

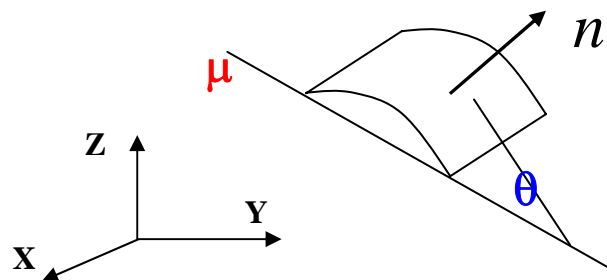
第二章第二节

晶 界 结 构

《材料科学基础》 第七章第二节

一、界面的5个自由度

空间自由度是描述晶界两个相邻晶粒的相对取向。



确定两个晶粒的相对取向最多需要5个自由度：

--首先考虑坐标中初始位向一致的两个晶粒，沿坐标的某一旋转轴 u 互相旋转一个角度 θ 的情况， u 轴取向需要2个变量（ u 的3个方向余弦中的2个）。此时 u 和 θ 三个自由度决定了两晶粒的相对取向。

--对位向不一致的两个晶粒，晶界相对于其中一个晶体的位向可用该晶界面的法线来描述，若晶界面的法线为 n ,

则 n 在坐标中的方向确定又需要2个自由度。

二、小角度晶界

小角晶界：两晶粒间的位向差小于 10° ；

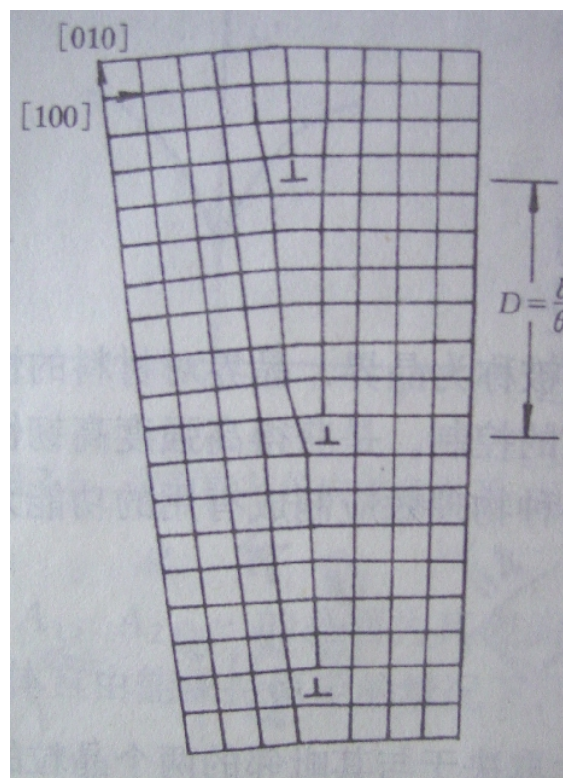
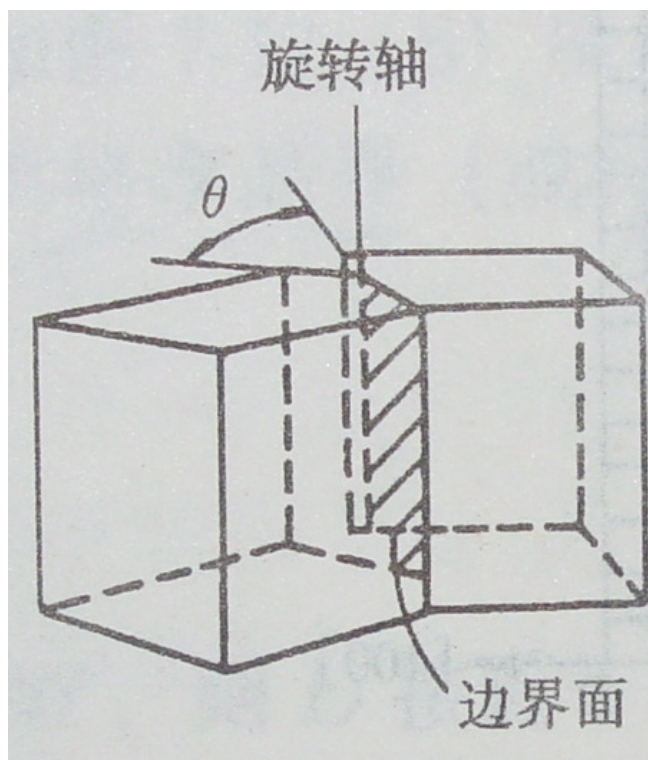
大角晶界：位向差超过 10° 。

