

УДК 548.4:548.313

©1994

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ И ЭНЕРГЕТИКИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН ИЛИ ФАЗ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

М.Д.Старостенков, С.В.Дмитриев, О.В.Бразовская

Предлагается процедура анализа взаимного расположения атомов вблизи плоской границы раздела двух многокомпонентных кристаллических фаз или границы контакта разориентированных зерен одной фазы. В модели твердых сфер в приближении парных межатомных потенциалов получено выражение энергии взаимодействия двух частей бикристалла. Методика расчета основана на расслоении взаимодействующих кристаллитов на двумерные моноатомные упаковки, параллельные границе раздела, и применении выражения энергии взаимодействия таких упаковок. Подход иллюстрируется примерами.

Основные процессы, отвечающие за развитие пластической деформации, развиваются на микроскопическом уровне. Общеизвестно, что границы раздела играют важную роль в обеспечении механических и других физических свойств кристаллических твердых тел, таких как диффузия, миграция, проскальзывание. Подобные процессы напрямую связаны с кристаллогеометрией границ. Учет релаксации атомов вблизи некогерентной границы существенно влияет на значение ее энергии. Поэтому модель твердых сфер не может дать надежной оценки энергии конкретной границы, однако для спектра границ, различающихся, скажем, ориентацией, эта модель часто дает достаточно хорошие оценки относительных значений энергий [1,2]. Модель твердых сфер, учитывающая различия в геометрическом строении дефекта, позволяет через значения относительных энергий выявить предрасположенность залегания дефектов в той или иной ориентации, качественно описать доменную структуру поликристалла, предсказать возможные типы реакций расщепления дислокаций.

Для однозначного описания границы раздела необходимо охарактеризовать геометрические и структурные свойства каждой фазы, их взаимную ориентацию и расположение. Иногда взаимную ориентацию зерен или фаз целесообразно характеризовать оператором вращения в одном из возможных его представлений: матрицами или векторами Гиббса, кватернионами или спиновыми матрицами [3,4]. В настоящей работе предлагаются методика описания кристаллогеометрии и методика получения аналитического выражения энергии плоской границы двух многокомпонентных кристаллических фаз в модели твердых сфер с использованием парных потенциалов межатомного взаимодействия.

Подобный подход был развит авторами для анализа сверхструктурных дефектов [5-7], в данной работе его применение распространяется на анализ некогерентных границ контакта двух кристаллических фаз или границ зерен одной фазы.

1. Описание геометрии многокомпонентного кристалла

В этом разделе приводится ряд результатов, описанных в работе [8], используемых в дальнейшем.

Определим решетку Λ^n как подмножество n -мерного евклидова пространства E^n , изоморфного группе упорядоченных наборов из k целых чисел z^k , где $k \in \{0, 1, \dots, n\}$, относительно операции их покомпонентного сложения. Будем считать далее, что эти наборы суть координаты векторов в E^n . Всегда можно найти n векторов v_i , таких, что любой вектор $x \in \Lambda^n$ представим в виде

$$x = \sum_{i=1}^n \xi_i v_i, \quad (1)$$

где ξ_i — некоторые целые числа. Согласно этому, вектору x можно однозначно поставить в соответствие матрицу-строку ξ чисел ξ_i — компонентов вектора x . Пусть строками матрицы V являются координаты векторов v_i относительно ортонормированного базиса. Матрица-строка координат вектора x , определяемых выражением (1), может быть записана в матричной форме следующим образом:

$$x = \xi V. \quad (2)$$

Здесь V называется порождающей матрицей решетки Λ^n . Векторы v_i определяют фундаментальную область, объем которой равен $|V|$. Фундаментальная область представляет собой элемент пространства минимального объема, трансляцией которого в направлении векторов v_i восстанавливается вся решетка. Матрица $A = VV^T$ называется матрицей Грама решетки Λ^n .

