位错理论基础

赵敬世 编著

国防工业出版社

前　言

本书是在前几年讲授关于位错理论课程的讲义基础上写成的。该讲义曾以铅印本在航空院校内使用，并承蒙一些部外院校的金属材料与热处理等专业用作参考教材。这次，作者是在一些同志的鼓励下，对原讲义进行了若干修改和补充后使其问世的。

位错理论自本世纪三十年代诞生起，经过许多学者的研究和发展，其内容已经十分丰富，成为了解结晶固体材料，尤其是金属材料的物理、化学和力学性质的重要基础。在国外，陆续出版了许多教科书和专门著作；许多专业的教学计划中都将其列为一门课程。但是在国内却因多种原因，这方面的书籍相当缺乏。虽有一些译著，内容不是过于专深，就是过于浅显，似乎还没有一本适合工科院校使用的教材。作者写作本书的动机，主要是有鉴于此的。根据作者的认识，本书试图兼顾普及与提高两个方面，使读者中能包括对位错理论知之极少的人，又包括对位错的几何学已有一定了解的人。也就是说，本书的内容既包含位错理论的最简单和最基本的部分，又包含比较深入的部分。希望读者通过本书能够对位错理论及其应用有一个相当完整的认识。不过，位错是一种微观的晶体缺陷，其研究方法无论是理论的还是实验的，都很不简单，也不直观。因此，一方面作者写作时力求深入浅出，并对一些较复杂的数学问题给出相当详细的推导；另一方面希望读者具有一定的金属学、数学和力学（包括弹性力学）的知识，否则阅读本书（至少是其中一部分）可能还是相当困难的。限于作者本身的水平，书中难免存在不妥之处，尚请读者指正。

写作过程中，曾经参考了许多文献资料，并选用了其中的不少图片和数据，不克一一列举，在此谨向有关人士一并表示谢意。张人佶博士审阅了书稿，提出了许多宝贵意见，谨向他以及所有给予帮助的同志致谢。

目　录

第一章　绪论 …… 1
§1-1　完整晶体的理论屈服强度 …… 1
§1-2　位错概念的引进 …… 2
§1-3　位错理论的发展概况 …… 3
第二章　晶体缺陷概述 …… 5
§2-1　完整晶体 …… 5
§2-2　点缺陷 …… 9
§2-3　面缺陷 …… 11
第三章　位错的基本性质 …… 13
§3-1　位错的两种基本类型 …… 13
§3-2　位错的伯格斯矢量 …… 14
§3-3　晶体中的位错的普遍定义 …… 15
§3-4　刃型位错及其运动 …… 16
§3-5　螺型位错及其运动 …… 19
§3-6　混合位错及其运动 …… 23
§3-7　位错的密度与滑移的宏观应变量 …… 24
第四章　位错的观察 …… 26
§4-1　蚀坑法 …… 26
§4-2　缀饰法 …… 27
§4-3　电子显微镜法 …… 28
§4-4　X射线衍射法 …… 32
§4-5　场离子显微镜法 …… 33
§4-6　计算机模拟 …… 33
第五章　位错的弹性性质 …… 35
§5-1　引言 …… 35
§5-2　直线状位错的应力场 …… 35
§5-3　位错的弹性应变能 …… 41
§5-4　位错的线张力与向心恢复力 …… 43
§5-5　作用在位错上的力的一般公式 …… 45
§5-6　两个平行的直线位错之间的交互作用力 …… 47
§5-7　互相垂直的位错线间的作用力 …… 50
§5-8　位错的塞积 …… 52
§5-9　曲线状位错弹性问题简介 …… 60
第六章　位错的起源、增殖和割阶 …… 65
§6-1　位错的起源 …… 65
§6-2　弗兰克-瑞德位错增殖机制——L形平面源 …… 67
§6-3　回转缝线与U形平面源 …… 68

§6-4 交滑移 ……70
§6-5 L形和U形攀移机制 ……70
§6-6 螺旋线位错的形成机制 ……71
§6-7 位错线交截与割阶 ……72
第七章 实际晶体中的位错 ……77
§7-1 引言 ……77
§7-2 汤普森四面体 ……77
§7-3 密排晶体结构中的原子堆垛层次 ……79
§7-4 堆垛次序符号 ……81
§7-5 面心立方晶体中的堆垛层错 ……81
§7-6 $\vec{t}$矢量，$\vec{f}$矢量和$\vec{n}$矢量 ……82
§7-7 面心立方晶体中的不全位错 ……83
§7-8 不全位错的矢量和不全位错的运动 ……86
§7-9 位错反应的条件 ……88
§7-10 面心立方晶体中的扩展位错 ……90
§7-11 面角位错、合成位错与层错四面体 ……93
§7-12 密排六方晶体中的不全位错 ……98
§7-13 体心立方晶体中的位错 ……104
§7-14 超结构中的位错 ……107
§7-15 非金属晶体中的位错 ……109
第八章 位错的点阵模型 ……112
§8-1 派耳斯-纳巴罗（Nabarro）模型的基本概念与基本方程 ……112
§8-2 非正弦作用力时派-纳模型的修正 ……117
§8-3 位错的能量与派-纳力 ……118
第九章 位错滑移的动力学 ……125
§9-1 运动位错的应力场及位错运动的极限速度 ……125
§9-2 位错速率与应力的关系 ……128
§9-3 塑性变形的热激活过程 ……130
§9-4 位错运动速率方程 ……134
§9-5 m^*的测量方法 ……136
第十章 位错理论的若干应用 ……149
§10-1 位错与溶质原子的交互作用 ……149
§10-2 第二相质点强化 ……148
§10-3 晶粒间界 ……153
§10-4 加工硬化 ……166
§10-5 位错与回复和再结晶 ……175
§10-6 蠕变 ……179
§10-7 疲劳 ……193
§10-8 断裂 ……198
主要参考文献 ……209

