

1960年

固体物理理论学习
报告汇编

晶体缺陷 和 金属强度

(上册)

科学出版社

53.819
633
1:2

1960 年固体物理学习报告汇编

晶体缺陷和金属强度

(上册)

31506/05



內 容 簡 介

本书为 1960 年在长春举办的固体物理理論学习报告会上有关晶体缺陷和金属强度問題的論文集。全书分为上下两册。上册主要是总结并介绍有关晶体缺陷的基本理論(主要是位錯理論),共收入“晶体中位錯理論的基础”,“位錯的彈性理論”,“小角度晶粒間界的位錯模型”,“点缺陷与位錯的交互作用”,“晶体中位錯的观测”等五篇文章。有关本問題的其他专题总结性的文章——“金属的加工硬化”,“金属的回复与再結晶”,“金属的蠕变”,“金属的脆性与断裂”,“金属蠕变和金属的理論强度”,“輻照对金属力学性能的影响”——将在下册中发表。

晶 体 缺 陷 和 金 属 强 度

(上 册)

科学出版社出版 (北京朝阳門大街 117 号)

北京市书刊出版业营业許可証出字第 061 号

中国科学院印刷厂印刷 新华书店总經售

1962 年 6 月第 一 版 书号: 2528 字数: 254,000

1962 年 6 月第一次印刷 开本: 850×1168 1/32

(京) 0001—8,300 印张: 9 9/16

定价: 1.40 元

前 言

金屬強度問題是金屬物理學科中的一個重要領域，近年來這方面的发展主要表現在人們對金屬晶體中各種缺陷有了更深刻的認識。可以毫不夸大地說，離開晶體缺陷是進入不了現在金屬強度微觀理論之門的。因此，在1960年8月由中國物理學會、中國科學院吉林分院和吉林大學聯合舉辦的固體物理學習報告會中，晶體缺陷與金屬強度曾經列為學習的主要內容之一。現在把這次會議中報告過的有關這方面的論文彙總成集，分上下兩冊出版，供從事金屬工作的科學技術人員和教學人員參考。

本文集上冊的內容主要是介紹位錯理論基礎和直接觀測位錯的某些實驗技術，下冊是敘述強度理論實際應用的某些方面。顯然，在這樣一種會議紀實的文集中，要包括整個金屬強度領域中所有的重要問題是不可能的。

為了本文集的出版，會議成立了編輯委員會，由李薰、錢臨照、荀清泉、柯俊、吳自良、馮端、葛庭燧、郭可信、師昌緒等九人組成。本文集上冊是由錢臨照同志負責編輯，下冊由柯俊同志負責編輯。各論文的内容由作者負責，並不一定代表編委會的意見。

李 薰

1962年1月

目 录

(上 册)

前言·····	李 薰 (iv)
晶体中位错理论的基础·····	钱临照 杨顺华 (1)
位错的弹性理论·····	冯 端 (125)
小角度晶粒间界的位错模型·····	赖祖涵 (173)
点缺陷与位错的交互作用·····	吴自良 (195)
晶体中位错的观测·····	钱临照 孙瑞蕃 赵景员 张世表 (243)

05939

晶体中位錯理論的基础

錢臨照 楊順華

第一章 导 論

1-1. 两种类型的固体强度理論

固体具有高强度的这一性質很早就被发现并被利用到生产实践中去。但是把固体具有高强度的这一件事提高到理論来認識，也就是說，把它发展成为一个完善的固体強度理論，到今日还没有很好完成。在今日看来，固体的力学性質的理論远落后于物质的电、磁性等的理論。

发展固体強度理論可以有两方面：

(1) 数学力学理論——数学力学理論也称宏观理論。弹性力学处理固体在弹性范围内的力学問題。按照Hook定律，固体在这范围内，应力与应变具有綫性关系。数学力学处理固体在范性范围内的性質的方法有两种，一种是应用弹性力学理論，加上范性形变情形下的应力应变間的非綫性关系作为改正項来进行計算的；另一种方法是利用粘滯性液体理論，把固体的范性与液体的流动性对比起来而处理的。不論根据以上两种方法中的哪一种方法，都可以計算出在各种受胁状态下，固体在弹性与范性形变中应力与应变的关系来，可以从簡單受胁状态的实验結果推算出复杂受胁状态来。这种計算方法应用在工程設計上获得很大的成功，但是宏观理論的缺点是没有考虑到固体在受胁及形变过程中所发生的物理变化，例如晶态試样的加工硬化、原子扩散、相变、回复、再結晶等的現象。数学力学的固体強度理論对这些現象及导致这些