Введем норму $N(x)$ вектора $x \in \Lambda^n$

$$N(x) = x \cdot x.$$

Очевидно, что длина вектора x определяется как

$$|x| = \sqrt{N(x)} = \sqrt{x \cdot x}.$$

Используя (2), получим представление нормы вектора в виде квадратичной формы относительно n целочисленных переменных ξ_i

$$N(x) = \xi A \xi^T.$$

Система узлов, получаемая параллельным переносом узлов решетки Λ^n на вектор p , не будет решеткой, если $p \notin \Lambda^n$. Такая система

узлов, обозначаемая через $\Lambda^n + \mathbf{p}$, называется упаковкой. Норма вектора \mathbf{x}' упаковки выражается следующим образом:

$$N(\mathbf{x}') = N(\mathbf{x} + \mathbf{p}).$$

Вектор \mathbf{p} может быть задан в пространстве размерности $m \geq n$, тогда вектор \mathbf{x} следует дополнить $m-n$ нулевыми компонентами.

Многокомпонентный кристалл Ω может быть описан в виде объединения некоторого числа T моноатомных упаковок. В самом деле, если решетка Λ^3 порождается векторами \mathbf{v}_i , на которые опирается элементарная ячейка кристалла, то

$$\Omega = \bigcup_{t=1}^T (\Lambda^3 + \mathbf{p}_t)_{A_t}, \quad (3)$$

где $\mathbf{p}_t = a_t \mathbf{v}_1 + b_t \mathbf{v}_2 + c_t \mathbf{v}_3$ — вектор сдвига t -й упаковки, причем коэффициенты a_t, b_t, c_t всегда могут быть выбраны из полуинтервала $[0, 1)$; A_t — сорт атомов, заполняющих упаковку с номером t .

2. Определение энергии взаимодействия двух параллельных двумерных моноатомных упаковок

Получим энергию взаимодействия двух двумерных упаковок $(\Lambda^2 + \mathbf{p})_A$ и $(\Delta^2 + \mathbf{q})_B$, расположенных в трехмерном пространстве, состоящих из атомов сортов А и В, где Λ^2, Δ^2 — решетки, порождаемые векторами $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ и $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ соответственно; \mathbf{p} и \mathbf{q} — векторы сдвига решеток. Считаем, что начала векторов $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ и $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ совпадают и они лежат в одной плоскости. Декартову систему координат XYZ выберем так, чтобы векторы $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ лежали в плоскости XOY . Поскольку векторы $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ имеют нулевую третью координату, определим матрицу

$$V = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{bmatrix}.$$

Векторы \mathbf{v}_i условимся нумеровать таким образом, чтобы $|V| > 0$.

В общем случае периодичность во взаимном расположении узлов данных упаковок отсутствует. Для вычисления энергии W их взаимодействия в расчете на единицу площади необходимо проводить ее осреднение по достаточно большому участку. Выберем на упаковке $(\Lambda^2 + \mathbf{p})_A$ участок, опирающийся на векторы $M\mathbf{u}_1, N\mathbf{u}_2$, где M, N — некоторые натуральные числа. Найдем энергию взаимодействия каждого атома этого участка с упаковкой $(\Delta^2 + \mathbf{q})_B$, просуммировав энергии парных связей и разделив на площадь участка. В пределе при $M, N \rightarrow \infty$ получим точный результат

$$\begin{aligned} W [(\Lambda^2 + \mathbf{p})_A \leftrightarrow (\Delta^2 + \mathbf{q})_B] &= \\ &= \lim_{M, N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{|M\mathbf{u}_1 \times N\mathbf{u}_2|} \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{\xi_1, \xi_2 = -\infty}^{\infty} \varphi_{AB}(|\mathbf{r}|) \right], \quad (4) \end{aligned}$$

где $\varphi_{AB}(|\mathbf{r}|)$ — парный потенциал взаимодействия атомов сортов А и В, взаимное расположение которых определяется вектором

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B = \mathbf{b} - \xi_1 \mathbf{v}_1 - \xi_2 \mathbf{v}_2, \quad \mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3) = \mathbf{p} - \mathbf{q} + m\mathbf{u}_1 + n\mathbf{u}_2.$$

Влияние на результат размера площадки осреднения, определяемого числами M, N , иллюстрируется ниже в примере 2.

