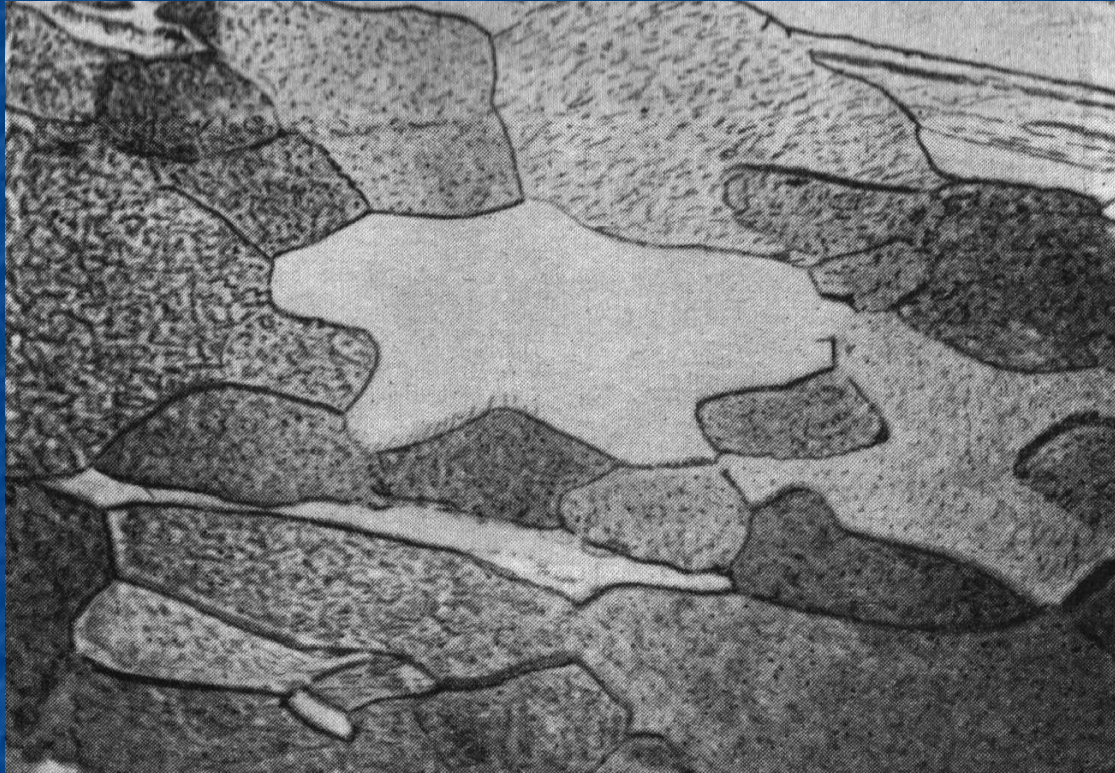


Плоские дефекты,  
двумерные наноструктуры

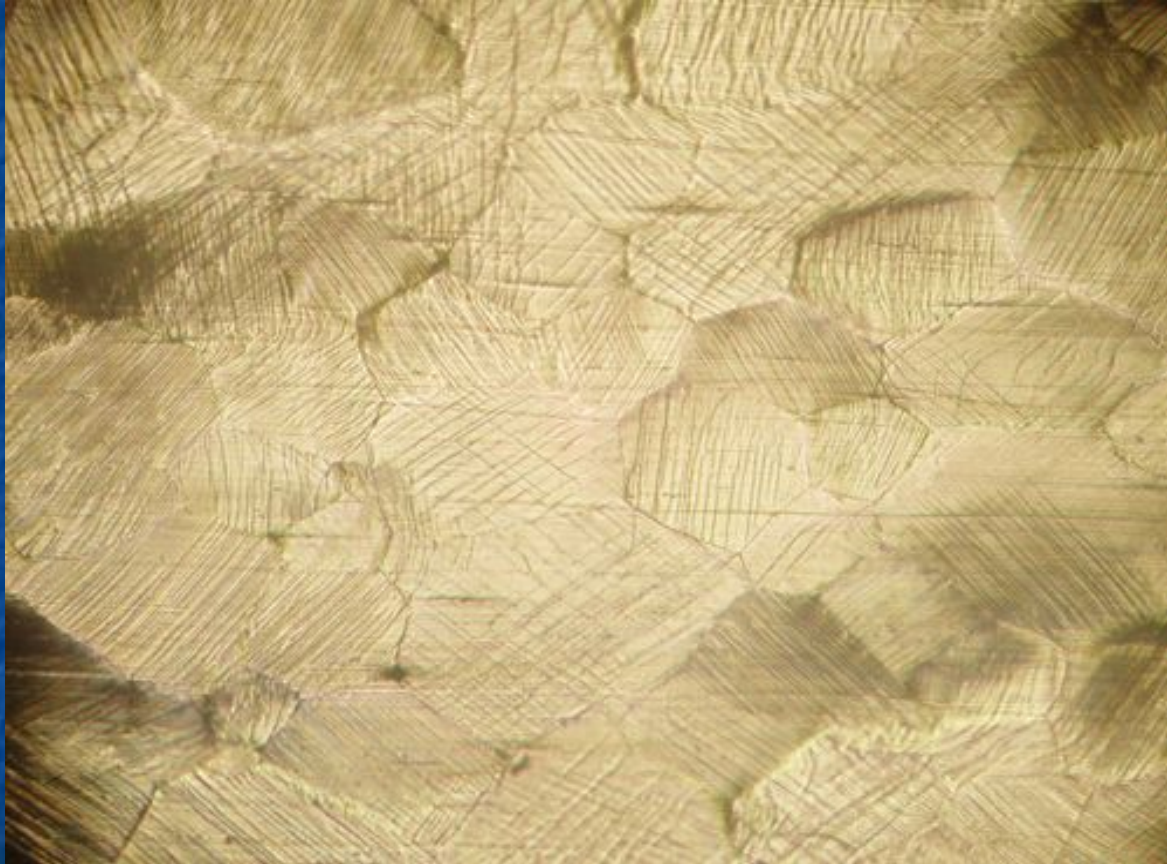
Большеугловые границы,

# Поликристаллическая структура



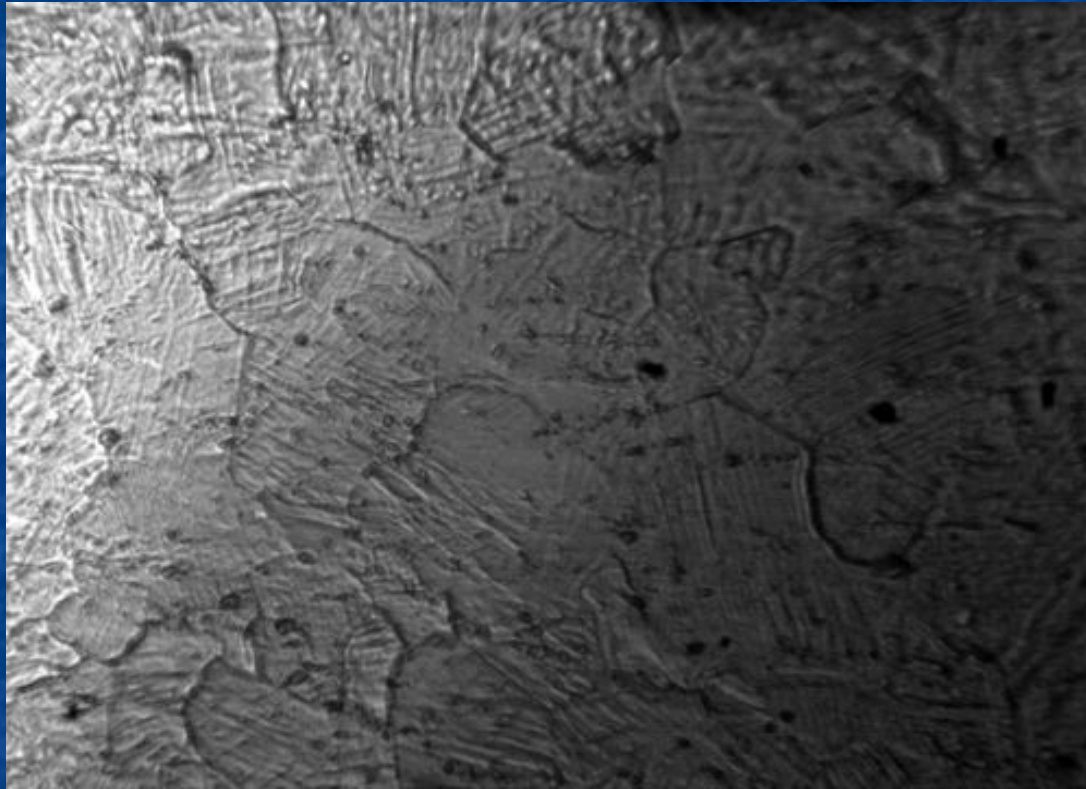
