

УДК 539.2

© 1992

КЛАССИФИКАЦИЯ МЕЖКРИСТАЛЛИТНЫХ ГРАНИЦ

Б. М. Даринский, Ю. А. Федоров

Произведена классификация межкристаллитных границ, в основу которой положен анализ картины наложения следов, выходящих на границу кристаллографических плоскостей сопрягающихся кристаллов. На основе этого анализа выявляются одномерные и двумерные периодические мотивы, возникающие при контакте двух поверхностей кристаллов с иррациональными индексами.

В настоящее время границы делятся на специальные и неспециальные [1]. Специальные границы имеют периодическое строение и возникают при дискретном числе углов разориентации, образующих счетное множество. Диапазон углов разориентации, соответствующий специальным границам, расширяется путем добавления зернограницных дислокаций. Однако и после этого для большинства материалов специальные границы составляют небольшую долю (менее 10%) от общего количества возможных границ [1].

Весьма важно для границ общего типа указать характерные черты, говорящие об относительной величине энергии; выделить типы границ, объединенные общими механизмами межкристаллитного проскальзывания, имеющие те или иные специфические зернограницные дефекты. Решение перечисленных задач, необходимое для целенаправленного развития зернограницной кинетической теории, следует начинать с классификации границ, которой в настоящее время фактически не существует, хотя предпринимались попытки [2, 3] подразделения произвольных границ на различные типы. В предлагаемом сообщении сделан шаг в этом направлении.

1. Геометрическая классификация

Построение границы можно представить следующим образом [3]. Возьмем два полубесконечных кристалла A и B с плоскими поверхностями Γ_1 и Γ_2 , которые могут и не быть кристаллографическими плоскостями, а затем сообщим им необходимый разворот на угол φ вокруг оси, перпендикулярной границе. Таким построением можно получить любую плоскую межкристаллическую границу (МКГ).

Имеют место три варианта расположения атомных узлов в плоскостях Γ_1 и Γ_2 . Во-первых, плоскость Γ_i может быть кристаллографической, т. е. содержать двумерную решетку атомных узлов. Плоскостям такого типа будем присваивать значение 2 (см. таблицу). Плоскость со значением 1 содержит лишь одну кристаллографическую линию. Она может быть получена, например, в результате поворота плоскости (001) в кубической решетке вокруг оси [100] на угол, тангенс которого имеет иррациональное значение. Плоскость, обозначаемая цифрой 0, иррациональна и содержит лишь один атомный узел.

Будем обозначать МКГ двумя цифрами в зависимости от типов плоскостей Γ_1 и Γ_2 . В таблице приведены обозначения шести типов границ, подразделяющихся

Типы МГК в зависимости от типов плоскостей Γ_1 и Γ_2 контактирующих кристаллов

Γ_2	Γ_1		
	0	1	2
0	00	01	02
1	10	11	12
2	20	21	22

по указанному выше признаку рациональности поверхностей контактирующих кристаллов.

Рассмотрим теперь картины пересечения плоскостей Γ_1 и Γ_2 различными кристаллографическими плоскостями. Последние оставляют на Γ_1 и Γ_2 следы кристаллографических плоскостей (СКП). Тип границы определяется картиной наложения этих следов, возникающих в результате контакта двух кристаллов.

Выделим элементы структуры, с помощью которых будет производиться классификация межкристаллических границ.

1. Единичные векторы, указывающие на ориентацию следа кристаллографической плоскости. На плоскости Γ_1 будем обозначать их l_j , на плоскости Γ_2 — соответственно m_j . Индекс нумерует различные семейства кристаллографических плоскостей.

2. Расстояния между соседними линиями следов одного семейства. Для плоскостей Γ_1 и Γ_2 это будут соответственно d_j и r_j .