Чтобы сделать выражение (4) удобным для практического применения, укажем диапазоны изменения целочисленных параметров ξ_1, ξ_2 , достаточные для учета всех связей длины не меньше R , являющейся радиусом обрезки потенциала φ_{AB}

$$E(\mathbf{b}_1 V^{-1}) - i - 1 \leq \xi_1 \leq E(\mathbf{b}_1 V^{-1}) + i + 1,$$

$$E(\mathbf{b}_2 V^{-1}) - j - 1 \leq \xi_2 \leq E(\mathbf{b}_2 V^{-1}) + j + 1,$$

где $E(s)$ — целая часть числа s ; V^{-1} — матрица, обратная к V ; целые числа i, j определяются следующим образом:

$$i = E\left((R + d) \frac{|\mathbf{v}_2|}{|V|}\right) + 1, \quad j = E\left((R + d) \frac{|\mathbf{v}_1|}{|V|}\right) + 1.$$

Здесь к радиусу обрезки потенциала R прибавлен диаметр параллелограмма d , определяемого векторами $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$

$$d = \max(|\mathbf{v}_1|, |\mathbf{v}_2|, |\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2|).$$

3. Расслоение сверхструктуры на двумерные упаковки, параллельные дефекту

Пусть одна из частей бикристалла представляет собой сверхструктуру Ω , заданную в виде (3), а плоская граница раздела фаз имеет ориентацию (hkl) . Удобно расщепить упаковку Ω на двумерные упаковки, параллельные плоскости дефекта. С этой целью для сверхструктуры Ω выберем новую элементарную ячейку, опирающуюся на векторы \mathbf{u}_i так, чтобы плоскость дефекта в новом базисе была бы плоскостью (001) .

Однородное уравнение

$$[hkl] \mathbf{x}^T = 0$$

имеет целочисленное решение вида

$$\mathbf{x}^T = G \begin{Bmatrix} m \\ n \end{Bmatrix}, \quad (5)$$

где G — (3×2) — целочисленная матрица с компонентами g_{ij} , алгоритм отыскания которой можно найти, например, в [9]; m, n — любые целые. В качестве первых двух векторов искомого базиса возьмем пару неколлинеарных векторов

$$\mathbf{u}_1 = g_{11} \mathbf{v}_1 + g_{21} \mathbf{v}_2 + g_{31} \mathbf{v}_3, \quad \mathbf{u}_2 = g_{12} \mathbf{v}_1 + g_{22} \mathbf{v}_2 + g_{32} \mathbf{v}_3, \quad (6)$$

параллельных плоскости (hkl). Третий вектор найдем из условия сохранения объема примитивной ячейки

$$|U| = |V|, \quad (7)$$

где первыми двумя строками матрицы U выступают координаты векторов (6), а компоненты третьей строки подлежат отысканию.

Расслоение Ω на моноатомные двумерные упаковки (атомные плоскости), параллельные границе раздела, имеет вид

$$\Omega = \bigcup_{t=1}^T \bigcup_{m=-\infty}^{\infty} (\Lambda^2 + \mathbf{f}_t + m\mathbf{u}_3)_{A_t}, \quad (8)$$

где решетка Λ^2 порождается векторами \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 . Векторы \mathbf{f}_t определяются через \mathbf{p}_t . Сначала находим векторы $\mathbf{p}'_t = \mathbf{p}_t U^{-1}$, затем координаты этих векторов приводятся к полуинтервалу $[0, 1)$ путем добавления целых чисел, и затем получаем $\mathbf{f}_t = \mathbf{p}'_t U$.

4. Описание взаимного расположения и энергии взаимодействия частей бикристалла

Рассмотрим два кристалла Ω_1 и Ω_2 с произвольными элементарными ячейками. Каждый кристалл расседем плоскостями $(h_1 k_1 l_1)$ и $(h_2 k_2 l_2)$ соответственно. Согласно сказанному выше, выберем элементарные ячейки кристаллов так, чтобы они имели по одной грани, параллельной плоскости сечения. Векторы, на которые опираются такие элементарные ячейки, обозначим \mathbf{u}_i и \mathbf{v}_i для Ω_1 и Ω_2 соответственно. Ориентируем кристаллы относительно некоторой общей декартовой системы координат XYZ таким образом, чтобы, во-первых, \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 , а также \mathbf{v}_1 и \mathbf{v}_2 были параллельны плоскости XOY , во-вторых, \mathbf{u}_1 и \mathbf{v}_1 были направлены вдоль оси OX и, в-третьих, начала базисных векторов совпадали. Таким образом, различные половинки кристаллов совмещаются так, что границы раздела оказываются параллельными. Определим особенности геометрического строения и энергию взаимодействия двух частей полученного бикристалла в зависимости от их взаимного расположения, которое задается четырьмя параметрами — тремя координатами радиус-вектора δ и углом поворота α вокруг нормали к границе, определяющими положение системы координат, связанной с одним из кристаллитов, относительно другого.