Зернограничная структура вольфрама  
при увеличении 500

# Поликристаллическая структура



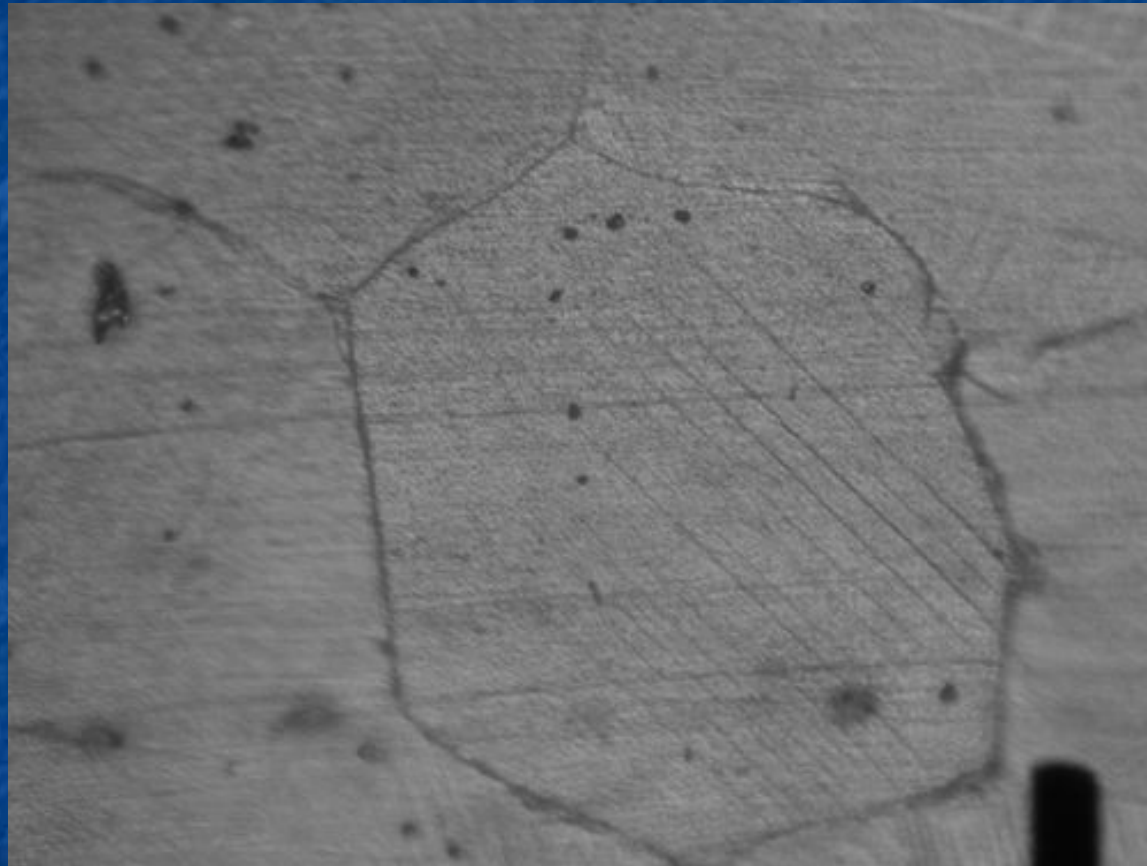
Зернограничная структура деформированного алюминия при увеличении  $\times 100$