現象的因素是无法处理的。

(2) 物理理論——物理理論也称微观理論。它是从固体的原子結構出发来考虑固体的強度問題；特別要研究温度、形变、形变速度、压强、化学成分、物質結構等因素对強度的影响。从固体的原子結構出发来研究強度的目的是要发现固体強度的物理本质，从而可以控制多种物理因素以改进固体的強度或者創造新材料以达到人們所預計的力学性質为生产建設服务。

1-2. 断裂強度的估計

自二十世紀二十年代的初年以来，有不少人从理論上做过固体断裂強度的估計。这里介紹 M. Polanyi 的方法^[1]。

假設固体在拉伸应力下，断裂时儲在固体中的弹性能变为断裂形成的两个表面上的能，即

$$\frac{1}{2} \sigma d = 2\gamma, \quad (1-1)$$

式中 σ 为固体断裂时的应力， d 为两分子間距 a 所伸长的长度， γ 为表面能。

假使胡克定律一直有效到固体断裂为止，則

$$\sigma = \frac{d}{a} E, \quad (1-2)$$

式中 E 为楊氏模量。

从以上两式得出固体断裂強度的理論数值

$$\sigma = 2\sqrt{\frac{\gamma}{a}} E. \quad (1-3)$$

一般而論， $a \sim 3 \times 10^{-8}$ 厘米， $E \sim 1000$ 公斤/毫米²， γ 可用表面张力来度量，固体的表面张力可从液体的曲綫用外推法得出，应大于 1000 达因/厘米，故

$$\sigma \sim 1000 \text{ 公斤/毫米}^2. \quad (1-4)$$

在 Polanyi 之后，曾有人把此理論加以补充和修正，或具体考虑一个离子晶体的断裂強度，所得結果在数量級上大致相同^[2-3]。

A. A. Griffith 从实验得出, 直径为 1 毫米的钾玻璃丝, 它的拉伸断裂强度约为 14 公斤/毫米². A. Иoffee 用未经特殊处理的岩盐得出它的断裂强度一般约在 0.4 公斤/毫米² 左右. 我们可以这末说, 固体强度的实验数值小于理论估计约为 100 倍至 1000 倍.

对于非晶态物质如玻璃, A. A. Griffith^[6] 曾观察到钾玻璃丝愈细, 强度愈高(直径从 1 毫米减至约 3 微米时, 强度自 14 公斤/毫米² 升至 350 公斤/毫米²), 而且同一直径的玻璃丝, 初从火焰中拉出来的强度远远大于它在空气中停留数小时后的强度(直径为 0.5 毫米的钾玻璃丝初从火焰中拉出时的强度可高达 154—630 公斤/毫米²). Griffith 从这一实验, 假设玻璃丝的表面不可避免地有若干微裂缝(现在称它为 Griffith 裂缝). 当远低于理论强度的应力加在试样上时, 应力就集中在裂缝的尖端上, 因而裂缝获得了发展, 导致试样断裂. 这样, 这些裂缝的存在可算是玻璃丝强度降低的原因. 用玻璃丝实际强度的数据, 从 Griffith 的理论可以计算出存在玻璃上的微裂缝的宽度约为 10^{-5} 厘米数量级. 这样, 非晶态物质的实际强度远低于理论强度获得了初步解释.

但问题至此远不能算结束.

1-3. 晶体与非晶体强度的物理本质

把 Griffith 的微裂缝理论应用在晶体上, 结果怎样呢? 通过计算, 我们可以得出在岩盐晶体表面上应存在着宽约 2 毫米的裂缝, 而在锌单晶体上则应有宽约 1 厘米的裂缝, 这显然与事实不相符合. 这样, 初步说明了微裂缝的强度理论不能适用于这些晶体上.

次之, 当我们观察应力加在晶体试样时(不论离子晶体或金属晶体), 在断裂之前, 试样经历一段或大或小的范性形变过程. 而当范性形变开始的时候, 在晶体上有两个显著的特征出现.