Упаковки Ω_1 , Ω_2 можем представить как объединение двух полупространств

$$\Omega_1 = \Omega_1^+ \cup \Omega_1^-, \quad \Omega_2 = \Omega_2^+ \cup \Omega_2^-,$$

где под Ω_1^+ , Ω_2^+ понимаются атомные плоскости, имеющие неотрицательную третью компоненту вектора \mathbf{u}_3 , а под Ω_1^- , Ω_2^- — плоскости с $u_{3z} < 0$. После расслоения Ω_1 , Ω_2 на двумерные упаковки будем иметь

$$\Omega_1^+ = \bigcup_{t=1}^T \bigcup_{i=0}^{\infty} (\Lambda^2 + \mathbf{p}_t + i\mathbf{u}_3)_{A_t},$$

$$\Omega_1^- = \bigcup_{t=1}^T \bigcup_{i=-1}^{-\infty} (\Lambda^2 + \mathbf{p}_t + i\mathbf{u}_3)_{A_t}, \quad (9)$$

$$\Omega_2^+ = \bigcup_{s=1}^S \bigcup_{j=0}^{\infty} (\Lambda^2 + \mathbf{q}_s + j\mathbf{v}_3)_{A_s},$$

$$\Omega_2^- = \bigcup_{s=1}^S \bigcup_{j=-1}^{-\infty} (\Lambda^2 + \mathbf{q}_s + j\mathbf{v}_3)_{A_s}. \quad (10)$$

Пусть совмещаются полупространства Ω_1^+ и Ω_2^- . Считая далее полупространство Ω_2^- неподвижным, осуществим поворот Ω_1^+ на угол α вокруг нормали к границе сечения, затем осуществим параллельный перенос Ω_1^+ на вектор $\delta = (\delta_1, \delta_2, \delta_3)$. При этом полупространство Ω_1^+ преобразуется в $\hat{\Omega}_1^+$, а базис \mathbf{u}_i преобразуется в \mathbf{u}'_i

$$\mathbf{u}'_i = C \mathbf{u}_i, \quad (11)$$

где матрица поворота C имеет вид

$$C = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Векторы \mathbf{p}_t , определяющие положение моноатомных упаковок, преобразуются аналогично

$$\mathbf{p}'_t = C \mathbf{p}_t. \quad (12)$$

Энергия взаимодействия двух половинок различных кристаллов $\hat{\Omega}_1^+$ и Ω_2^- в расчете на единицу площади поверхности контакта в зависимости от δ и α может быть получена суммированием энергий двумерных моноатомных упаковок

$$W \left[\hat{\Omega}_1^+ \leftrightarrow \Omega_2^- \right] = \sum_{t=1}^T \sum_{s=1}^S \sum_{j=-1}^{-\infty} \sum_{i=0}^{\infty} W^*, \quad (13)$$

где T, S — количество атомов в примитивных ячейках упаковок Ω_1 и Ω_2 ; $\hat{\Lambda}^2$ — решетка, порождаемая векторами $\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2$; W^* — энергия взаимодействия двух плоских упаковок, определяемая выражением (4) после параллельного переноса Ω_1^+ на δ ,

$$W^* = W \left[\left(\hat{\Lambda}^2 + \mathbf{p}'_t + i\mathbf{u}'_3 + \delta \right)_{A_t} \leftrightarrow \left(\Delta^2 + \mathbf{q}_s + j\mathbf{v}_3 \right)_{A_s} \right].$$

Индексы i, j в (13) достаточно изменять в диапазоне

$$0 \leq i \leq E((R - \delta_3)/u'_{3z}) + 1, \quad -E(R/v_{3z}) - 1 \leq j \leq -1,$$

где предполагается, что $R - \delta_3 > 0$, иначе части бикристалла не взаимодействуют.