第一章 绪 论

§1-1 完整晶体的理论屈服强度

我们已经知道，金属和许多非金属固体都是结晶体；也就是其组成原子在空间中呈周期性的规则排列。实际的原子排列情况称为晶体结构。绝大多数金属的晶体结构都比较简单，为体心立方、面心立方和密排六方；相反，合金和非金属固体的结构则往往相当复杂。所谓完整晶体指的是其原子严格按照空间点阵位置排列而成的晶体。例如，简单立方晶体就是立方晶胞的八个阵点完全被原子占满，其他地方则没有原子。整个晶体是由这种晶胞在空间堆叠而成。因此，完整晶体就是无缺陷的单晶体。

1926年，弗兰克尔（Френкель）估算了完整晶体的屈服强度。设有一块简单正方晶体（图1-1(a)）受到外力的作用，由于它处在完整的状态，因而可以用任意两行相邻原子在外力作用下的行为来代表（图1-1(b)）。这两行原子之间的相互作用力有两种：（1）每一行上的原子间的相互作用力，这与两行原子在图示外力作用下的位移无关；（2）两行原子之间的作用力，这种作用力才是抵抗外力的。由于这两行原子处在未受力状态和外力迫使其位移一个原子间距之后的状态均是平衡状态，所以不难想象两行原子之间的作用力和迫使其作相对位移的外力都是周期性的。为更清楚地理解在外力作用下的原子位移情况，可以取其中若干原子来讨论。图1-2中的A、B、C、D四个原子

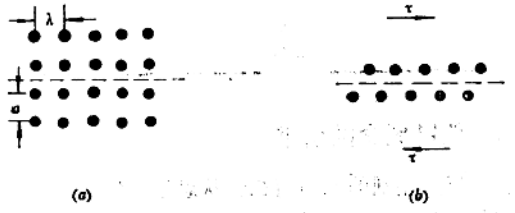

图1-1 完整的简单正方晶体投影及其受力后的变形

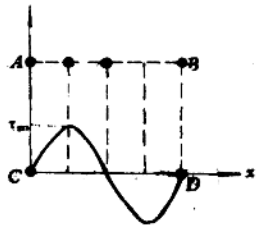

图1-2 原子位移与应力的关系

分处两行。A原子在未受到外力时与C对应，经外力作用后，移至另一平衡位置，即B的位置而与D对应。B则依次移动一个位置。在A受力开始移动时，必然受到C的吸引力的对抗（与A同行的原子的遭遇也是如此），且随着位移的增加，所需外力也应增加。但当A到达C与D的中间位置时，由于C和D的共同作用，不需外力也应能停留不动。这样分析的结论是，在A处于C、D间的1/4位置时，需要的外力最大。进而言之，我们可以认为这种周期性的力是正弦波形，而屈服应力亦即使晶体发生塑性变形的应力正好和周期性力的极大值对应。上述分析，用数学式子表示时就成为

$$\tau = \tau_m \sin \frac{2\pi x}{\lambda},$$

在原点附近，利用$\sin\theta \approx \theta$的性质，上式可以写成

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

$$\tau \approx \tau_m \frac{2\pi x}{\lambda}。$$

如果认为晶体在塑性变形前的应力和应变关系恒可用胡克定律表示，则

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

式中G为晶体的切变模量，a为两行原子的距离。从上面二式可得到

$$\tau_m = \frac{G\lambda}{2\pi a}。$$

在晶体中，设$a \approx \lambda$是合理的，故上式成为

$$\tau_m \approx \frac{G}{2\pi}。$$

一般工程上用的金属的切变模量G约为$10^4 \sim 10^5 MN/m^2$，除以2π仍然是一个很大的数值；但实际测得的一般金属单晶体的屈服强度却只有1 MN/m^2左右或更低，只是理论值的极少一部分！即使考虑到得出上述理论值的假设不尽正确（例如有人修正理论值到$G/10 \sim G/30$），理论值与实际值之间的巨大差异依然存在。这种情况在表1-1中可以进一步清楚看出。许多科学工作者曾致力于探讨这个问题，并导致了解释这种矛盾现象的晶体中的位错理论的产生。

表1-1 理论与实际屈服强度的比较

金 属	切变模量G (MN/m^2)	理论τ_m (MN/m^2)	实际τ_m (MN/m^2)
Al	24400	3870	0.786
Ag	25000	3980	0.372
Cu	40700	6480	0.490
α-Fe	~ 68950	~ 10960	2.750
Mg	16400	2630	0.393

