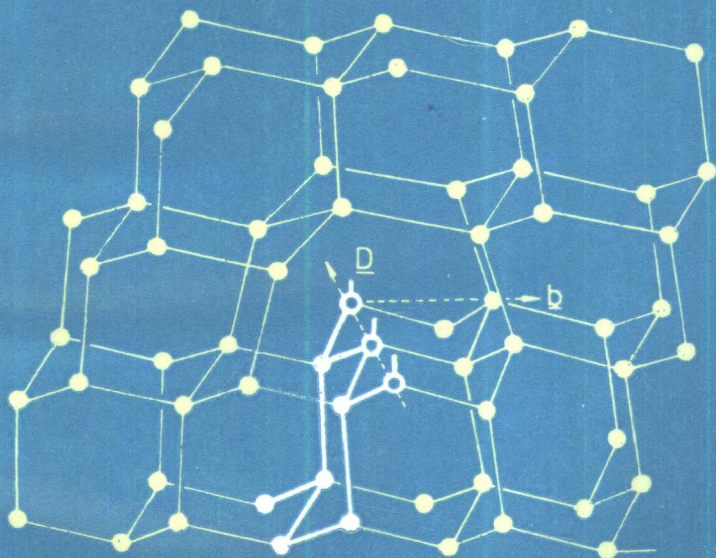


晶体缺陷

陈继勤 陈敏熊 赵敬世 编著



浙江大学出版社

晶 体 缺 陷

陈继勤 陈敏熊 赵敬世 编著

浙江大学出版社

(浙)新登字第10号

内 容 简 介

本文主要介绍位错的基本理论及其在材料中的实际应用。全书共分七章,分别阐述点缺陷和线缺陷的基本性质、典型晶体中的位错、面缺陷的基本性质、缺陷间相互作用、位错理论在金属强度中的应用和晶体缺陷对物理性能的影响。本书文字叙述详尽易懂,每一章附有思考题与习题,另附参考文献,便于自学和深入学习有关内容。

本书可作为金属材料与热处理专业以及热加工类专业研究生教材,也可供相应专业的大专院校师生和有关工程技术人员参考。

晶 体 缺 陷

陈继勤 陈敏熊 赵敬世 编著

责任编辑 涂 红

*

浙江大学出版社出版

浙江大学印刷厂印刷

浙江省新华书店发行

*

开本: 850×1168 1/32 印张: 9.9375 字数: 249千字

1992年4月第1版 1992年4月第1次印刷

印数: 0001-2000

ISBN 7-308-00947-5

TG·009 定价: 3.30元

编者的话

本书是根据金属材料与热处理专业硕士研究生培养工作研究会第二届会议要求出版硕士生晶体缺陷课程用参考教材的决定而编写的。编写大纲主要是依据1986年11月杭州晶体缺陷教学研讨会制定的教学大纲确定的。

晶体缺陷理论已广泛应用于材料科学的各个领域，故本书以介绍有关基本理论和基础知识为主（第一至第五章），适当介绍实际应用（第六至第七章）。在编写时注意了与本科生金属学、力学性能等课程的衔接，以及研究生其它课程的横向联系。此外，尽可能避免简单重复，力求做到在原有基础上的深入。有关位错观测的内容在本科生和研究生某些课程（如x射线金属学，金属电子显微分析）中要作详细介绍，因而本书不单独设章。

考虑到各个院校所开设研究生课程以及学时数的不同，在使用本教材时可对有关内容（尤其是第七章）按实际情况适当增减或调整。

参加本书编写的有：天津大学陈敏熊（第一、三、四章），北京航空航天大学赵敬世（第二章），浙江大学陈继勤（第五、六、七章）。全文由陈继勤主编。北京科技大学余永宁，河北工学院王健安，上海工业大学周自强对全书进行了审阅，并提出了宝贵意见，在此表示衷心的感谢。