3. Пусть некоторый след, характеризуемый вектором l_j , пересекается семействами следов, направление которых задает вектор l_j . В качестве элементов структуры возьмем отрезки, отсекаемые на СКП l_j двумя ближайшими СКП l_j , которые обозначим λ_{ij} . Точки пересечения двух семейств СКП одного кристалла являются следами кристаллографических линий (СКЛ) и образуют плоскую периодическую решетку. Для Γ_2 отрезки, аналогичные λ_{ij} , обозначим μ_{ij} . Отрезки, отсекаемые семейством следов m_j на следе l_j , будем обозначать ν_{ip}^+ , а если наоборот, то ν_{ip}^- .

Рассмотрим теперь возможные картины наложения следов двух кристаллов, приводящие к схеме рис. 1. На поверхности каждого кристалла с иррациональными индексами можно рассмотреть бесконечно большое число следов различных кристаллографических плоскостей. Чем меньше целочисленные индексы Миллера кристаллографических плоскостей, тем больше расстояние между следами. Поскольку такие плоскости относительно плотно заселены атомами кристаллической решетки, то именно они дадут определяющую картину атомного расположения в

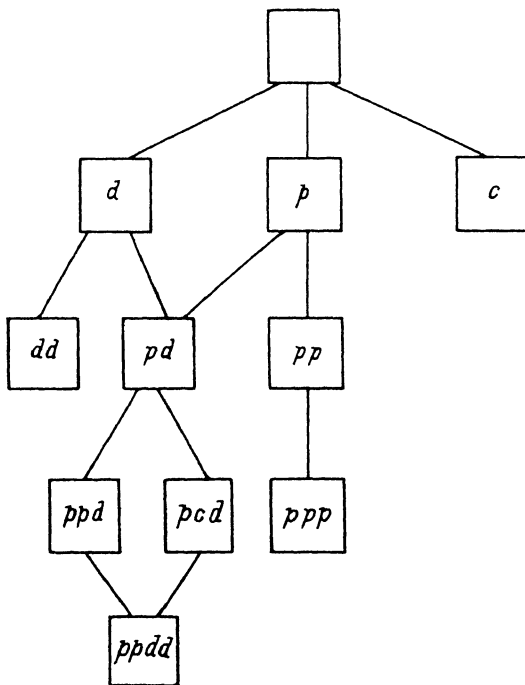


Рис. 1. Типы металлокристаллитных границ.

реальной межкристаллитной границе. Поэтому дальнейшие рассуждения будут относиться к следам кристаллографических плоскостей с малыми индексами.

Общий случай МКГ без ограничений на элементы структур СКП представим на рис. 1 верхним квадратом. Механизм проскальзывания по такой границе предложен в работе [3].

Первой картиной наложения, выделенной из хаоса пересечения следов от различных кристаллографических плоскостей контактирующих кристаллов, является параллельность следов плоскостей двух кристаллов. Этот случай представлен квадратом с буквой *p* на схеме рис. 1. Так как параллельность двух прямых, лежащих в плоскости МКГ, достигается путем поворота одного из кристаллов вокруг перпендикуляра к МКГ на некоторый угол, то совокупность границ с параллельными СКП образует четырехпараметрическое множество, являющееся подмножеством пятипараметрического множества всех ориентаций границ и углов относительного поворота соседних кристаллов. Отметим, что в общем случае параллельные следы образуют несоразмерную структуру линий вследствие несоразмерности расстояний между следами двух соседних кристаллов.

Другой четырехпараметрической картиной наложения является такая, когда семейство следов кристаллографических линий одного кристалла, принадлежащих некоторой плоскости того же кристалла, располагается на семействе следов плоскостей другого кристалла. Условием для реализации такой картины наложения являются равенства $\lambda = \nu'$ или $\mu = \nu^m$ (квадрат *c* на рис. 1).

