

УДК 669.5 : 620.186.8

ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ И ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН

Страумал Б. В., Швиндлерман Л. С.

К настоящему времени накоплен большой экспериментальный материал по структуре и свойствам границ зерен. Принято разделять границы зерен на два обширных класса: специальные (или близкие к специальным) границы и границы общего типа. Свойства специальных границ резко отличаются от свойств границ общего типа — ориентационные зависимости поверхностного натяжения, параметры диффузии по границам, миграции границ и т. д. имеют резко немонотонный характер с экстремумами на «специальных» углах [1–6]. Достаточно давно разработаны геометрические модели, предсказывающие существование специальных границ. Первой из них была модель решеток совпадающих узлов (PCY), в рамках которой показано, что при определенных углах разориентации часть узлов взаимопроникающих решеток совпадает. PCY характеризуется величиной Σ — обратной плотностью совпадающих узлов. Оказалось, что угловые координаты границ со специальными свойствами действительно совпадают со значениями углов для PCY с низкими Σ . Это принято объяснять тем, что граница зерен, проведенная в PCY с низким Σ , обладает периодическим строением и более низкой энергией по сравнению с границами общего типа. Хотя PCY разрушается при сколь угодно малом отклонении от специального угла, свойства специальных границ отличаются от свойств границ общего типа в некотором конечном интервале углов разориентации. Это объясняется аккомодацией структуры специальных границ с помощью так называемых собственных зернограницных дислокаций [7, 8]. Векторы Бюргера этих дислокаций задаются полной решеткой наложений ПРН [8]. Чем больше величина Σ , тем меньше длина такого вектора Бюргера. В работах по машинному моделированию собственные зернограницные дислокации определяются как периодические «вкрапления» структурных единиц одного типа в границе, построенной из структурных единиц другого типа. К сожалению, такие расчеты пока проводятся без учета тепловых колебаний решетки. Существующие геометрические модели позволяют описать структуру любой специальной границы, предсказать специальные параметры разориентации. Однако уже создатели этих моделей понимали, что большие значения Σ и малые длины векторов Бюргера зернограницных дислокаций, по-видимому, не имеют физического смысла. Дискуссии о границах применимости геометрических моделей структуры границ зерен ведутся давно, однако полной ясности нет и в настоящее время [8, 9]. Так, в частности, остаются открытыми вопросы о максимальном значении Σ_{\max} , при котором специальные границы еще отличаются по свойствам от границ общего типа; неясно, во всем ли интервале температур специальные границы остаются специальными, и если существует Σ_{\max} , то как эта величина зависит от температуры. Необходимо узнать, чем определяется ширина углового интервала, в котором специальная граница проявляет свои специальные свойства, а ее структура состоит из чередующихся сингулярных участков и собственных зернограницных дислокаций.

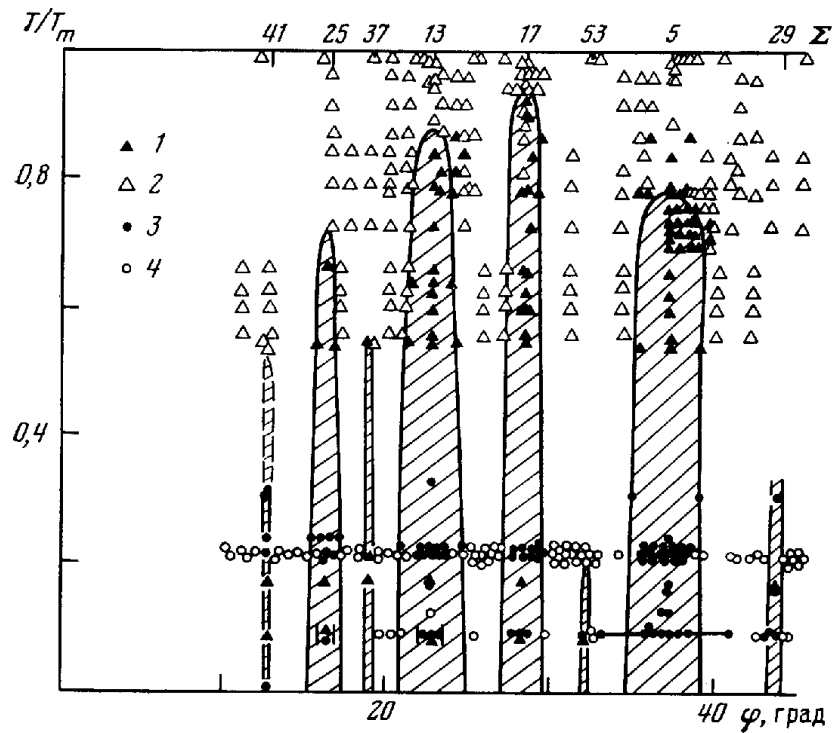


Рис. 1. Диаграмма существования специальных и неспециальных границ зерен $\langle 100 \rangle$. 1 — границы со специальными свойствами; 2 — границы с неспециальными свойствами; 3 — границы со специальной структурой; 4 — границы с неспециальной структурой

Анализ этих вопросов и составляет цель настоящей работы. С помощью известных из литературы экспериментальных данных построены области существования специальных границ в координатах температура — угол разориентации.