由于编者学识水平有限，书中缺点和错误在所难免，诚恳地希望读者批评指正。

编者

1991年8月

目 录

第一章 点缺陷基本性质	1
§1 点缺陷种类.....	1
一、空位	2
二、间隙原子	3
三、离子晶体中的点缺陷	7
§2 点缺陷的平衡浓度.....	9
一、单空位的平衡浓度.....	9
二、双空位的平衡浓度.....	11
三、间隙原子的平衡浓度.....	13
§3 点缺陷形成能.....	14
一、电子势能变化.....	15
二、电子动能变化.....	16
三、空位形成能的实验测定.....	17
§4 形成熵的计算.....	18
§5 点缺陷的运动.....	20
一、点缺陷的迁移.....	20
二、空位迁移能.....	22
三、点缺陷的消失.....	24
参考文献	25
习题与思考题.....	25
第二章 线缺陷的基本性质	27
§1 引 言.....	27
一、简单立方晶体中的刃型和螺型位错.....	28
二、位错的柏格斯矢量(柏氏矢量).....	29
三、刃型位错及其运动.....	31
四、螺型位错及其运动.....	33

五、位错密度	37
§2 弹性力学基础知识	37
一、应力张量	38
二、应变张量	40
三、应力与应变关系(广义虎克定律)	42
四、弹性力学平衡问题的求解方法	43
§3 位错的应力场	44
一、直线型刃型位错的应力场	45
二、螺型位错的应力场	50
三、任意形状位错环的应力场简介	53
四、各向异性弹性体中的直线位错	56
§4 位错的弹性能、自由能及线张力	58
一、弹性能	58
二、自由能	60
三、线张力	61
§5 位错受力	65
一、直线位错受力	65
二、作用在位错上的力的一般公式	67
§6 位错的萌生和增殖	69
一、位错的萌生	69
二、位错增殖机制	72
三、螺旋线位错的形成机制	77
§7 位错的滑移阻力	79
一、派-纳模型的概念与方程	79
二、非正弦作用力时派-纳模型的修正	87
三、位错的能量与派-纳力	89
§8 位错运动的速度与应力的关系	96
一、运动位错的应力场和位错运动的极限速度	97
二、位错速率与应力的关系	100
三、塑性变形的热激活问题	102

§9 位错的攀移力	104
参考文献	110
习题	111
第三章 典型晶体中的位错	113
§1 面心立方晶体中的位错	113
一、全位错	113
二、堆垛层错	115
三、不全位错	117
四、扩展位错	121
§2 体心立方晶体中的位错	131
一、全位错	131
二、堆垛层错	132
三、位错分解	135
四、不全位错与孪晶的关系	137
§3 密排六方晶体中的位错	139
一、全位错与不全位错	139
二、堆垛层错	141
三、密排六方晶体的滑移	142
参考文献	144
习题及思考题	144
第四章 面缺陷的基本性质	145
§1 小角度晶界	145
一、对称倾斜晶界	145
一、非对称倾斜晶界	146
三、扭转晶界	147
四、小角度晶界位错模型的Frank公式	149
§2 大角度晶界	153
一、重合位置点阵	153

§3 其他的晶界模型.....	160
一、O点阵理论.....	161
二、旋错.....	161
§4 相界模型.....	164
一、相界.....	165
二、反相畴界.....	167
§5 晶界能.....	169
一、晶界能的计算.....	169
二、有关晶界能的分析.....	172
参考文献.....	174
习题及思考题.....	175

第五章 缺陷间相互作用..... 176

§1 溶质原子与位错相互作用.....	176
一、静电相互作用.....	176
二、化学相互作用.....	178
三、弹性相互作用.....	180
四、三种相互作用大小的比较.....	184
§2 平行位错之间相互作用.....	184
一、平行螺位错间相互作用.....	185
二、平行刃位错间相互作用.....	186
三、螺和刃位错间相互作用.....	186
§3 位错塞积群应力场的计算.....	186
一、计算塞积群正前方的应力.....	188
二、计算塞积群前任一点 $R(r, \theta)$ 的应力.....	189
§4 位错间近程互作用.....	191
一、位错的汇合.....	191
二、位错的交割.....	191
§5 实际晶体中的位错反应.....	194
一、Lomer-Cottrell位错的形成.....	195

二、位错网络的形成	195
三、层错四面体的形成	197
§6 位错与面缺陷互作用	198
一、面缺陷与位错作用可用镜像位错代替的依据	198
二、界面对位错的作用	199
参考文献	201
习题与思考题	202
第六章 位错理论在金属强度中应用	204
§1 晶体软硬实质	204
一、晶体的理论强度	204
二、晶体实际屈服强度的估计	207
§2 三类晶体的屈服现象	208
一、屈服曲线方程	208
二、对屈服曲线方程的理解	209
§3 流变应力与位错密度	211
一、平行位错间互作用机制	211
二、与林位错互作用机制	212
三、位错胞壁作用机制	213
§4 加工硬化	215
一、硬化三阶段的描述	215
二、位错理论对加工硬化的解释	216
§5 晶体的断裂	221
一、脆性断裂	222
二、韧性断裂	228
三、韧脆转变	229
§6 固溶强化	231
一、面心立方晶体固溶强化	232
二、体心立方晶体固溶强化	239
三、不均匀固溶强化	245