# Поликристаллическая структура



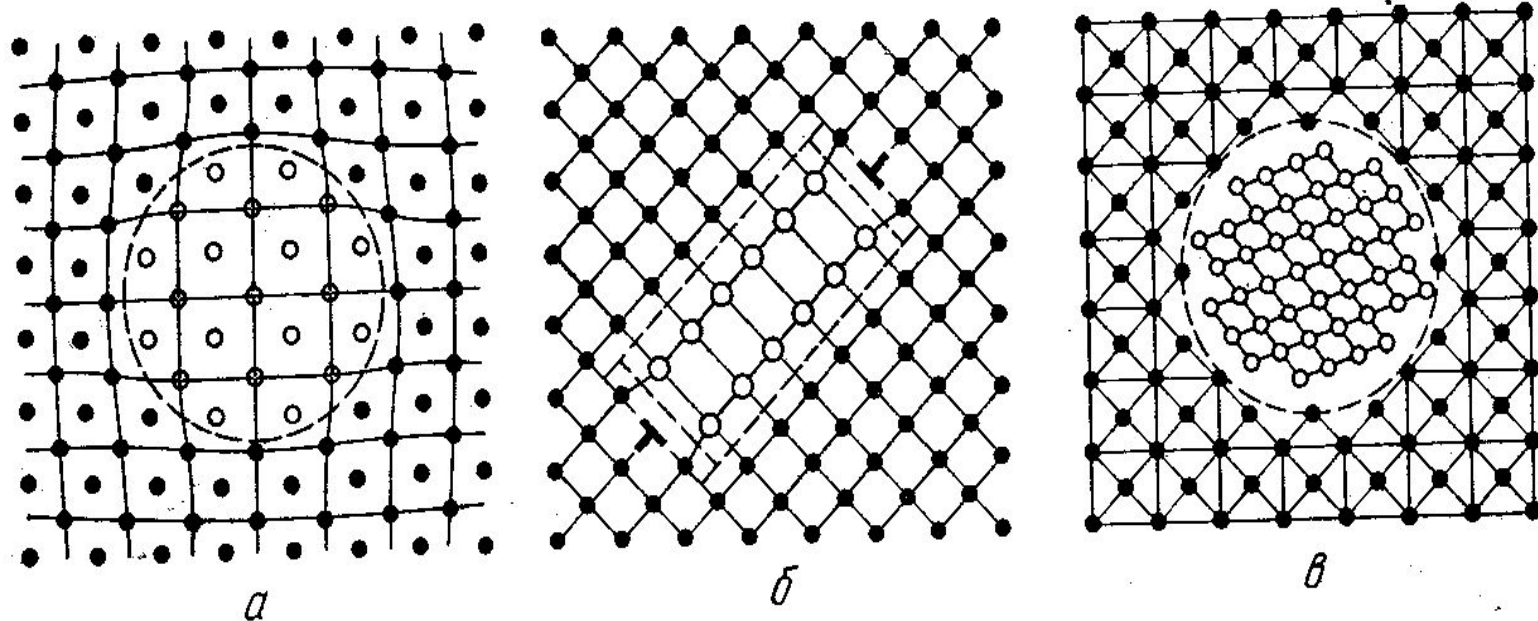
Зернограничная структура нитрида титана  
при увеличении 400

# Поликристаллическая структура



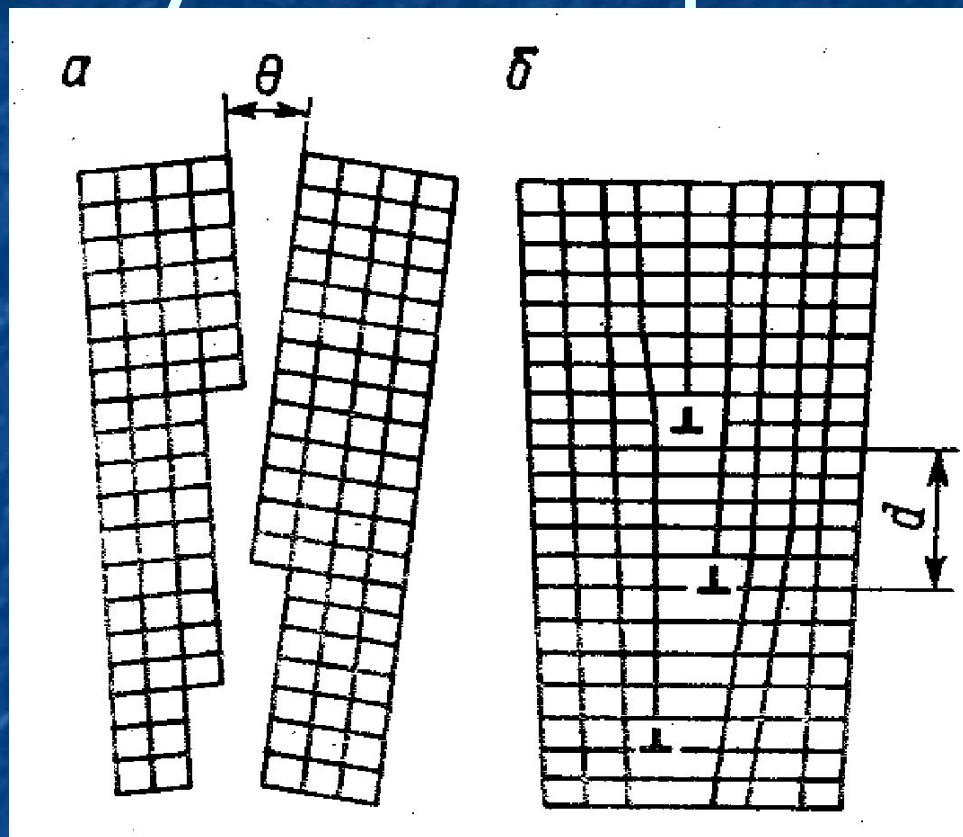
Зернограничная структура меди  
при увеличении 400

