

## 第二章第三节

# 晶 界 的 能 量

《材料科学基础》第七章第三节

---

# 一、小角度晶界的能量

是晶界上所有位错的总能量。

对倾转晶界，界面能是一系列同号位错产生的位错应变能。单位长度刃位错能量为：

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{D}{b} + E_c$$

式中  $G$  剪切模量， $b$  柏氏矢量， $\nu$  泊松比， $E_c$  位错中心能量， $D$  位错间距。

设同号刃位错间不存在滑移矢量方向上的交互作用，每个位错上方是压应力，下方是拉应力，在直径为  $D$  的圆周外，位错的应力场彼此抵消，即位错应力场的极限距离为  $D$ 。对应单位长度上晶界的位错密度为  $1/D$  ( $= \theta / b$ )，

则晶界单位面积界面能  $\gamma_{gb}$  与位错能量的关系:

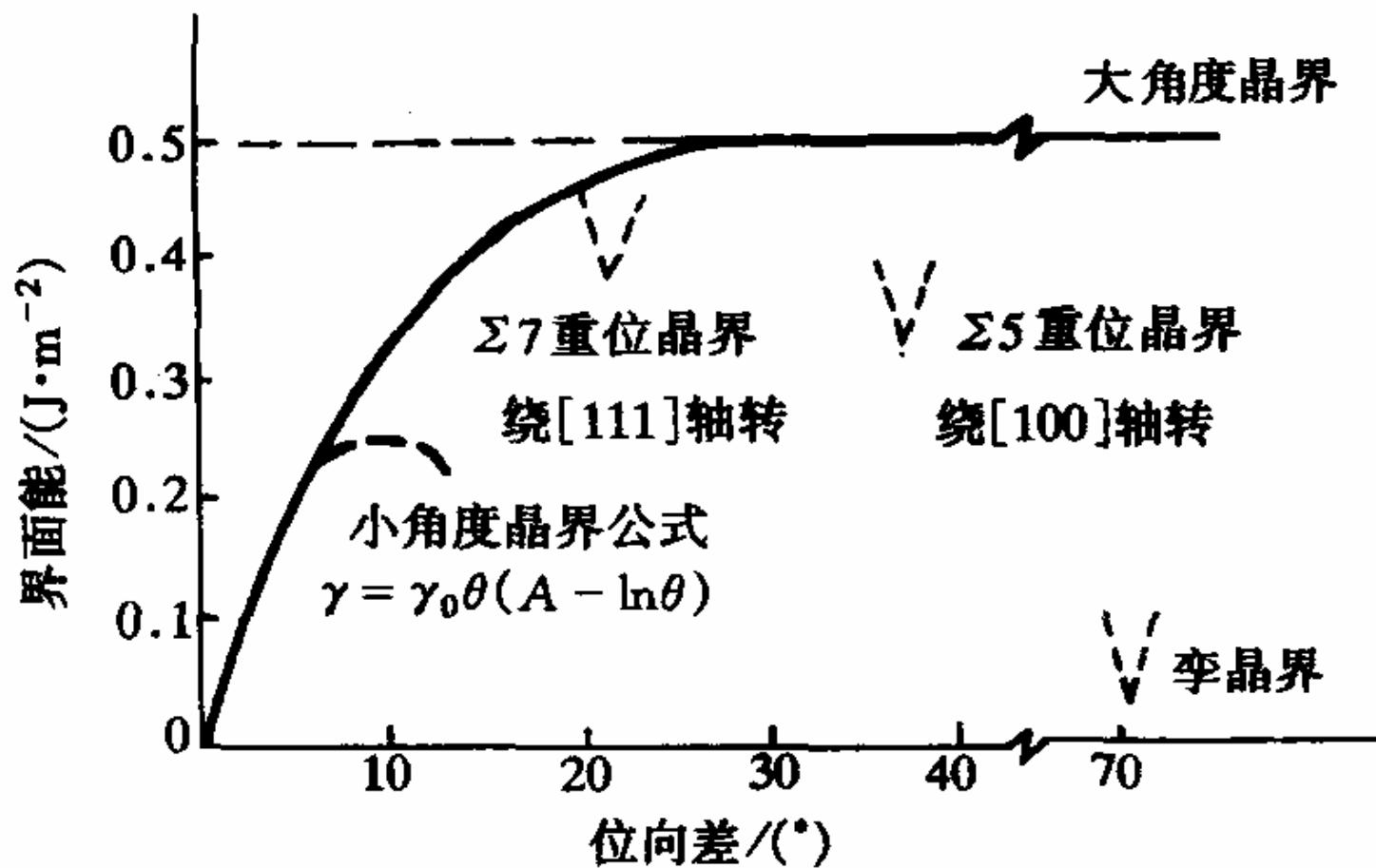
$$\gamma_{gb} = E \frac{1}{D} = \left[ \frac{Gb\theta}{4\pi(1-\nu)} \right] \ln\left(\frac{1}{\theta}\right) + \frac{E_c\theta}{b}$$

或写成  $\gamma_{gb} = \gamma_0 \theta (A - \ln \theta)$

式中:  $\gamma_0 = Gb / 4\pi(1-\nu)$   $A = 4\pi(1-\nu)E_c / Gb^2 = E_c / (\gamma_0 b)$

界面能与取向角的关系:

$$\gamma_{gb} / (\gamma_{gb})_m = \frac{\theta}{\theta_m} \left( 1 - \ln \frac{\theta}{\theta_m} \right)$$



界面能与位相差的关系

## 二、大角度晶界的能量

### 1. 任意大角度晶界

通常具有比较松散的结构，因而具有较高的能量，且基本上不随位向差而变化。

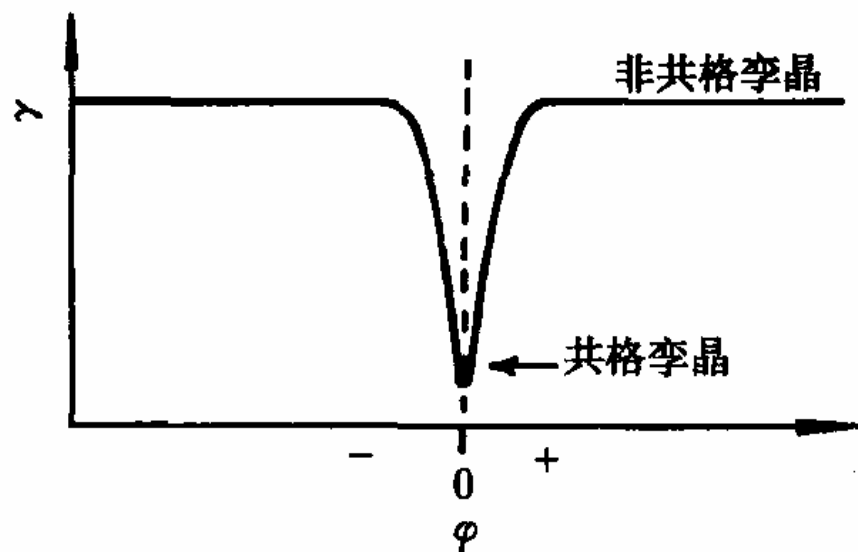
### 2. 特殊大角度晶界能

#### (1) 共格孪晶界:

是一种有孪晶关系的对称倾转晶界。共格原子基本处于无畸变的状态，共格孪晶界的能量非常低。

## (2) 非共格孪晶界:

非共格态导致界面能较高。孪晶界面能对界面取向敏感，有如图的函数关系。



孪晶界能和晶界取向的关系

## (3) 高密度重合位置的重位晶界

能量显著降低