(1) 一般的晶体发生滑移, 少数晶体在特殊取向情形下发生孪生. 滑移或孪生都在一定的晶体学平面及方向上进行.

(2) 临界切应力(屈服强度), 即加在试样上的临界应力在滑

移平面及滑移方向上的分量,有一定的数值。

回过来看非晶态物质,脆性断裂是它的特征之一。次之,即使

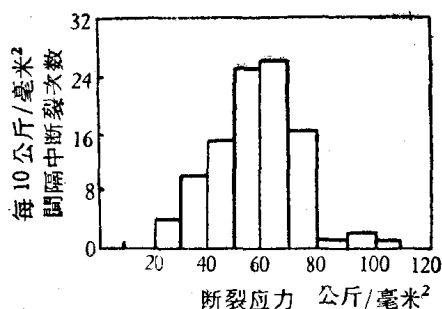


图 1-1. 玻璃絲在不同張強下由 Griffith 裂縫导致断裂次數的分布曲綫

在同一大小和同一条件下所生产出来的玻璃絲上,它的断裂强度也是有统计性的分布而无恒定的数值(见图 1-1)。晶体强度与非晶体强度的物理本质有所不同至此愈为明显。

范性形变的开始即为晶体中原子发生永久性迁移的开始。因此,屈服强度应可理解为标志晶体强度的最重要、最基本的参量。

1-4. 晶体屈服强度的估计

1926 年 Я. И. Френкель 估计了晶体的屈服强度^[7]。首先假设晶体中的原子排列是理想的,相邻两列原子稳定的位置如图 1-2。两列原子间力有两种:(1)每层中原子间的相互作用力,这与两列原子位移不相干;(2)上下两层原子之间的相互作用力,这种力显然是周期性的,首先假定它是正弦波形(图 1-3a)。

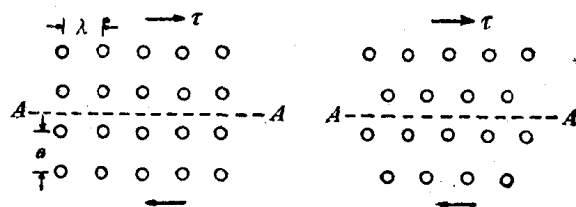


图 1-2. 理想晶体中的原子排列

设在晶体的滑移面及滑移方向上外加切应力 τ , 在某相邻两列原子层之间 AA 产生位移,如图 1-2 所示。这位移 x 与切应力 τ 间之关系如图 1-3a 中的正弦波形曲线。当切应力没有加上去

的时候 ($\tau = 0$), 位移 $x = 0$ 。当位移为 λ (即相邻两原子的間距) 时, τ 又为零。在此两个稳定平衡点之間存在着一个势垒 (見图 1-3b)。在这个势垒的峯頂 P 处, 应力又为零, 但此处的平衡是不稳定的。过此, 当位移繼續增加时, 应力繼續减小, 即变向, 直到 $x = \lambda$, 則应力又回复到零。

因此, 应力 τ 与位移 x 之間的关系可以表示为

$$\tau = \tau_m \sin 2\pi \frac{x}{\lambda}; \quad (1-5)$$

在原点附近 $\frac{x}{\lambda}$ 值較小, 上式可写成

$$\tau \simeq \tau_m 2\pi \frac{x}{\lambda}, \quad (1-6)$$

式中 τ_m 为最大切应力。設晶体在范性形变开始之前它的应力与应变之間关系恆可用胡克定律来表示, 則

$$\tau = G \frac{x}{a}, \quad (1-7)$$

式中 G 为晶体的切变模量, a 为相邻两层原子列的間距。上式即为图 1-3a 中在原点切于曲綫的虛綫。

从式(1-6)和(1-7), 可得

$$\tau_m \simeq \frac{G}{2\pi} \frac{\lambda}{a}. \quad (1-8)$$

在此晶体中, 当 $x = \frac{1}{4}\lambda$ 时, 切应力达最大值, 过此, 晶体的形变从弹性范围进入范性范围。故 τ_m 相当于此晶体的屈服应力即屈服強度的数值。