Анализ экспериментальных данных о специальных и неспециальных границах. На рис. 1 и 2 приведены все известные авторам экспериментальные данные о специальных и неспециальных границах зерен. В препринте [10] все эти результаты приведены в виде таблицы с подробным списком литературы.

На рис. 1 изображены данные для границ зерен $\langle 100 \rangle$ (кручения и наклона). По оси ординат отложена гомологическая температура, а по оси абсцисс — угол разориентации, который меняется от 0 до 45° . На диаграмме есть точки четырех типов: 2, 4 — значения углов разориентации и температур, при которых границы зерен проявляли специальные свойства; 1, 3 — границы, проявляющие себя как границы общего типа; 3, 4 — результаты прямых экспериментов, 1, 2 — косвенных. На основании экспериментальных данных, как прямых, так и косвенных, на рис. 1 приведены линии, отделяющие области существования специальных границ с различными Σ от единой области существования границ общего типа. Оказывается, что лишь границы с $\Sigma=3$ проявляют себя как специальные вплоть до температуры плавления. Границы с более высокими Σ остаются специальными лишь до некоторой конечной температуры. Отметим, что угловой интервал существования специальных границ уменьшается с ростом Σ .

На рис. 2 приведены данные об интервалах существования всех специальных границ. В отличие от рис. 1 по оси абсцисс отложен не угол разориентации, а величина Σ . Угловой интервал существования специальных границ не показан. Рисунок 2 позволяет оценить температуру, при которой происходит потеря «специальных» свойств для границ с данным Σ . Результаты сгруппированы в порядке возрастания Σ , а для каждого Σ — в порядке убывания гомологической температуры. (Под гомологи-