На рис. 2 изображен участок картины наложения, соответствующий квадрату *c*. Два семейства сплошных линий принадлежат кристаллу *A*; их точки пересечения являются следами кристаллографических линий, которые будем называть СКЛ_{*A*}. Рис. 2 показывает, что СКЛ_{*A*} попадают на следы плоскостей соседнего кристалла *B* (СКП_{*B*}), изображенные штриховыми линиями. Если имеется лишь одно соотношение типа *c*, то на СКП_{*B*} попадают лишь те СКЛ_{*A*}, которые находятся на СКП_{*A*}, направленном вдоль l_1 . Все СКЛ_{*A*}, расположенные на любом другом СКП_{*A*}, например l'_1 , смещены вдоль l'_1 от СКП_{*A*} на некоторые расстояния b'_1 . Эти расстояния показаны на рис. 2 толстыми линиями. При смещении на такое расстояние одной из решеток картина наложения переместится и совпадение СКЛ_{*A*} с СКП_{*B*} будет уже на l'_1 . В местах совпадений СКЛ_{*A*} с СКП_{*B*} должны, как правило, находиться относительно глубокие энергетические минимумы. Поэтому при неоднородном сдвиге на каком-нибудь СКП_{*A*} возникает конфигурация с энергетическим минимумом, аналогичная той, что имеет место на l_1 .

Соизмеримость отрезков, отсекаемых на следе l_1 двумя семействами других следов l_j и l_k в пределах одной граничной плоскости ($\lambda_{ij} = \lambda_{ik}$), указывает на наличие в этой плоскости кристаллографической линии.

Квадратом *d* обозначено семейство МКГ, имеющих одинаковые расстояния между следами плоскостей, но развернутых на некоторый угол. Отметим, что два ограничения такого типа, наложенные на следы семейств попарно одинаковых плоскостей, приводят к границе чистого кручения.

Другие, более узкие подмножества границ получаются путем наложения еще одного соотношения между следами. Так, наложение условия параллельности еще двух семейств следов для границ *p*-типа приводит к возникновению двух систем параллельных следов плоскостей с несоразмерными периодами (рис. 1, квадрат *pp*). Дополнительные ограничения такого же типа приводят к увеличению числа систем следов плоскостей, параллельных друг другу.

Рассмотрим ограничения $r = d$ на границах типа *p*. В этом случае следы плоскостей будут совпадать на протяжении всей плоскости МКГ, образуя

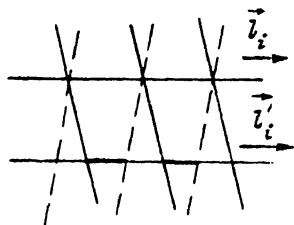


Рис. 2. Взаимное расположение характерных следов в межкристаллитной границе типа *c*.

периодическую картину наложения следов. Знак равенства в данном случае понимается как соразмерность. На рис. 1 этот случай обозначен квадратом с буквами *pd*. В этом случае возникает граница с сопрягающимися плоскостями [1]. Проскальзывание по такой границе рассматривалось в работе [4].

Квадрат *ppd* обозначает семейство МГК, где имеются две пары параллельных СКП: l_i и m_i , а также l_j и m_j , причем в одном из направлений расстояния между параллельными СКП соседних кристаллов одинаковы ($d_i = r_i$). Смещение в этом направлении одного из кристаллов на d_i приводит к полному повторению картины наложения следов. В направлении l_j смещение одного из кристаллов на любой вектор воспроизводит картину наложения СКП, однако сдвигает ее.

Если в рассматриваемой границе *ppd* граничные плоскости кристаллографические, то в соответствии с таблицей будем обозначать эту границу 22 *ppd*. Такая граница представляет собой несоразмерную структуру, скольжение по которой рассматривалось в работе [5]. Граница, рассматриваемая в работе [6], имеет одну кристаллографическую плоскость, ее тип 21 *ppd*; в работе [7] изучается скольжение по границе 11 *ppd*.

Квадрат *pcd* (рис. 1) обозначает семейство СКП, для которого выполняются условия *p*, *c*, *d* одновременно. Квадрат *ppp* при условии, что оказываются параллельными в трех направлениях три пары следов одинаковых кристаллографических плоскостей, обозначает симметричную границу наклона (двойник).