§7 合金中第二相强化	251
一、硬的不变形的第二相粒子强化	251
二、软的可变形的第二相粒子强化	253
§8 马氏体相变与马氏体强化	257
一、马氏体形核的位错模型	258
二、马氏体胚核的长大	260
三、马氏体强化	262
§9 高温强度的位错理论	264
一、蠕变的描述	264
二、蠕变第二阶段的位错理论	265
§10 疲劳强度的位错理论	266
一、疲劳现象的特点	267
二、疲劳的位错模型	268
参考文献	269
习题与思考题	270
第七章 晶体缺陷对物理性能的影响	271
§1 电子论基础	271
一、量子力学基本方程	271
二、晶体中电子的能带	272
三、晶体中电子跃迁的规律	273
§2 缺陷与晶体电学性能	275
一、晶体电阻	275
二、点缺陷电阻	278
三、位错电阻	279
§3 缺陷与半导体性能	280
一、半导体中载流子数目和它的迁移率	280
二、缺陷对半导体晶体能阶的影响	282
三、缺陷对载流子数目的影响	286
§4 离子晶体中缺陷	289

一、光的发射和吸收·····	289
二、离子晶体中的点缺陷·····	291
三、色心的形成·····	292
四、位错应力场与晶体双折射·····	293
§5 缺陷与磁学性能·····	298
一、晶体磁性概述·····	298
二、位错对铁磁性的影响·····	300
参考文献·····	303
习题与思考题·····	304

第一章 点缺陷基本性质

点缺陷是晶体中原子大小的零维缺陷，它在晶体中可以呈热平衡状态存在，而其它缺陷如位错和晶界是热力学不稳定的。点缺陷最早是1926年弗蓝克尔（Frankel）为了解释离子晶体导电的实验事实提出的。1942年塞兹（Seitz）等为了阐明扩散机制，研究了金属中点缺陷的一些基本性质。50到60年代，由于原子反应堆技术的进展，高能粒子对固体的辐照效应引起了人们的重视，又推动了对晶体中点缺陷的深入研究。70年代因点缺陷及其与位错的交互作用对半导体的性能有很大的影响，引起了人们对半导体材料中点缺陷性质的注意，并采用核磁共振等近代物理实验技术对点缺陷周围的状态（特别是电子结构和状态）进行了深入的研究。

由上述点缺陷研究的发展过程不难看出点缺陷是一种重要的缺陷，因为它影响许多晶体材料的物理性能和力学性能，如金属中的空位在原子运动或扩散相变过程中（诸如回火、沉淀、受损伤晶体的退火等）起着重要作用。

本章将着重介绍点缺陷的一些基本性质如点缺陷的种类、形成能、振动熵和点缺陷的迁移。而关于点缺陷对性能的具体影响将在本书第七章等有关章节中讨论。

§1 点缺陷种类

晶体中的点缺陷包括空位、间隙原子、杂质或溶质原子和色心、以及由它们组合而成的复杂缺陷（如空位对和空位群）。在纯金属中，只有空位和间隙原子。在离子晶体中会产生荷电的空

位和间隙原子。产生空位和间隙原子的途径可能有以下几种：

① 热振动 依靠热振动使原子脱离正常点阵位置而产生缺陷，如形成空位、间隙原子和空位对。这种缺陷受热振动的控制，它的浓度与温度有关，在平衡状态时称为热平衡态点缺陷。随着温度升高，热平衡态点缺陷的浓度也增高。如将晶体加热到高温，形成较高的空位浓度，然后由高温快速冷却，使空位在冷却过程中来不及消失，就得到含有过剩空位的晶体，从而形成非平衡态空位。用这样的方法得到的过饱和空位称为淬火空位。

② 冷加工 金属在塑性变形时要产生大量位错，位错间有交互作用，在适当条件下，位错交互作用的结果能产生点缺陷。由于塑性变形是在低的温度下进行的，所产生的点缺陷不会消失，而过饱和地保存下来。

