

УДК 539.21 : [539.216.25+681.51.015.26 : 681.3]

© 1990

## СПЕЦИАЛЬНЫЕ МЕЖФАЗНЫЕ ГРАНИЦЫ В СИСТЕМАХ С БОЛЬШИМ НЕСООТВЕТСТВИЕМ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

А. В. Бугаков, В. М. Иевлев, Т. Л. Тураева

Методом машинного моделирования проведен анализ энергии и структуры специальных межфазных границ (МГ) кручения в системе (001) Ag—(001) Cu. На зависимости энергии МГ от угла взаимной разориентации выявлены локальные минимумы, соответствующие образованию наиболее плотных решеток совпадения узлов на МГ. Выявлены структурные элементы, образующие границы. Методом дифракции электронов исследовано изменение взаимных ориентаций фаз при диффузионном спекании одноориентационных островковых пленок (001) Ag с поверхностью монокристаллических пленок (001) Cu. Установлено вращение островков Ag в плоскости границы от исходных ориентаций к ближайшим ориентациям совпадения.

Существование специальных (особых) границ зерен (ГЗ) в поликристаллических твердых телах подтверждено результатами многочисленных прямых и косвенных исследований их структуры и свойств. Разработана дислокационная модель структуры ГЗ, которая базируется на представлениях решетки совпадающих узлов (PCY) и зернограничных дислокаций (ЗГД), компенсирующих отклонения  $\Delta\theta$  взаимных разориентировок зерен от специальных  $\theta_k$  [1, 2].

Поскольку дислокационное описание в модели PCY—ЗГД не дает полного представления об атомной структуре границ, в последние годы были проведены исследования релаксированных атомных структур ГЗ методом машинного моделирования. Представления о структуре ГЗ получили дальнейшее развитие и обобщение в модели структурных элементов (структурных единиц — SE) [3, 4]. При ее непротиворечивости модели PCY и ЗГД модель SE более приемлема и к описанию ГЗ для промежуточных разориентировок зерен между соседними  $\theta_k$ . Хорошее экспериментальное подтверждение модели SE получено при исследовании методом просвечивающей электронной микроскопии пленочных бикристаллов золота, содержащих ГЗ для  $\Sigma < 29$  [5].

Вопрос о специальных межфазных границах (МГ) был поставлен в [6] в связи с обнаружением нетривиальных ориентационных соотношений между пленкой и подложкой при росте конденсированных в вакууме пленок золота на ювенильной поверхности скола (111) кремния (несоответствие параметров решеток  $f_0 \approx 0.25$ ): эти соотношения отвечали сравнительно плотным PCY<sup>1</sup> на МГ подложка—пленка. Реализация ориентаций совпадения на МГ при ориентированной кристаллизации пленок была в дальнейшем показана на ряде других систем (CaF<sub>2</sub>—Mo, Au—Ni и др.

<sup>1</sup> В отличие от ГЗ на МГ полного совпадения узлов кристаллических решеток фаз не должно быть даже при больших  $f_0$ , однако для систем с большими  $f_0$  возможны ориентационные соотношения, при которых для образования PCY необходима небольшая деформация решеток  $\varepsilon_0$ . Таким образом, помимо параметра МГ характеризуется еще несоответствием PCY  $F_0$ . В этой связи неоднозначен и выбор PCY на МГ для одного ориентационного соотношения, а соответственно ПРН и векторов Бюргерса граничных дислокаций (ГД).

[6]). В то же время данные о дислокационной структуре МГ в системах с большими  $f_0$  весьма ограничены, а об энергии и атомной структуре отсутствуют вовсе. При известных трудностях экспериментальных исследований в этом направлении целесообразно использование методов машинного моделирования, хорошо развитых для ГЗ.

Цель настоящей работы — анализ энергии и структуры специальных МГ методом машинного моделирования и экспериментальная проверка методами дифракции электронов и просвечивающей электронной микроскопии существования локальных минимумов на угловой зависимости энергии МГ в системе Ag—Cu. При выборе системы исходили из того, что она характеризуется достаточно большим значением  $f_0$  ( $\approx 0.12$ ) и весьма ограниченной взаимной растворимостью компонентов.