小角晶界又可分为：**倾转晶界**（一系列刃位错构成）

扭转晶界（螺位错构成）

1. 对称倾转晶界

对称倾转晶界可以看作是取向一致的两个晶体相互倾转 $\theta/2$ 角形成的界面。



对称倾转晶界的位错模型

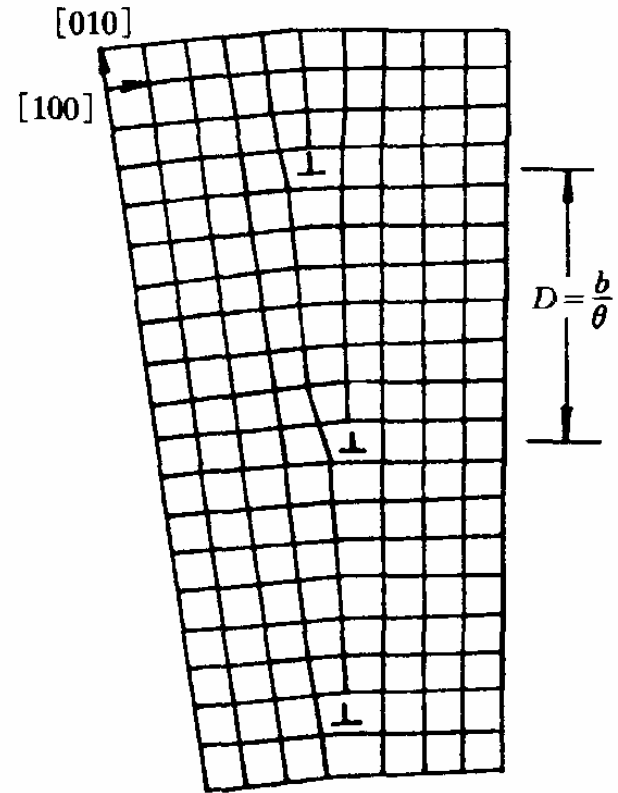
位错间距 D 与柏氏矢量 b 的关系:

$$D = b / (2 \sin(\theta/2))$$

当 θ 很小, $\sin(\theta/2) \approx \theta/2$,
于是:

$$D = b / \theta$$

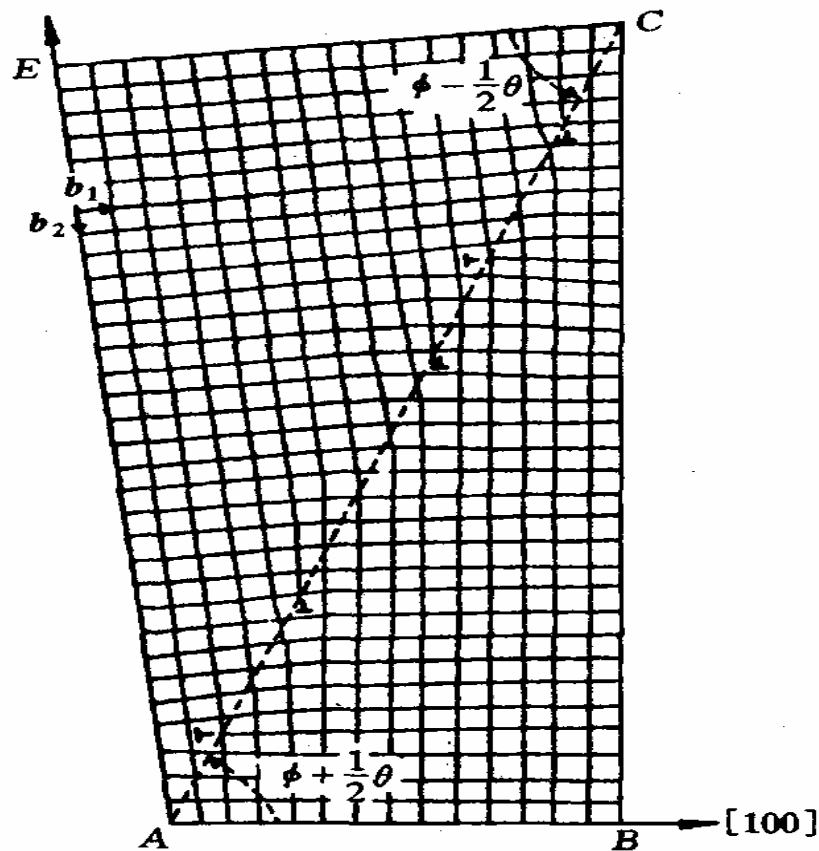
上式看出, θ 较大时 D 就会变得很小, 致使位错中心发生重叠, 因此该模型仅适用小角晶界。