# Малоугловые границы

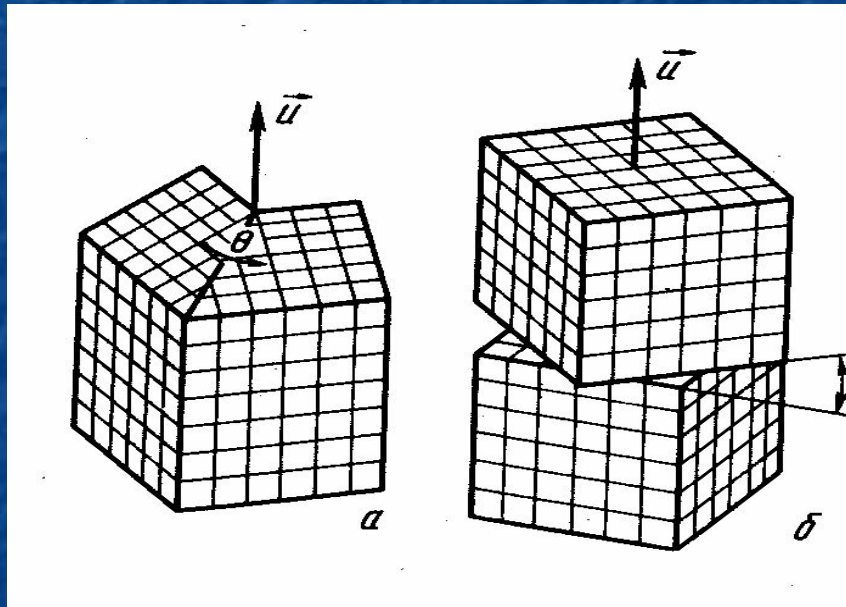


Степень когерентности выделений [120]:  
*a* — квазикогерентные или когерентные с положительным параметром несоответствия решеток; *б* — полукogerентные; *в* — некогерентные выделения

# Малоугловые границы



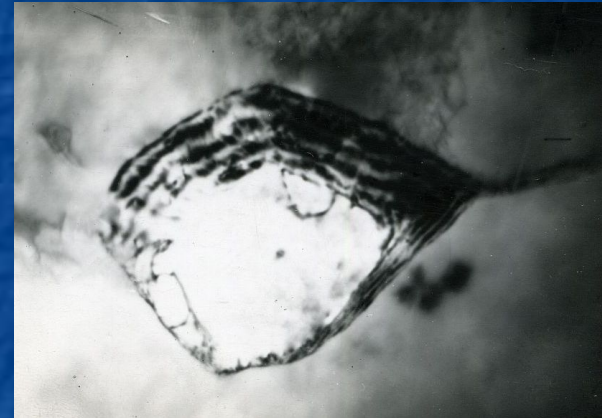
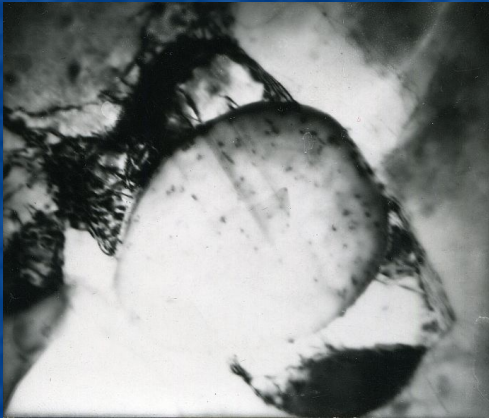
# Большеугловые границы



- 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  $\Theta$  вокруг общей оси  $U$ .
- Угол  $\Theta$  - 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  $\Theta$  и два параметра оси  $U$ .
- Эти три параметра задают вектор разориентировки
- $\Theta = |\Theta| U$

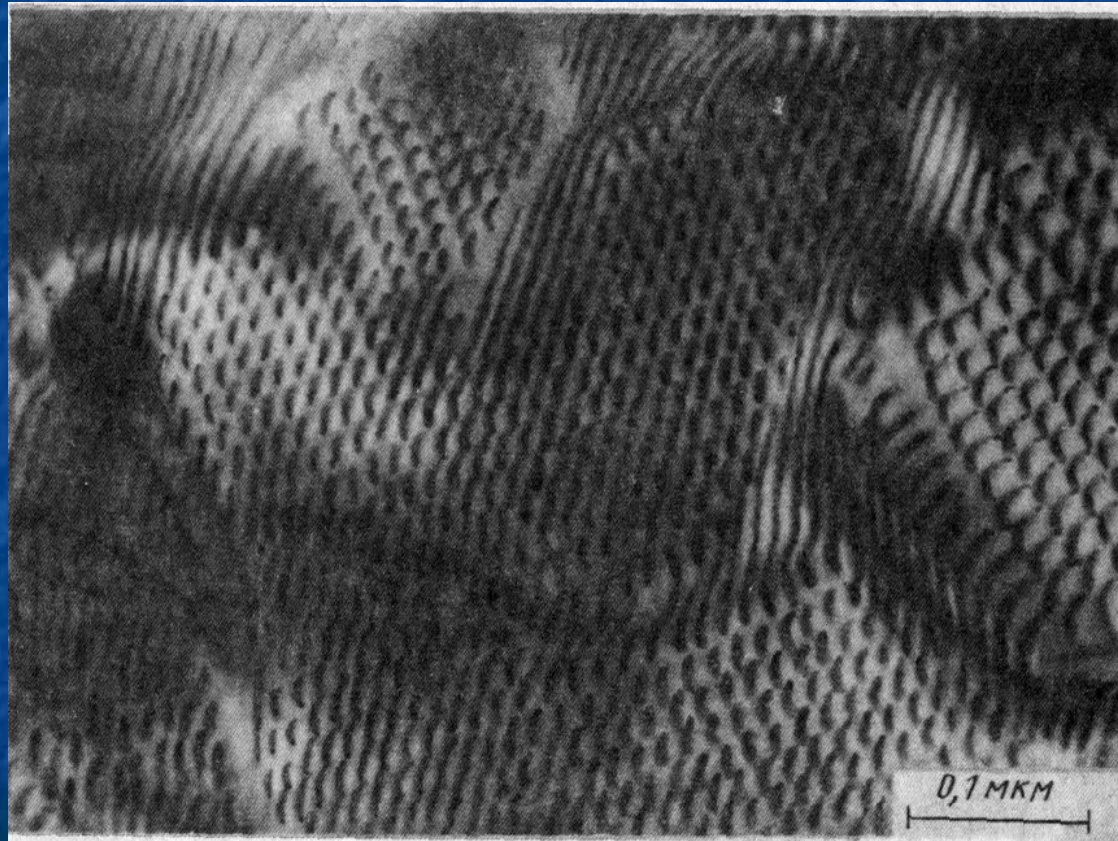


# Большеугловые границы



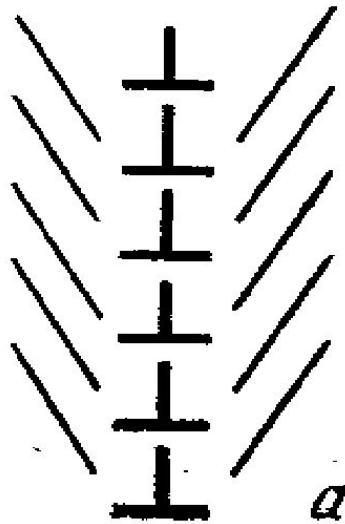
- Дислокационная структура большеугловых границ в алюминии. На рис. справа видны параллельные ряды зернограничных дислокаций. Размытость дислокационных линий свидетельствует о расщеплении полных дислокаций в большеугловой границе и превращении их в частичные (неполные) дислокации.

