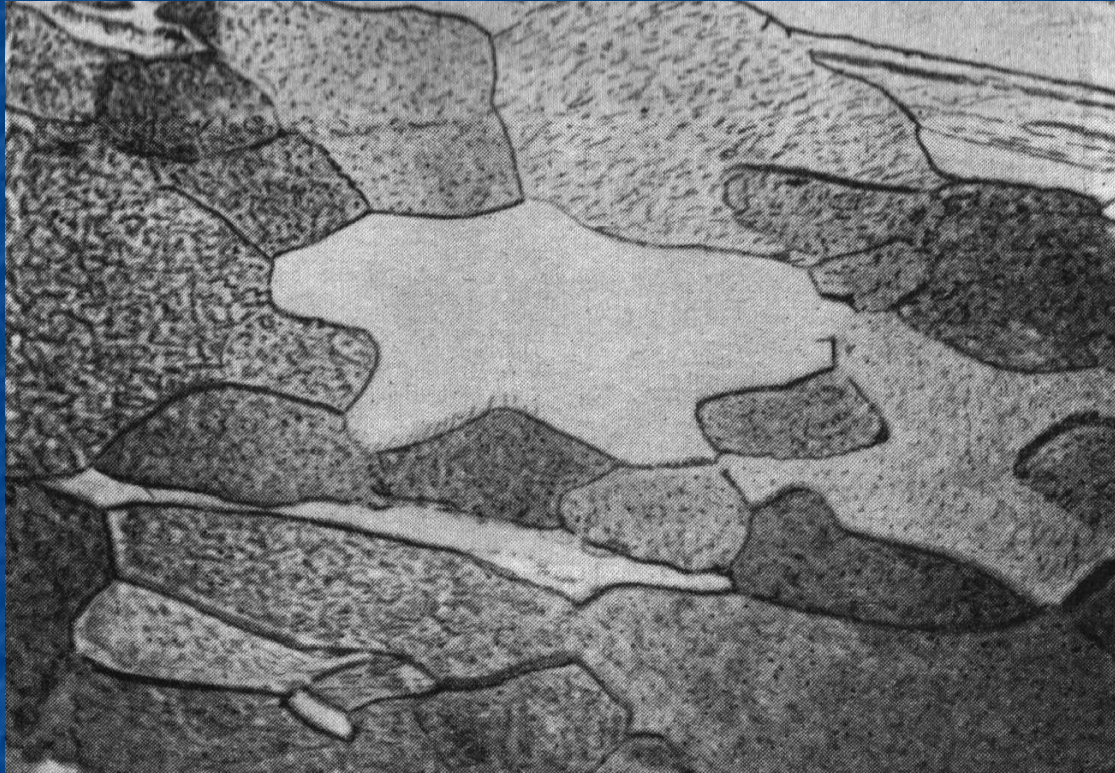


Плоские дефекты,
двумерные наноструктуры

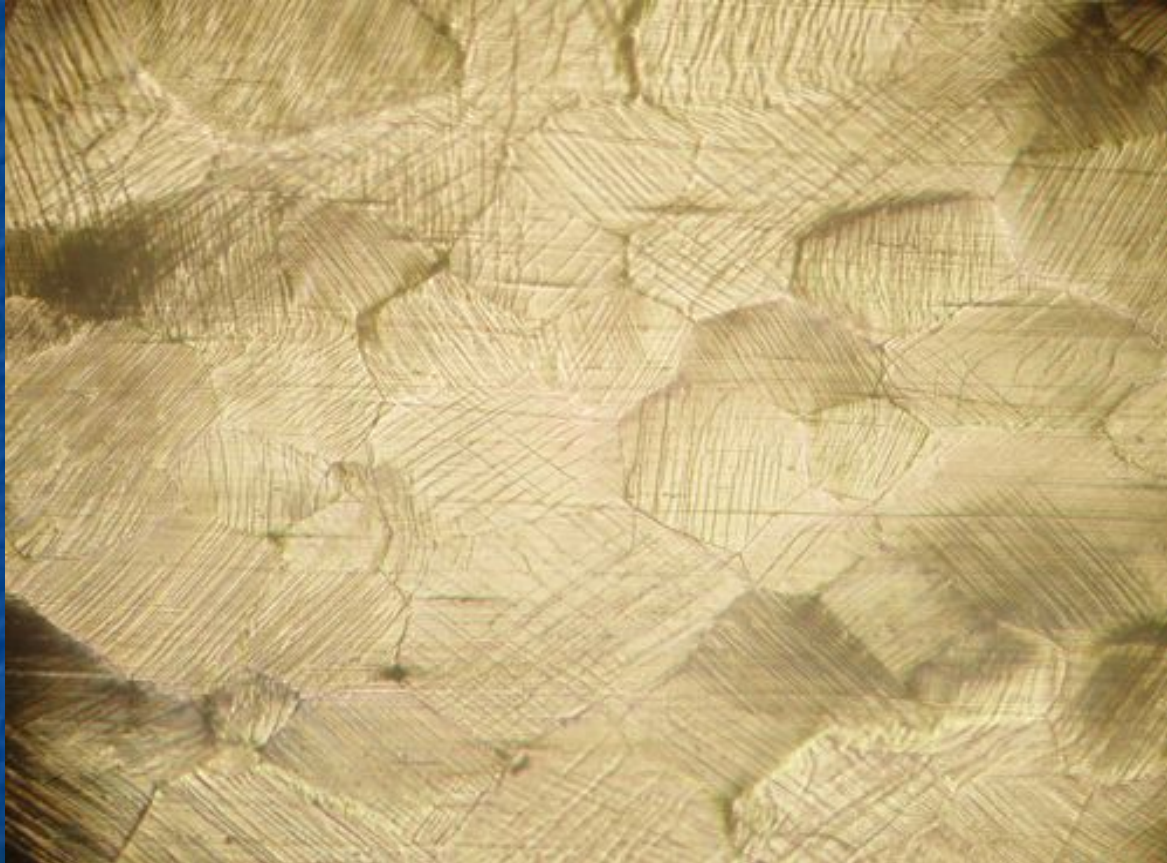
Большеугловые границы,

Поликристаллическая структура



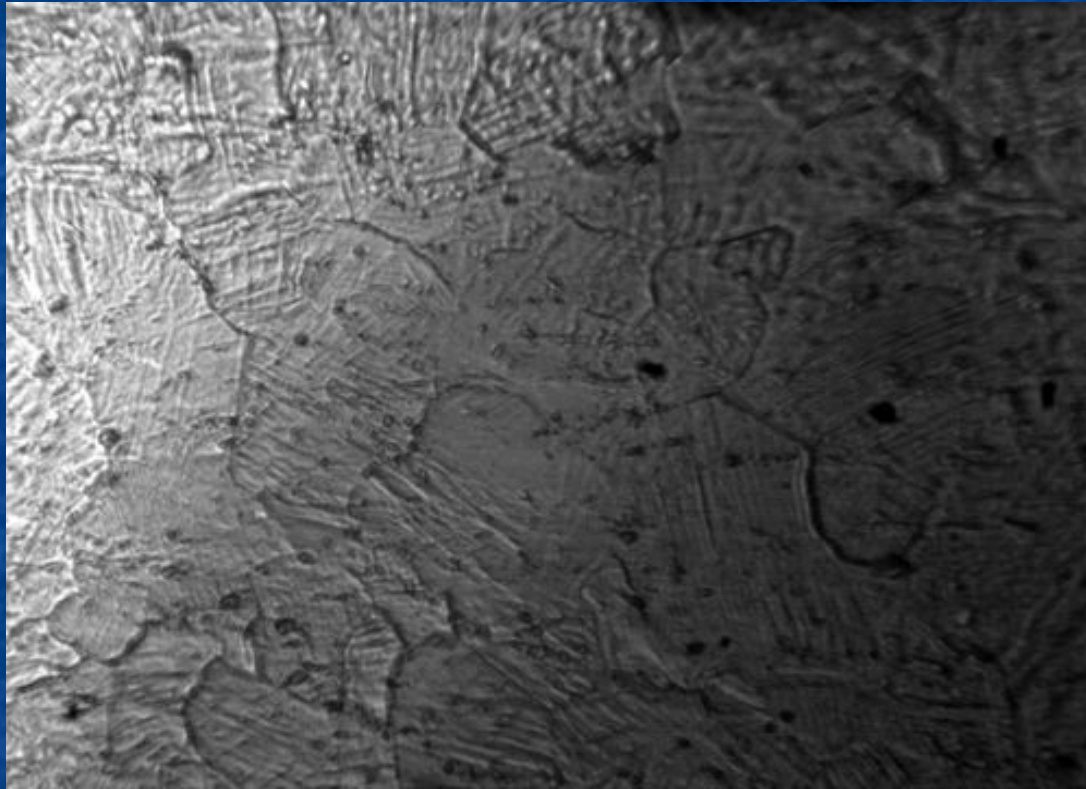
