



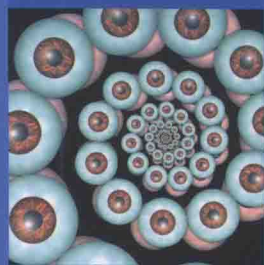
国际制造业先进技术译丛

ISTE

WILEY

晶界与晶体塑性

Grain Boundaries
and Crystalline Plasticity



[美] 路易塞特 普里斯特 (Louisette Priester) 主编
江树勇 张艳秋 译

 机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS



国际制造业先进技术译丛

Grain Boundaries and Crystalline Plasticity

晶界与晶体塑性

[美] 路易塞特·普里斯特 (Louissette Priester) 主编

江树勇 张艳秋 译



机械工业出版社

Copyright© ISTE Ltd 2011

All Rights Reserved. This translation published under license. Authorized translation from the English language edition, entitled Grain Boundaries and Crystalline Plasticity, ISBN 978-1-84821-327-2, by Louise Prieste, Published by John Wiley & Sons. No part of this book may be reproduced in any form without the written permission of the original copyrights holder.

北京市版权局著作权合作登记 图字：01-2014-3376 号。

图书在版编目 (CIP) 数据

晶界与晶体塑性 / (美) 普里斯特 (Priester, L.) 主编; 江树勇, 张艳秋译. —北京: 机械工业出版社, 2015. 12

(国际制造业先进技术译丛)

书名原文: Grain Boundaries and Crystalline Plasticity

ISBN 978-7-111-52212-6

I. ①晶… II. ①普…②江…③张… III. ①晶粒间界—研究②晶体—塑性—研究 IV. ①O7

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 280579 号

机械工业出版社 (北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

策划编辑: 李万宇 责任编辑: 李万宇

责任校对: 丁丽丽 封面设计: 鞠 杨

责任印制: 李 洋

北京机工印刷厂印刷 (三河市南杨庄国丰装订厂装订)

2016 年 1 月第 1 版第 1 次印刷

169mm × 239mm · 16.75 印张 · 323 千字

0 001—3 000 册

标准书号: ISBN 978-7-111-52212-6

定价: 68.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

电话服务

网络服务

服务咨询热线: 010-88361066 机工官网: www.cmpbook.com

读者购书热线: 010-68326294 机工官博: weibo.com/cmp1952

010-88379203 教育服务网: www.cmpedu.com

封面无防伪标均为盗版

金书网: www.golden-book.com

本书从晶界与晶体塑性关系着手，基于原子尺度、纳观尺度、微观尺度、介观尺度和宏观尺度，系统介绍了晶界基本结构与晶体材料力学行为之间的关系，强调了晶界对于工程应用领域中的多晶体材料所具有的重要意义。本书共六章，第1章为晶界结构与缺陷，第2章为晶界变形的基本机制，第3章为冷变形晶界，第4章为蠕变与高温塑性——晶界动力学，第5章为晶间疲劳，第6章为晶间偏析与晶体材料的断裂。

本书含有许多原创性的学术思想，汇集了当代最新科研成果，具有较强的科学性、学术性和前沿性，所反映的知识体系具有极强的交叉性，涉及材料科学、固体力学、断裂力学、计算科学和机械工程等相关知识，为从事金属晶体材料设计、金属晶体材料力学性能和金属塑性成形研究的相关人员提供指导，且完全适合作为相关专业的本科生、研究生和科研人员的学习用书。

译者序

历时半载，终于完成了《晶界与晶体塑性》这本书的翻译工作。本书集中反映了路易塞特·普里斯特（Louisette Priester）教授的科学理论研究水平，汇集了很多新颖的学术思想，融入了大量的现代最新科技成果。本书是迄今为止全面介绍晶界与晶体塑性相互关系的第一本专著，从原子尺度、纳观尺度、微观尺度、介观尺度和宏观尺度，系统介绍了晶界基本结构与晶体材料力学行为之间的关系，所反映的知识体系具有极强的交叉性，涉及材料科学、固体力学、断裂力学、计算科学和机械工程等相关知识。