#### 4. М а ш и н н о е м о д е л и р о в а н и е

Учитывая сложность задачи построения хорошего потенциала взаимодействия для МГ вследствие неизвестности параметров взаимодействия, мы ограничились определением только относительных значений энергии МГ для различных ориентационных соотношений. В этом случае для расчета достаточно простейшего потенциала парного взаимодействия Морзе

$$\varphi(r_{ij}) = D \{ \exp[-2\alpha(r_{ij} - r_0)] - 2\exp[-\alpha(r_{ij} - r_0)] \}, \quad (1)$$

где  $\varphi(r_{ij})$  — энергия взаимодействия атомов  $i$  и  $j$  на расстоянии  $r_{ij}$ , друг от друга;  $D$ ,  $\alpha$ ,  $r_0$  — параметры, определяемые на основе данных об энергии образования вакансий, сжимаемости и параметре решетки материала. Методики расчета и значения этих параметров для ряда материалов приведены в [7]. Невозможность определить или рассчитать эти параметры для взаимодействия на МГ делает их выбор условным (например, использование в [8] комбинационных правил [9], приемлемых для твердых растворов). С учетом определяющей роли геометрических факторов при сопряжении решеток на МГ (что проявляется в одинаковых ориентационных соотношениях для разных систем, но с близкими значениями  $f_0$ , например MgO—Ni и Au—Ni [10]) при моделировании МГ можно использовать одинаковые значения  $D$  и  $\alpha$  для взаимодействия в кристаллах и на МГ, а учитывать различие в параметрах решеток величиной  $r_0$ . Последнюю можно определить исходя из условия, что энергия атома в кристалле будет иметь минимум при данном параметре решетки. Для взаимодействия на МГ используется значение  $r_0$ , рассчитанное для решетки с параметром, равным среднему арифметическому значению двух исходных. Величина  $r_0$  будет зависеть от радиуса обрезания взаимодействия. Сравнение поведения такого кристалла с реальным при однородных деформациях показало, что наилучшее соответствие наблюдается, если ограничиваться взаимодействием только ближайших соседей. Возможно, что это обусловлено видом выбранного потенциала. Исходя из этого выбирался радиус обрезания при расчете энергии и релаксированной структуры.

Полная энергия системы при сопряжении решеток определяется суммированием

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij}) \quad (2)$$

по всем атомам первого и второго кристаллов, а оптимальное сопряжение — минимизацией энергии по параметрам их относительного смещения. Для расчета релаксированной структуры МГ можно использовать метод Гиббсона [11], основанный на решении системы уравнений движения атомов, на которые действуют силы со стороны окружающих атомов.

Уравнение движения атома  $i$  имеет вид

$$\mathbf{a}_i = \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i, \quad (3)$$

где  $\mathbf{a}_i$ ,  $\mathbf{v}_i$ ,  $m_i$  — ускорение, скорость и масса атома  $i$ ;  $\mathbf{F}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij}$ ;  $\mathbf{F}_{ij}$  — сила взаимодействия атомов  $i$  и  $j$

$$\mathbf{F}_{ij} = -\text{grad } \varphi_{ij}. \quad (4)$$

Уравнение (3) можно записать в конечных разностях

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t - \Delta t/2) + (\Delta t/m_i) \mathbf{F}_i, \quad (5)$$

$$\mathbf{x}_i(t + \Delta t) = \mathbf{x}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \Delta t/2) \Delta t. \quad (6)$$

Решение системы уравнений (5), (6) дает релаксированную структуру. С целью экономии времени счета скорость атома приравняется нулю, если он проходит через положение равновесия.

Для удобства уравнения можно преобразовать к безразмерному виду. Определим безразмерные величины  $X = x/a$ ,  $\tau = t/T$ ,  $M_i = m_i/m_0$ , где  $a$  — параметр решетки 1 кристалла,  $m_0 = 1$  а. е. м. =  $1.67 \cdot 10^{-27}$  кг. Тогда  $V = vT/a$  и уравнения приводятся к виду

$$\mathbf{V}_i(\tau + \Delta\tau) = \mathbf{V}_i\left(\tau - \frac{\Delta\tau}{2}\right) + \frac{2\alpha D T^2}{am_0 M_i} \Delta\tau \mathbf{f}_i, \quad (7)$$

$$\mathbf{X}_i(\tau + \Delta\tau) = \mathbf{X}_i(\tau) + \mathbf{V}_i(\tau + \Delta\tau) \Delta\tau, \quad (8)$$

где  $\mathbf{f}_i = \mathbf{F}_i/2\alpha D$  — безразмерная сила. Из условия  $2\alpha D T^2/am_0 = 1$  можно определить масштаб времени

$$T = \sqrt{am_0/2\alpha D}. \quad (9)$$

При  $a \approx 0.3$  нм,  $\alpha = 15$  нм<sup>-1</sup>;  $D = 0.42$  эВ  $T = 1.58 \cdot 10^{-14}$  с. Шаг релаксации  $\Delta\tau$  выбирался  $\sim 0.5 \div 0.8$ , при этом  $\Delta t \sim 1 \cdot 10^{-14}$  с, что соответствует величине  $\Delta t$ , используемой в подобных расчетах [11].