Зернограничная структура вольфрама
при увеличении 500

Поликристаллическая структура



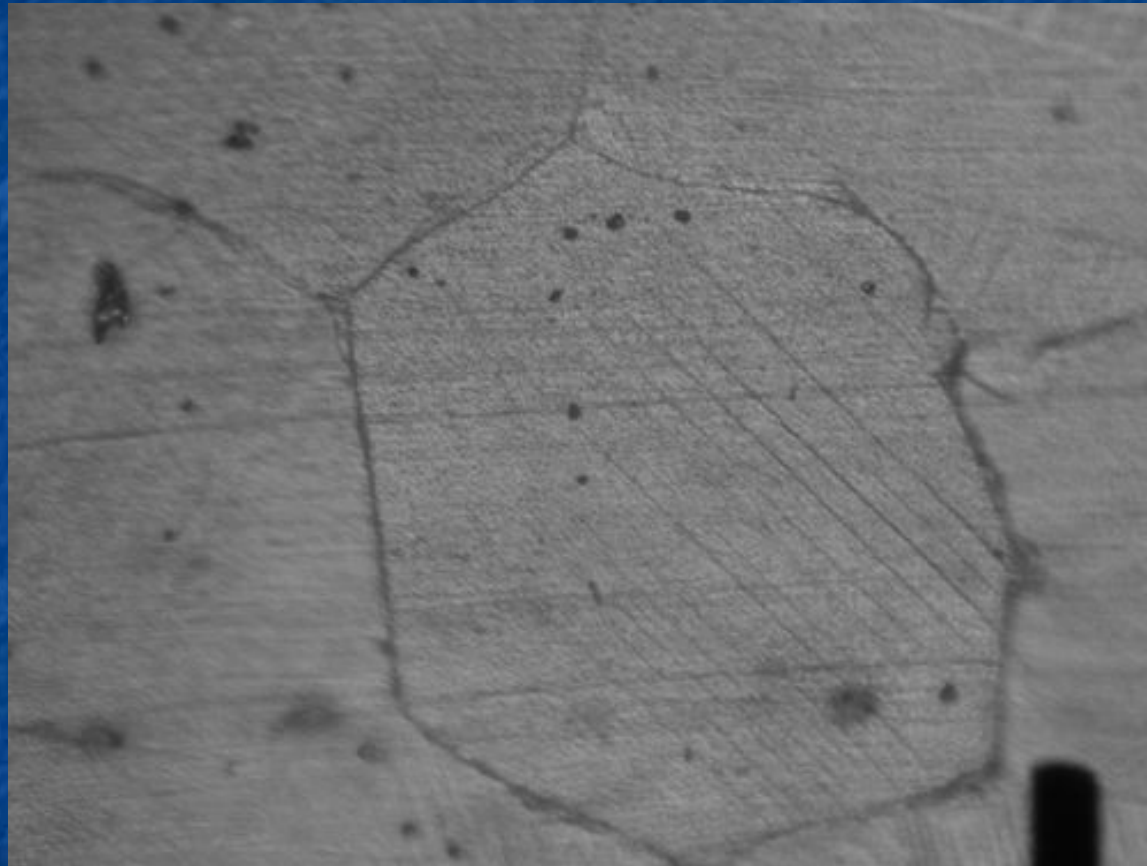
Зернограничная структура деформированного алюминия при увеличении $\times 100$