§1-2 位错概念的引进

晶体理论强度与实际强度之间存在巨大差别的原因何在？从思维的发展来看，人们比较容易想到，既然理论强度是假定晶体是完整晶体时所得到的，那么，如果实际上晶体是有缺陷的话，强度自然就会降低了。另外，理论强度是假定晶体发生变形时原子的移动是整体地同时进行的，如果原子能够以某种方式逐步移动，则令其位移所需的外力就会更小。但是，科学地解决这个问题，却并不容易。在前人大量工作的基础上，于1934年由泰勒（Taylor）、奥罗万（Orowan）、波朗依（Polanyi）三人分别提出了关于这种特殊形式的缺陷的模型，即位错模型。

位错理论的核心是认为实际的晶体中存在一种叫做位错的缺陷，此种缺陷在外加应力很小时就能使晶体产生塑性变形。这种缺陷是与点缺陷（如空位）和面缺陷（如晶界）等不同、但又有联系的缺陷，它决定性地影响着实际晶体的屈服强度。没有缺陷尤其是没有位错的晶体，其屈服强度应当为理论值。让我们先用不严格的方法说明这种理论。在图1-3中左数的第一个图表示一个完整晶体；而左数的第二图则是一个有缺陷的晶体，缺陷是CD关界的上下两部分差了一个原子，其余部分则仍旧是完整的。这种不完

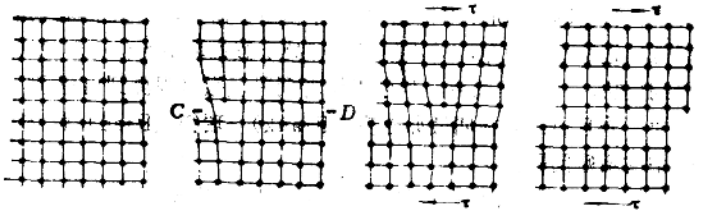

图1-3 位错的存在与运动使晶体易于产生塑性变形

整性或缺陷，就称之为位错（Dislocation）（准确地说这个位错应称为刃型位错，这在以后将要仔细论述）。在没有外力时，这个不完整晶体并不会发生变化（不考虑温度作用）；但是，只要在其上下两个面上施加很小的切应力，在绝大部分原子不发生明显运动的情况下，处于位错部分的原子，由于本来就处于非平衡位置，只要很小的切应力便会使其移至平衡位置。而且完成这个动作仅仅要求附近另一小部分原子脱离正常位置，所以也不困难。在这个小的切应力继续存在的条件下，位错从一个位置移到另一个位置直至移动到晶体表面而消失。于是晶体也发生了相当于一个原子间距的塑性变形。

不难看出，位错这种缺陷在图1-3中的表现是上、下两行相比，上行多了一个原子。在实际的三维晶体中则是上、下两个面相比，上边的面上多了一条由原子组成的"线"。若以晶体的上、下两部分相比，则上部多了一个"平面"（原子平面）。位错与点缺陷的不同要予以注意，它并不是一系列填隙原子，后者存在于晶体中及移动到晶体之外，并不能造成一个原子间距的塑性变形。可以进一步设想，当晶体中存在许多位错时，它们在不大的外力作用下运动就能产生宏观上可见的塑性变形。另外，测试由科学家制造的"没有"位错的晶体时，其屈服强度确实与理论屈服强度一样大，从另一方面证明了位错的作用。

§1-3 位错理论的发展概况

晶体中的位错理论虽然迟至三十年代才出现，但位错概念却早在本世纪初即已由沃特拉（Volterra）等引入各向同性连续介质的弹性力学中。并且，在晶体中的位错理论的研究工作中，直到现在，还应用着弹性力学的一些成果。

最早把滑移位错的形式引进晶体中作为一种特殊缺陷是在1928年。但在发现X射线以后就曾经发觉实际晶体的反射与预期的完整晶体的反射差别很大，于是提出了实际晶体由嵌镶块组成的理论。最终地明确提出刃型位错图像是在1934年。特别是泰勒明白地把各向同性介质中的沃特拉位错引入晶格中，与晶体的滑移变形联系起来，对奠定位错理论基础作出了贡献。

1938年弗兰克尔等指出，在外力作用下晶体中的位错的运动速度，不能超过声波在晶体中的速度。1939年伯格斯（Burgers）指出位错强度（现在称为伯格斯矢量或伯氏矢量）在研究位错中的重要性，并引入螺型位错的概念，与前面提到的刃型位错一起，构成了位错的两种基本类型。

后来，派耳斯（Peierls）提出了简单正方晶体中形成刃型位错的原子相对位移的

数学模型。这一工作的意义，在于突破了一般弹性力学的范畴，初步处理了位错中心的应力与应变关系。科垂耳（Cottrell）在 1947 年提出了研究溶质原子与位错交互作用的报告，以解释低碳钢的屈服现象，首次使得纯粹处于假说境地的位错理论在解释金属的力学行为中得到成功。1950 年前后，科学工作者利用显微镜观测到由螺型位错源生长出来的晶体表面；并且通过现在叫做弗兰克（Frank）-瑞德（Read）源的机制，解释了位错在晶体中的增殖问题。

到 1956 年时，一系列理论问题已经逐渐探索清楚，但在实验方面却还一直未能从原子排列上证实位错的存在。不难明白，如果没有实验的证据，位错理论就不能被认为是完全可靠的。门特尔（Menter）当时用电子显微镜在铂酞花青晶体(Platinum-Phthalocyanine)中第一次观察到位错的存在。同年，用电子显微镜观察金属晶体中的位错的实验也获得进展。此后，以电子显微镜为主导手段的研究位错的实验方法，大大地推动了位错的研究工作。实验不仅证实了理论方面的许多结果，而且推动了理论工作。近年来，由于电子显微镜技术的迅速发展，以及电子计算机的应用，位错的研究又取得了很大进展。总之，经过五十年的发展，位错理论和实践都已获得辉煌的成就。