为計算方便起見, 可以当作 $a \simeq \lambda$, 故

$$\tau_m \simeq \frac{G}{2\pi}. \quad (1-9)$$

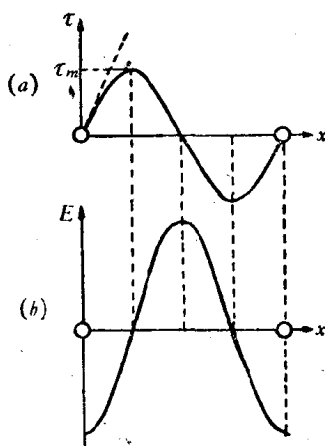


图 1-3. (a) 应力与原子位移之間的关系; (b) 势能与原子位移之間的关系

一般工程用的金属的切变模量 G 恒在 10^3 与 10^4 公斤/毫米² 之間, 故晶体的理論屈服强度应在 10^2 — 10^3 公斤/毫米² 数量級之間, 而实验所得的屈服强度数值为:

一般金属单晶体的約在 10^{-1} 公斤/毫米² 数量級;

汞单晶体的可低达 10^{-3} 公斤/毫米²;

NaCl 单晶体的約在 10^{-1} — 1 公斤/毫米² 数量級之間。

因此晶体屈服强度的实验数值与理論估計相比較, 前者低于后者約 100 倍至 1000 倍, 甚至可以更大些。

以上的屈服强度理論数值的估計根据切应力是位移的正弦函数的假設而来。无疑的, 这个周期性的函数形式有所改变可以影响屈服强度的計算。Orowan^[8,9] 考虑了晶体中原子的可压缩性及原子間键合力的适当数值得出 τ 与 x 的关系曲线可能如图 1-4 中

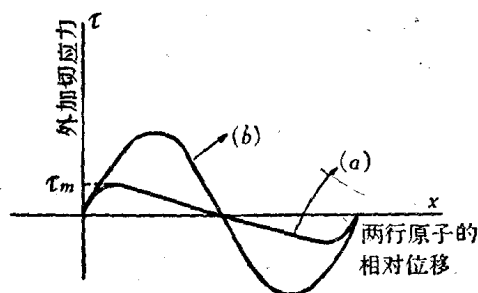


图 1-4. 考虑原子的可压缩性, 应力与原子位移之間的关系可如曲线 (a) 所示。曲线 (b) 与图 1-3(a) 相同

实线所示, 它的 τ_m 显然比图中虚线所示正弦关系的要低得很多。Orowan 估計一般金属的屈服强度应在

$$\tau_m \simeq \frac{G}{10}$$

与

$$\tau_m \simeq \frac{G}{50}$$

之間。

Mackenzie^[10] 根据 Orowan 上述的考虑以及其它因素, 指出一般金属的理論屈服强度应为

$$\tau_m \simeq \frac{G}{30} \quad (1-10)$$

显然, 经过这样多方修正的金属的理論屈服强度还是比实际数值大得很多。

应当指出, 上述的估計数值只是从理想晶格即完整的金属单晶体上得出来的, 这个数值只能和金属单晶体的临界切应力的实

驗数据来比較。至于經過高度冷加工的金属多晶体,它的屈服强度倒是可以較好地接近于上述理論强度的估計。例如經過高度冷加工的一般碳素鋼和合金鋼的屈服强度約在 20 到 100 公斤/毫米²之間。但这些金属試样中的原子排列极为复杂,不能与上述理論所用的簡單模型相比拟,因此这种金属的实际强度虽較接近于理論数值,但仍不能认为上述理論所根据的模型具有与事实相符的真实性。

1-5. 范性形变的热力学理論

对于上节所指出的理論屈服强度与实际屈服强度之間的巨大差别, R. Becker^{[11], [12]} 曾于 1925 年提出一个假設。他认为这个差别的来源是由于真实晶体中有热应力的存在。晶体中原子的热运动产生了各种頻率, 自紅外到声頻的各种弹性波向各个方向传播开来。这些不規則波的叠加可能在晶体中造成局部的应力峯。Becker 以为晶体在外应力下所以进行滑移, 就因为在外应力上加上这个由于原子热运动所造成的在局部地区的应力峯值达到了理論强度数值时开始的。滑移一經在局部地区开始, 它就能单独在外应力之下在整个滑移面上传播开来。这样, 每一个达到这样境地的原子热运动就能产生一个原子間距 λ 的位移。