# Большеугловые границы

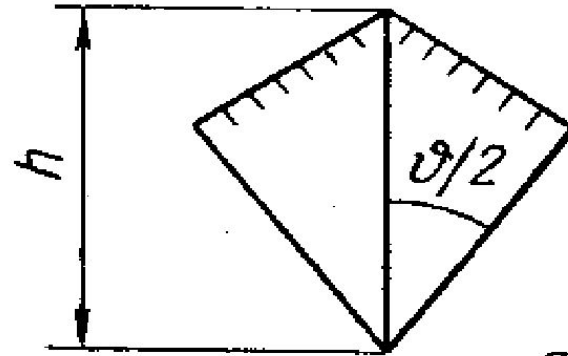


Сетка ЗГД, создающая отклонение  $0,5^{\circ}$  от разориентировки  $36,9^{\circ}$  [001] в границе кручения  $\Sigma 5$  в тонкопленочном бикристалле золота

# Большеугловые границы



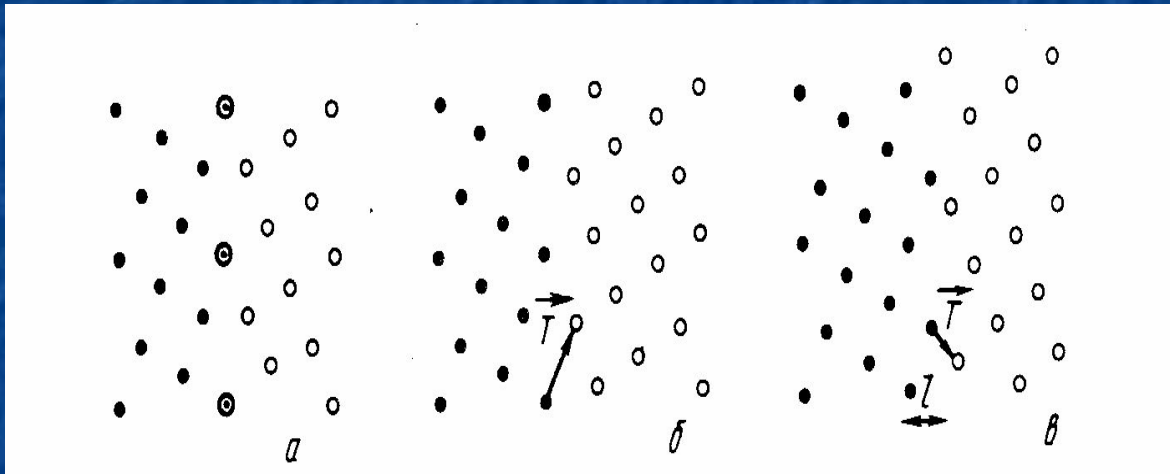
*a*



*б*

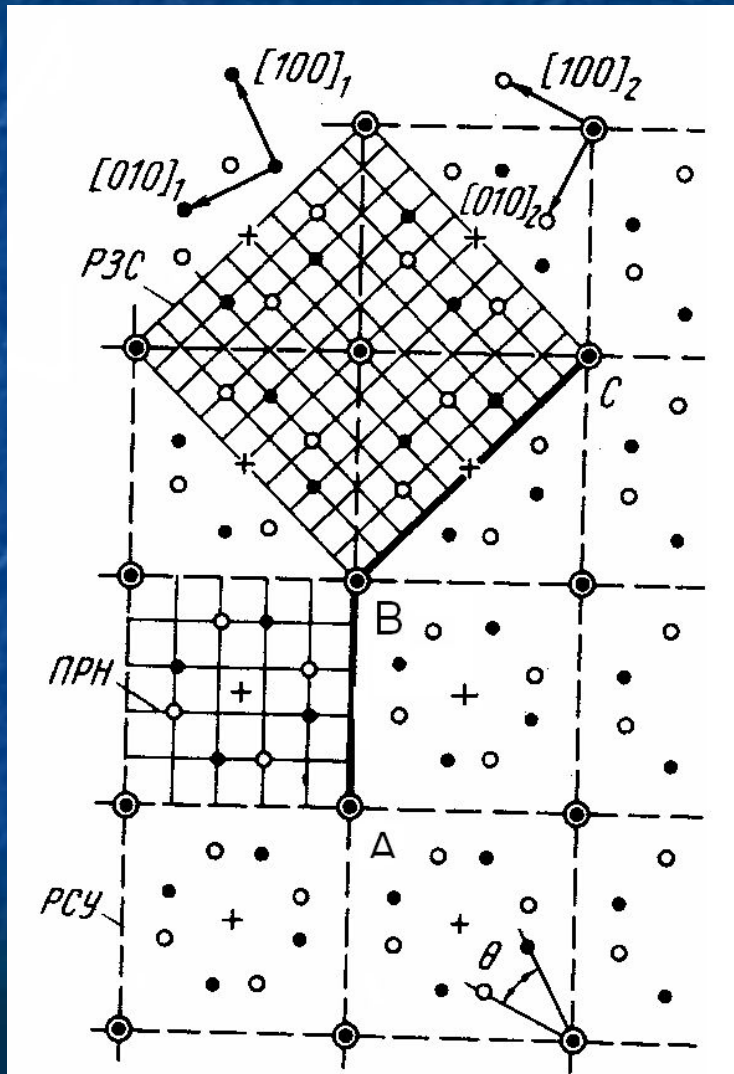
Простая граница наклона (*a*) и ее представление с точки зрения числа атомных плоскостей, оканчивающихся на границе (*б*)

# 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  $\Sigma$ , тем меньше плотность узлов совпадения.
- Если  $\Sigma 3$ , то граница имеет двойниковую ориентацию.