В работе приняты периодические граничные условия: при любых ориентационных соотношениях расчет ведется для соответствующей им ячейки РСУ. Это уменьшает время счета (при малых  $\Sigma$ ), позволяет избежать краевых эффектов; учитывая РСУ с относительно большими  $\Sigma$ , можно получить достаточное количество точек для построения зависимости энергии МГ от угла ориентации кристаллов.

Для определения ориентаций совпадения на МГ можно использовать следующий алгоритм машинного расчета. Рассмотрим две плоские решетки узлов, заданные структурными матрицами  $S^{(1)}$  и  $S^{(2)}$  и отношением параметров решеток  $u$ , развернутые на угол  $\theta$ .

Координаты узлов решетки 2 преобразуются в кристаллическую систему координат решетки 1 и сравниваются с координатами ближайшего узла решетки 1, т. е. ближайшими целыми числами. Если расстояние между ними меньше заданной величины несовпадения, то определяется несоответствие длин векторов решеток 1 и 2

$$F = 2(x^{(2)} - x^{(1)})/(x^{(2)} + x^{(1)}). \quad (10)$$

При  $F$ , меньшем заданного значения  $F_0$ , атомы считаются совпадающими. Из полученного таким образом набора совпадающих векторов выбирается базис РСУ и определяются параметры  $\Sigma_1$ ,  $\Sigma_2$ ,  $F$ .

Для определения координат атомов в ячейке РСУ задаются ее структурные матрицы в кристаллах 1 и 2 в кристаллических координатах  $M_1$  и  $M_2$ . Затем рассчитываются координаты атомов  $x$  в кристаллической системе координат РСУ1 и РСУ2; если  $0 \leq x < 1$ , то атом принадлежит ячейке. Для определения положения атомов в плоскостях, параллельных границе, задаются векторы смещения плоскостей, а также начальное смещение кристаллов.

Программы расчета РСУ, энергии, релаксированной структуры специальных межфазных границ и ее графического изображения разработаны на языке Турбо—Паскаль. Исходными данными для расчета являются: 1) структурные матрицы кристалла 1, ячеек РСУ в кристаллах 1 и 2, сме-

$\theta_0$	$\Sigma_1/\Sigma_2$	$F_0$	$\theta_0$	$\Sigma_1/\Sigma_2$	$F_0$
0	64/81	0.005	22.7	41/53	-0.006
1.9	53/68	-0.002	23.4	65/82	0.006
5.0	41/52	0.004	26.6	4/5	0.011
6.3	32/41	-0.001	30.0	53/68	-0.002
8.1	25/32	-0.001	31.3	29/37	0.001
10.3	20/25	0.011	35.4	41/53	-0.006
12.3	29/37	0.001	37.9	10/13	-0.009
15.3	10/13	-0.009	40.2	45/58	-0.004
17.7	41/52	0.004	42.3	13/17	-0.012
19.7	13/17	-0.012	45	25/32	-0.001
21.6	50/65	-0.009			

щения атомных плоскостей и начальные смещения кристаллов; 2) параметр решетки кристалла 1, массы атомов (а. е. м.), число слоев в кристаллах, число соседних ячеек РСУ, с которыми возможно взаимодействие; 3) параметры потенциала Морзе  $D$ ,  $\alpha$ ,  $r_{01}$ ,  $r_{02}$ ,  $r_{03}$ , радиус обрезания взаимодействия, шаг релаксации  $\Delta\tau$ , точность определения энергии  $\epsilon$ .

В расчете специальных МГ системы Ag—Cu по плоскости (001) использованы следующие параметры потенциала Морзе:  $D=0.42$  эВ,  $\alpha=15$  нм<sup>-1</sup>,  $r_{01}=0.2889$ ,  $r_{02}=0.2556$ ,  $r_{03}=0.2723$  нм; с учетом взаимодействия только ближайших соседей радиус обрезания выбирался равным  $1.3r_0$ .