③ 辐照 动能很大的高能粒子（如中子、 α 粒子、高速电子等）轰击金属晶体时，由于粒子轰击，原子离开原来位置，产生空位和间隙原子。如果高能粒子的动能很大，使最初被碰撞的原子获得比较高的能量，它有可能继续对其它原子发生碰撞，而形成大量的空位和间隙原子。

此外还有其它方法可以产生点缺陷。

间隙原子除了在极低温度高能粒子辐照的特殊条件下产生外，一般在纯金属中很少存在；相反，空位的存在却比较普遍，对金属晶体的影响也较大，所以空位在点缺陷中占有重要的地位，因此将着重讨论空位。

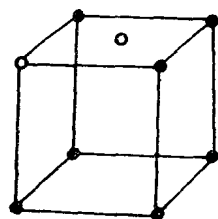
一、空位

在晶体点阵中，从原来应有原子存在的一个阵点取走原子，则在晶体中形成一个空位。这种空位称为肖脱基（Schottky）空位。经典的空位图像是很简单的，认为原子被取走后，周围原子只向空位处作稍微移动，产生松弛，留下一个明确的空位图像。

另外一种图像则认为空位形成后，其周围的原子向空位作较大的位移，而形成约有十几个原子大小的非晶区，类似于局部熔化，有人称之为松驰群。这两种图像很难通过实验直接观察来区别。一般情况可以认为是呈经典图像的，而在接近熔点时，可能呈现松驰群。

根据经典图像可以看出，形成一个空位时：① 破坏点阵的周期排列；② 晶体产生膨胀，形成一个空位时约增加半个原子体积 Ω ；③ 引起少量的点阵畸变。

在一定能量条件下晶体中两个单空位有可能结合成为空位对 (vacancy pair 或 divacancy)，如图1-1所示。



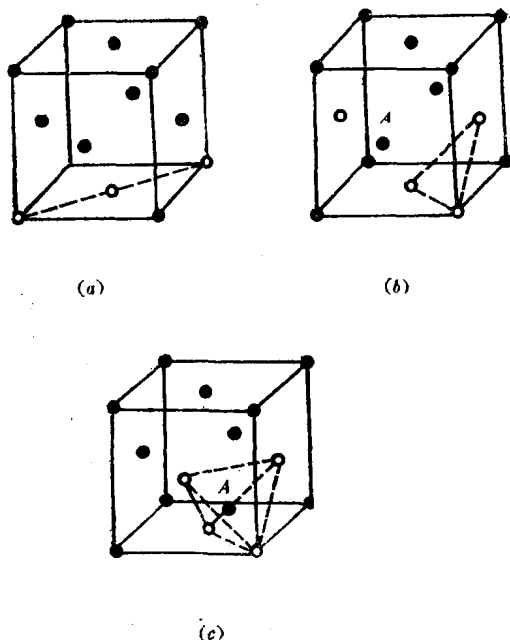
- —结点上存在原子，
- —结点上无原子为空地

图1-1 面心立方晶体中的双空位

假如晶体中有三个空位结合在一起则称为三空位 (trivacancy)。图1-2为面心立方金属铜中三空位可能的几种形式。三个空位成直线排列的如图(a)，这三个空位彼此不是最近邻的，从能量角度看这种结构最不稳定。图(b)中的三个空位是最近邻的，所以更为稳定，且它们之间的键合也更有利。图(c)表示三空位附近的A原子松驰进入四个空位的中心，即由三空位进一步演变成空位四面体中间含有一间隙原子，当然也可以四个空位或更多的空位结合在一起形成空位群。为了与空位群相区别，在光学显微镜和电子显微镜下可以观察到的大的空孔称之为空洞 (void)。

二、间隙原子

金属晶体大多是体心立方、面心立方和密排六方结构。这些晶体中都有间隙位置，进入晶体点阵间隙位置的原子称为间隙原子。这种间隙位置通常是晶体点阵的最大空隙位置，在一般情况下不应该有原子存在。间隙原子可以是晶体本身固有的原子，也



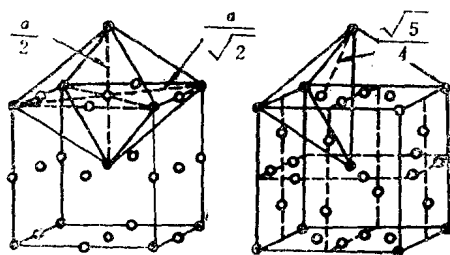
(a) 直线排列；(b) 平面结构；(c) 四面体结构，其中的A原子松弛到四面体中心