以往，关于晶体力学强度的理论，都是宏观的或半微观的，数学表达上则是半经验的，能够系统地说明力学性质的理论可以说还不存在。唯有位错理论已经和正在成功地解释诸如屈服点、加工硬化、弥散硬化、蠕变和断裂等一系列重要问题，从而对工程现象的本质的认识起了很大的作用。而且从发展角度来看，相信对于晶体力学行为的各个方面的解释与改进，位错这个原子尺度的微观机制必将发挥更大的作用。

第二章　晶体缺陷概述

§2-1　完 整 晶 体

从微观角度分析，材料在通常所知的固态下可以分为晶态与非晶态两大类。晶态材料包括金属、合金和许多无机非金属材料，非晶态材料包括玻璃等材料。同一种物质可因不同条件而处于不同状态。

晶体中的原子排列可用三维空间网格表示。这种网格的交叉点就是原子的平衡位置。每一个基本的平行六面体称为晶胞。每一个完整晶体就由这种晶胞堆积而成（见图2-1）。按照晶体学的分类，晶体依晶胞的轴的长短比及其夹角的大小不同，分为七个晶系，十四种点阵。绝大部分纯金属具有简单的点阵结构，即面心立方、体心立方和密排六方三种。这是因为把金属原子结合在一起的金属键的方向性很小，也没有饱和性，金属原子（离子）间的吸引力使金属形成晶体时在各个方向上都等同地堆积起来，并且趋向原子间的紧密排列，于是金属的晶体结构就既简单而又种类不多了。下面对此做一些讨论。

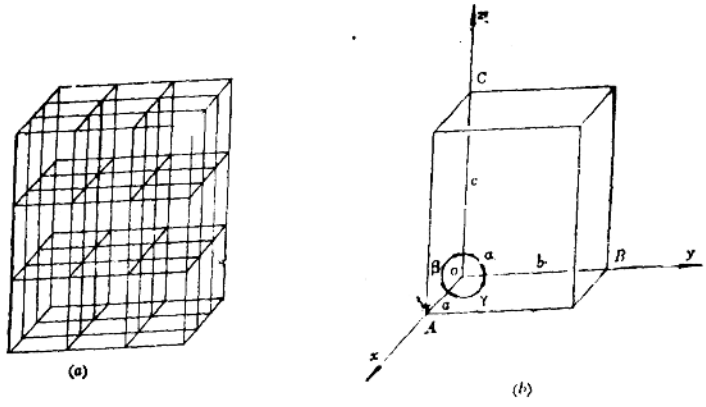

图　2-1

（a）空间点阵，（b）晶胞。

紧密相连的金属原子，可以看成是紧密相连的球体。在平面上就成为许多大小相同的彼此相切的圆。因此，金属固体的一维排列方式只有一种。在二维即平面上的原子排列如果仍遵循紧密相切的原则，排列方式也只有一种。考虑到次紧密的排列方式，则还可以有一种。前一种就是正三角形（图2-2（b）），或正六角形（图2-2（c）），后一种就是正方形（图2-2（a））。这两种图形如此简单，却概括了金属晶体的基本平面结构。在构成晶体的时候，通常总有一定的厚度，因此原子在三维空间中的排列情况

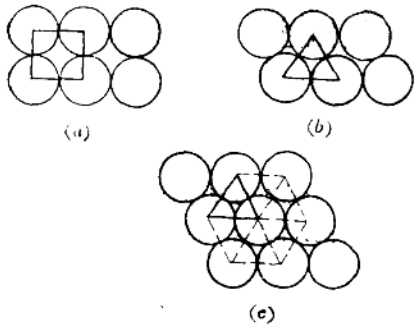

图2-2 二种排列方式

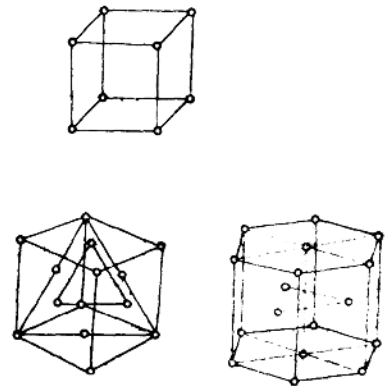

图2-3 简单立方、密排六方和面心立方点阵

的意义重大。在二维的基础上形成三维物体时，如果是金属，由于紧密排列，可能的方式仍然不多。在正方形的基础上叠加一层就形成三维的简单立方结构。在六角形的基础上形成三维晶体时，常见的有两种方式。一种是密排六方点阵，即第二层的原子堆积在第一层的三个原子形成的空隙中（与三者相切），第三层又与第一层对准，构成所谓 *ABABAB* 结构，这就是密排六方点阵。另一种是第三层仍不与第一层对准，而是第四层才与第一层对准，构成所谓 *ABCABC* 结构，也就是面心立方点阵。这几种结构都表示在图 2-3 中。至于体心立方点阵的形成，则稍有特点。它可以看成是基础的二维平面上的四个原子稍微脱离接触，第二层的一个原子放在与这四个原子相切的位置，第三层又与第二层相切且与第一层对准，而且整个晶胞保持为立方形，如图 2-4 所示。