本书的第1章介绍了晶界的基本概念，从几何角度介绍了晶界的基本特征，引出了倾斜晶界、扭转晶界、混合晶界、对称晶界和非对称晶界的基本概念，并给出了重合位置点阵（CSL）和位移对称守恒点阵（DSC）的基本概念；从本征位错角度描述了晶界的基本结构，引出了一般晶界、奇异晶界和临位晶界的基本概念；最后介绍了晶界的基本缺陷，包括点缺陷（空位、间隙原子和置换原子）、线缺陷（非本征位错）和体缺陷（晶界沉淀）。第2章介绍了晶界变形的基本机制，描述了位错与晶界的相互作用机制，并从几何准则和能量准则的角度，介绍了两种位错滑移传播机制，即位错直接滑移传播和位错间接滑移传播，最后介绍了晶界的应力释放机制。第3章从多晶体的冷塑性变形出发，描述了晶界在多晶体各个晶粒之间的变形协调性中所扮演的角色，采用晶体塑性有限元法计算了多晶体晶粒的内应力，最后简要介绍了Hall-Petch定律、几何必须位错、再结晶机制和回复机制。第4章介绍了晶界在蠕变和高温塑性变形中所扮演的角色，描述了晶界扩散、晶界滑动和晶界迁移的基本机制，从而引出了四种蠕变机制模型，包括位错攀移蠕变机制、晶界扩散蠕变机制（Coble蠕变）、体积扩散蠕变机制（Nabarro蠕变）和界面反应蠕变机制，最后概要介绍了超塑性现象。第5章介绍了晶间疲劳，包括低温晶间疲劳和高温晶间疲劳，描述了驻留滑移带和孪晶界对晶间疲劳的影响。第6章介绍了晶间偏析和晶体材料的断裂，描述了晶间偏析引起的晶界脆化机制和晶界强化机制，最后介绍了由于液态金属导致晶间润湿而引起的晶间开裂现象。

在本书的翻译工作中，江树勇教授翻译了第1章、第2章、第3章、第4

章、第5章，张艳秋博士翻译了第6章、附录及前言部分，并且由江树勇教授和张艳秋博士互相进行了校对，最后由江树勇教授统校。感谢博士研究生胡励、梁玉龙、庄大勇、王宇和硕士研究生谢海增、王磊、宫在飞在翻译过程中所做的一些公式录入和文字录入工作。

在本书的翻译过程中，我们尊重原作者的写作方式和思维习惯，尽量做到原汁原味，但为了便于国内读者的理解，我们必然要做一些中英文语言习惯的转换。另外，对于一些理论、法则、准则的提出者和文献的作者，除了大家广为熟知的人名之外，其余均保持英文名字，以便于读者检索文献。总之，我们非常钦佩 Louissette Priester 教授在编写此书过程中所表现出来的博学和智慧，书中关于晶界工程的许多原创性学术思想必然对相关学科及领域产生深远的影响，其对学术界的贡献是难以估量的。然而，从辩证的角度而言，原书在编写或排版过程中仍然存在一些小的错误、疏忽和遗漏，对于本专业领域的读者而言，可能并不会影响对本书的阅读和理解，但对于专业领域之外或本专业领域的初学者，确实会对可读性产生一定的影响。所以面对这样一本著作，在翻译过程中，我们不敢有任何的懈怠和疏忽，尤其对于一些小的错误、疏忽和遗漏之处，我们通过我们自身的专业知识和检索原始文献，基本都进行了一定的修正，但由于出版时间的限制，在翻译过程中存在匆忙和仓促。本书虽经多次推敲和校稿，但由于我们的知识水平有限，难免有翻译不当和修正不当之处，敬请读者谅解。

译者

2015年9月15日

前 言

这本书主要介绍了晶界在晶体材料的塑性行为中所扮演的重要角色。随着具有亚微米晶粒尺寸的材料（金属材料 and 陶瓷材料等）的使用和发展，理解晶界这种角色的需要与日俱增。从确实可行的模型到新的实验方法和模拟方法，本书描述了“晶界”物质与其对材料力学性能的贡献之间关系的科学状态。本书的作者都是在各自领域中最优秀的专家学者，他们向读者呈现了他们专业领域的全景画面，涉及从基础理论知识到新技术的最新发展。

以晶界的行为为出发点，然后追溯到晶界网络对一个多晶体材料塑性的贡献，这都需要采用多尺度的方法。这种多尺度的方法首先从原子尺度描述晶界，然后从纳观尺度和微观尺度详细描述点缺陷、位错缺陷和晶界之间的基本反应关系，最终从介观尺度和宏观尺度来揭示材料的力学行为以及支配这些行为的基本定律。这些研究项目也需要物理方法、化学方法和力学方法的相互结合。