对称倾转晶界的位错模型

2. 不对称倾转晶界

非对称倾转晶界，如任意的 $(h\ k\ 0)$ 面，需要用柏氏矢量分别为 $[100]$ 及 $[010]$ 的两组平行的刃位错来表示。



不对称倾转晶界的位错模型
(简单立方晶格)

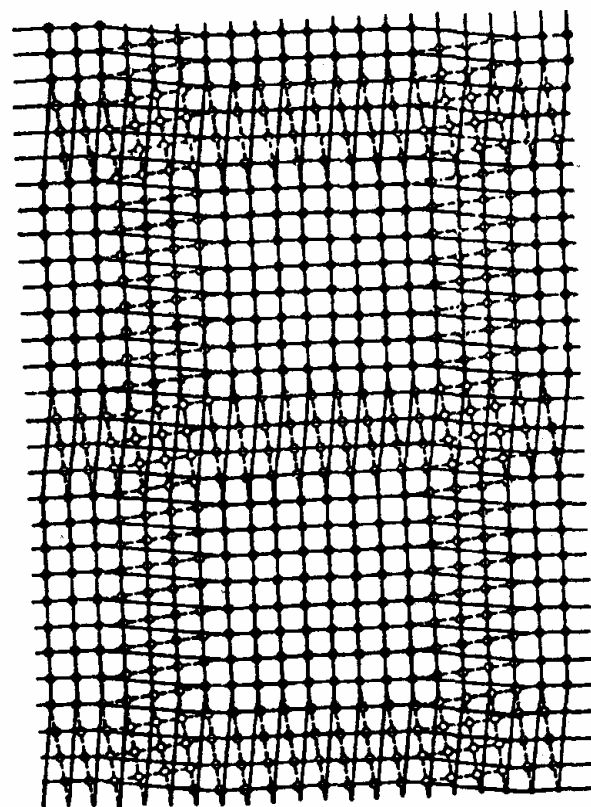
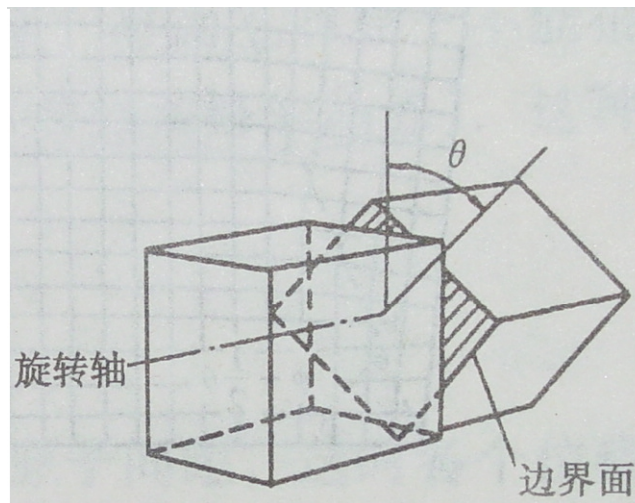
3. 扭转晶界

旋转轴垂直于晶界平面，即 $u \parallel n$ ，形成扭转晶界。

晶界两侧的原子一部分重合，另一部分不重合形成螺位错。整个扭转晶界是由两组交叉的螺位错构成的网格，一组平行 $[100]$ ，另一组平行于 $[010]$ ，网格间距 D 满足：

