移面下边的晶胞将吸引间隙原子和比基体原子大的置 换式溶质原子。

下面以置换式溶质原子为例来定量地分析这个问题。

首先,把晶体简化为连续弹性介质,如图 2-43,在其中挖一球形孔洞,半径为 r_0 ,相 当于从晶体中拿掉一个基体原子,然后,在此孔洞中填入一个半径为 $r_0(1+\varepsilon)$ 的小球,相 当于将一个体积与基体原子不同的溶质原子放入晶体中的空位。 ε 称为错配度,表示溶质原 子与基体原子大小的差别。在此过程中,外力反抗位错应力场所作之功(或者说位错应力场 所作的负功)就是位错与溶质原子的交互作用能。由于小球在周围介质中引起的位移垂直于 球面,位错应力场中只有正应力分量 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 σ_{xx} 作功,它们的平均值为

$$\sigma = \frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \qquad (2-84)$$

在位移 ε a 的过程中, 位错应力场所作的功为 $4\pi\sigma\epsilon r_0^3 = \sigma\Delta V$, $\Delta V = 4\pi\epsilon r_0^3$ 为溶质原子与基体 原子的体积差。从而, 位错与溶质原子的相互作用能 U 为

$$U = -\frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})\Delta V \qquad (2-85)$$

把刃型位错的应力场公式(2-59)代入式(2-85),得到

· 98 ·

$$U = A \frac{\sin\theta}{r}; \qquad A = \frac{\mu b}{3\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \Delta V \qquad (2-86)$$

其中 r 与θ为溶质原子的坐标位置(图 2-43)。

式(2-86)表明: 当 $\Delta V > 0$,在 $0 < \theta < \pi$ 处, U为正;在 $\pi < \theta < 2\pi$ 处,U为负。当 $\Delta V < 0$ 时则相反。平衡状态要求相互作用能最小,所以,比基体原子大的置换式溶质原子 和间隙原子将被位错的压缩区排斥,被位错的膨胀区吸引;而比基体原子小的置换式溶质原 子和空位的移动趋向恰好相反。这正是在本节开始时所预计的。





图 2-43 位错与溶质原子的相互作用

图 2-44 体心立方晶格中的间隙式溶质原子

由于溶质原子与位错有相互作用,若温度和时间允许,它们将向位错附近聚集,形成所 谓的柯垂耳(Cottrell)气团,使位错的运动受到限制。因为在这种情况下推动位错运动, 或者首先挣脱气团的束缚,或者拖着气团一起前进,无论如何都要作更多的功。

按照上面的计算, 螺型位错与溶质原子将不发生弹性相互作用, 这是由于螺型位错的应 力场仅有切应力分量, 而溶质原子产生的畸变又被假定为球形对称的结果。实际上, 有时溶 质原子引起的畸变与球形对称相差很远。例如体心立方铁晶格中的碳或氮原子, 它们的适宜 间隙位置是立方体的面心, 当它们处在这样的位置时, 在〈100〉方向相接邻的基体原子距 离近, 在〈110〉方向相接邻的基体原子距离远, 所以产生四方性的畸变 (图 2 - 44)。其应 力场不但有正应力分量, 同时有切应力分量, 于是它们不仅与刃型位错有相互作用, 同时也 与螺型位错发生相互作用。基于这种效应, 位错周围的溶质原子在沿 x、y、z 的三种面心 位置上发生择优分布, 或者叫作应力感生有序, 从而使系统能量降低。溶质原子与位错的这 种相互作用有时称为史诺克 (Snoek) 气团。

刀型位错附近晶格的局部膨胀和压缩引起自由电子的再分布,在膨胀一侧电子浓度偏高,在压缩一侧电子浓度偏低,结果使得膨胀区荷负电,压缩区荷正电,整个位错成为一个 线状的电偶极子。因此,对于价数与基体不同的溶质原子将表现出电学相互作用,不过,与 弹性相互作用比较起来,这种作用很小。此外,在位错与溶质原子之间还会发生所谓的化学 相互作用。 根据波尔兹曼统计,在平衡状态,位错周围溶质原子的浓度可以表示为

 $C = C_0 \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) \tag{2-87}$

其中 C₀ 为晶体中溶质原子的平均浓度, U 为位错与溶质原子的相互作用能。当富集的溶质 原子浓度超过溶解度极限时,它们将形成沉淀物质点在位错线上析出来。

空位与间隙原子不仅受到位错应力场的排斥和吸引,如在关于位错攀移一节中所述,它 们还能够消失于位错中心或从这里产生,同时伴随着位错的攀移。空位、间隙原子和位错在 一定条件下还可以互相转化。例如过饱和度太高的空位往往沿着一定晶面凝聚成片状的形式 从晶体中析出来,如图 2-45 (a)所示;当这样的空位片长得足够大之后将失去稳定,其 两对面崩塌并合,于是空位片的周界就转化成一个位错环,如图 2-45 (b)所示。在淬火 或辐照后的晶体中经常发现这样的位错环。在晶界附近,因为过饱和空位可流入晶界并在那 里消亡,所以不易形成位错环。当塑性形变使得在滑移面上出现很多位错的时候,有可能相 邻滑移面上的异号刃型位错遇到一起,这时它们将互相抵消,变成一列空位或填隙原子,如 图 2-46 所示。再如当两个螺型位错相切割时会产生刃型的位错割阶,带有刃型割阶的螺型 位错继续滑移时,它的割阶将被迫攀移,结果在割阶走过的地方产生一串空位或者间隙原 子,如图 2-47 所示。显然,这时螺型位错的运动要受到割阶的严重牵制。