既已假設晶体中原子的位移是由于原子的热运动助长而成的, 那么在 0°K 时晶体的临界切应力 τ_m 就应当是外加应力的数值。而在温度 T 时, 晶体在外加应力 τ 时就能产生屈服現象, 于是由原子的热运动助长晶体产生屈服現象的热应力应为 $(\tau_m - \tau)$ 。在晶体的体积 V 中, 使应力从 τ 提高到 τ_m 所需的激活能是什么呢? 严格讲来, 它应当是在这体积中弹性能量的增量減去外加应力所做的功^[13]; 前者为 $V(\tau_m^2 - \tau^2)/2G$, 而后者为 $\tau V(\tau_m - \tau)/G$ 。前者有 $1/2$ 的因子是因为应力随应变而变更, 后者沒有 $1/2$ 的因子是因为此时应变由 τ/G 增大到 τ_m/G , 而外加应力 τ 沒有变更的緣故。故激活能

$$W = V(\tau_m^2 - \tau^2)/2G - \tau V(\tau_m - \tau)/G = (\tau_m - \tau)^2 V/2G. \quad (1-11)$$

在这体积内,原子在单位时间内及单位体积内获得激活能 W 的几率服从 Boltzmann 定律,即其几率

$$P = e^{-W/kT}. \quad (1-12)$$

因 $T = 0$ 时 $W = 0$, 故 e 项的系数为 1.

今在 V 体积内由原子位移而发生的形变量为 d , 在这晶体中设有 Z 个 V 体积, 则在单位时间内发生形变的 V 的数目将为 ZP , 而在此单位时间内可能发生的总位移量为 dZP , 此即为形变速率

$$u = dZP = dZe^{-\frac{(\tau_m - \tau)^2}{2GkT}} V = Ae^{-\frac{(\tau_m - \tau)^2}{2GkT}} V, \quad (1-13)$$

式中 $A = dZ$. 若形变速率为一恒量, 即形变为匀速, 则

$$(\tau_m - \tau)^2 / T = \text{恒量}$$

或

$$\tau = \tau_m - aT^{\frac{1}{2}}, \quad (1-14)$$

式中 a 为一常数.

Becker 所获得的(1-14)式可以说明晶体的强度随温度的升高而减弱, 但没有能说明晶体强度的理论数值与实验数值之间的巨大差别. 更困难的一件事, 他假设了晶体在绝对零度时应具有纯粹弹性, 这与事实不符.

其后, E. Orowan 曾对 Becker 的理论作了一些修正^[11]. 他考虑了以下三点:

(1) 晶体中存在着结构上的缺陷, 当外加应力时, 应力集中在缺陷上, 若外加应力为 τ , 而由于在 V 中的缺陷, 应力集中在 V 中的缺陷处为 τ' ,

$$\tau' = q\tau, \quad q > 1,$$

则

$$u = Ae^{-\frac{(\tau_m - q\tau)^2}{2GkT}} V. \quad (1-15)$$

(2) 由热运动可能发生应力的反向运动, 则可得

$$u = A \left\{ e^{-\frac{(\tau_m - q\tau)^2}{2GkT}} V - e^{-\frac{(\tau_m + q\tau)^2}{2GkT}} V \right\}. \quad (1-16)$$

在一般情况下第一项比第二项大得多, 但当 $\tau = 0$ 时, $u = 0$.

(3) 考虑到硬化的因素。假使晶体在形变过程中原子位移 x 距离后,原屈服点提高到

$$\tau'_m = \tau_m + Bx,$$

則

$$u = Ae^{\frac{[(\tau'_m + Bx) - q\tau]}{2GkT}} \quad (1-17)$$

这个理論改进了 Becker 理論中的若干缺点;引入了晶体缺陷,因此降低了晶体強度的估計值,避免了 $T = 0^\circ\text{K}$ 时不发生范性形变的困难,考虑了硬化这一个重要因素。在这些新的考虑中把晶体缺陷包括进去的一项是正确的,但是作者在引入缺陷时沒有明确指出晶体中缺陷的本質,因此它仅在数学形式上降低了晶体強度的估計值,而沒有明确的物理意义。引入硬化这一考虑也仅限于形式而缺乏物理的涵义。

1-6. 位錯概念的引入

从上面的历史叙述可清楚地看出,在晶体中用相邻两原子面整个相对位移的模型,或者用原子的热运动来帮助原子获得額外的应力达到晶体屈服強度的理想数值的設想都不能滿意地解释晶体的范性行为。