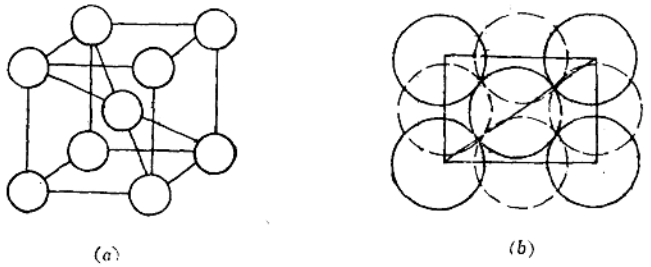

图2-4 体心立方晶胞（*a*）及其（110）平面（*b*）

综上所述，各种完整金属晶体就是分别由这几种晶胞重叠而成的。其它的晶体的结构有的也比较简单，有的则比较复杂。多数金属只有一种晶体结构，少数金属可能因条件不同而具有二种或更多种结构。

因为原子呈球状，所以无论怎样紧密排列也都不可能把空间充满，总会留下间隙。表 2-1 计算出几种晶体的体致密度，即空间被原子占满的程度，以及每一个原子周围有多少原子与其相切的情况——配位数。显然，体致密度越大，间隙就越小。由于原子排列的规则性，间隙在晶体中的排列也是有规则的。间隙虽小，作用却不可忽视。可以设

表2-1 几种晶体结构的体致密度和配位数

晶体结构	体致密度	配位数
简单立方	0.5236	6
体心立方	0.6802	8
面心立方	0.7405	12
密排六方	0.7405	12

想，如果没有间隙，晶体的许多现有特性将会改观。例如碳原子就是存在于钢铁中的铁原子间隙中，从而引起钢铁性能发生很大变化。金属晶体中的原子排列方式不多，因此，其中的间隙种类也不多。在面心立方与密排六方结构中存在两种间隙：四面体间隙与八面体间隙。体心立方结构中也存在这两种间隙。间隙也有配位数的概念，仍然定义为其周围最近邻的原子数。例如平面上有三个圆相切，其中的间隙的配位数为3，可称为三角形间隙（图2-5）。从金属学的角度看，最感兴趣的是这个间隙能容纳多大尺寸

图2-5 二维密排中的间隙

的原子。很容易算出其 $r=0.155R$，其中 r 和 R 分别为间隙球体与大球体的半径。通过计算，密排结构和体心立方结构中的间隙列于表2-2中。但应指出，这些间隙在每种结

表2-2 面心立方、密排六方和体心立方中的间隙

晶体结构	间隙类型	间隙配位数	r 的最大值
面心立方与密排六方	四面体	4	$0.225R$
面心立方与密排六方	八面体	6	$0.414R$
体心立方	四面体	4	$0.291R$
体心立方	八面体	6	$0.154R$

构中的具体位置却各有特点。密堆积的面心立方与密排六方中的四面体间隙和八面体间隙如图2-6所示。四面体间隙周围的四个原子中心连接起来构成一个正四面体。同样，把八面体间隙周围的六个原子中心连接起来也会形成一个正八面体。间隙本身并非四面体或八面体，而是处于多面体中心的由相应的球面部分组成的小孔洞。还应当注意间隙与空位的概念的区别，空位是点阵的阵点上没有原子而出现的孔洞。例如面心立方结构中的空位的配位数是12。

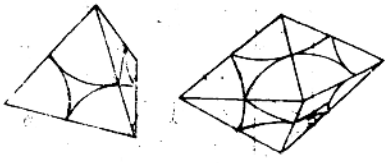

图2-6 密堆积原子间的两种间隙

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

面心立方晶胞中围绕着四面体间隙的两个四面体的位置示于图 2-7。相对于原子 A 来说，上部的间隙中心位于坐标为 $-1/4$、$-1/4$、$-1/4$ 处，因此处在立方体的对角线上。根据面心立方晶体的四次转动对称轴（即垂直轴）来计算，上部的间隙在晶胞中共有四个。同理，下部的间隙也有四个。即每个晶胞共有八个四面体间隙。

面心立方晶体中有一个恰好位于晶胞中心的八面体间隙，还有一种间隙位于图中晶胞的一条棱边中心处（图 2-8）。仍然运用四次转动对称轴的概念，知道十二条棱边上均各有一个八面体间隙。考虑到这些八面体间隙每一个都不仅属于本晶胞，而是与周围晶胞所共有，可以算出每个面心立方晶胞中共有四个八面体间隙。从图中还可看出，两

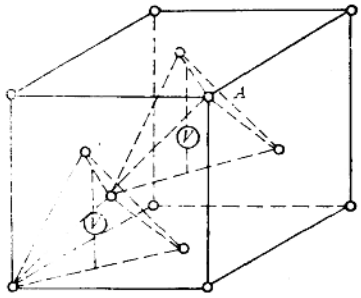

图2-7　面心立方晶胞中的四面体间隙示例

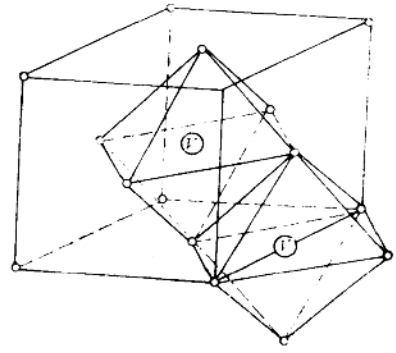

图2-8　面心立方晶胞中的八面体间隙示例

个八面体间隙之间夹着的正是一个四面体间隙。把所有八面体都画出来就发现所有四面体间隙都处于八面体之间，以致不再剩下自由空间。这表示整个空间可用棱长相等的正四面体和正八面体堆满。