В реальных ситуациях возможно возникновение границ, структура которых содержит до пяти соотношений типа *p*, *c*, *d* для различных пар СКП. Особо отметим структуру *ppdd*, где две пары параллельных СКП имеют соответственно одинаковые расстояния. Такую границу назовем границей сопрягающихся линий (имеются в виду кристаллографические линии). Если в этой структуре граничные плоскости являются кристаллографическими (22 *ppdd*), то соответствующая граница является специальной [1].

2. Энергия

Предложенная классификация позволяет сделать суждение о свойствах границ без расчета положений атомов. В частности, рассматривая энергию МКГ в приближении жесткого кристалла, можно усмотреть тенденции к образованию периодических структур с совпадающими СКП и СКЛ. В рамках такого подхода энергия границы представляется в виде суммы парных взаимодействий атомов контактирующих кристаллов. Если отсутствуют периодические картины наложения следов, то энергия МКГ будет записана в виде интеграла от энергии межатомного взаимодействия по области трехмерного пространства, занятой кристаллическими решетками

$$E = \rho_1 \rho_2 S \int \varphi(z_2 - z_1, x, y) dx dy dz_1 dz_2, \quad (1)$$

где интегрирование по z_1 проводится по области первого кристалла, а по z_2 — второго. Здесь S — площадь МКГ; ρ_1, ρ_2 — плотности узлов первого и второго кристаллов. Энергия взаимодействия кристаллов складывается из энергий взаимодействия однородных полос с толщинами dz_1 и dz_2 (рис. 3).

Каждое из ограничений типа *c*, *d* и *p* не изменяет *b* модели жесткой решетки выражения (1) для энергии МКГ.

Выполнение условия *pd* приводит к иному выражению для энергии МКГ. Для множества МКГ, заключенного в *pd* (рис. 1), характерно совпадение следов плоскостей (рис. 3). Энергия МКГ в этом случае получается интегрированием по координатам плоскостей и последующим суммированием по плоскостям. Снова изучим взаимодействие атомов, находящихся в рассматриваемых выше полосах (рис. 3). Вследствие короткодействия межатомных сил основной вклад в энергию

связи дают взаимодействия атомов, находящихся на сопрягающихся плоскостях. Отсюда ясно, что в границе находящиеся по разные стороны граничной плоскости взаимодействующие атомы разделены совокупностью расстояний, меньших по сравнению с расстояниями в случае рассмотренной ранее границы без сопрягающихся плоскостей. Поскольку структура в области границы является более рыхлой по сравнению с объемом, большинство рассматриваемых расстояний соответствует хвосту характерной кривой межатомного взаимодействия. Поэтому энергия связи границы с сопрягающимися плоскостями больше (а общая энергия меньше) по сравнению с границей, не содержащей сопрягающихся плоскостей.

Очевидно, что при взаимном смещении кристаллов в плоскости pd -границы в направлении x (рис. 3) будут иметь место энергетические минимумы с периодом, равным расстоянию между следами сопрягающихся плоскостей.

Для однопараметрического множества $ppdd$ характерно сопряжение не только кристаллографических плоскостей, но и кристаллографических линий. Энергия МКГ получается интегрированием вдоль кристаллографических линий, образующих совпадающие следы, и последующим суммированием

$$E = \gamma_1 \gamma_2 S S_1^{-1} \sum_m \sum_n \int \varphi(r_n - r_m) d\xi_n d\xi_m, \quad (2)$$

здесь S_1 — площадь ячейки периодической решетки СКЛ; ξ_m — переменная, характеризующая положение точки на кристаллографической линии одного из кристаллов; ξ_n — аналогичная переменная n -ой линии другого кристалла; m, n — пара натуральных чисел, определяющая положение СКЛ в кристалле; γ_1 и γ_2 — линейные плотности атомов на кристаллографических линиях, образующих совпадающие СКЛ. И здесь путем рассуждений, аналогичных проведенным выше, можно показать, что энергия границы с сопрягающимися кристаллографическими линиями ниже, чем энергия границы, содержащей только сопрягающиеся плоскости. Еще меньшей энергией обладает граница, содержащая общие атомные узлы смежных кристаллов (специальная).