这些不同的方法并没有利用大量的数学公式进行讨论，而是在大量参考文献的支撑下进行的。对于定义、机理和理论模型的介绍都伴随有实验和数值模拟的描述，这对这些模型起到了很好的支撑作用。这些例子涉及各种形式的晶体材料，包括金属材料、金属合金材料、陶瓷材料和半导体材料等。这些性能涉及热变形、冷变形、蠕变、疲劳和断裂。

本书各章都保持自身的独立性，是获得某一具体领域基本知识的一篇很好的参考文献。然而，只有把这本书看作是一本完整的著作，才能使读者理解晶界在晶体塑性中所扮演的角色。本书分为如下6章。

第1章讨论了晶界的基本概念，包括它们的几何特征、基本结构和基本缺陷，这一章主要介绍了作为变形矢量的晶间位错。第2章详细介绍了在变形期间位错和晶界之间相互作用的基本过程以及所产生的相应应力的释放过程。第3章描述了变形期间在晶界及其临近区域所发生的变形和应力状态，讨论了材料的力学行为，并将其看作是晶粒尺寸的函数，该章也简要地介绍了再结晶现象。第4章至第6章连续讨论了如下问题：（1）晶界在蠕变、高温塑性以及超塑性中所扮演的角色。（2）双晶和多晶中遭受高温和低温疲劳时的晶界演化行为，主要涉及几种关键材料，如铁、不锈钢、铜和超合金等。（3）晶界对断裂的响

应，尤其侧重于偏析对晶间脆性的影响，同时也强调了液态金属引起的脆化。

理解晶界对晶体塑性的影响还未曾作为一本专著的主题，而这一主题为控制材料的性能提供了一种思路与挑战。

Louissette Priester

巴黎第十一大学

2011年9月

目 录

译者序

前言

第1章 晶界结构与缺陷	1
1.1 晶界平衡结构	1
1.1.1 双晶体学的几何描述及要素	1
1.1.2 用本征位错表示的晶界结构	4
1.1.3 晶界原子结构——结构单元模型	8
1.1.4 能量原子描述	11
1.2 晶界的晶体缺陷	14
1.2.1 点缺陷——晶间偏析	15
1.2.2 线缺陷——非本征位错	23
1.2.3 体缺陷——晶界沉淀	29
1.3 结论	32
1.4 参考文献	32
第2章 晶界变形的基本机制	37
2.1 临近晶界的位错	37
2.2 位错与晶界间的弹性作用——镜像力	38
2.3 位错和晶界之间的短程（或核心）作用	41
2.3.1 位错滑移传播的几何准则和能量准则	42
2.3.2 晶界处位错反应的基本机制	44
2.3.3 位错和晶界之间相互作用机制的原子尺度模拟	48
2.3.4 相互作用机制的实验观察	52
2.3.5 与非本征位错相关的弹性应力场	60
2.4 与非本征位错相关的应力场的释放	63
2.4.1 晶界内的应力释放过程	64
2.4.2 应力场随着释放时间的演化	65

2.4.3	晶界应力释放现象的实验研究	66
2.4.4	结论	75
2.5	材料的基本界面机制与力学行为之间的关系	76
2.6	参考文献	79
第3章 冷变形晶界		85
3.1	前言	85
3.2	晶界塑性变形的协调性和不协调性	86
3.2.1	概述	86
3.2.2	双晶中变形不协调性的计算	89
3.3	多晶晶粒中的内应力	90
3.3.1	晶体塑性的概念以及在多晶模型中使用的单晶行为	91
3.3.2	多晶中的内应力	93
3.3.3	应力释放机制	95
3.4	使用有限元法(FEM)模拟局部力学场	98
3.4.1	多晶聚集体	99
3.4.2	从单晶到多晶的有限变换	100
3.4.3	本构硬化律参数的确定	101
3.4.4	基于多晶模型的局部力学场的例子	102
3.5	Hall-Petch 定律及几何必须位错	105
3.5.1	定义	105
3.5.2	多晶中晶粒尺寸效应的模拟及与实验的比较	106
3.6	变形和再结晶中的亚晶界和晶界	110
3.6.1	变形亚晶界和晶界	110
3.6.2	再结晶亚晶界	111
3.7	结论	117
3.8	参考文献	118
第4章 蠕变与高温塑性——晶界动力学		125
4.1	前言	125
4.2	晶界与晶粒增长	127
4.2.1	晶界动力学与晶粒长大定律	127
4.2.2	晶界偏析与沉淀对晶界迁移的影响	129
4.3	晶界和蠕变——相应机制和唯象定律	131
4.3.1	晶界机制	131
4.3.2	蠕变模型及动力学	137