Поликристаллическая структура



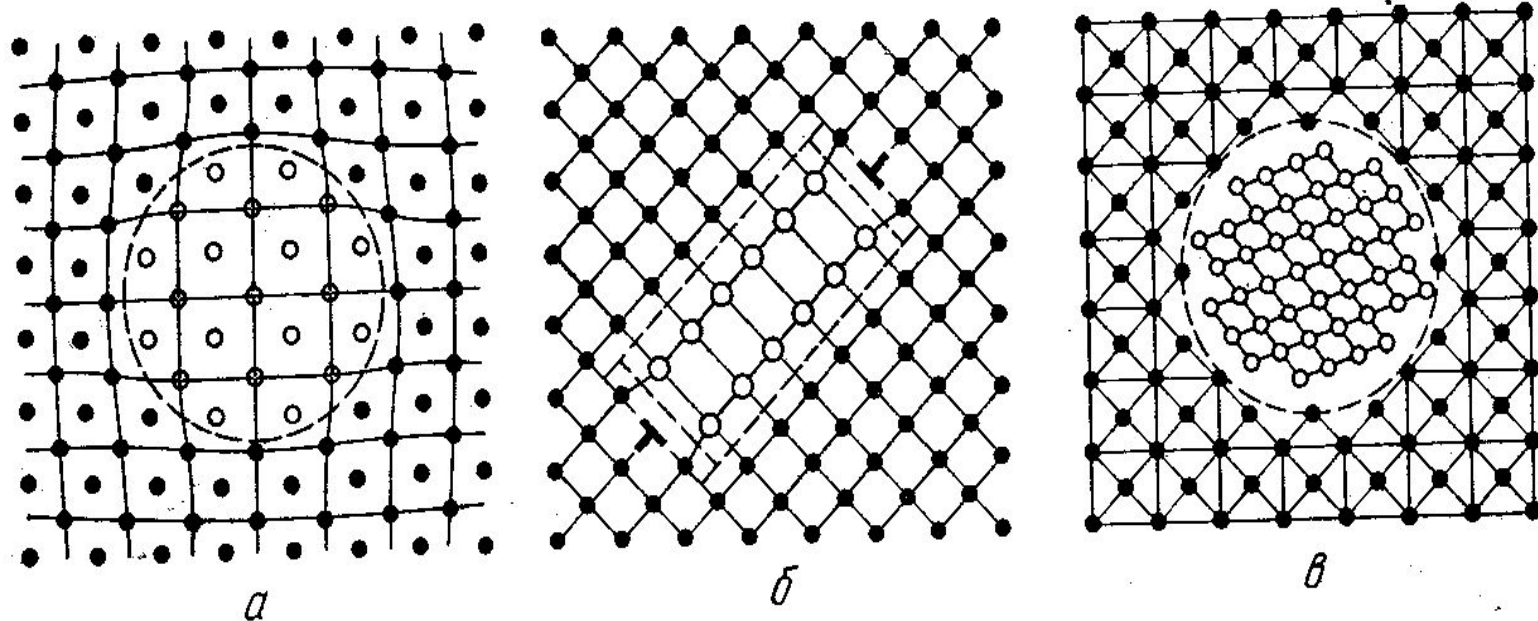
Зернограничная структура нитрида титана
при увеличении 400

Поликристаллическая структура



Зернограничная структура меди
при увеличении 400

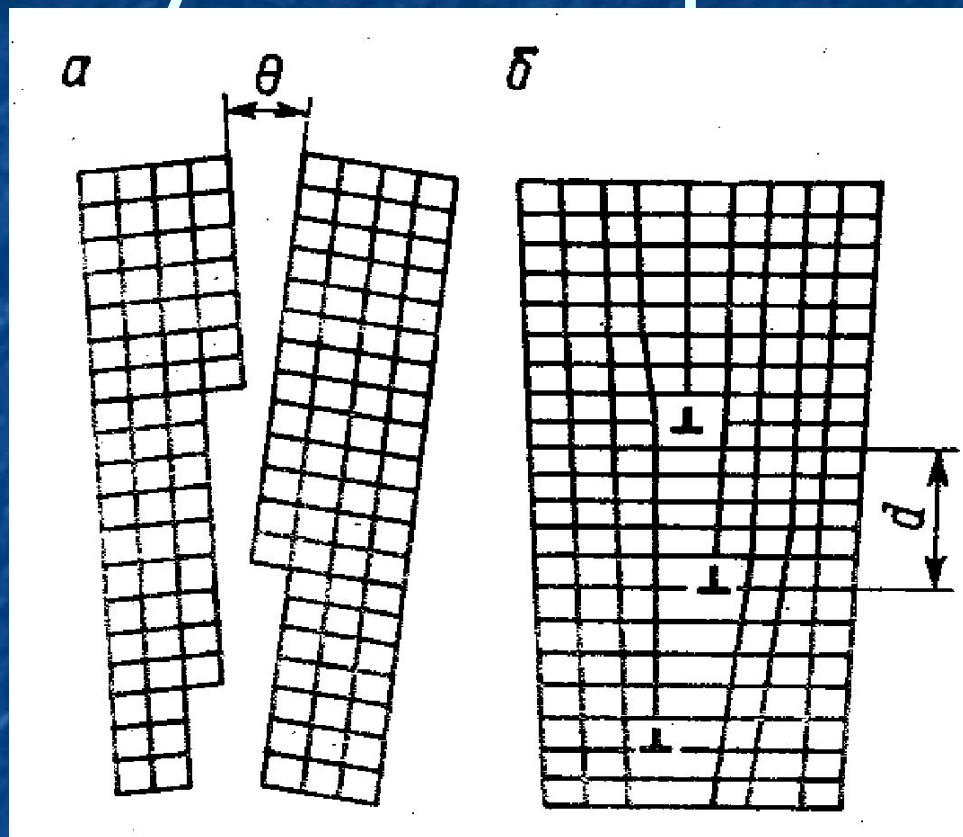
Малоугловые границы



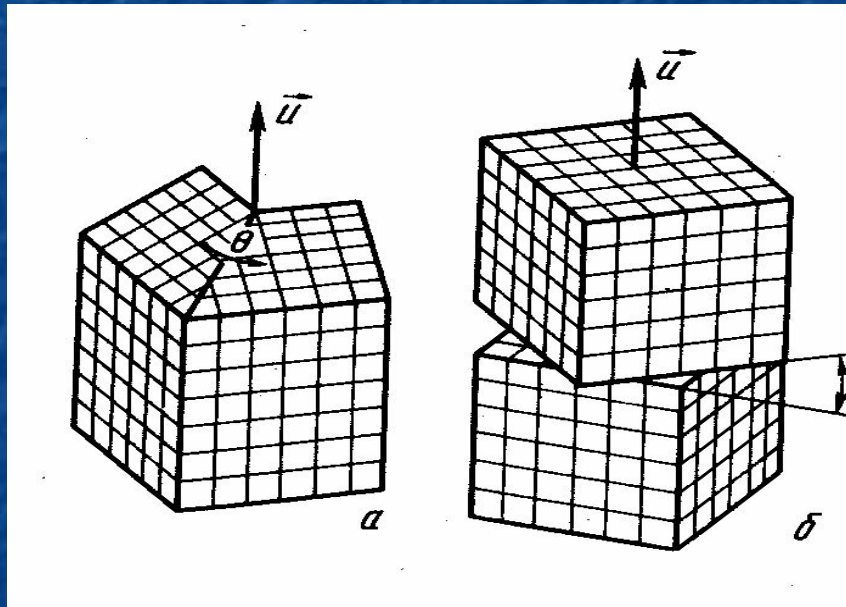
Степень когерентности выделений [120]:

a — квазикогерентные или когерентные с положительным параметром несоответствия решеток; *б* — полукогерентные; *в* — некогерентные выделения