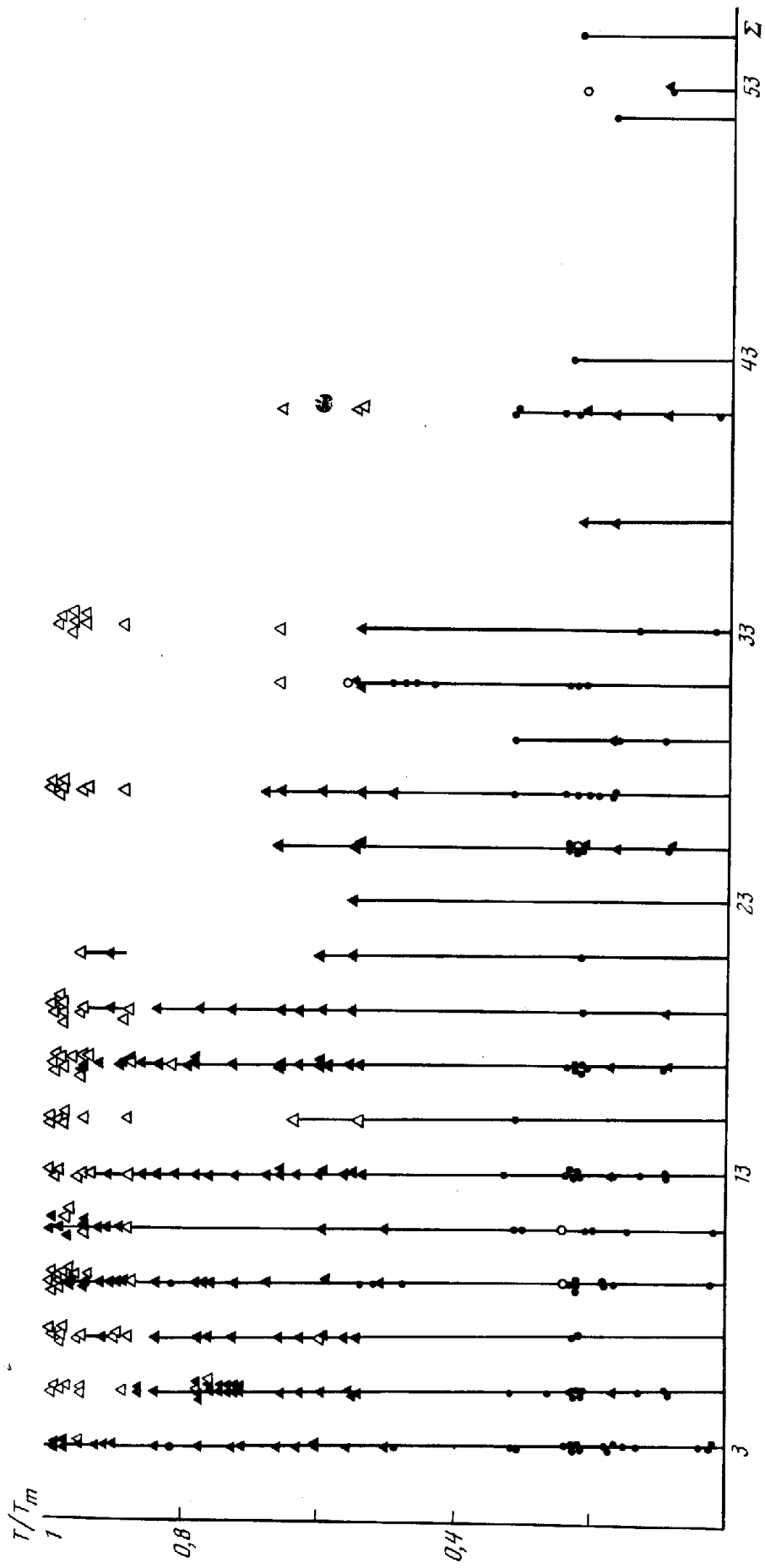


Рис. 2. Зависимость температуры существования специальных и несpecialных границ зерен от обратной плотности совпадающих узлов Σ . Обозначения, как на рис. 1

ческой температурой понимается отношение температуры, при которой изучались свойства границ или их структура, к температуре плавления вещества.) Использование гомологической температуры позволяет объединить в общую картину результаты изучения одних и тех же границ в различных веществах. Такое объединение в определенной мере эквивалентно изучению границ зерен в одном и том же веществе, но при различных температурах. Данных о структуре и свойствах границ в настоящее время не так много, поэтому здесь не разделены и границы зерен различных типов, т. е. наклона и кручения, хотя на специальных границах наклона и кручения различается характер набора собственных зернограницных дислокаций: стенки и сетки — соответственно одномерная или двумерная аккомодация отклонения угла разориентации от специального.

Охарактеризуем кратко методы исследования свойств и структуры границ зерен. Объясним, почему в каждом отдельном случае причислены границы зерен к специальным или неспециальным (границам общего типа). Обсудим косвенные методы, когда определяются какие-либо свойства границы.

Метод припекания металлических шариков. Идея этого метода предложена в работе [11], а впервые реализована в работах [9, 12, 13], в которых изучено распределение по разориентациям микроскопических монокристаллических шариков, припеченных к массивной монокристаллической подложке. Если на ориентационной зависимости поверхностного натяжения границ есть сингулярные точки, то шарики могут поворачиваться при отжиге в положение с минимальным поверхностным натяжением, отвечающее этим сингулярным точкам. Поворот происходит под воздействием градиента поверхностного натяжения границы зерен между шариком и подложкой $dc/d\theta$, который возрастает при приближении к сингулярной точке. Таким образом, углы, на которых наблюдались резкие отклонения количества шариков от среднего значения, отвечают специальным границам с низким поверхностным натяжением, т. е. специальным границам. Если при углах, соответствующих данному значению Σ , не отмечается пиков в распределении шариков, это значит, что границы с данным Σ не отличаются по поверхностному натяжению от границ общего типа и не являются специальными.

Данные, полученные указанным методом, приведены на рис. 1 и 2 в интервале температур от $0,9 T_{пл}$ до $T_{пл}$. Отметим, что из совокупности данных, приведенных на рис. 1 и 2, видно, что при более низких гомологических температурах наблюдается все больше границ со специальными свойствами. Этот факт проявляется в работах [12, 13]: с уменьшением температуры растет количество пиков на распределениях числа шариков по разориентации. Возрастание количества пиков наблюдается и при увеличении давления [13]. Эти результаты интерпретируются авторами как проявления фазовых переходов на границах [9, 14]. К сожалению, в работах [12, 13] не указаны величины Σ , отвечающие изученным границам, поэтому столь важные результаты не вошли в таблицу работы [10] и не приведены на рис. 1 и 2.

К следующей группе отнесем *методы, в которых данные о специальных границах зерен получены из ориентационных зависимостей термодинамических свойств границ зерен.* Измерения свойств (поверхностного натяжения [15, 16] коэффициента диффузии [2, 3, 17], подвижности [3—6, 18], микротвердости [19] и параметров межкристаллитной коррозии [20]) проводили на бикристаллических образцах с одиночными границами зерен, кристаллографические параметры которых были известны (обычно с точностью $\pm 0,5^\circ$). Такие ориентационные зависимости имеют немонотонный характер с минимумами, или максимумами, которые соответствуют специальным границам. Точки, полученные в этих экспериментах, заполняют интервал гомологических температур от 0,5 до $0,9 T_{пл}$. Среди работ такого типа следует особо отметить исследование [17], где

изучали коэффициенты пограничной диффузии никеля в меди по углам наклона с углами разориентации θ , близкими к специальному для $\Sigma=5$, в интервале $\Delta\theta < 2^\circ$. По мнению авторов работы [17], скачки на температурных и угловых зависимостях коэффициента диффузии связаны с гипотетическим фазовым переходом специальная граница — граница общего типа.