4.3.3	本构蠕变律和变形机制图	142
4.3.4	蠕变模型的局限性、晶界化学组成和蠕变	145
4.4	晶界与超塑性	148
4.4.1	唯象理论与微观机制	148
4.4.2	不同模型	152
4.4.3	晶粒长大和超塑性变形	154
4.5	展望：纳米材料的蠕变	156
4.6	参考文献	157
第5章	晶间疲劳	163
5.1	前言	163
5.2	低温晶间疲劳	166
5.2.1	解释晶间疲劳所考虑的几种尺度	166
5.2.2	α 铁及其他体心立方 (BCC) 金属与合金的研究	167
5.2.3	面心立方结构 (FCC) 金属及金属合金的晶间疲劳断裂	176
5.3	高温疲劳	190
5.3.1	概述	190
5.3.2	奥氏体不锈钢	191
5.3.3	镍基超合金	196
5.4	结论	204
5.5	致谢	205
5.6	参考文献	205
第6章	晶间偏析与晶体材料的断裂	213
6.1	晶界与断裂	213
6.1.1	断裂参数——不同类型的断裂	213
6.1.2	晶间断裂	216
6.2	晶间偏析	217
6.2.1	偏析起源	217
6.2.2	平衡偏析热力学——现存的模型	218
6.2.3	晶间平衡偏析的一般特征	223
6.2.4	非平衡偏析	223
6.2.5	晶间偏析的不均匀性——晶界结构的影响	223
6.3	偏析与晶间断裂	225
6.3.1	晶间脆化机制	225
6.3.2	从脆化偏析到强化偏析	228

6.4 液态金属诱发的晶间断裂	233
6.4.1 与液态金属接触发生的现象	233
6.4.2 液态金属脆化	234
6.4.3 晶间渗透	234
6.4.4 Cu-Bi 体系的晶间扩散	236
6.4.5 Ni-Bi 体系中的晶间润湿	237
6.4.6 晶间渗透机制	239
6.4.7 Al-Ga 体系的例子	241
6.4.8 结论	242
6.5 总结	242
6.6 参考文献	243
附录	247
附录 A 双晶体学及界面缺陷的拓扑表征	247
附录 B 第3章的附录	249
B.1 符号	249
B.2 无限小变形	250
B.2.1 塑性变形和转动	250
B.3 终极变换	251
B.3.1 几何变换	251
B.3.2 运动学	251
B.4 终极变换的不协调性	252
B.5 几何必须位错密度的计算	253
作者列表	254

第1章

晶界结构与缺陷

1.1 晶界平衡结构

晶界是具有相同结构的两个晶体之间的界面。工业材料的力学性能不仅取决于它们的晶体结构，而且还取决于晶体之间的界面，尤其是晶界的结构和化学成分。结构材料通常都为多晶体，因而其力学性能不仅与晶粒尺寸直接相关，而且还取决于晶界。另外，虽然在电子工业中所使用的材料是几乎没有缺陷的，但是，由于制造工艺过程复杂，材料中仍然经常会产生一些应力，这些应力主要是由位错、孪晶和晶界等缺陷引起的。

因此，在多数材料中都会遇到这些晶界“研究对象”，它们的结构以及它们的力学性能、化学性能和电性能在几十年来一直都是人们深入研究的主题，而且它们在新兴的纳米材料中也占据着重要的地位。在描述机械过程或化学过程所导致的晶界缺陷之前，我们将在这部分给出三种方法来描述平衡晶界，即纯几何法、位错法和基于能量计算的结构单元法。从晶界研究发展历程来看，位错法是最先使用的，结构单元法则是最后使用的。相关内容可以参考 [PRI 06] 和 [SUT 95] 这两个文献。