Малоугловые границы

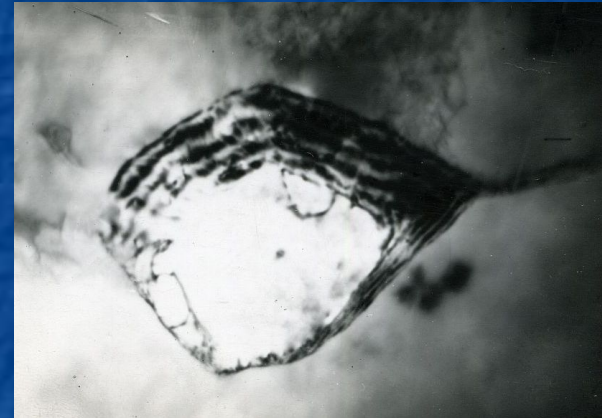
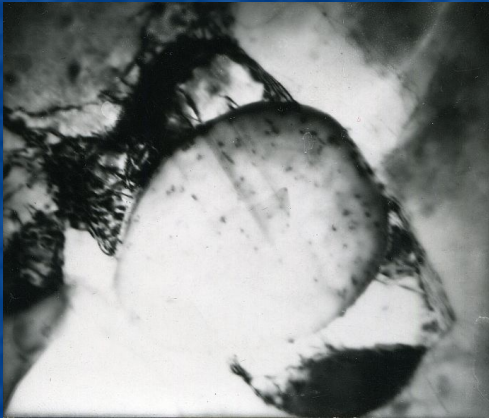


Большеугловые границы



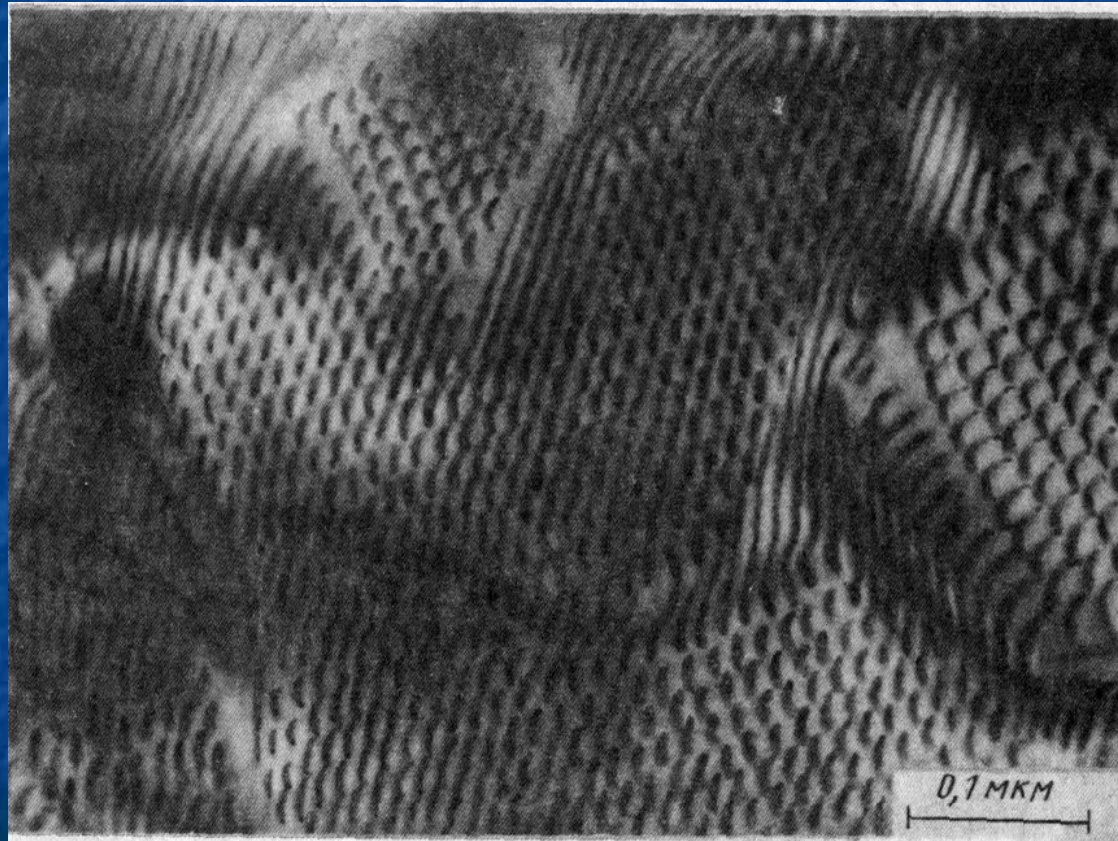
- К большеугловым границам относят границы раздела кристаллитов в поликристаллическом агрегате.
- **Можно выделить характерные признаки большеугловых границ.**
- Это разориентировка зерен – поворот одного кристалла относительно другого, приводящего к совпадению кристаллов, на угол Θ вокруг общей оси U .
- Угол Θ - угол разориентировки зерна.
- Ось U - ось разориентировки зерна.
- Вектор U выбирают единичной длины (его можно задать двумя компонентами).
- Таким образом, разориентировка задается тремя скалярными параметрами – это Θ и два параметра оси U .
- Эти три параметра задают вектор разориентировки
- $\Theta = |\Theta| U$

Большеугловые границы



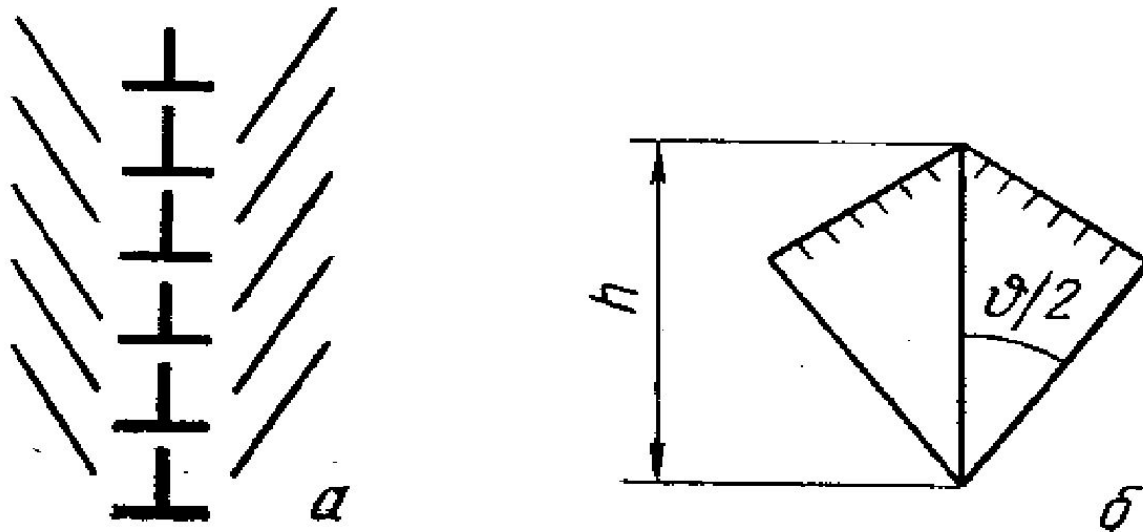
- Дислокационная структура большеугловых границ в алюминии. На рис. справа видны параллельные ряды зернограничных дислокаций. Размытость дислокационных линий свидетельствует о расщеплении полных дислокаций в большеугловой границе и превращении их в частичные (неполные) дислокации.