图 2-46 一对异号刃型位错转化成一列空位

五、位错源与位错增殖

尽管位错是热力学不稳定的缺陷,但它们却经常存在于晶体之中,特别是金属晶体,位

错密度一般很高。

(一) 位错的来源

在讨论位错结构时曾经谈到, 螺型位错会在晶体表 面露头处造成一个永不消失的台阶,可以充当晶体的生 长前沿,因此,结晶核心中如有位错,它的长大速度要 比完整晶体快。

根据理论上的计算,由于位错的能量很大,除非晶 体受到的应力接近理论切变强度,位错是不能靠热激活 产生的。因此、位错不会在晶体中均匀形核、它只能在一些具备了条件的特殊地方产生。



图 2-47 带割阶螺型位错的运动

如前所述,过饱和空位可以凝聚成空位片,空位片崩塌时便转化成位错环(如 图 2-45),这是产生位错的一种重要途径。从熔体中生长出来的晶体,在高温时空位浓度 可达 10¹⁸/cm³ 个以上, 而室温的平衡空位浓度很小。如果空位全部聚成半径为 10⁻⁵ cm 的圆 片,它们崩塌后将形成10¹²/cm³个位错环,相当于位错密度6×10⁷ cm/cm³。实际上不会全 部空位都转变成位错环,因为表面、晶粒间界和已有的位错也起着空位消亡的作用,空位的 一部分不免要流入这些地方。

结晶时若杂质分凝或成分偏析显著,最后凝固的晶体成分不同于先前凝固的晶体,从而 点阵常数也要有所不同。作为点阵常数逐渐变化的结果,在过渡区可能形成一系列刀型位 错。同样、从表面向晶体中扩散另一种元素时、也会因为与原子大小不同相关的内应力形成 位错。晶体中的沉淀物或夹杂物若在周围基体中产生较大的应力(例如相变应力或因膨胀系 数不同在温度变化时产生的热应力),也会导致位错的产生。

结晶过程中正在生长的两部分晶体相 遇,如果它们的位向有轻微差别,在结合 处将形成位错。图 2-48 示意地表示相对 有一倾转角的两块晶体,在长大到相互接 触时,在它们中间形成一列刃型位错。以 这种方式产生位错的典型例子是熔体中的 树枝状结晶、如果因机械扰动、温度梯度 或成分偏析引起的应力,使枝晶发生转动 或弯曲, 便会通过上述机制在晶体中形成 位错和位错网。类似的情况也发生于以外 延法在衬底上沉积多晶薄膜的过程中,倘 若最初的外延结晶核心在衬底上位置不 正,它们长大相遇时就会形成位错。

当晶体受到力的作用,局部地区会产 生应力集中,如在裂缝尖端、夹杂物界



图 2-48 不同取向两晶体相遇时形成的位错

面、表面损伤附近等,倘若应力集中程度达到理论切变强度水平,便有可能在这里直接产生位错。

(二) 位错的增殖

在充分退火的一般金属晶体中,位错密度约为 10⁶~10⁸/cm²。塑性形变时,大量位错滑 出晶体,在表面形成滑移线,但同时位错密度却增加到 10¹¹~10¹²/cm² 的数量级。可见,在 塑性形变过程中位错以某种机制增殖了。

一种已经实验证实的位错增殖机构称为弗兰 克-瑞德 (Frank – Read) 源。设想晶体中某滑移面 上有一段刃型位错 AB,它的两端被位错网节点钉 住,如图 2 - 49 所示。当外加切应力满足必要的条 件时,位错线 AB 将受到滑移力的作用而发生滑移 运动。在应力场均匀的情况下,沿位错线各处的滑 移力 $F_t = tb$ 大小都相等,位错线本应平行向前滑 移,但是由于位错 AB 的两端被固定住,不能运 动,势必在运动的同时发生弯曲,结果位错线变成



图 2-49 弗兰克-瑞德源的结构

曲线形状,如图 2 - 50 (b)所示。位错所受的力 F_1 总是处处与位错线本身垂直,即使位错 弯曲之后也还是这样,所以在它的继续作用下,位错的每一微元线段都要沿它的法线方向向 外运动,经历像图 2 - 50 (c) ~ (d)的样子。当位错线再向前走出一段距离,图2 - 50 (d)