В группе методик [21—28] изучено *распределение зерен по разориентациям после рекристаллизационных отжигов*. Эта методика близка к методу Шьюмона — Глейтера, но она является «еще более косвенной», поскольку в методе Шьюмона — Глейтера распределение по углам определяется свойствами индивидуальных границ между шариками и подложкой, а при рекристаллизации распределение по углам устанавливается в ходе эволюции большой системы связанных между собой и поэтому сильно взаимодействующих границ зерен. Углы разориентации границ определяют с помощью рентгеновских методов или электронной микроскопии. Эти данные иногда дополняют изучением фасетирования границ, так как на фасетки разбиваются только специальные границы.

К *прямым методам* определения специальных границ относят изучение структуры границ зерен с помощью электронной микроскопии и электронографии (при комнатной температуре [29—40] и с нагревом *in situ* [41]), рентгеновской дифракции [42—44] и полевой ионной микроскопии [45]. Специальными считают в этих случаях границы, на которых наблюдается сетка зернограницных дислокаций, аккомодирующих, в соответствии с моделью Брендона [7, 46], отклонение угла разориентации границы зерен от специального.

С помощью прямых методов угловой интервал существования специальных границ определяется наиболее точно (до $\pm 0,01^\circ$). К специальным относят не только те границы, на которых наблюдается равновесная сетка зернограницных дислокаций с векторами Бюргера, соответствующими решетке ПРН [8, 9], но и те границы зерен, в которых наблюдались локализованные зернограницные дислокации, образовавшиеся в результате, например, расщепления поглощенных границей решеточных дислокаций. Особо следует отметить среди работ этой группы очень подробные исследования границ кручения (100) в золоте и окиси магния, выполненные в работе [32], работы [33, 36], а также работу [39] по изучению зернограницных дислокаций в нержавеющей стали при различных температурах. В работе [39] на границе $\Sigma=31$ при переходе от температуры 625° к температуре 725° наблюдалось размытие электронно-микроскопических изображений зернограницных дислокаций, что можно интерпретировать как переход от специальной границы зерен к границе зерен общего типа.

Аналогия между специальными и неспециальными границами зерен и соизмеримыми и несоизмеримыми фазами в адсорбированных слоях на поверхности. В работе [47] предложено рассматривать границы зерен на основе концепции соизмеримости. В ней проводится аналогия между структурами совпадения и соизмеримыми структурами, между вторичными зернограницными дислокациями и доменными стенками в слабосоизмеримых структурах.

Закономерности, определяющие условия существования соизмеримых и несоизмеримых фаз на поверхности, получены в теоретических работах [48—50]. В них рассматривается монослой адсорбированных атомов, который находится под воздействием периодического потенциала монокристаллической подложки. Минимизируя энергию взаимодействия атомов с подложкой, авторы работы [49] получили решения двух типов: в одном случае решетка адсорбата соизмерима с подложкой вдоль оси x , в другом — положения не всех атомов адсорбата соответствуют энергетическим минимумам подложки, т. е. решетки монослоя и подложки несоизмеримы. Соизмеримые фазы возникают в окрестностях δ всех точек, где отноше-

ние b/q периодов подложки и слоя адатомов рационально:

$$b/q = M/N + \delta.$$

Величина N называется порядком соизмеримости. Величина δ экспоненциально уменьшается с ростом порядка соизмеримости N . Кроме этого, авторы работы [45] показали, что при определенной температуре T_1 дальний порядок в соизмеримой фазе исчезает и при $T > T_1$ она превращается в несоизмеримую. Соизмеримые фазы более высоких порядков исчезают при температуре $T_N = T_1/N^2$.

Рассмотрим аналогию между поверхностными фазами и границами зерен. В случае границ зерен сверхструктура на границе тоже возникает при рациональных отношениях периодов решеток двух зерен при их взаимном развороте. Аналогом концентрации адсорбированных атомов будет в этом случае угол разориентации θ , а аналогом порядка соизмеримости — величина Σ . «Соизмеримые фазы» (специальные границы) тоже существуют в некотором интервале углов $\Delta\theta$ вблизи специальной разориентации θ_2 . В интервале $\theta_2 \pm \Delta\theta$ структура специальных границ состоит из чередующихся сингулярных участков и зернограничных дислокаций, которые аккомодируют несоответствие $\Delta\theta$. При $\Delta\theta \rightarrow 0$ расстояние между зернограничными дислокациями стремится к бесконечности и при достаточно малых $\Delta\theta$ такие дислокации не наблюдаются (например, в работе [51] при $\Delta\theta = 0,005^\circ$ для $\Sigma = 9$ и $\Delta\theta = 0,02^\circ$ для $\Sigma = 11$ собственные зернограничные дислокации не наблюдались, а уже при $\Delta\theta = 0,1^\circ$, $\Sigma = 9$ [52, 53] и $\Delta\theta \approx 0,2^\circ$, $\Sigma = 11$ [54] они были видны на электронно-микроскопических снимках). С ростом $\Delta\theta$ энергия системы собственных зернограничных дислокаций растет и при определенных значениях $\Delta\theta$ становится более выгодной «несоизмеримая фаза» — неспециальная граница зерен общего типа со структурой, описываемой с помощью 0-решетки [38].