$$D = b / \theta$$

倾转晶界和扭转晶界是小角晶界模型的两种简单形式。对一般晶界，旋转轴和晶界可以有任意的取向，需要5个自由度才能将晶界完全确定。



扭转晶界的位错模型

三、大角度晶界

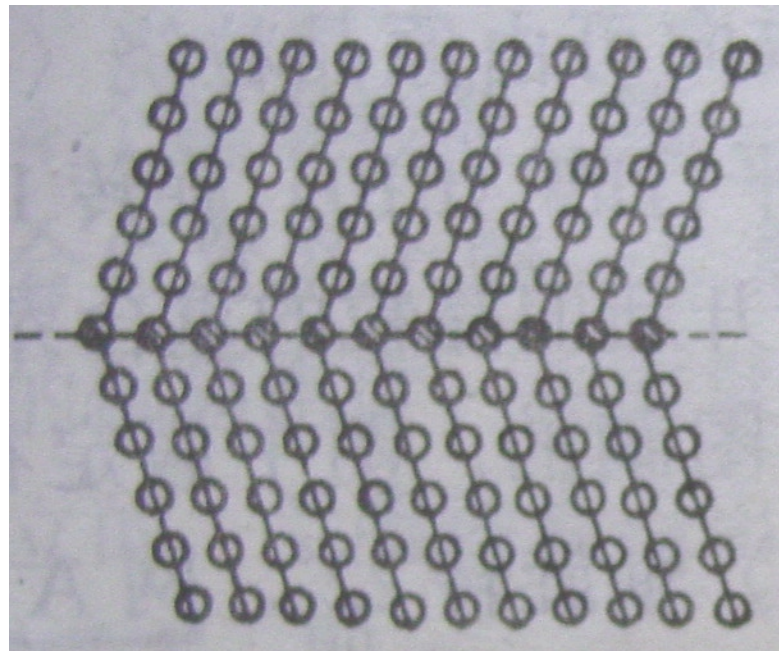
定义：晶粒之间的位向差 $>10^\circ$

特殊大角度晶界：

特殊大角度晶界的能量比任意大角度晶界低，即在某些特殊取向角下，晶界上相邻的点阵匹配的较好，表现出较低的能态。

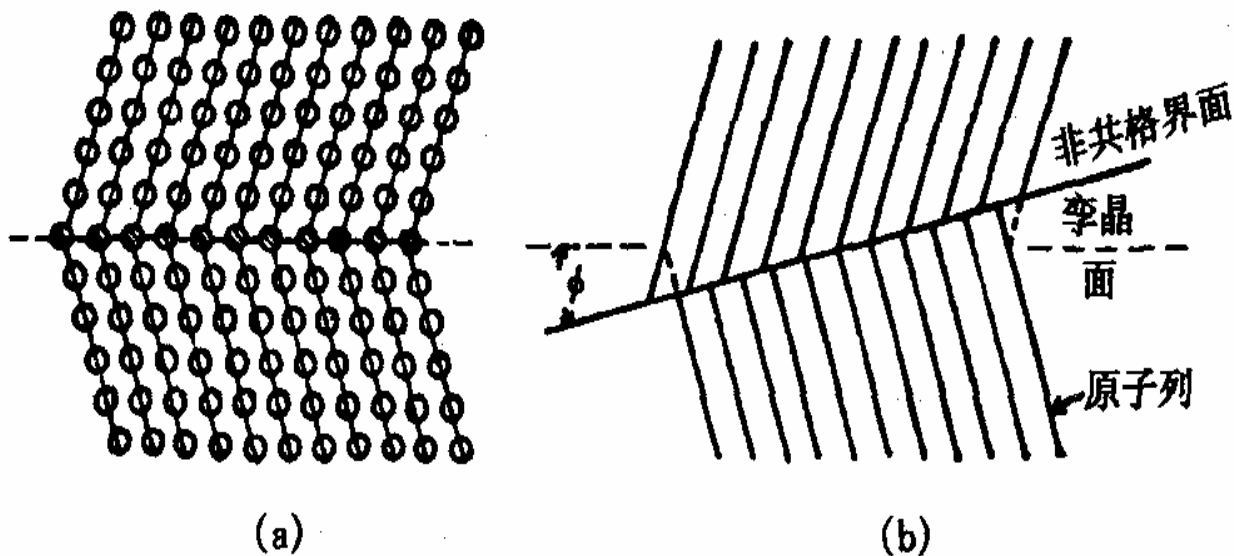
1. 共格界面

为最简单的特殊大角晶界。界面的原子恰位于两晶体的晶格结点上，形成共格晶界。即界面处原子的阵点位置正好重合。



当两晶粒取向互为对称时，形成**共格孪晶界**。

对孪晶界，界面上的原子不能和邻接两晶粒很好地匹配，此界面称为**非共格孪晶界**。



共格孪晶界与非共格孪晶界

当原子间距差别不大，界面点阵通过一定的畸变保持共格，相应引起的点阵扭曲，称共格畸变或共格应变。

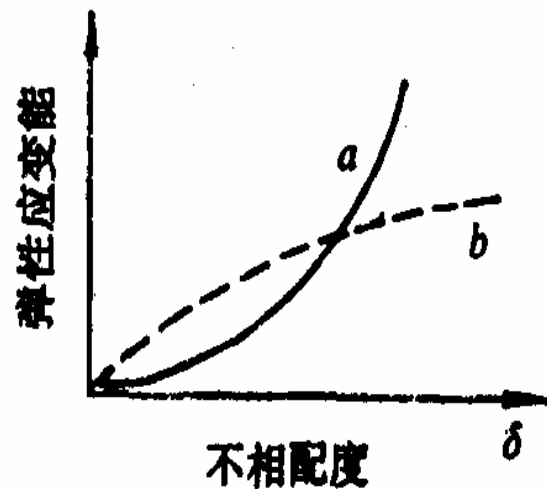
2. 半共格界面

点阵错配度 δ 的概念:

$$\delta = \frac{a_{\beta} - a_{\alpha}}{a_{\alpha}}$$

a_{α} 和 a_{β} 是 α 和 β 相无应力态的点阵常数。