Большеугловые границы



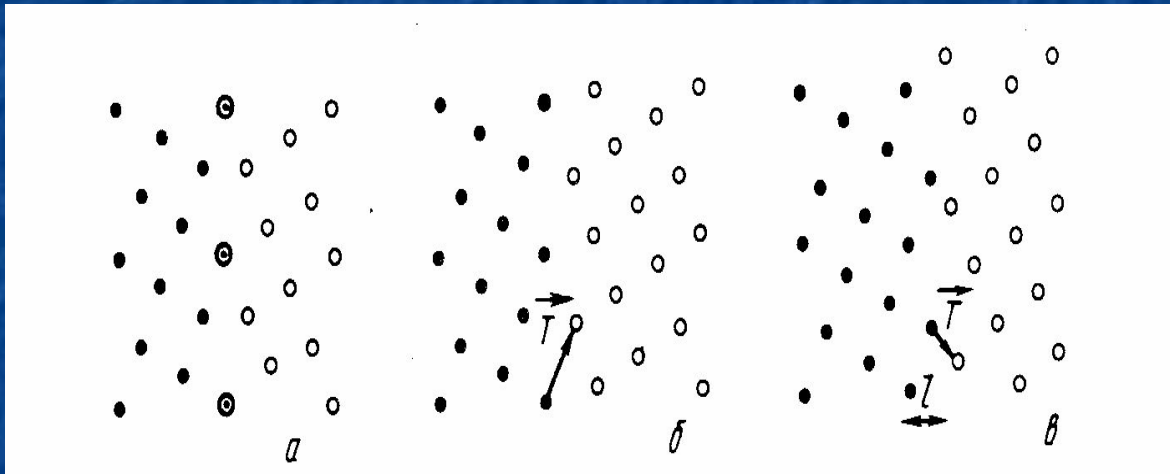
Сетка ЗГД, создающая отклонение $0,5^{\circ}$ от разориентировки $36,9^{\circ}$ [001] в границе кручения $\Sigma 5$ в тонкопленочном бикристалле золота

Большеугловые границы



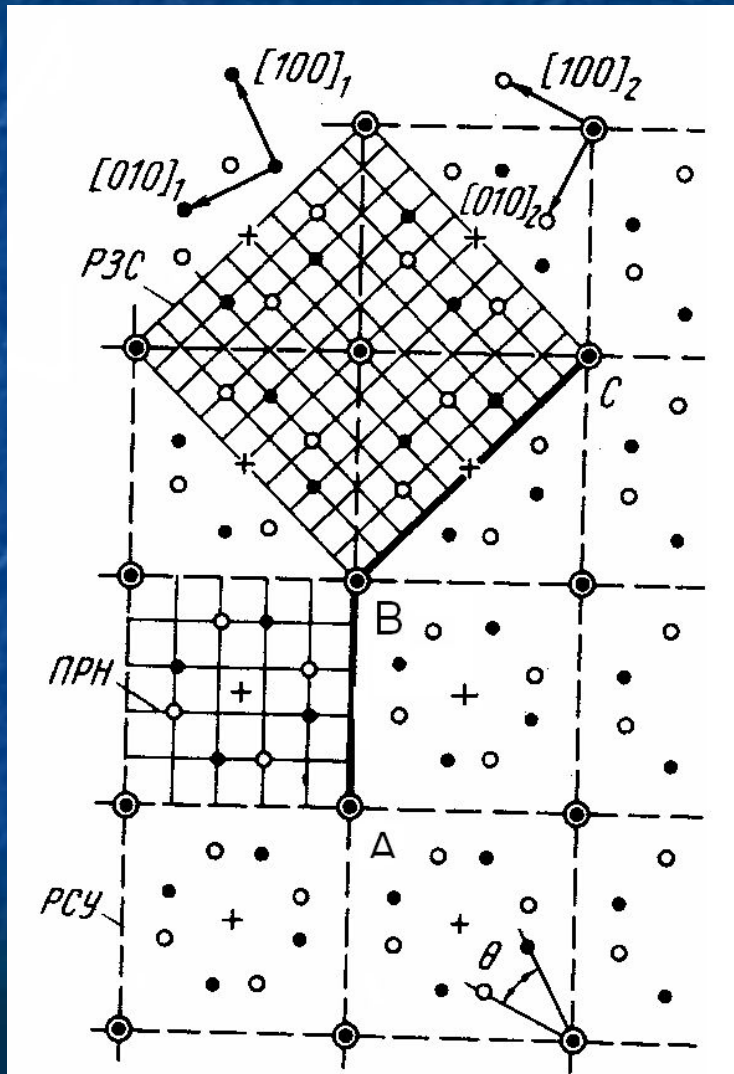
Простая граница наклона (а) и ее представление с точки зрения числа атомных плоскостей, оканчивающихся на границе (б)

Микроскопические параметры границы



- Границы зерен с одинаковыми макроскопическими параметрами, но различными микроскопическими параметрами.
- Для таких границ разработана специальная классификация, которая характеризуется обратной плотностью узлов совпадения, или в обозначениях - $\Sigma = n$.
- Например, если $n=3$, то $\Sigma 3$ означает, что третий узел в решетках является общим.
- Таким образом, чем больше число под знаком Σ , тем меньше плотность узлов совпадения.
- Если $\Sigma 3$, то граница имеет двойниковую ориентацию.