На основе этой аналогии можно применить выводы теории Покровского и Талапова [48–50] для границ зерен. Результаты, приведенные на рис. 2, позволяют это сделать. На рис. 3 приведена зависимость температуры, при которой происходит переход от специальной границы к неспециальной, от величины Σ . Верхние границы изображенных температурных интервалов соответствуют минимальным значениям температуры, при которых не наблюдалось специальных свойств у данных границ, а нижние границы отвечают максимальным температурам, при которых данные границы еще вели себя как специальные. Из-за недостатка экспериментальных данных для ряда значений отсутствуют верхние границы температурных интервалов. В целом рис. 3 позволяет считать, что температура перехода от специальной границы к неспециальной действительно падает с ростом Σ — параметра соизмеримости для границ, а при данной температуре специальные свойства проявляются лишь у границ с величиной Σ , меньшей некоторой Σ_{\max} .

На рис. 4 приведена зависимость логарифма углового интервала $\Delta\theta$ существования специальных границ от величины Σ . Точки при изменении $\Delta\theta$ на два порядка величины хорошо ложатся на прямую. Следовательно, угловой интервал существования специальных границ действительно экспоненциально уменьшается с ростом параметра соизмеримости Σ .

Таким образом, предсказания теории [49] хорошо согласуются с экспериментальными данными. Сформулируем основные выводы, которые следуют из проведенного анализа экспериментальных данных по изучению структуры и свойств границ зерен и из аналогии между границами зерен и адсорбированными слоями на поверхности.

1. Специальные границы проявляют свои специальные свойства в определенном интервале углов и температур.

2. Температура перехода специальных границ в границы общего типа уменьшается с ростом величины Σ , которая играет роль параметра соизмеримости для границ зерен. При данной температуре, таким образом,

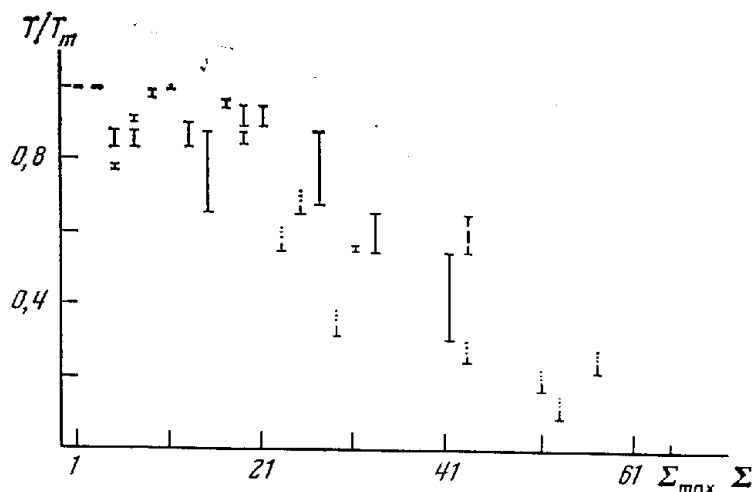


Рис. 3

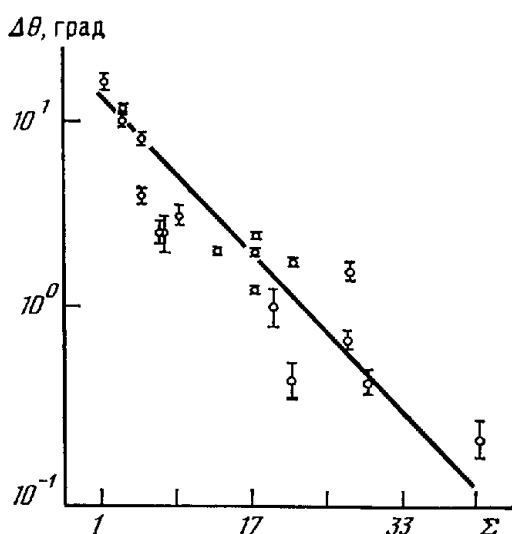


Рис. 4

Рис. 3. Зависимость температуры перехода специальных границ в неспециальные от обратной плотности совпадающих узлов Σ ; $\Sigma_{\max} \approx 65$

Рис. 4. Зависимость ширины углового интервала, в котором существуют специальные границы при низкой температуре, от обратной плотности совпадающих узлов Σ

специальные свойства проявляют лишь границы с величиной Σ , меньшей некоторой Σ_{\max} . С уменьшением температуры (точнее, отношения температуры к $T_{пл}$) все больше границ проявляют специальные свойства. При одной и той же температуре в материалах с более высокой $T_{пл}$ специальными свойствами будут обладать и границы с более высокими Σ .