Энергия границы с совпадающими СКЛ является также периодической функцией смещения, причем существуют два периода, соответствующие базисным векторам двумерной решетки совпадающих СКЛ.

В заключение отметим, что, хотя границы общего типа имеют непериодическую структуру, они представляют собой системы с дальним порядком, навязываемым кристаллическими решетками контактирующих кристаллов. Аналогичная ситуация возникает при образовании квазикристаллов [8]. В большей части нашего сообщения рассматривались границы, имеющие непериодическую атомную структуру. Характерно, что для некоторых видов таких границ можно все же выделить периодические мотивы (например, совпадающие СКЛ), дающие возможность получить устойчивые неоднородные сдвиги и связанные с ними специфические зернограничные дислокации.

Заметим также, что предлагаемая классификация делит границы по геометрическим картинам наложения следов. Такие картины говорят о возможных физических ситуациях взаимного расположения следов в сформировавшейся границе, однако они не всегда дают однозначный ответ на вопрос об окончательной структуре границы. Для этого требуются специальные исследования, хотя отправ-

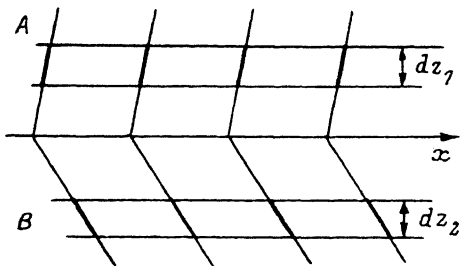


Рис. 3. Схематическое изображение МКГ двух кристаллов А и В для расчета энергии границы.

ным пунктом в таких исследованиях является картина наложения. В качестве примера приведем p -границу, где расстояния между параллельными следами несоизмеримы. В реальной границе далеко не обязательно будет несоизмерная структура параллельных СКП, возможно сопряжение плоскостей с образованием структурных дислокаций [1, 4]. Также специального рассмотрения требуют вопросы об устойчивости зернограницных дислокаций, ступенек, фасеток в произвольных границах. Особенно это относится к тем границам, где реально возникла несоизмерность. Вопрос об устойчивости солитонных образований здесь значительно сложнее, чем в специальных границах, из-за того, что имеется непрерывный набор векторов неоднородных сдвигов, переводящих границу из одного энергетического минимума в другой.

Авторы благодарны В. И. Альшицу, В. Р. Регелю, а также остальным участникам семинара ИК АН СССР за обсуждение настоящей работы.

Список литературы

- [1] Орлов А. Н., Перевезенцев В. И., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах. М., 1980. 154 с.
- [2] Штремель М. А.//ФММ. 1990. № 6. С. 15—21.
- [3] Даринский Б. М., Федоров Ю. А.//Поверхность. 1990. № 6. С. 136—141.
- [4] Федоров Ю. А.//ФММ. 1991. № 7. С. 67—72.
- [5] Даринский Б. М., Сайко Д. С., Федоров Ю. А.//Изв. вузов. Физика. 1987. Т. 30. № 9. С. 53—57.
- [6] Даринский Б. М., Сайко Д. С., Федоров Ю. А.//ФММ. 1988. Т. 65. № 3. С.610—613.
- [7] Даринский Б. М., Федоров Ю. А.//ЖТФ. 1988. Т. 58. № 10. С. 2048—2051.
- [8] Заславский Г. Н., Сагдеев Р. З., Усиков Д. А., Черников А. А.//УФН. 1988. Т. 156. № 2. С. 193—251.

Липецкий политехнический институт

Поступило в Редакцию
4 января 1992 г.