Пример 1. Граница c -доменов в сверхструктуре $L1_0$

Рассмотрим образование стенки c -домена с плоскостью залегания (110) в сверхструктуре $L1_0$, с параметром решетки a , которая представляет собой планарный дефект, образованный поворотом одной части кристалла, отсеченной плоскостью (110), относительно другой вокруг оси, перпендикулярной этой плоскости, на угол $\alpha = \pi$. Если $\mathbf{v}_1 = (a, 0, 0)$, $\mathbf{v}_2 = (0, a, 0)$, $\mathbf{v}_3 = (0, 0, a)$ — порождающие векторы решетки Λ , то представление упаковки Ω , отвечающей сверхструктуре $L1_0$, имеет вид (3), где $T = 4$, векторы, определяющие моноатомные упаковки

$$\mathbf{p}_1 = (0, 0, 0), \quad \mathbf{p}_2 = (a/2, a/2, 0), \quad \mathbf{p}_3 = (0, a/2, a/2), \quad \mathbf{p}_4 = (a/2, 0, a/2),$$

сорта атомов упаковок

$$A_1 = A_3 = A, \quad A_2 = A_4 = B.$$

Выберем новый базис \mathbf{u}_i такой, чтобы \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 лежали в плоскости (110). Уравнение

$$[110]\mathbf{x}^T = 0$$

имеет общее решение

$$\mathbf{x}^T = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} m \\ n \end{Bmatrix}.$$

Согласно (6), имеем $\mathbf{u}_1 = (-\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2)$, $\mathbf{u}_2 = \mathbf{v}_3$. Вектор \mathbf{u}_3 , удовлетворяющий условию (7), можно взять в виде $\mathbf{u}_3 = \mathbf{v}_2$. Векторы сдвига моноатомных упаковок, принадлежащие новой элементарной ячейке

$$\mathbf{p}_1 = (0, 0, 0), \quad \mathbf{p}_2 = (-a/2, a/2, 0), \quad \mathbf{p}_3 = (0, a/2, a/2), \quad \mathbf{p}_4 = (-a/2, a, a/2).$$

Чтобы иметь возможность использовать выражение (4) в расчете энергии границы, развернем кристалл так, чтобы \mathbf{u}_1 был направлен вдоль OX и \mathbf{u}_2 лежал в плоскости XOY . Матрица поворота имеет вид

$$F = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 & 0 & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & 0 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Описание Ω в виде (3) после поворота

$$\mathbf{u}_1 = a(\sqrt{2}, 0, 0), \quad \mathbf{u}_2 = a(0, 1, 0), \quad \mathbf{u}_3 = a\sqrt{2}/2(1, 0, 1), \quad T = 4,$$

$$\mathbf{p}_1 = a(0, 0, 0), \quad \mathbf{p}_2 = a(\sqrt{2}/2, 0, 0),$$

$$\mathbf{p}_3 = a(\sqrt{2}/4, 1/2, \sqrt{2}/4), \quad \mathbf{p}_4 = a(3\sqrt{2}/4, 1/2, \sqrt{2}/4),$$

$$A_1 = A_3 = A, \quad A_2 = A_4 = B.$$

Таким образом, определены расслоение сверхструктуры на двумерные упаковки согласно выражению (8) и ее представление в виде двух полупространств Ω^+ и Ω^- (9). Сформируем границу с-доменов, развернув Ω^+ на угол $\alpha = \pi$, при $\delta = 0$. Из (11), (12) получаем

$$\mathbf{u}'_1 = a(-\sqrt{2}, 0, 0), \quad \mathbf{u}'_2 = a(0, -1, 0), \quad \mathbf{u}'_3 = a(-\sqrt{2}/2, 0, \sqrt{2}/2),$$

$$\mathbf{p}'_1 = a(0, 0, 0), \quad \mathbf{p}'_2 = a(-\sqrt{2}/2, 0, 0),$$

$$\mathbf{p}'_3 = a(-\sqrt{2}/4, -1/2, \sqrt{2}/4), \quad \mathbf{p}'_4 = a(-3\sqrt{2}/4, -1/2, \sqrt{2}/4).$$