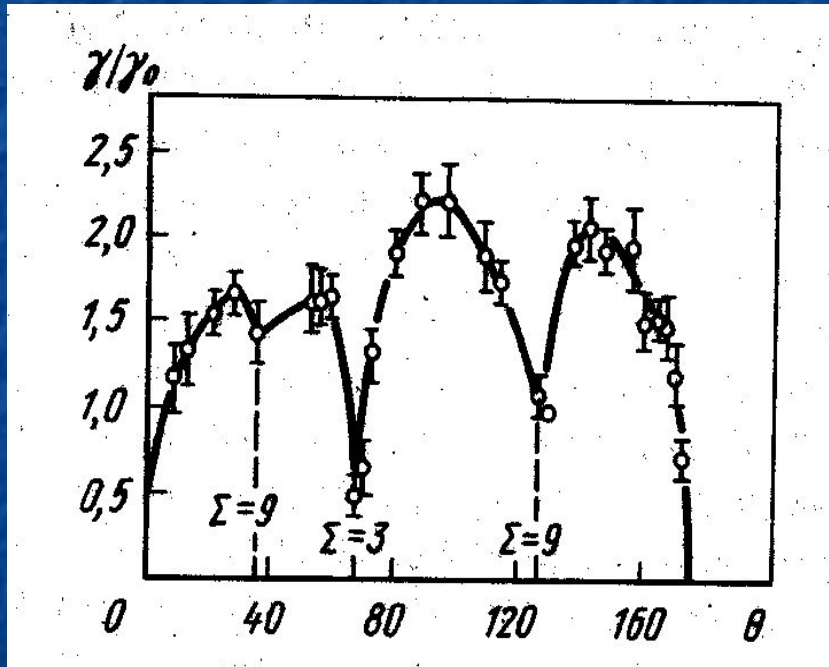
Структура совершенных границ зерен



- Наложение двух примитивных кубических решеток, разориентированных на $36,86^\circ$ вокруг оси $[001]$.
- Можно выделить:
 - 1 - решетку совпадающих узлов (PCY),
 - 2 - 0-решетку,
 - 3 - полную решетку наложения (ПРН),
 - 4 - решетка зернограничных сдвигов (PЗС).
- На рис. $\Sigma 5$

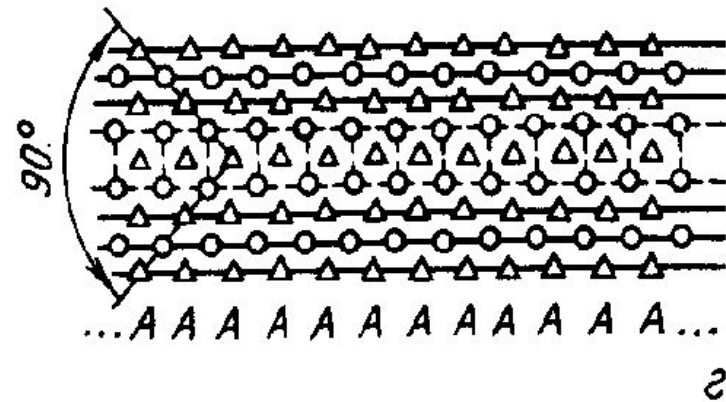
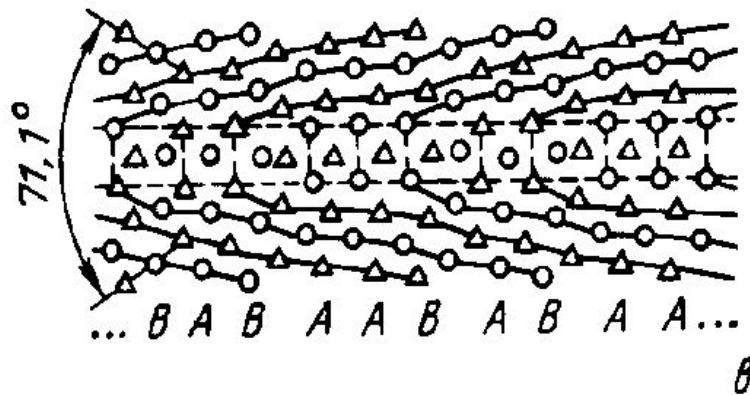
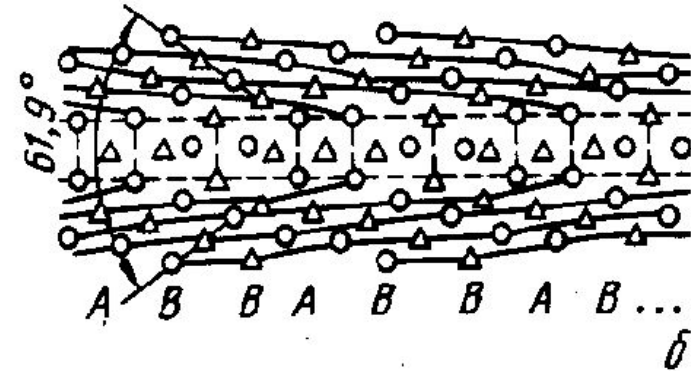
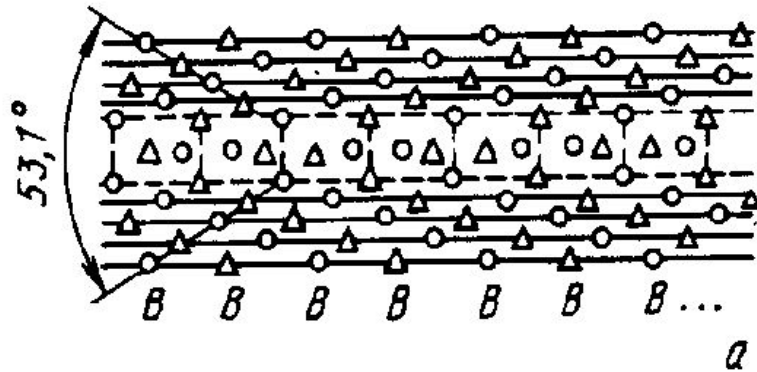
Специальные границы

Зависимость энергии границ зерен в алюминии, разориентированных вокруг оси [011], от угла разориентировки θ . Здесь γ – зернограничная энергия, γ_0 – энергия свободной поверхности.



- Решетка РСУ с высокой плотностью совпадающих узлов (малой величиной Σ) образуется только при некоторых, так называемых «специальных», разориентировках зерен.
- Границы с такими разориентировками называют специальными границами.