二十年代之初到三十年代之中許多科学工作者在晶体的范性行为上做了不少实验工作,发现了若干經驗規律^[15]。这些工作使人知道,一个成功的晶体范性模型,必須能够說明以下几个事实:

- (1) 晶体是容易开始滑移的;
- (2) 使晶体开始滑移的应力(屈服強度)与温度的关系不大;
- (3) 晶体表面上的滑移痕迹并不都是从晶体的一边貫通到另一边,而是有时中止在晶体的中部,见图 1-5 (不均匀滑移)。

此外,晶体(特别是金属)有显著的加工硬化現象,一个成功的晶体范性模型对这个复杂的現象也必須在开头的时候可以看出能得出滿意解释的端倪。

那时有不少的工作者都傾向于企图以真实晶体具有缺陷的假

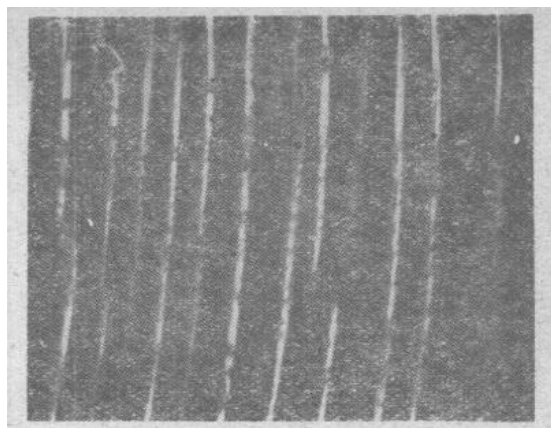


图 1-5. 滑移的痕迹有时中止在晶体的中部

設來說明晶体的范性。A. Smekal 把晶体的許多物理性質分成两类:(一)結構灵敏的,(二)非結構灵敏的。而晶体的范性是屬於結構灵敏的一类。按照 Smekal 的說法^[16],“一个具有結構灵敏性質的晶体必須在穩定的理想晶格之外具备更多的結構因素來說明这个結構灵敏的性質,最簡單的这种額外的結構因素就是在理想晶格之上外加不同类型的和数目不等的空隙”。換言之,晶体的范性以用具有特殊形式的缺陷的晶体点陣來說明最为可能。

1934 年,几乎同时 M. Polanyi^[17], E. Orowan^[18], G. I. Taylor^[19] 三人分別发表关于这种特殊形式的晶体缺陷(位錯)的模型。

在 Taylor 的論文里,他注意到 A. Иоффе 的岩盐工作。当一个受胁的岩盐晶体放在一对正交的尼科耳稜鏡中間观察时,发现在滑移的同时有发亮的綫条从晶体的一边传播到晶体的另一边。这說明滑移在晶体中部分地区产生了应力集中,同时也說明滑移是从晶体的一边传播到另一边去,正象裂縫在脆性物質中的传播一样。

晶体平衡理論要求晶体中的每个原子放在势能最低的地方。原子的热运动使得原子在它势能最低处的附近运动。它能跳跃过势垒落到邻近的位置上去的机会是很小的。例如如图 1-6 中的周期曲綫代表理想晶体中两列原子 A_0, A_1, A_2 与 B_0, B_1, B_2 中間在

CD 处的势能曲线。在离 C_0 为 x 处的势能可以下式表示：

$$P = -A \cos(2\pi x/\lambda), \quad (1-18)$$

式中 λ 为原子列上相邻两原子的间距。 A 为振幅。可以很清楚地看到，在 CD 线上的原子处在 C_0 ， C_1 ， C_2 等处最为稳定。如 C_0 要跳到 C_1 位置上去，它必须跃过高为 $2A$ 的势垒方可。

若晶体中包含一种原子排列的缺陷。上列原子 $\cdots A_0 A_1 A_2 A_3 \cdots$ 仍作均匀的排列，而下列原子中某一段的 N 个原子均匀分布在相当于上列原子 $N+1$ 个原子的长度中，其余的原子则仍旧与上列原子一一对应对齐（图 1-7 为含有 $N=3$ 的缺陷的原子排列）。此时在 CD 线上的势能可以下式表之：

$$P = -A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda} \left(\frac{N+1}{N + \frac{1}{2}} \right) - A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda} \left(\frac{N}{N + \frac{1}{2}} \right), \quad (1-19)$$