1.1.1 双晶体学的几何描述及要素

1.1.1.1 自由度

晶界在几何上可以用九个参数（或自由度）来定义，其中六个参数用来定义界面运动，可以建立两个相邻晶体之间的联系，另外三个参数用来定义界面平面。在九个参数中，五个参数称为宏观参数，四个参数称为微观参数。在立方晶系中，晶粒取向的运动都是以转动的形式进行的，因此定义这种运

动的三个宏观参数就是转角 θ 和旋转轴的方向余弦 $[uvw]$ ，另外两个宏观参数用来定义界面平面取向，通常用该平面的法线表示。在四个微观参数中，有三个参数用来定义晶粒之间的平移（在晶界平面内的平移以及沿着垂直晶界平面方向的伸展），另一个参数用来确定界面沿着晶界平面法线方向上的位置。这些微观参数实际上就是“能量”参数，通常通过计算能量最稳定的原子结构来确定，而且该原子结构可以通过实验采用电子显微镜观察到。在非立方结构的材料中，界面运动不是一个简单的转动，经常伴随着一个变形。

1.1.1.2 倾斜晶界、扭转晶界、混合晶界、对称晶界和非对称晶界

为了简化起见，上面的术语是根据旋转轴 $[uvw]$ 相对于晶界平面 $\{hkl\}$ 的取向来定义晶界的。

如果旋转轴 $[uvw]$ 位于晶界平面内，则该晶界就是倾斜晶界；如果旋转轴 $[uvw]$ 垂直于晶界平面，该晶界就是扭转晶界；如果旋转轴 $[uvw]$ 与晶界平面成某一角度，该晶界就是混合晶界。如果两个晶粒之间的平面（设为平面 1 和平面 2）能够用表达式 $\{hkl\}_1 = \{hkl\}_2$ 来定义，该晶界就是对称的，否则它们就是非对称的。

1.1.1.3 双晶体学和重合度

重合度的概念和重合指数的定义是由 G. Fiedel 在 1920 年和 1926 年为了描述孪晶而提出的^[PRI 20, FRI 26]。Bollmann^[BOL 70]发展了这一概念，利用晶格可以相互贯通的双晶体学思想对晶界进行了更为完整的几何描述。他认为双晶体的获得过程首先是通过界面的运动，然后通过界面的定位，最后是两个不同晶粒内原子的彼此抑制。在远离界面的位置，晶粒内的原子占据了晶内的平衡位置。对于一些界面运动来说，两个晶体的晶格节点是重合的，如图 1.1 所示。因此可以定义一个重合位置点阵（CSL），该重合位置点阵实际上就是两个晶体晶格平移子集的交集部分。这种重合位置点阵可以用重合指数 Σ 来表征，它等于重合的晶胞体积与原始的晶胞体积之比。 Σ 是一个整数（对于立方结构的晶体材料，该值为奇数），随着 θ 角而不连续变化。Mykura 采用重合指数 Σ 对立方晶体材料中的重合位置点阵进行了描述^[MYK 80]。三维重合位置点阵只存在于立方结构晶体材料或具有特定轴比 c/a 的六方结构晶体材料中。在其他情况下，大部分晶界都被描述为“近特定取向”^[CRI 89]。

1.1.1.4 DSC 点阵

材料中的晶界未必都是重合晶界，对于偏离重合的晶界，Bollmann^[BOL 70]通过引进位移对称守恒点阵（DSC）进行了几何上的定义，避开了使用重合位置点阵（CSL）这个不变量。（DSC）点阵就是两个晶体平移子集的并集，它能够定义理想晶界位错的柏氏矢量，就是使晶界结构不发生改变的柏氏矢量。