图1-2 面心立方晶体中三空位的几种可能形式

可能是外来的尺寸较小的杂质原子。为了区分，通常称前者为自间隙原子。

体心立方晶体中的间隙位置有八面体和四面体两种，八面体间隙中心在 $[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0]$ 及其等效位置，即在晶胞各面的中心，如图1-3(a)所示。显然，体心立方晶体的八面体间隙是不对称的，可以看出间隙中心距上下两原子的距离为 $\frac{a}{2}$ ，而距其余四个原子的距离为 $a/\sqrt{2}$ 。八面体的间隙半径 r 约为0.154原子半径。

体心立方晶体四面体间隙中心在 $[\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0]$ 及其等效位置，如



(a)

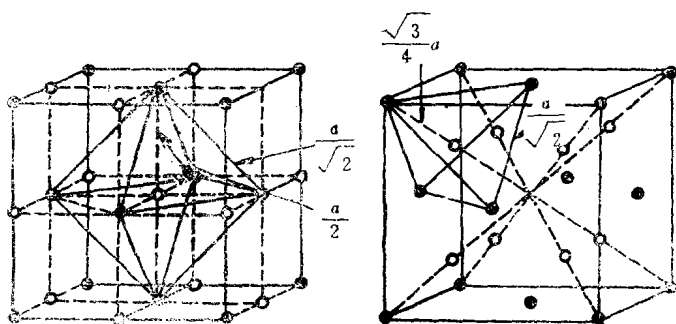
(b)

(a) 八面体位置；(b) 四面体位置

图1-3 体心立方晶体的间隙位置

图(b)。可以看出间隙中心与相邻四个原子的距离皆为 $\frac{\sqrt{5}}{4}a$ ，表明四面体间隙是对称的。四面体的间隙半径 r 约为0.291原子半径。

面心立方晶体中的间隙位置也有八面体和四面体两种。八面体间隙中心在 $[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ 及其等效位置，即在晶胞的体心位置，见图1-4(a)。显然面心立方晶体八面体间隙与体心立方晶体的八



(a)

(b)

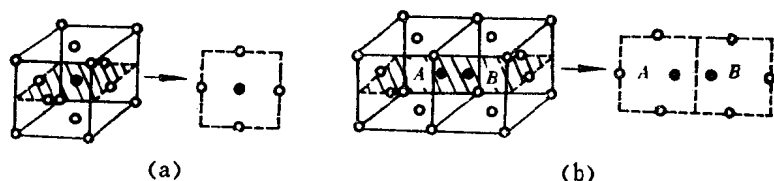
(a) 八面体位置；

(b) 四面体位置

图1-4 面心立方晶体的间隙位置

面体间隙相似，但前者间隙是对称的。因为间隙中心距相邻的六个原子的距离是相同的，皆为 $a/2$ ，八面体间隙半径 r 约为0.41原子半径。面心立方晶体四面体间隙中心在 $[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$ 及其等效位置，如图1-4(b)所示。与体心立方晶体一样，面心立方晶体的四面体间隙也是对称的，四面体的间隙半径 r 约为0.225原子半径，可以看出较八面体间隙明显要小。

根据能量计算表明，在面心立方晶体中自间隙原子的稳定位置并不如图1-5(a)所示的在八面体间隙的中心，而是按图1-5(b)所示的组态。也就是说原来在体心位置的间隙原子A要把原来在面心上的原子B沿(100)方向挤开一些。这种组态能量稍低一些，称为对分组态，因为有两个原子共有—个晶格位置。同样也有(110)型和(111)型对分间隙原子。



(a) 八面体间隙位置；(b) 对分组态

图1-5 面心立方晶体中的对分组态间隙原子

间隙原子还可以有第三种形式即珠链组态，如图1-6所示。可以看出沿(110)密排方向有 $(n+1)$ 个原子挤在 n 个原子位置上。间隙原子以这种方式组态可使点阵畸变减小。以高速中子辐照铜就有可能出现这种情况。

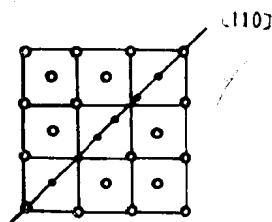


图1-6 面心立方晶体中间隙原子的珠链组态

密排六方晶体也有八面体间隙和四面体间隙，与面心立方晶体相比两种晶体结构的八面体和四