密排六方结构中虽然也有与面心立方结构中相同形状的正多面体，但其排列却不一样。图 2-9 绘出其中三个四面体间隙的例子。利用三次对称轴的关系，可知晶胞中含有八个完整的四面体间隙。其中二个在晶胞中心：一个正放，一个倒立，并以一个面相接触。至于密排六方中的八面体间隙，则也不能在一个晶胞内画完全。图 2-10 是其位置

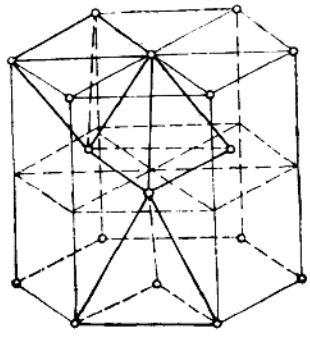

图2-9　密排六方晶胞中的三个四面体间隙示例

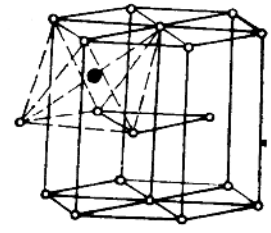

图2-10　密排六方晶胞中的八面体间隙示例

之一。与面心立方一样，整个空间也能由这两种多面体充满。对于一个晶胞而言，充满它共需十二个四面体，六个八面体。

体心立方结构中也存在的四面体与八面体间隙不是正多面体。图 2-11 所示为其中

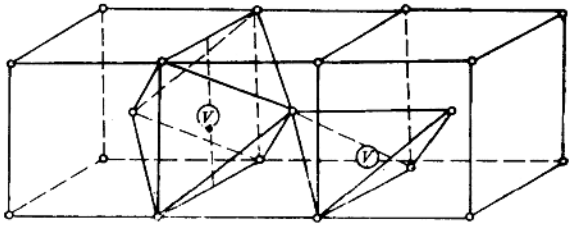

图2-11　体心立方中的八面体和四面体间隙

的例子。从图中可见，有的边长为点阵常数 a，有的边长是 $\sqrt{3}\,a/2$。更有意思的是体心立方中的四面体实际上包括在八面体之中。那末划分它们有什么必要呢？问题在于从间隙尺寸数字看，四面体间隙反而大于八面体间隙。如果在四面体间隙中放入一个填满间隙的球，这个球就会陷在那里。除非把邻近的原子推开，这个球是不能迁移到其所属的八面体间隙中心的。实际晶体的情况复杂得多，例如，碳原子在 α-Fe 中间隙存在时，往往宁可存在于尺寸较小的八面体间隙中。从实用观点看。体心立方金属中的间隙作用更重要。因为间隙原子对体心立方金属的力学性质影响更大。造成这种情况的原因之一就是体心立方金属中的原子形成的多面体是不规则的，因而间隙原子引起的畸变是不对称的，间隙原子在各间隙之间运动时引起的畸变也是不对称的。

§2-2　点　缺　陷

实际晶体常常是不完整的，存在着多种类型的缺陷：点缺陷、线缺陷、面缺陷和体缺陷。这些缺陷使局部的原子排列不再规则并且改变了晶体的性质。本书虽然是介绍位错（即线缺陷）的，但鉴于各种缺陷之间的相互关系十分密切，所以还是对其它类型缺陷给予简略说明。

完整晶体中原子位于阵点上（有热振动），点缺陷则指某阵点上没有原子（空位缺陷），或间隙处出现了原子（间隙原子缺陷）。置换原子一般也会造成与周围原子的不完全匹配，所以也属于点缺陷。

一、空位的形成及其平衡浓度

原子在晶体中热振动的能量与原子振动的频率有关。在金属晶体中，如果忽略自由电子对于比热的影响，则其内能 U 只与原子振动有关。等容比热 $c_v=dU/dT$。根据量子力学，频率为 ν 的原子的能量为

$$U=\frac{1}{2}h\nu_0+h\nu\Big/\left(\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1\right)$$

式中 h 为普朗克常数，k 为波耳兹曼常数。第一项代表绝对零度时原子振动的能量。第二项与温度和振动频率有关。当温度很低时，$h\nu/kT$ 很大，内能和比热均很小。升温时，