3. Угловой интервал существования специальных границ при низких температурах экспоненциально уменьшается с ростом Σ .

Диаграмма существования специальных и неспециальных границ и фазовые переходы на границах. Вопрос о фазовых переходах на границах зерен давно обсуждается в литературе. Термодинамика таких переходов рассмотрена в работах [1, 55]. В них показано, что в точках фазовых переходов на границах зерен должны наблюдаться изломы на температурных зависимостях поверхностного натяжения и изломы или скачки на температурных зависимостях кинетических свойств (коэффициентов диффузии, скорости миграции и т. п.). Однако экспериментальных данных о фазовых переходах на границах зерен крайне мало, они противоречивы и не образуют в настоящее время единой картины (см., например, обзор [4]). Эта ситуация разительно отличается от положения, сложившегося в изучении внешних поверхностей. Там количество экспериментальных работ по фазовым переходам уже приближается к полутысяче. Обилие экспериментального материала позволило создать и мощную теорию. Подробно описаны и обобщены, в частности, явления, связанные со взаимными переходами соизмеримых и несоизмеримых фаз. В двумерных

системах существенно богаче, чем в объеме, разнообразие критических явлений: число классов универсальности для критических явлений в двумерных системах намного выше [56]. Появляются и первые экспериментальные работы по определению критических показателей для двумерных фазовых переходов на внешней поверхности [57, 58].

Все это интересное разнообразие явлений существует, как можно предположить, и на границах зерен. Описание границ зерен с помощью моделей, подобных моделям работ [48–50], позволяет указать области температур и параметров разориентации, где следует искать фазовые переходы на границах и, по-видимому, связанные с ними критические явления. Результаты настоящей работы позволяют объяснить с единых позиций ряд интересных фактов.

Среди них в первую очередь следует упомянуть результаты работ [12, 13], в которых наблюдалось увеличение количества специальных границ с уменьшением температуры и ростом давления. Это означает, что при высоких давлениях вид фазовых диаграмм, подобных приведенной на рис. 1 и 3, существенно изменяется. Однако работ по изучению свойств границ под давлением очень мало. Кроме работы [13] можно назвать только исследования миграции границ в олове [59] и диффузии по межфазным границам олово — германий [60].

В работе [36] зернограничные дислокации наблюдались на специальных границах $\langle 100 \rangle$ в окиси магния вплоть до $\Sigma=53$, а на границах $\langle 100 \rangle$ в золоте — только до $\Sigma \leq 25$ [29, 31]. Этот факт можно объяснить тем, что $T/T_{пл}$ для окиси магния составляет 0,095, а для золота — 0,219 и в интервале от 0,095 до 0,219 специальные границы с $\Sigma=29, 41, 53$ (и, возможно, 25) переходят в неспециальные (см. рис. 1). В работе [9] упоминается резкое исчезновение дислокаций несоответствия на некогерентной межфазной границе α - и β -латуни. Дислокации исчезают при небольшом изменении угла разориентации, хотя они еще должны легко разрешаться в электронном микроскопе. Аналогичное явление наблюдалось, по свидетельству автора работы [9], и на границах зерен в золоте. Исчезновение дислокаций в этих случаях можно объяснить переходом через критический угол $\Delta\theta$, отделяющий область существования данной специальной границы от границы общего типа. Такое же превращение, которое проявляется в исчезновении изображений структурных зернограничных дислокаций, наблюдалось и на границах зерен (110) в нержавеющей стали [39]. Отличие от работы [9] состоит в том, что здесь наблюдался переход через критическую температуру T_c , при которой специальная граница с $\Sigma=31$ превращается в неспециальную. Первой работой, где был осуществлен целенаправленный поиск фазовых переходов специальная граница — граница общего типа, является исследование на границах наклона с $\Sigma=5$ в меди [17]. Отметим, что в работе [47] по изучению поверхностного натяжения в таких же границах $\Sigma=5$ в меди наблюдается особенность ориентационной зависимости поверхностного натяжения в очень узкой окрестности $\Sigma=5$ при $\Delta\theta < 0,2^\circ$. По мнению авторов работы [47], это связано с еще одним (гипотетическим) переходом, вызванным диссоциацией зернограничных дислокаций. Косвенным подтверждением такого перехода могут служить и результаты авторов работы [51], не наблюдавших зернограничных дислокаций на границах, отклоняющихся от $\Sigma=9$ на 0,005 и от $\Sigma=11$ на $0,1^\circ$.