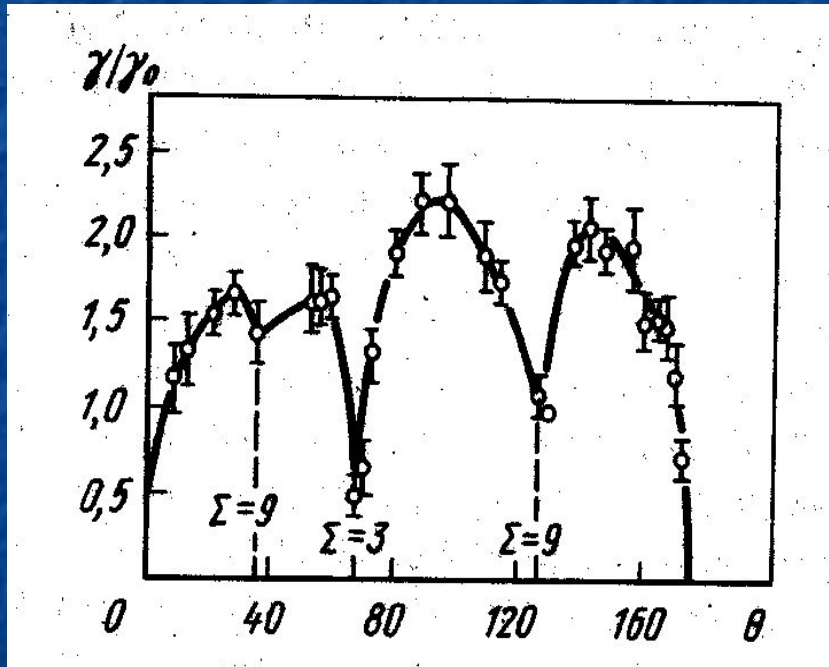
# Структура совершенных границ зерен



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

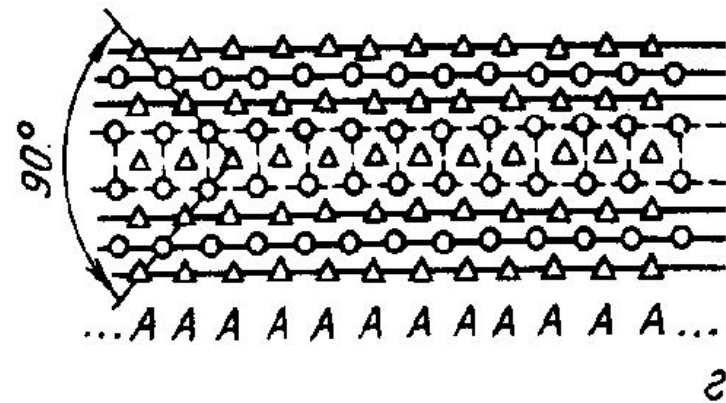
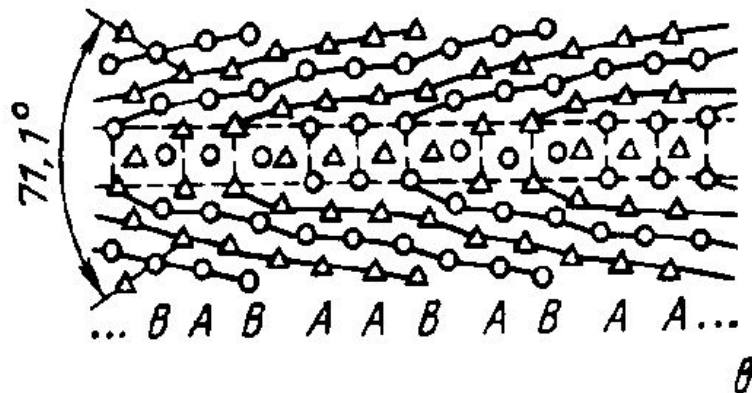
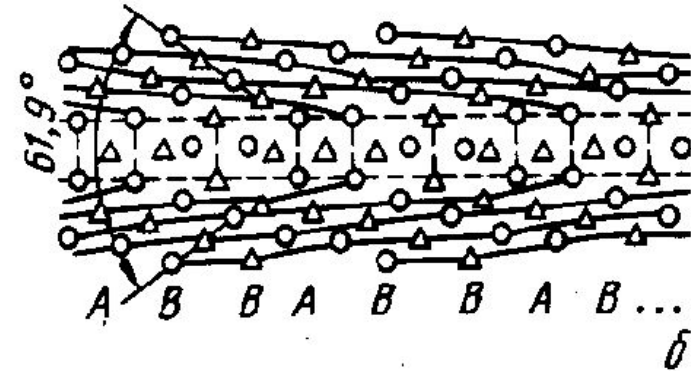
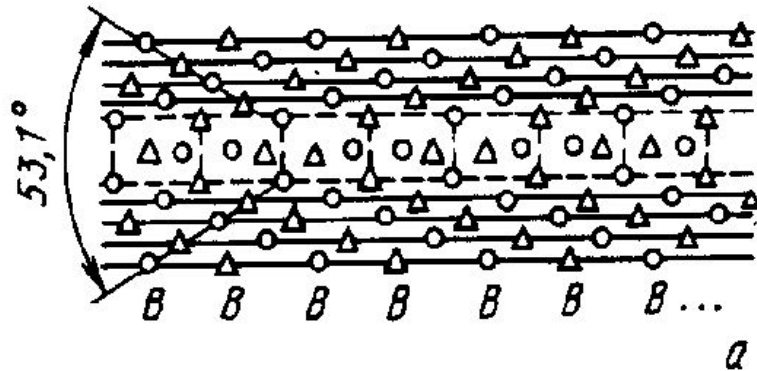
# Специальные границы

Зависимость энергии границ зерен в алюминии, разориентированных вокруг оси [011], от угла разориентировки  $\theta$ . Здесь  $\gamma$  – зернограничная энергия,  $\gamma_0$  – энергия свободной поверхности.