处于 CD 线上势能最低位置上的原子 C_0 ， C_1 ， C_2 ， $C_3 \cdots$ 等，其中

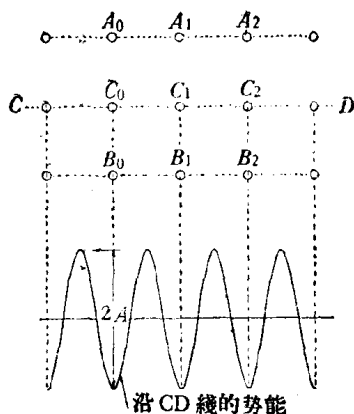


图 1-6. 理想晶体中的原子排列及其势能曲线

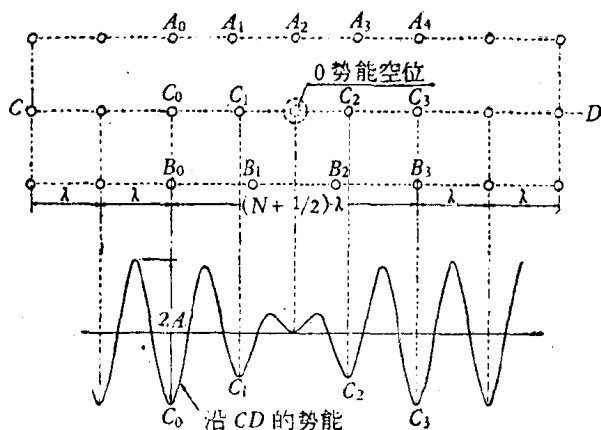


图 1-7. 晶体中存在位错但未受势的原子排列及其势能曲线

C_1, C_2 两个原子比较容易跳跃到它们之间的势能空位 O 上去, 它们迁移位置的激活能比其他位置上原子所需要的要小得多。但因为 C_1, C_2 跳跃到 O 位置上的机会相同, 故这样的原子排列还是稳定的。

现在进一步假设在晶体上加上切应力 τ 使 $A_0, A_1, A_2 \cdots$ 列原子相对于 $B_0, B_1, B_2 \cdots$ 列原子作一很小的位移 δ , 此时在 CD 线上的势能可表如下式:

$$P = -A \cos 2\pi \frac{x - \delta}{\lambda} \left(\frac{N+1}{N + \frac{1}{2}} \right) - A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda} \left(\frac{N}{N + \frac{1}{2}} \right). \quad (1-20)$$

图 1-8 为在上式 $N = 3$ 时的原子排列图形及其势能曲线。从这图上很明显地可以看出, 原子 C_2 要跳到它的左邻势能空位 O 上所需的激活能 h_2 比原子 C_1 跳到 O 上所需要的激活能 h_1 要小得多。

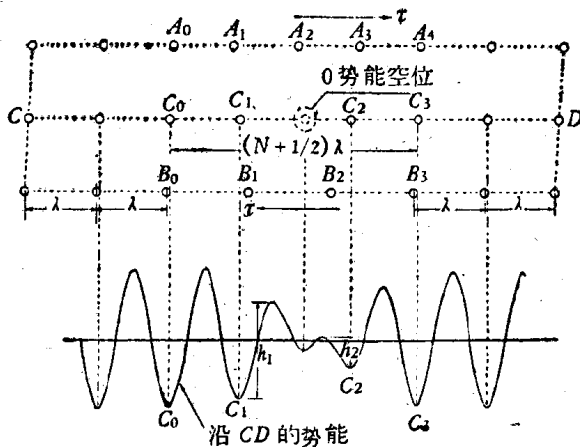


图 1-8. 在切应力下存在位错的晶体中原子的排列及其势能曲线

如以 $\delta/\lambda = 0.1$ 来计算, $h_1 = 2.70A$, 而 $h_2 = 0.85A$. 若 C_2 获得足够的激活能从它跳到 O 位置上, 其他原子的位置也随之而略加修正, 使仍如原图, 只是此时 CD 上的空位向右移动一个原子间距而已。

于是, 如晶体中的这种原子排列的缺陷在最初时位置在晶体的左边, 则在不大的应力作用及原子获得适当的激活能之下, 这个