В данном случае наблюдается периодичность в расположении элементарных ячеек полупространств $\hat{\Omega}^+$ и $\hat{\Omega}^-$, что позволяет в выражении (4) при подсчете энергии взаимодействия двух плоских упаковок положить $M = N = 1$. Энергия дефекта определяется в виде разности между энергиями взаимодействия полупространств идеального и дефектного кристаллов. Первая получается применением выражения (13) к вычислению энергии связи полупространств Ω^+ и Ω^- , т.е. при подстановке векторов $\mathbf{u}'_i = \mathbf{v}_i = \mathbf{u}_i$ и $\mathbf{p}'_i = \mathbf{q}_i = \mathbf{p}_i$, вторая — к вычислению энергии связи полупространств $\hat{\Omega}^+$ и $\hat{\Omega}^-$, т.е. при подстановке векторов $\mathbf{q}_i = \mathbf{p}_i$ и $\mathbf{v}_i = \mathbf{u}_i$. В результате получаем энергию стенки с-домена в расчете на единицу площади

$$W = \left[\sum_{t,s=1}^4 \sum_{k=-1}^{-\infty} \sum_{l=0}^{\infty} W_* \right] - \left[\sum_{t,s=1}^4 \sum_{k=-1}^{-\infty} \sum_{l=0}^{\infty} W_{**} \right], \quad (14)$$

где

$$W_* = D \sum_{i,j=-\infty}^{\infty} \varphi_{A_i A_j} (|\mathbf{p}_t - \mathbf{p}_s - i\mathbf{u}_1 - j\mathbf{u}_2 + (k-l)\mathbf{u}_3|),$$

$$W_{**} = D \sum_{i,j=-\infty}^{\infty} \varphi_{A_i A_j} (|\mathbf{p}_t - \mathbf{p}'_s - i\mathbf{u}'_1 - j\mathbf{u}'_2 - l\mathbf{u}'_3 + k\mathbf{u}_3|),$$

$$D = |\mathbf{u}_1 \times \mathbf{u}_2|^{-1} = (a^2 \sqrt{2})^{-1}.$$

Раскрывая суммы в выражении (14), получим энергию дефекта в расчете на единицу площади через энергию упорядочения $\omega = 2\varphi_{AB} - \varphi_{AA} - \varphi_{BB}$. Приведем семь первых слагаемых

$$W = D [\omega(r_1) - 2\omega(r_2) + 2\omega(r_3) - 6\omega(r_4) + 6\omega(r_5) - 4\omega(r_6) + 12\omega(r_7) + \dots],$$

где $r_n = a\sqrt{n/2}$ — радиус n -й координационной сферы.

Заметим, что этот результат совпадает с полученным ранее в [10].

Пример 2. Энергия границы зерен в твердом аргоне

Рассчитаем энергию границы зерен в твердом аргоне с ориентацией (001), образованной поворотом одного из кристаллитов относительно другого на угол α вокруг нормали к границе ($\delta = 0$). Твердый аргон имеет ГЦК решетку, следовательно, векторы \mathbf{v}_i и \mathbf{p}_i могут быть выбраны так же, как и в предыдущем примере. Сорта атомов всех подрешеток в данном случае одинаковы и не будут указываться в дальнейшем. Векторы \mathbf{v}'_i и \mathbf{p}'_i определяются из (11), (12). Энергию границы зерен определим как разность энергий взаимодействия частей бикристалла в идеальном и дефектном кристаллах. При расчете энергии идеального кристалла можно в (4) положить $M = N = 1$, а для дефектного площадка осреднения энергии может быть конечной только для специальных разориентировок. Тем самым для энергии границы зерен получаем выражение (14), где вместо W_* и W_{**} следует взять

$$W_* = a^{-2} \sum_{i,j=-\infty}^{\infty} \varphi(|\mathbf{p}_t - \mathbf{p}_s + i\mathbf{v}_1 + j\mathbf{v}_2 + (l-k)\mathbf{v}_3|),$$

$$W_{**} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[(Na)^{-2} \sum_{n,m=0}^{N-1} \sum_{i,j=-\infty}^{\infty} \varphi(|\mathbf{r}|) \right],$$