- 界面的附加能量与 δ^2 成正比，有如图的关系。
- 当 δ 较小 (<0.05)，形成共格界面。
- 对较大的 δ ($0.05 \leq \delta \leq 0.25$)，共格畸变的增大使系统总能量增加，以半共格代替共格能量降低。



a-连贯连界

b-含有界面位错的半连贯边界

半共格界面模型

以刃位错周期地调整补偿。对上部晶体，单位长度需要附加的半晶面数等于

$$\rho = \frac{1}{a_{\alpha}} - \frac{1}{a_{\beta}}$$

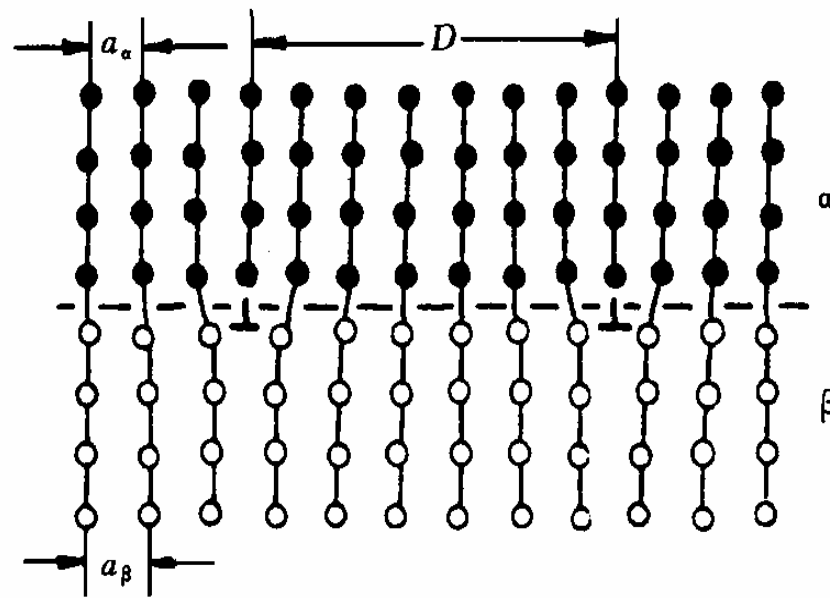
即位错间距：

$$D = \frac{a_{\alpha} a_{\beta}}{a_{\beta} - a_{\alpha}} = \frac{a_{\beta}}{\delta}$$

对小的 δ ，可近似写成：

$$D \approx b / \delta$$

式中 $b = (a_{\alpha} + a_{\beta}) / 2$ 。



半共格界面示意图

3. 非共格界面

两晶粒之间界面处原子无重合点阵关系

四、晶界原子排列的模型（经典模型）

- 1 重合位置点阵模型（Coincidence Site Lattice, CSL）
- 2 O点阵模型（O-lattice）
- 3 DSC点阵（Displacement Shift Complete Lattice）

界面结构的总结