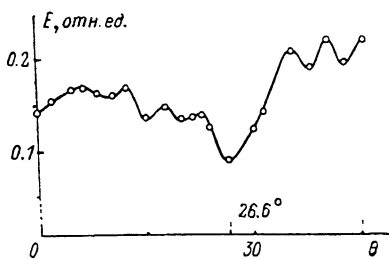


Рис. 1. Зависимости энергии межфазной границы (001) Ag—(001) Cu от угла взаимной разориентации.

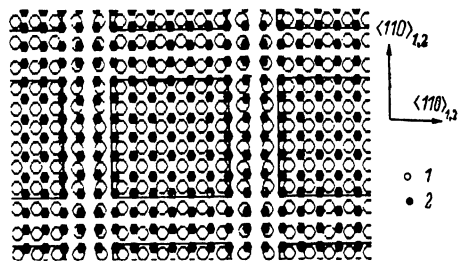


Рис. 2. Схема релаксированной структуры межфазной границы для  $\theta=0$ .

1 — атомы Ag, 2 — атомы Cu.

Определяли дополнительную по сравнению с идеальным кристаллом энергию, обусловленную искажениями на границе. Принимая, что структурная толщина МГ составляет несколько атомных слоев, в расчете учитывали по 7 слоев каждого кристалла; при этом по 3 внешних слоя в релаксации не участвовали. Первый кристалл был закреплен неподвижно, внешняя часть второго кристалла могла перемещаться как целое в трех направлениях для уменьшения энергии.

На рис. 1 приведены значения энергии для ряда границ, параметры РСУ которых даны в таблице. На зависимости  $E(\theta)$  имеются минимумы при  $\theta_k=0, 10.3, 15.3, 19.7, 26.6, 37.9$  и  $42.3^\circ$ , которым отвечают наиболее плотные РСУ из рассмотренных (исключение  $\theta_k=0$ ). И хотя наименьшая энергия МГ для ( $\theta_k=26.6^\circ$ ) соответствует самой плотноупакованной РСУ для данной системы ( $\Sigma_1/\Sigma_2=4/5$ ), следует отметить немонотонную зависимость энергии от величины  $\Sigma$  ( $\theta_k=15.3$  и  $37.9^\circ, 19.7$  и  $42.3^\circ$ ). Хорошо выраженный минимум при  $\theta_k=0$  показывает, что даже при относительно большом  $f_0$  параллельность плотноупакованных направлений остается энергетически выгодной. Экспериментальные исследования [12] показывают, что при конденсации в вакууме пленок системы Ag—Cu происходит параллельное сопряжение кристаллических решеток, чему способствует

по-видимому, и преимущественное ориентированное зародышеобразование второй фазы в параллельной ориентации.

На рис. 2 приведена схема релаксированной структуры МГ для параллельного сопряжения. Она представляет собой чередование областей хорошего сопряжения, релаксированных к структуре  $\Sigma_1/\Sigma_2=1/1$ , и областей

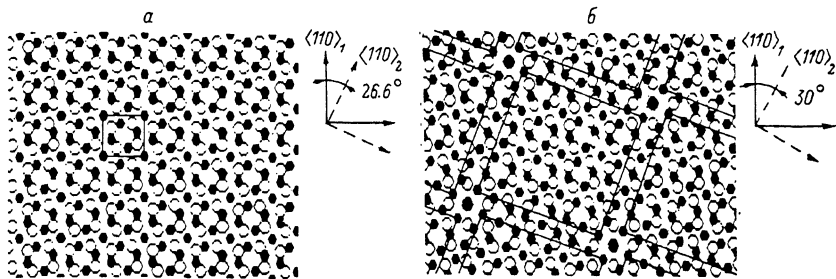


Рис. 3. Схемы релаксированных структур межфазных границ для  $\theta=26.6$  (а) и  $30^\circ$  (б).

плохого сопряжения (выделены штриховой линией), которые можно рассматривать как дислокации несоответствия (ДН). Большая относительная ширина ДН ( $1/3$  периода РСУ) должна затруднять их электронно-микроскопическое наблюдение.