频率升高，第二项贡献增大。由于每一个原子的振动与周围原子的振动相关，原子振动有不同的频率。原子振动的能量按几率分布。具有足够大的能量的原子，振幅大到一定程度，就可能脱离平衡位置，从而在晶体中形成空位。空位的数量可以用热力学定律来确定。在总原子数N很大的晶体中引入n个空位时自由能变化ΔG为

$$\Delta G \approx \Delta E - T\Delta S。$$

设ΔE_v为每个空位引起的内能变化，称为空位形成能；ΔS_v为每个空位的振动熵；ΔS_c为整个晶体的结构熵；于是

$$\Delta G \approx n\Delta E_v - T(n\Delta S_v + \Delta S_c)。$$

把形成一个空位看成从晶体内部移动一个原子到表面的过程，这个过程需要能量，因此ΔE_v是正值。振动熵代表引进空位后周围原子振动情况的变化。空位有增加周围原子振幅和减少振动频率的作用，统计力学求得

$$\Delta S_v \approx 3k\ln(\nu/\nu')，$$

ν代表初始频率，ν'代表空位周围原子的频率。因为$(\nu/\nu')>1$，故ΔS_v也是正值。至于结构熵，则统计力学认为

$$\Delta S_c = k\ln\omega$$

ω表示形成n个空位时的可能有的方式数目。根据排列组合公式，

$$\omega = N!/(N-n)!\,n!，$$

代入ΔS_c中，由于N和n都是很大数目，故可采用斯特林近似计算法：$\ln x! \approx x\ln x - x$，得到

$$\Delta S_c = -k\left(N\ln\frac{N-n}{N} + n\ln\frac{n}{N-n}\right)。$$

因为$(N-n)/N<1$，$\left(\frac{n}{N-n}\right)<1$，故$\Delta S_c$必为正值。

把这三者代入ΔG中，能够得到图2-12的情况。能量项使自由能增加，熵项使自由能减小。自由能曲线有一个最小值，代表平衡空位n_e值。令$d\Delta G/dn=0$，便可求出n_e：

$$\frac{n_e}{N} \approx \exp\left(-\frac{\Delta E_v}{kT} + \frac{\Delta S_v}{k}\right)。$$

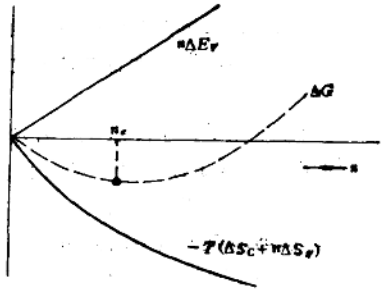

图2-12　形成空位时自由能及有关各项的变化

表2-3给出一些金属的有关数据。事实上，一般来说空位数字绝对值不小，但相对于总原子数仍然不大。取形成能为1eV，$e^{\Delta S_v/k}=0.1$，估算出n_e/N（即平衡空位浓度）：

0℃	500℃	1000℃
$10^{-18.5}$	$10^{-6.5}$	10^{-4}

即使在1000℃时，空位不过占原子数的万分之一。

上述讨论的重要意义在于：空位这种缺陷在热力学上是稳定的，反之理想的完整晶体

表2-3 一些金属的与空位有关的数据

金 属	ΔE_v (eV)	ΔS_C	$e^{\Delta S_v/k}$
Al	0.75	$2.4k$	0.11
Cu	1.1	$1.5k$	4.5
Ag	1.09	$1.5k$	4.5
Au	0.94	$1.0k$	2.7

注：k 为波耳兹曼常数。

却是不稳定的。空位数随温度升高而急剧增多，这对于热处理工艺很有意义。空位与位错形成的关系、空位与位错的交互作用等都是我们今后要讨论的内容。

在金属中还可能存在双空位（空位对）以及多空位；计算表明，双空位的数目较少。对于金属的各种性能和金属中的扩散，空位都有很大的作用。

二、平衡间隙原子浓度

采用类似计算空位的方法可以求出间隙原子的浓度表达式。设晶体具有可以进入间隙原子的间隙位置数为N，间隙原子数为n，间隙原子的形成能为ΔE_i，振动熵为ΔS_v，当$n \ll N$时，可以求出间隙原子平衡浓度

$$\frac{n}{N}=\exp\left(-\frac{\Delta E_i}{kT}+\frac{\Delta S_v}{k}\right)。$$

间隙原子的形成能要比空位形成能大，数字上约为后者的3～4倍。因此，晶体中的间隙原子是非常少的。上述讨论是针对晶体自身的间隙原子而言的，至于外来的间隙原子，在某些情况下，如碳在铁中的间隙存在，却可以较多。这是因为碳原子的尺寸较小所致。

§2-3 面 缺 陷

在讨论过点缺陷之后，我们越过线缺陷而直接讨论面缺陷，是因为线缺陷即位错已经在前面讨论过，并将在后面章节中详细介绍。面缺陷也是一种重要缺陷，它对金属和其他材料的性能有重要影响。这里仅能对面缺陷作一些扼要介绍。

在人们日常接触的金属材料中大多是多晶体材料。而且每个晶粒仍然不是完整的单晶体，它们往往由亚晶粒组成。这些晶粒的晶界与亚晶界都可以看成为一种缺陷，因为它们那里的原子排列也是不规则的。因为它们一般是二维的，所以又叫面缺陷。面缺陷还包括相与相之间的界面等。

为了描述晶界的几何关系，先讨论二维的平面点阵。图2-13(a)是两个呈一定角度θ的简单立方点阵。当二者长大汇集时，它们之间就形成了晶界。但要确定晶界的具体位置，显然还需要且仅需要知道晶界平面与两个点阵之一的某一平面之间的具体角度ϕ，因为如图中(b)所示，不同的ϕ角决定了不同的晶界。所以，为了完全确定平面上的晶界，必须确定：