图 2-50 弗兰克-瑞德源的动作过程

的 p、q 两点就碰到一起了。从位错的柏格斯矢量来看,可知 p、q 两点处应该一是左旋螺型位错,一是右旋螺型位错,所以当它们遇到一起的时候,便要互相抵消。于是,原来的整个一条位错线现在被分成两部分,如图 2-50 (e)所示。此后,外面的位错环在 F_t 的作用下不断扩大,直至到达晶体表面,而内部的另一段位错将在线张力和 F_t 的共同作用下回到原始状态。过程到此并没有结束,因为应力还继续加在晶体上,事实上在产生了一个位错环之后的位错 AB 还将在 F_t 的作用下继续不断地重

复上述动作,这样,图 2-49 所示的结构就会放出 大量位错环,造成位错的增殖。

由于位错滑移之后,在它扫过面积两侧的晶体 要发生一个 b 的相对滑移,故当一个位错扫过整个 滑移面,到达晶体表面的时侯,整个滑移面的两侧 就沿着位错柏格斯矢量的方向相对滑移一个 b,并 在晶体表面产生一个高度为 b 的台阶。弗兰克 - 瑞 德源提供了一个可以在应力作用下放出大量位错环 的机构,如果它放出了 1000 个位错环,并且都滑 移到晶体表面,那么滑移面两侧的晶体就要相对滑 移 1000 个 b,晶体表面就会出现 1000 / 高龄 000





移 1000 个 b,晶体表面就会出现 1000b 高的台阶,造成晶体的宏观变形和可见的滑移线。
开动弗兰克 - 瑞德源需要施加应力。考虑一段弧形位错在滑移力与线张力共同作用下的
平衡,即设想滑移面上的一段微元位错线 ab 在滑移力F,及线张力 T 的共同作用下达到平衡。平衡时位错线 ab 的张角为δθ,曲率半径为 R (图 2 - 51)。按静力学,这时应有

$$2T\sin\frac{\delta\theta}{2} = F_{t}R\delta\theta \qquad (2-88)$$

考虑到 88 很小,该式可简化为

$$2T\frac{\delta\theta}{2} = F_{t}R\delta\theta$$

或

$$F_{t} = \frac{T}{R} \qquad (2-89)$$

把 $F_t = \tau b$ 及 $T = \frac{1}{2} \mu b^2$ 代人式 (2-89), 得到

$$\tau = \frac{\mu b}{2R} \tag{2-90}$$

此式表明,当位错弧线达到平衡时,外加应力与弧线的曲率半径成反比,即位错曲率半径越 小,要求与之相平衡的切应力越大。

分析图 2-50 中弗兰克-瑞德源的位错线 AB,当它弯曲之后,需要一定大小的切应力与之平衡,曲率越大,相平衡的切应力也越大。图 2-50 (b)表示位错线弯成了半圆形,

· 103 ·

与在此之前和在此之后的各种状态比较,此时曲率最大,所以需要最大的切应力。可见,一 个弗兰克 – 瑞德源受到适当切应力的作用时,就开始运动和弯曲。起初,为了弯曲能继续进 行,所需的应力越来越大,直到位错弯成半圆形,相应的应力达到最大值;此后,位错再向 外膨胀,曲率重又减小,所需的应力也减小。因此,为了使弗兰克 – 瑞德源开动并放出位错 的力决定于状态 (b),也即是与半圆形位错相平衡的切应力就是使弗兰克 – 瑞德源开动的临 界应力。引用式 (2-90) 可得到此临界应力为

$$\tau_{\rm C} = \frac{\mu b}{2R} = \frac{\mu b}{l} \tag{2-91}$$

其中 l 是位错线 AB 的长度。如果取 10^{-4} cm 作为 l,同时取 b 为 10^{-8} cm,则式 (2-91) 给 出 τ_c 大约为 10^{-4} μ m,这和实际晶体的屈服强度接近。

弗兰克 - 瑞德源的位错增殖机构实质上是由一段可滑移位错和两个被钉扎的端点构成 的。两个被钉扎的端点不一定必须是位错网的节点,其他障碍物也可以起钉扎位错的作用。 例如螺型位错交叉滑移就可以自行提供这样的钉扎点。在图 2-52 中,一个螺型位错开始在 P_2 面中滑移,可能由于遇到某种障碍或局部应力状态的变化,位错的一段交叉滑移到 Q 面,并且在绕过障碍之后又回到与 P_2 面相平行的 P_1 面,这时留在 Q 面上的两段位错是刃 型的,不能随 P_1 、 P_2 面上的位错一起前进,结果 P_1 、 P_2 面上的位错就会以图 2-50 所描 述的方式增殖位错,这种情况通常被称为位错的双交滑移增殖机构。

有时一个可滑动位错只有一端被固定,这种位错在切应力的作用下将形成蜷线并绕固定点 转动,当它转动的圈数足够多时,同样可以产生大量滑移的效果,所以这种结构也称为单点 源。



图 2-52 双交滑移位错增殖机构



图 2-53 孪晶形成的位错机制

如果牵制位错端点的是一个螺型位错或具有螺型分量的位错,那么位错的扫动面将不是 一个平面,而是一个螺旋面。位错每旋转一周便上升到相邻的一个原子面(图 2 - 53),同 时在每一个原子面上产生相当于扫动位错柏格斯矢量的滑移,这种机制被用来作为形变孪晶 形成过程的一种解释。

· 104 ·