Существование локальных минимумов на расчетной зависимости  $E(\theta)$  позволяет ожидать реализацию специальных МГ в физическом эксперименте в первую очередь для  $\theta_k=26.6^\circ$ , приводящего к наиболее плотной РСУ из возможных для данной системы. Расчетная релаксационная атомная структура МГ иллюстрируется схемой (рис. 3, а), где выделен характерный структурный элемент границы.

Принципиальным является вопрос о закономерностях структурных изменений при отклонении ориентации на некоторую величину  $\Delta\theta$  от  $\theta_k$ . Анализ релаксированной структуры границы для  $\theta=26.6+42.4^\circ$ , рассчитанной как для ориентации совпадения  $\theta_k=30^\circ$  ( $\Sigma_1/\Sigma_2=53/68$ ), показывает (рис. 3, б), что она представляет собой периодическую сверхструктуру чередующихся обширных областей, релаксированных к структурному мотиву  $\Sigma_1/\Sigma_2=4/5$  (рис. 3, а), и узких полосок плохого сопряжения, интервал между которыми хорошо согласуется с ожидаемым для ГД, компенсирующих отклонение  $\Delta\theta$  от  $\theta_k=26.6^\circ$  с векторами Бюргерса, соответствующими векторам ПРН для данного  $\theta_k$ . Относительно небольшая ширина ядра ГД в этом случае позволяет ожидать наблюдение их методом просвечивающей электронной микроскопии.

Другая картина наблюдается при отклонении от  $\theta_k=15.3^\circ$ . На рис. 4, а приведена схема релаксированной структуры МГ для  $\theta=17.7^\circ$ , из которой следует, что МГ для  $\theta=\theta_k+\Delta\theta$  может быть представлена как наложение взаимно смещенных участков («структурных элементов») границы для  $\theta_k$  (рис. 4, б).

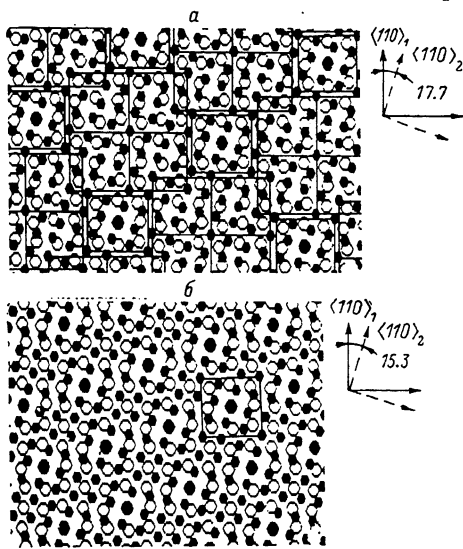


Рис. 4. Схемы релаксированных структур межфазных границ, характеризующихся  $\theta=17.7$  (а) и  $15.3^\circ$  (б).

Представленные на рис. 2—4 результаты показывают, что возможны по крайней мере два варианта релаксированных структур межфазной границы при отклонении от  $\theta_k$ : с образованием граничных дислокаций, компенсирующих это отклонение; с наложением «структурных элементов», соответствующих данному  $\theta_k$ , что, по-видимому, исключает возможность наблюдения дислокационной структуры таких границ.

## 2. Результаты структурных исследований методом дифракции электронов и просвечивающей электронной микроскопии

Для экспериментального выявления специальных МГ целесообразно использовать методику спекания одноориентационных эпитаксиальных островковых пленок одного металла с поверхностью монокристаллических пленок другого [13], аналогичную методике выявления специальных ГЗ [14].

Монокристаллические пленки Cu ориентации (001) толщиной  $\sim 70$  нм выращивали методом термического испарения и конденсации в вакууме

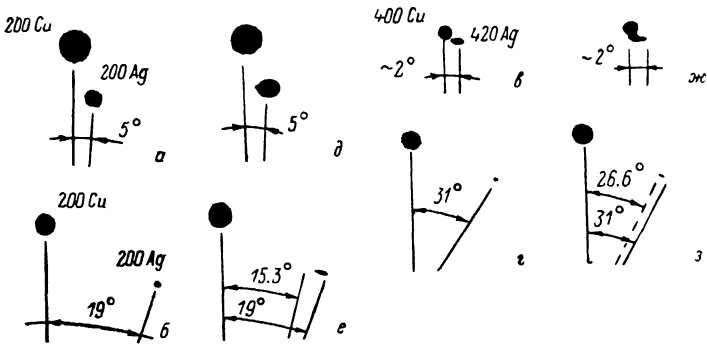


Рис. 5. Фрагменты электронограмм от образцов с исходными разориентировками  $\theta = 5$  (а), 18 (б), 28.5 (в), 31° (г) и соответственно от образцов после отжига (д—з).