- Решетка РСУ с высокой плотностью совпадающих узлов (малой величиной  $\Sigma$ ) 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"  $\Sigma 1$   $90^\circ$  [001]; Границы  $\Sigma 5$  и  $\Sigma 1$  (совершенная кристаллическая решетка) являются предпочтительными

# Большеугловые границы

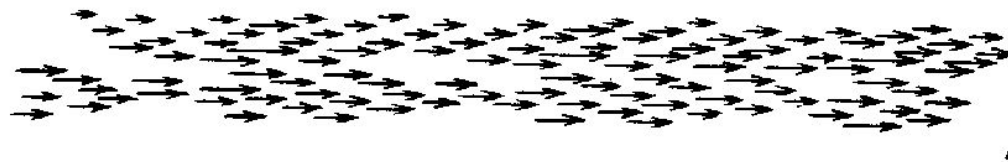
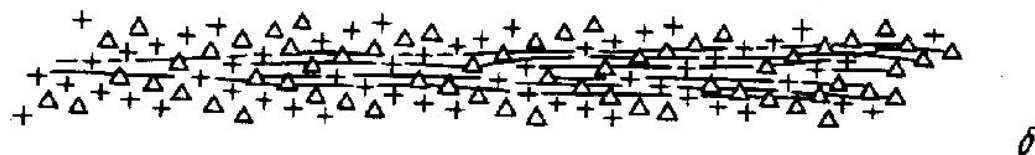
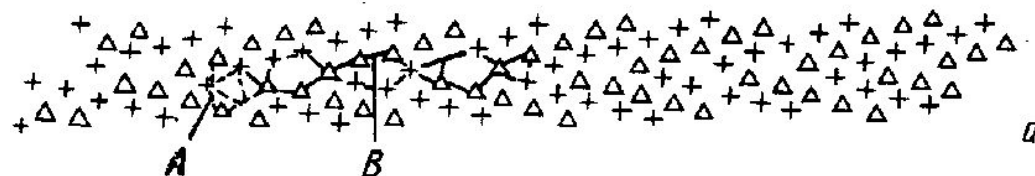
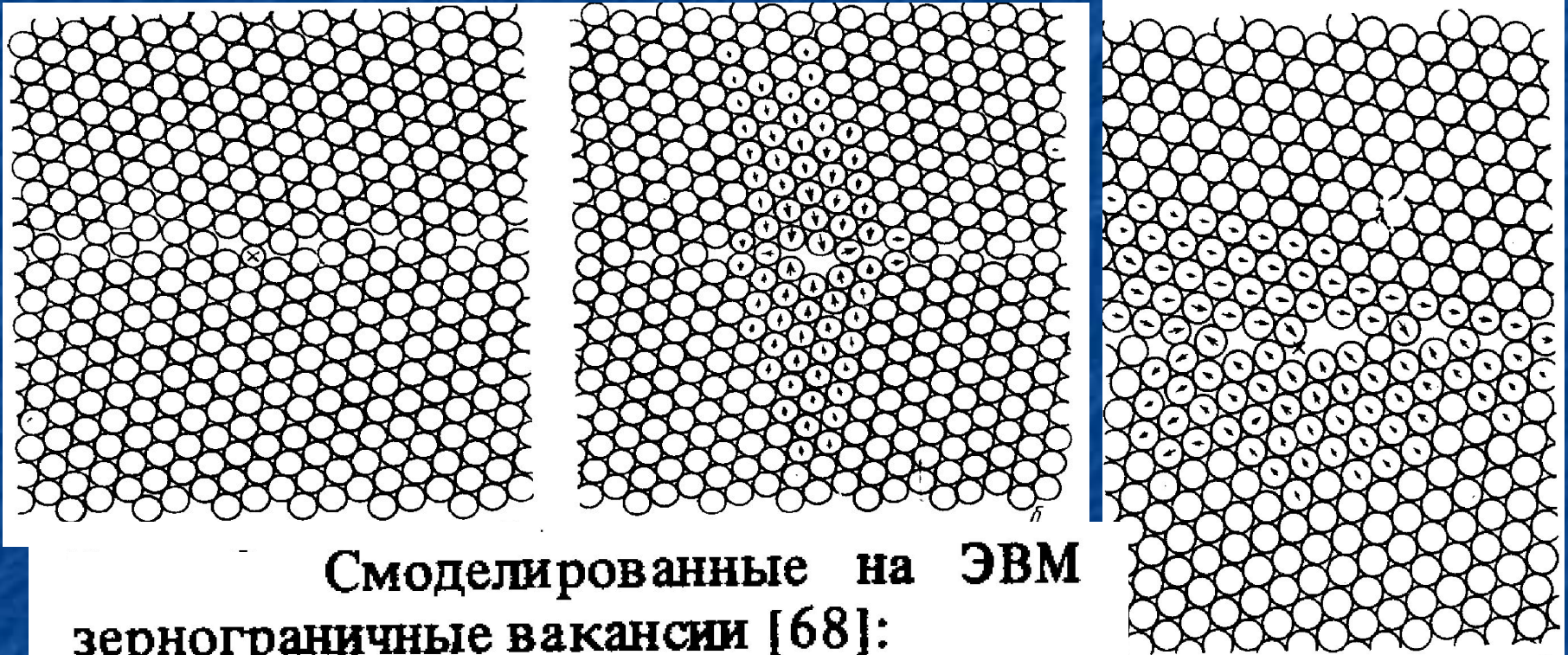


Рис. 7. Рассчитанная на ЭВМ структура границы  $\Sigma 89$   $145,1^\circ$   $[\bar{1}10]$  в алюминии [48]:  
A – структурные единицы предпочтительной границы  $\Sigma 11$   $129,5^\circ$   $[\bar{1}10]$ ; B – структурные единицы предпочтительной границы  $\Sigma 27$   $148,4^\circ$   $[\bar{1}10]$