Большеугловые границы



Рассчитанные на ЭВМ структуры границ зерен в меди [48]:

a – граница $\Sigma 5$ $53,1^\circ$ [001]; *б* – граница $\Sigma 17$ $61,9^\circ$ [001]; *в* – граница $\Sigma 37$ $71,1^\circ$ [001]; *г* – "граница" $\Sigma 1$ 90° [001]; Границы $\Sigma 5$ и $\Sigma 1$ (совершенная кристаллическая решетка) являются предпочтительными

Большеугловые границы

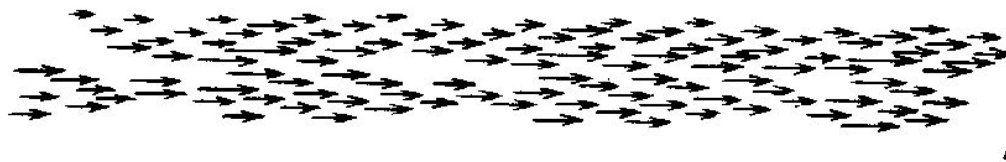
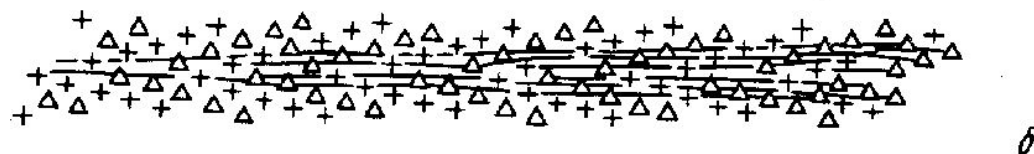
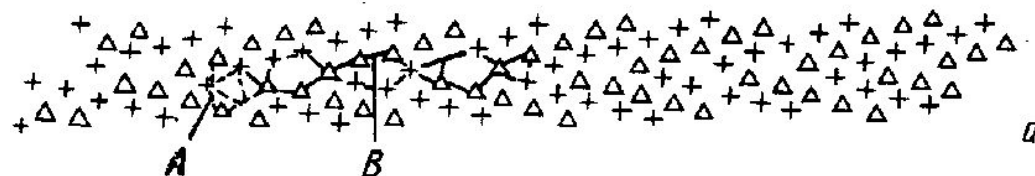
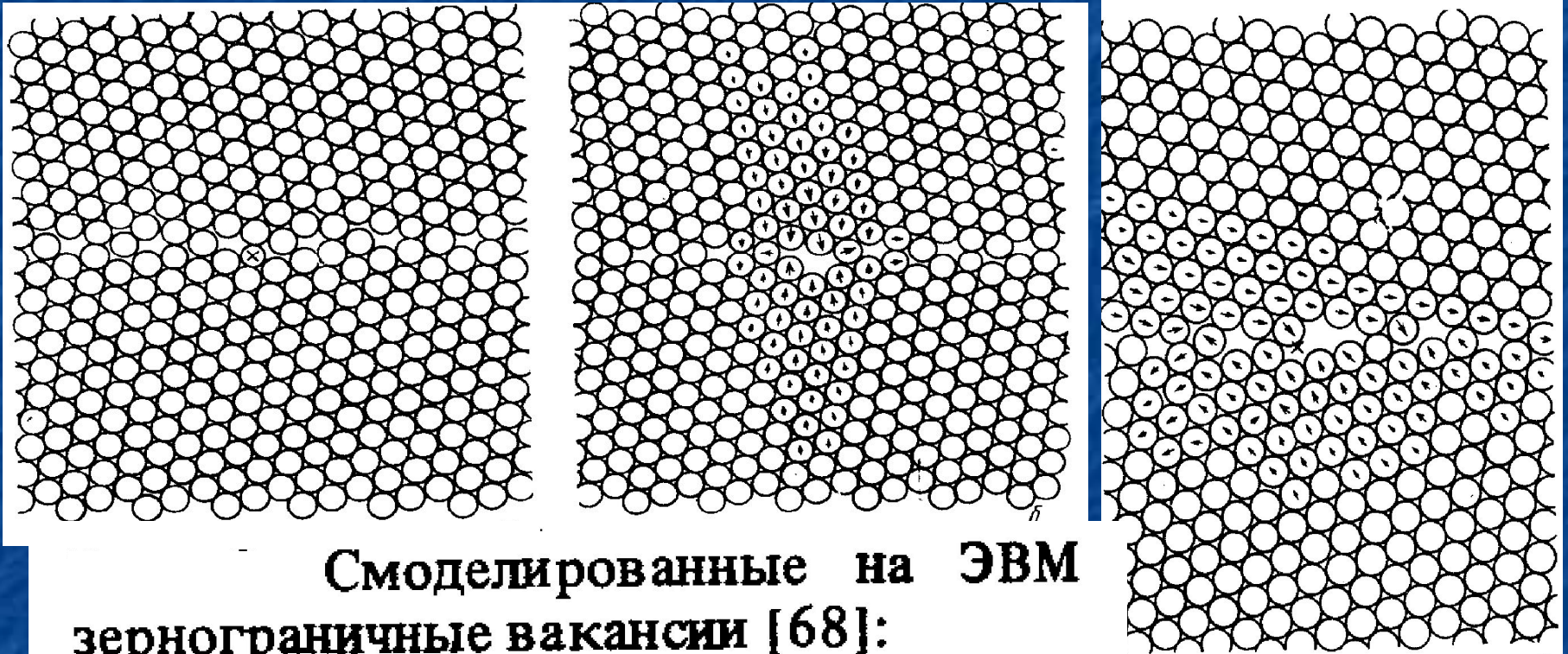