В последнее время появилось несколько работ, где структурные переходы на границах наблюдались при машинном моделировании их строения [61–63]. Еще большее разнообразие фазовых переходов возможно на межфазных границах раздела, образованных, в отличие от границ зерен, различными веществами. Межфазные границы могут различаться типом связи, даже геометрические модели для их описания отличаются значительной сложностью [4].

Авторы благодарят В. Л. Покровского, А. Л. Талапова, Г. В. Уймина за полезное обсуждение применимости результатов работы [49] к границам зерен.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бокштейн Б. С., Копецкий Ч. В., Швиндлерман Л. С. Термодинамические и кинетические свойства границ зерен в металлах. М.: Металлургия, 1986. 220 с.
2. Алешин А. Н., Бокштейн Б. С., Петелин А. Л., Швиндлерман Л. С. Металлофизика, 1980, т. 2, с. 83.
3. Алешин А. Н., Бокштейн Б. С., Швиндлерман Л. С. Физика твердого тела, 1977, т. 19, № 12, с. 3511.
4. Aristov V. Yu., Kopezky Ch. V., Shvindlerman L. S. Scr. Met., 1977, v. 11, p. 109.
5. Fridman E. M., Kopezky Ch. V., Shvindlerman L. S. Z. Metallkunde, 1975, B. 60, S. 533.
6. Аристов В. Ю., Копецкий Ч. В., Швиндлерман Л. С. В кн.: Научные основы материаловедения. М.: Наука, 1981, с. 84.
7. Brandon D. G., Ralph B., Ranganathan S., Wald M. S. Acta Met., 1964, v. 12, p. 813.
8. Орлов А. Н., Перевезенцев В. Н., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах. М.: Металлургия, 1980. 214 с.
9. Gleiter H. Mater. Sci. and Eng., 1982, v. 52, p. 91.
10. Страумал Б. Б., Швиндлерман Л. С. Области существования специальных и неспециальных границ зерен. Препринт, № 4321, Черноголовка: ИФТТ АН СССР, 1985. 23 с.
11. Shewmon P. In: Recrystallization, grain growth and textures. Metals Park Oh.: ASM, 1966, p. 165.
12. Erb U., Gleiter H. Scr. Met., 1979, v. 13, p. 61.
13. Meiser H., Gleiter H., Mirwald E. Scr. Met., 1980, v. 14, p. 95.
14. Gleiter H. Radex Rundschau, 1980, v. 1, p. 51.
15. Gjostein N. A., Rhines F. N. Acta Met., 1959, v. 7, p. 319.
16. Hasson G., Boos J. Y., Herbeuval I., Biscondi M., Goux C. Surf. Sci., 1972, v. 31, p. 115.
17. Prokofjev S. I., Shvindlerman L. S. Scr. Met., 1985, v. 19, № 9, p. 1051.
18. Rutter J. W., Aust R. T. Acta Met., 1965, v. 13, № 2, p. 181.
19. Chou V. T., Cai B. C., Romig A. D., Lin L. S. Phil. Mag., 1983, v. A47, № 3, p. 363.
20. Qian X. R., Chou Y. T. Phil. Mag., 1982, v. A45, № 6, p. 1075.
21. Андреева А. В., Фионова Л. К. Физика металлов и материаловедение, 1981, т. 52, № 3, с. 593.
22. Рыбин В. В., Титовец Ю. Ф., Теплитский Д. М., Золоторевский Н. Ю. Физика металлов и материаловедение, 1982, т. 53, № 3, с. 544.
23. Ishida Y., Ichinose H., Mori M., Hashimoto M. Trans. Japan Inst. Met., 1983, v. 24, № 6, p. 349.
24. Ishida Y., Yamamoto T. Trans. Japan Inst. Met., 1977, v. 18, № 3, p. 221.
25. Скакова Т. Ю., Голубь Е. А., Орлов Л. Г. Физика металлов и материаловедение, 1980, т. 50, № 1, с. 213.
26. Masteller M. S., Bauer C. L. Phil. Mag., 1978, v. A38, № 6, p. 697.
27. Sukhomlin G. D., Andreeva A. V. Phys. Stat. Sol. (a), 1983, v. A78, № 1, p. 333.
28. Косевич В. М., Байзульдин Б. М. Физика металлов и материаловедение, 1979, т. 48, № 2, с. 443.
29. Balluffi R. W., Goodhew O. J., Tan T. Y., Wagner W. P. J. Phys., 1985, v. 36, Colloque C-4, p. 17.
30. Wagner W. R., Tan T. Y., Balluffi R. W. Phil. Mag., 1984, v. 29, p. 895.
31. Balluffi R. W., Komem Y., Schober T. Surf. Sci., 1972, v. 31, p. 68.
32. Schober T., Balluffi R. W. Phil. Mag., 1971, v. A21, p. 109.
33. Schober T., Balluffi R. W. Phys. Stat. Sol. (b), 1971, v. 44, № 1, p. 115.
34. Schober T., Warrington D. H. Phys. Stat. Sol. (a), 1971, v. A6, p. 103.
35. Sass S. L., Tan T. Y., Balluffi R. W. Phil. Mag., 1975, v. A31, p. 559.
36. Sun C. P., Balluffi R. W. Phil. Mag., 1982, v. A46, № 1, p. 49.
37. Sun C. P., Balluffi R. W. Scr. Met., 1979, v. 13, № 8, p. 757.
38. Tan T. Y., Sass S. L., Balluffi R. W. Phil. Mag., 1975, v. 31, p. 575.
39. Clark W. A., Smith D. A. J. Met. Sci., 1979, v. 14, № 4, p. 776.
40. Постников В. С., Иевлев В. М., Соловьев К. С., Кущев С. Б. Физика металлов и материаловедение, 1975, т. 40, № 2, с. 446.
41. Постников В. С., Иевлев В. М., Соловьев К. С., Золотухин Н. В. Физика металлов и материаловедение, 1974, т. 37, № 1, с. 124.
42. Buday J., Donald A. M., Sass S. L. Scr. Met., 1982, v. 16, № 4, p. 393.
43. Carter C. B., Donald A. M., Sass S. L. Phil. Mag., 1979, v. 39, № 5, p. 533.
44. Guan D. Y., Sass S. L. Phil. Mag., 1979, v. 39, № 3, p. 293.
45. Smith D. A. Scr. Met., 1979, v. 13, № 5, p. 379.
46. Brandon D. G. Acta Met., 1966, v. 14, № 11, p. 1479.
47. Prokofjev S., Shvindlerman L., Volkov V. In: Proc. of 6 Intern. Symp. on High-Purity Materials and Technology. Dresden, GDR, May 6-10, 1985, p. 335.