（1）一个点阵与另一个点阵的相对位向θ；

（2）晶界本身相对于一个点阵的位向ϕ。

这种晶界能够用两个角度规定，所以又叫二自由度晶界。

对于三维空间晶体之间的晶界，也必须同时确定晶体间的相对位向和晶界相对于其

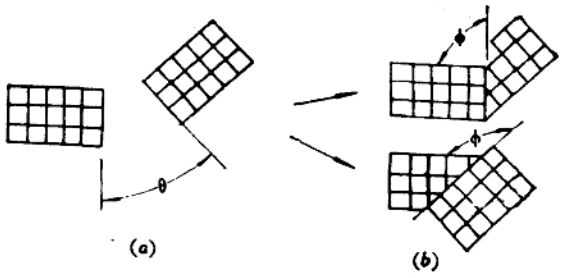

图2-13 二维点阵中的晶界

中一个晶体的位向。以图 2-14 中的晶体为例。设想将一个晶体沿 $x-z$ 平面切开，然后右半部分绕 x 轴旋转，于是造成了两个晶体。一般情况下两个晶体之间的相对位向可以绕 x、y、z 三个轴旋转而形成。也就是说，两个晶体本身的位向关系就需要三个互

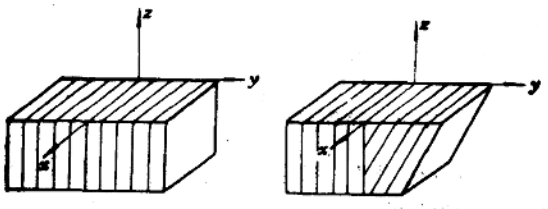

图2-14 三维点阵的晶界

相独立的角度才能确定。至于晶界本身位向的确定，可以讨论如下：图中的晶界处在 $x-z$ 平面上，通过绕 x 轴或 z 轴旋转，可以改变晶界平面；但此面却不允许绕 y 轴旋转，或者说绕 y 轴旋转会要求晶体本身位向发生变化。因此空间的晶界具有五个自由度，其中三个确定一个晶体相对于另一个晶体的位向，另外二个确定晶界本身的位向。

根据晶界的情况，晶界可以分成许多类型：如小角度晶界、大角度晶界、孪晶界等。其中，小角度晶界可以用位错描述，已经没有什么争议。大角度晶界的情况很复杂，我们将在专门章节中加以介绍。孪晶界是相邻晶粒之间的一种特殊取向所造成的。在最简单的情况下，相邻晶粒之间以孪晶界面为镜面呈镜面对映关系。此外，堆垛层错在某种意义上可以说就是两条孪晶界。在密堆积的面心立方晶体中，密排面按 *ABCABCABC*……排列，如果出现 *ABCACABC*……排列，就出现了堆垛层错。

第三章　位错的基本性质

§3-1　位错的两种基本类型

晶体中的位错有两种基本类型，一种叫刃型位错，一种叫螺型位错。前者在介绍位错概念时已经提及。从本章开始，我们先讨论简单立方晶体中的位错，这是因为简单立方晶体的结构简单，其图像易于直观表示。实际存在的晶体中，比较简单的就是纯金属晶体，要等到对简单立方晶体中的位错有了真正的认识之后，才能对它们中所存在的位错进行介绍。

设想在简单立方晶体（图 3-1(*a*)）中出现了位错（为简化图形，以后一般在图中有可能不画原子的情况下就只画晶格）。一种是刃型位错（图 3-1(*b*)），另一种是螺型位错（图 3-1(*c*)）。

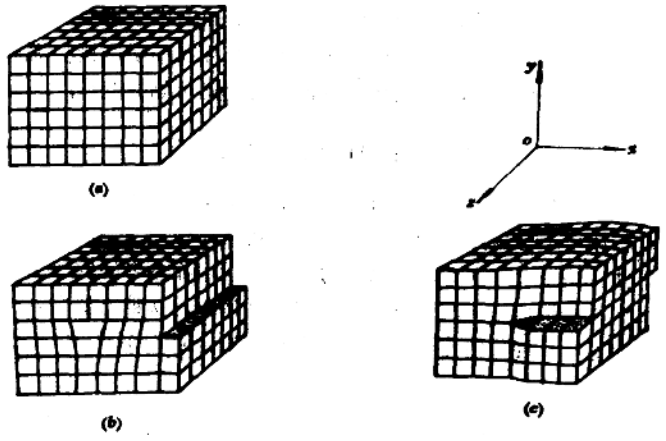

图3-1　简单立方晶体及其中的刃型与螺型位错

刃型位错的基本特点是在晶体的某一平面以上，多出了一个与之相垂直的原子面，此面也可以称之为半原子平面。产生刃型位错的方法，可以看成是自晶体的上部插入此多余的半原子平面，犹如用刀劈入晶体里面一样，而劈入的终止处如同刀刃一般。但更确切些的产生方法，则需要三种动作，即在晶体内切开某一个平面至某一位置为止（图中切开面是 *xoz* 平面）；然后让此面两侧的原子作一个原子间距的相对位移，如果相对位移的方向与 *x* 轴平行，就得到一个刃型位错；第三步则是将切开部分重新粘合。应当注意，这里所谓的切开与粘合，实际上表示的是切断与恢复晶体中的原子间的相互作用力的意思。

螺型位错与刃型位错不同之处在于当晶体内某一平面被切开以后，此面两侧的相对

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com