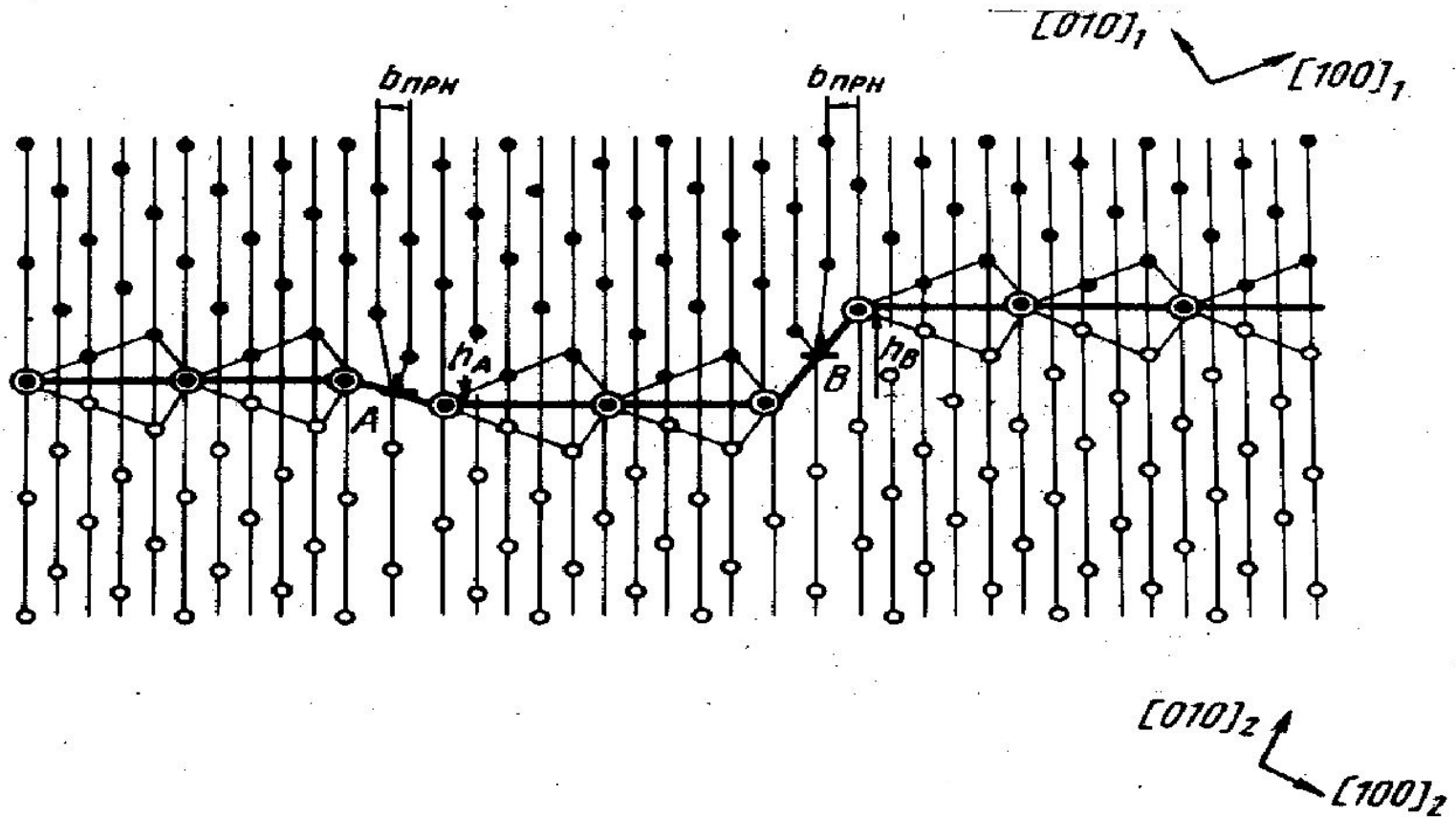


# Большеугловые границы



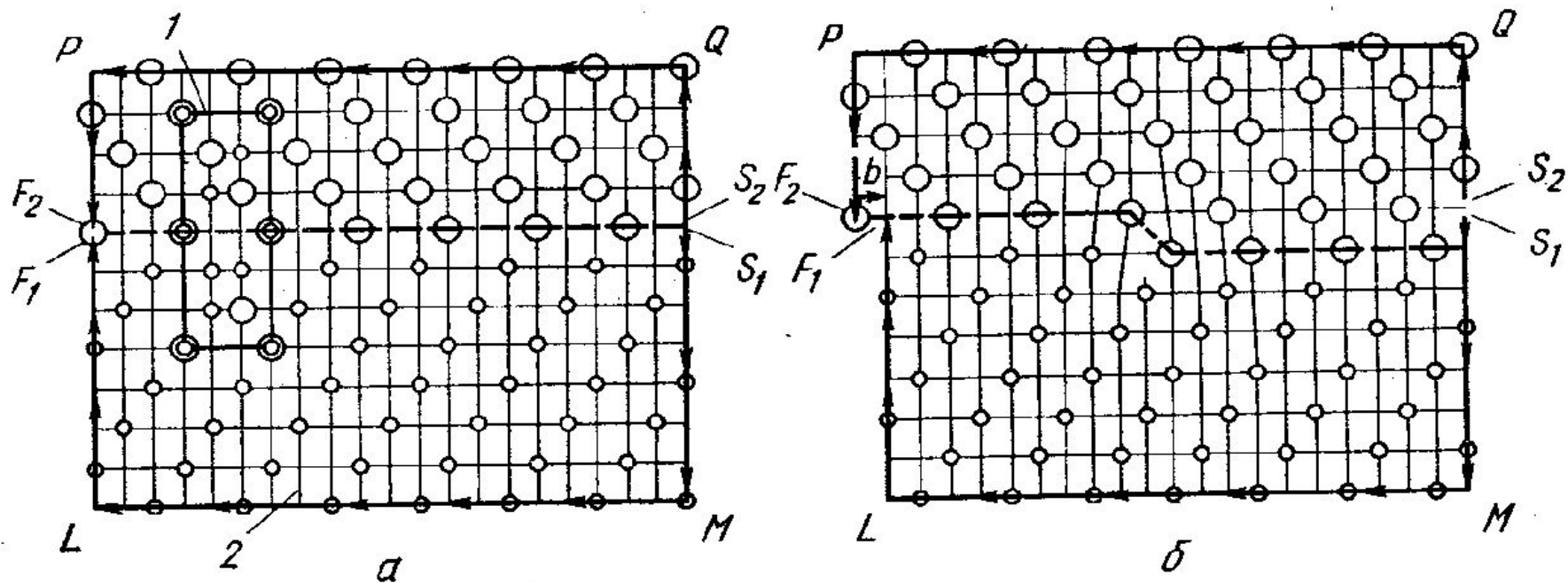
Смоделированные на ЭВМ зернограничные вакансии [68]:  
*а* – граница наклона  $\Sigma 7$ ; *б* – вакансия в этой границе, образованная удалением атома *X* на рис. *а*; *в* – вакансия в произвольной границе

# 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