48. Покровский В. Л., Таланов А. Л. Журн. эксперим. и теорет. физики, 1978, т. 75, с. 1151.
49. Покровский В. Л., Таланов А. Л. Журн. эксперим. и теорет. физики, 1980, т. 78, с. 269.
50. Pokrovsky V. L., Talanov A. L. Phys. Rev. Lett., 1979, v. 42, p. 65.
51. Papon A. M., Petit M., Silvestre G., Backmann J. J. In: Grain Boundaries in Semiconductors. N. Y.: Acad. Press, 1982, p. 27.
52. Krivanek O. L. Chem. Scr., 1978–1979, v. 14, № 1–5, p. 213.
53. Krivanek O. L., Isoda S., Kobayashi K. Phil. Mag., 1977, v. 36, № 4, p. 931.
54. Clarebrough L. M., Forwood C. T. Phys. Stat. Sol. (a), 1980, v. A58, № 2, p. 597.
55. Hart E. W. In: The Nature and Behaviour of Grain Boundaries. N. Y.–L.: Plenum Press, 1972, p. 155.
56. Schick M. Progr. in Surface Sci., 1981, v. 11, p. 245.
57. Tejwani M. J., Ferreira O., Vilches O. E. Phys. Rev. Lett., 1980, v. 44, p. 152.
58. Bretz M. Phys. Rev. Lett., 1977, v. 38, p. 501.
59. Molodov D. A., Straumal B. B., Shvindlerman L. S. Scr. Met., 1984, v. 18, p. 207.
60. Straumal B. B., Klinger L. M., Shvindlerman L. S. Scr. Met., 1983, v. 17, p. 275.
61. Hashimoto M., Ishida Y., Jamamoto R., Doyama M. Acta Met., 1981, v. 29, p. 617.
62. Bonnet R., Cousineau E. Acta Cryst., 1977, v. A33, № 5, p. 850.
63. Kikuchi R., Cahh J. W. Phys. Rev. B, 1980, v. 21, p. 1893.
64. Cicotti G., Guillope M., Pontikis V. Phys. Rev., 1983, v. 27, p. 5576.

Институт физики твердого тела
АН СССР, Черноголовка

Принята в печать
31.X.1985

THERMAL STABILITY AND REGIONS OF EXISTENCE OF SPECIAL GRAIN BOUNDARIES

Straumal B. B., Shvindlerman L. S.

The diagrams of existence of special and non-special grain boundaries are plotted on the base of several original works. It is shown that special grain boundaries exist in a certain finite interval of misorientation angles, the magnitude of this interval decreasing exponentially with growing Σ -inverse density of coincident sites; special boundaries exist in a finite temperature range, here the special boundary – non-special boundary transition may occur below the melting temperature, and the temperature of this transition reduces with growing Σ ; there is a threshold value of Σ_{\max} that is temperature dependent and decreases with growing temperature. For an appropriate temperature above Σ_{\max} the boundaries with special misorientation angles are not different in the properties from general-type boundaries. Analogy is given between special and non-special grain boundaries and commensurate and incommensurate phases in adsorbed layers on the external surface.