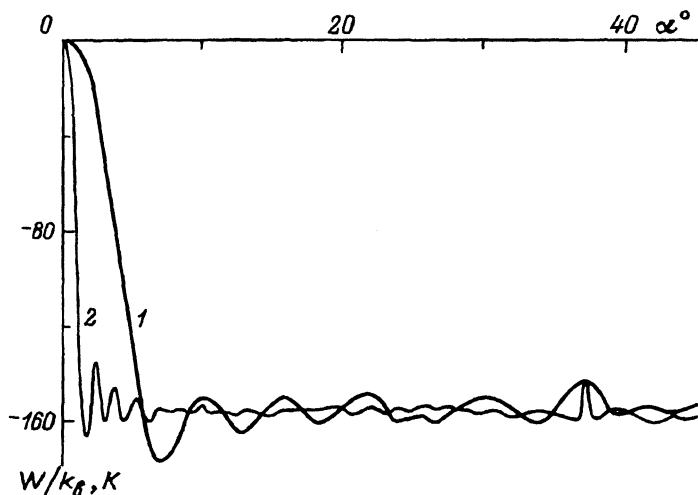
где

$$\mathbf{r} = \mathbf{p}_t - \mathbf{p}'_s + n\mathbf{v}_1 + m\mathbf{v}_2 - i\mathbf{v}'_1 - j\mathbf{v}'_2 - l\mathbf{v}'_3 + k\mathbf{v}_3.$$

На рисунке приводятся зависимости средней энергии W границы зерен от угла их разориентации α в расчете на единицу площади, полученные для твердого аргона с потенциалом Леннарда-Джонса

$$\varphi(\mathbf{r}) = 4\epsilon [(\sigma/\mathbf{r})^{12} - (\sigma/\mathbf{r})^6]$$

с параметрами $\epsilon/k_B = 119.8 \text{ K}$, $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$ [11].



Зависимость осредненной энергии W границы кручения (001) в твердом аргоне от угла α разориентировки зерен, отнесенной к единице площади.

Кривые 1, 2 соответствуют площадкам осреднения при $N = 5$ и $N = 20$.

Кривые 1, 2 построены при $N = 5$ и 20 соответственно. Увеличение площадки осреднения показывает, что кривая $W(\alpha)$ при $N \rightarrow \infty$ представляет собой константу с бесконечным множеством δ -пигов, соответствующих специальным разориентировкам [4], причем амплитуда пиков весьма быстро убывает с ростом обратной плотности совпадающих узлов Σ . Наибольшая амплитуда пика соответствует $\alpha = 0^\circ$, следующий пик при $\alpha = 36.87^\circ$ ($\Sigma = 5$) еще хорошо заметен, а следующий, при $\alpha = 22.62^\circ$ ($\Sigma = 13$), почти не различим в масштабе рисунка.

Таким образом, предлагаемая процедура позволяет в модели парных межатомных потенциалов выписывать аналитические выражения энергий взаимодействия различных кристаллических фаз, контактирующих по плоской границе.

Список литературы

- [1] Баранов М.А., Старостенков М.Д. // ФММ. 1992. № 10. С. 25-33.
- [2] Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Голобокова С.И. // Поверхность. 1994. № 2. С. 96-100.
- [3] Рыбин В.В., Титовец Ю.Ф., Теплицкий Д.М., Золоторевский Н.Ю. // ФММ. 1982. Т. 53. № 3. С. 544-554.
- [4] Валиев Р.З., Вергазов А.Н., Герцман В.Н. Кристаллогеометрический анализ межкристаллитных границ в практике электронной микроскопии. М.: Наука, 1991. 260 с.
- [5] Старостенков М.Д., Дмитриев С.В. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 7. С. 2087-2093.
- [6] Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Голобокова С.И. // Изв. вузов. Физика. 1992. № 5. С. 73-77.
- [7] Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Волкова С.М. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 1. С. 31-37.
- [8] Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. М.: Мир, 1990. Т. 1. 415 с.
- [9] Родосский К.А. Алгоритм Евклида. М.: Наука, 1988. 240 с.
- [10] Старостенков М.Д., Старостенкова О.Х. // Изв. вузов. Физика. 1988. № 1. С. 110-112.
- [11] Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990. Т. 1. 349 с.

Алтайский государственный технический
университет им. И.И.Ползунова

Поступило в Редакцию
1 октября 1993 г.
В окончательной редакции
16 мая 1994 г.