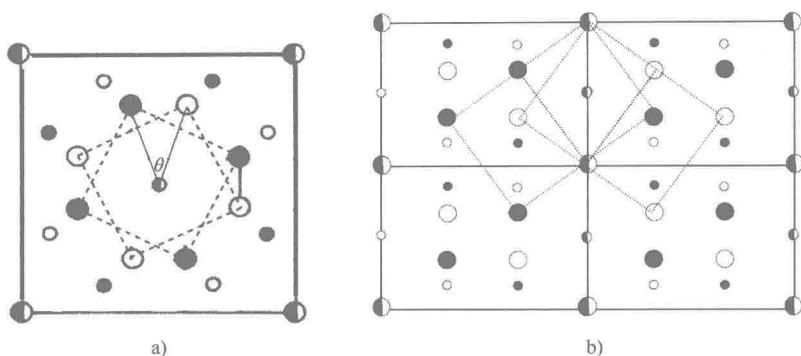


图 1.1 沿旋转轴方向的重合晶格单胞视图: a) $\Sigma = 5$ 的双晶 (体心立方晶格中绕 $[001]$ 轴旋转); b) $\Sigma = 3$ 的双晶 (面心立方晶格中绕 $[011]$ 轴旋转, 此图中给出了 4 个重合单胞)。图中的公共点用双色 (黑白) 表示, 不同尺寸的点代表沿示意图法线方向的不同位置, 虚线表示晶格的投影。

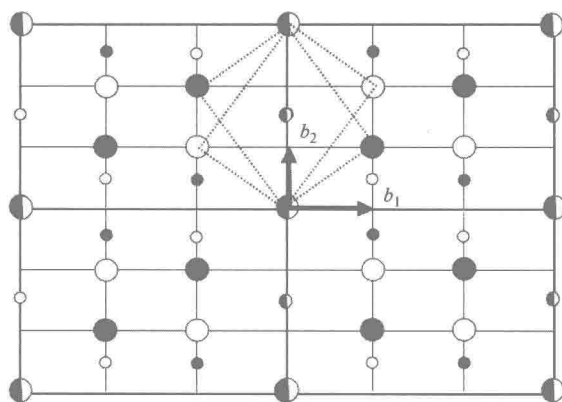


图 1.2 与面心立方结构晶系中绕 $[011]$ 轴旋转获得的与 $\Sigma = 3$ 双晶相关的 DSC 点阵 (细线部分)。矢量 b_1 和 b_2 是 3 个基本 DSC 点阵矢量中的 2 个, 第 3 个矢量

与 $[011]$ 轴平行, 此时有 $b_1 = \frac{1}{3} [11\bar{1}]$ 、 $b_2 = \frac{1}{6} [\bar{2}1\bar{1}]$ 和 $b_3 = \frac{1}{2} [011]$ 。

重合指数越高, DSC 点阵的基本矢量就越短。图 1.2 给出了图 1.1b 所示的面心立方结构材料中与 $\Sigma = 3$ 晶界的重合位置点阵 (CSL) 相关的位移对称守恒点阵 (DSC) 沿旋转轴 $[011]$ 方向上的投影。与位移对称守恒 (DSC) 点阵的柏氏矢量不相关的位错称为不全位错, 它们位于不同结构的两个晶界剖面之间。

1.1.1.5 几何法的局限性

倾斜晶界和扭转晶界或对称晶界和非对称晶界的概念具有很大的相对性。实际上，通过晶体的对称操作，也可以将倾斜晶界描述为扭转晶界。通常所选择的描述就是所有可能描述中晶界转动最小的那一个。对一个晶界的描述也取决于所观察的尺度，一个在微米尺度上观察是线性结构的晶界，如果在原子尺度上进行观察，则可能发现其是多面体结构。还应该注意的，倾斜晶界中与旋转轴垂直的一个台阶对应一个具有扭转特征的小平面（见图 1.3）。在通过高分辨率透射电镜（HRTEM）所获得的图像中，我们可以看到一个摩尔条纹，其对应于彼此相对旋转的两个晶体的重合部分，是重合位置点阵（CSL）沿着 $[001]$ 轴方向上的图像。

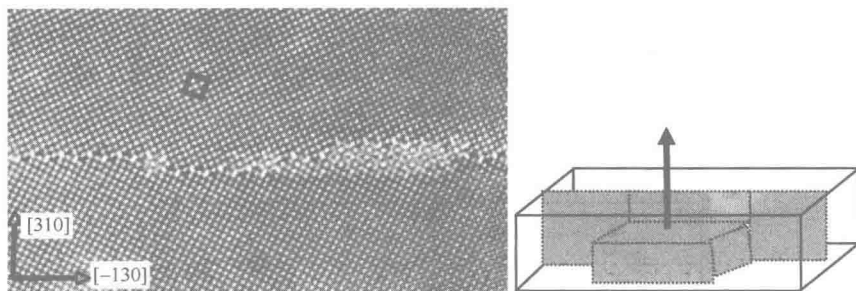


图 1.3 锗 (Ge) 中围绕 $[001]$ 轴的 $\Sigma = 3$ 晶界的高分辨率透射电镜 (HRTEM) 图像，倾斜晶界平面是 (310) ，沿着晶界可以看到 (001) 平面的纳米尺度的小平面对应一个具有扭转特征的小平面，表明该晶界在局部上表现为扭转特征。