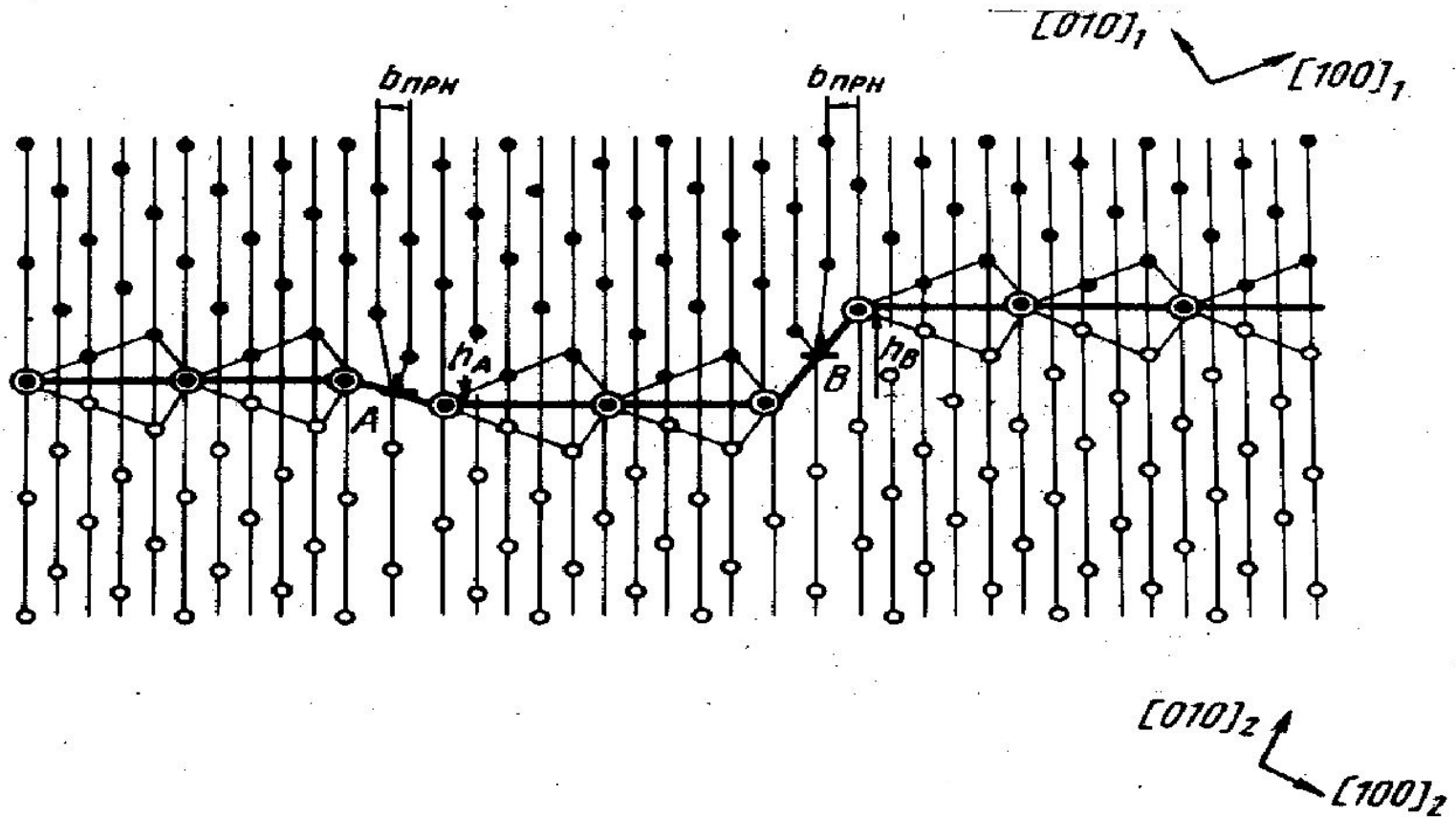
Рис. 7. Рассчитанная на ЭВМ структура границы $\Sigma 89$ $145,1^\circ$ $[\bar{1}10]$ в алюминии [48]:
A – структурные единицы предпочтительной границы $\Sigma 11$ $129,5^\circ$ $[\bar{1}10]$; B – структурные единицы предпочтительной границы $\Sigma 27$ $148,4^\circ$ $[\bar{1}10]$

Большеугловые границы



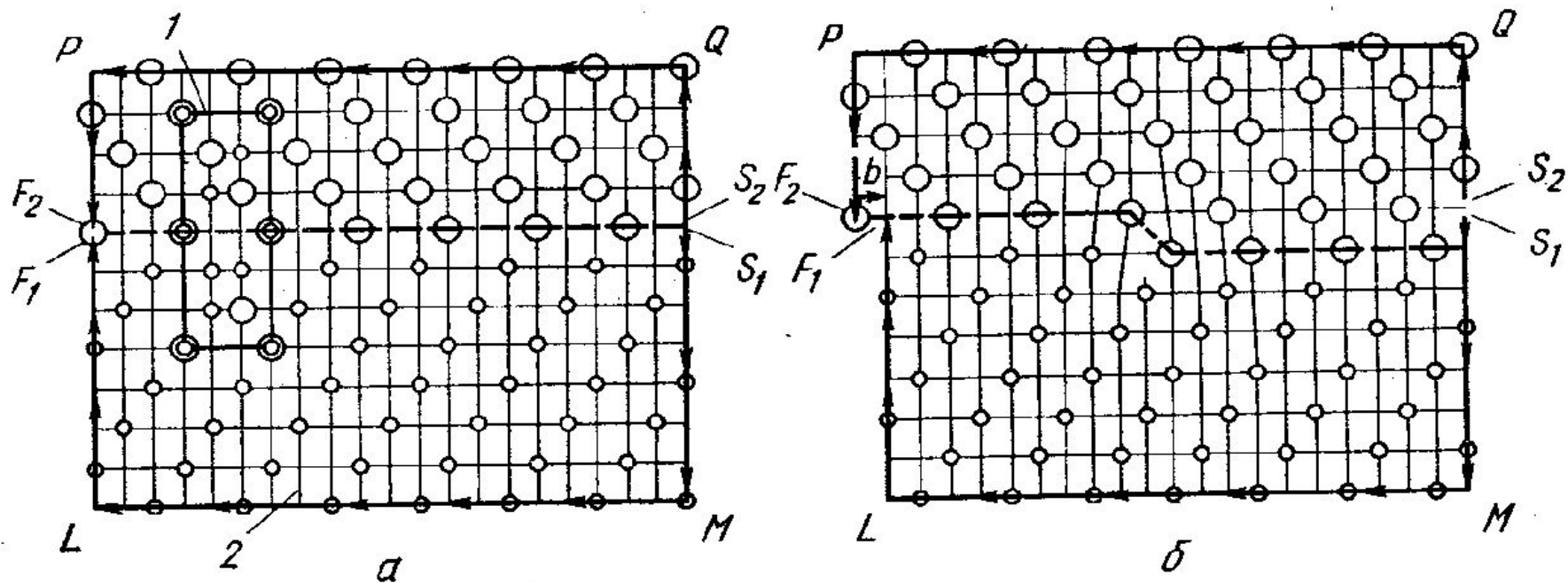
Смоделированные на ЭВМ зернограничные вакансии [68]:
а – граница наклона $\Sigma 7$; *б* – вакансия в этой границе, образованная удалением атома *X* на рис. *а*; *в* – вакансия в произвольной границе

Большеугловые границы



ЗГД с одинаковыми векторами Бюргера, но имеющие различные ступеньки в границе $\Sigma 5$

Большеугловые границы



Вид параллельно $\{111\}$ на двойник первого порядка $\{111\} \{112\}$ в г. ц. к. решетке, на котором изображены решетка совпадения и решетка воспроизводящихся смещений (а). Этот вид позволяет построить контур Бюргерса (б), который также показывает ЗГД в решетке воспроизводящихся узлов. Для дефектных кристаллов контур Бюргерса следует начинать и заканчивать строить на плоскости дефекта:

1 — решетка совпадения; 2 — решетка воспроизводящихся смещений