“双晶学”的描述只提供了晶格之间取向的几何信息，而没有提供关于晶界平面的信息，因此没有描述关于低能晶界结构的任何信息。平衡晶界结构是通过晶体的相对平移和晶界平面的位置进行局部定义的，该平衡晶界结构可以通过实验观察（大多数情况下采用 HRTEM）或数值模拟来确定。

值得注意的是，重合指数和晶界能之间并不存在相关性。

最后需要注意的是，目前已经存在更为完备的双晶学方法，可以用来描述晶间缺陷^[PON 89]，这将在附录 A 中进行简要介绍。

1.1.2 用本征位错表示的晶界结构

1.1.2.1 Read-Shockley 模型

第一个小角度倾斜晶界（或称之为亚晶界）模型是由 Read 和 Shockley^[REA 50] 提出的，该模型认为晶界是由周期性分布的位错构成的，这使两个相邻晶粒之间能够保持较小的取向差。这种模型后来被推广至包含任何取向差的

晶界。

所引进的位错之所以称为“本征”位错，是因为它们是构成亚晶界结构的必要组成部分。距离为 d 、具有相同柏氏矢量 b 的刃型位错构成位错墙，因而晶粒之间的取向差为 $\theta = b/d$ （见图 1.4 和图 1.5a），该位错墙形成一个对称的倾斜亚晶界。

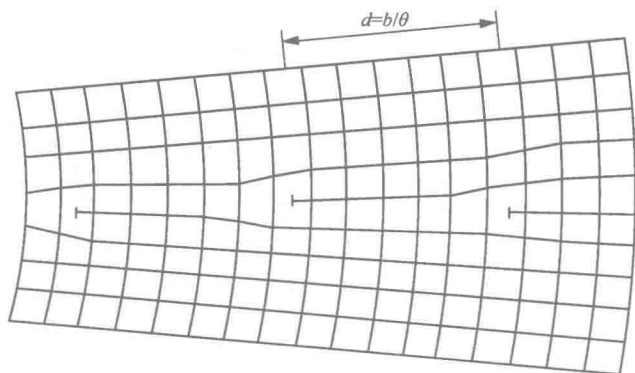


图 1.4 Read-Shockley 亚晶界模型

晶界平面的不对称性必然会造成晶界的小面化，而且可以通过具有不同柏氏矢量的位错进行协调（见图 1.5b）。一个扭转的亚晶界可以通过一个由两个垂直的螺型位错族构成的位错墙进行协调（见图 1.6）^[PRI 79]。

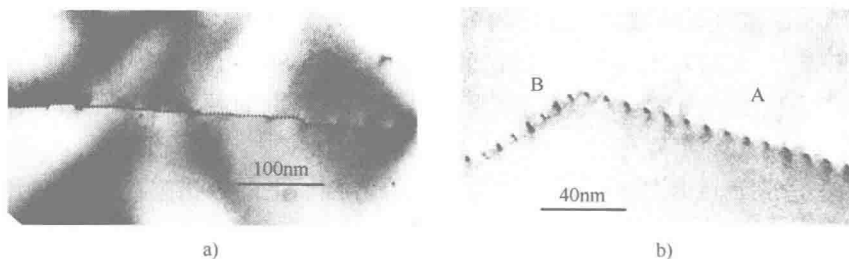


图 1.5 a) 锗 (Ge) 中绕 $[011]$ 轴的倾斜亚晶界的透射电镜 (TEM) 照片，突出了初级本征位错；b) 显示一个小面化晶界的详细信息：A 表示由刃型位错协调的对称晶界，B 表示由离解的 60° 位错构成的非对称小平面。

最近的数值模拟^[CHE 09]已经表明，位错含量依据晶界平面而变化，而且已经在锗^[BOU 79]和铝^[PEN 79]中证实了亚晶界的实验观察结果，这以前已经用弹性计算证明过。

根据 Read-Shockley 模型，（每单位面积）晶界能可以计算为构成晶界的位错的能量之和，即