на поверхность (001) NaCl при температуре подложки  $\sim 700$  К, островковые пленки Ag при 650 К. Последние закрепляли углеродной пленкой и после освобождения от подложки накладывали на свободные монокристаллические пленки, задавая взаимные ориентировки, близкие к  $\theta_k = 0, 10.3, 15.3, 26.6, 37.9^\circ$ . В электронных микроскопах ЭВМ-100АК, ПРЭМ-200 контролировали исходные взаимные ориентировки и морфологию образцов и после отжига в среде водорода при 550 К в течение 0.5 ч.

На рис. 5 приведены фрагменты электронограмм от образцов с исходными разориентировками (а—г) и соответственно от образцов после отжига (д—з). Появление на последних односторонних размытых отражений островковой фазы (Ag) указывает на вращение при отжиге островков в плоскости межфазной границы к положению, соответствующему  $\theta_k$  (0, 15.3, 26.6°). Для наглядности ориентационных изменений при малых исходных отклонениях от  $\theta_k$  на фрагментах рис. 5, в, з приведены отражения более высокого порядка, т. е. от почти совпадающих плоскостей {400} Cu и {240} Ag РСУ с  $\Sigma_1/\Sigma_2 = 4/5$  ( $\theta_k = 26.6^\circ$ ). Видно, что пучность отражения Ag смещается в положение, отвечающее параллельности этих плоскостей, т. е.  $\theta_k$ .

В тех случаях, когда исходные разориентировки практически совпадают с  $\theta_k$  (рис. 6, а, б), изменения в положении отражений в результате отжига не выявлены.

Установленные закономерности подтверждают существование предсказываемых расчетом локальных минимумов на зависимости  $E(\theta)$ .

Структура МГ наиболее подробно была исследована для  $\theta$ , близких к  $26.6^\circ$ , поскольку и РСУ (ПРН), и анализ релаксированной структуры

предсказывают возможность наблюдения межфазных дислокаций, уstraивающих несоответствие PCY. На рис. 7 приведены изображения исходной структуры и после отжига. В пределах большей части островков отожженных образцов выявляется периодический контраст в виде двух ортогональных систем линий, основное направление и максимальный наблюдающийся период которых совпадают с ожидаемыми для межфазных дислокаций с векторами Бюргера, соответствующими базисным векторам ПРН.

Особенность ориентационных соотношений, приводящих к данной специ-

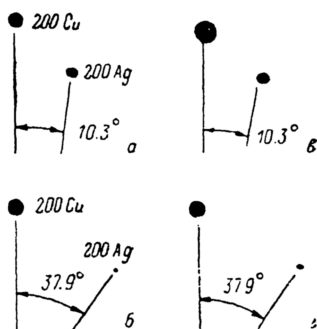


Рис. 6. Фрагменты электронограмм от образцов с исходными разориентировками  $\theta=10$  (а) и  $38^\circ$  (б) и соответственно от образцов после отжига (в, г).

альной МГ, состоит в том, что они обеспечивают двойную дифракцию почти совпадающих отражений 400 Cu и 420 Ag, приводящую к образованию муара той же периодичности и тех же направлений, что и для межфазных дислокаций  $P_M = |\Delta g_{hkl}|^{-1}/F_0$ . И хотя это затрудняет интерпретацию наблюдаемых периодических изображений, наличие участков, где

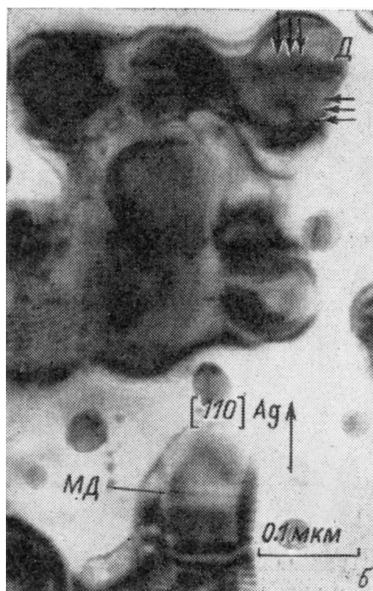
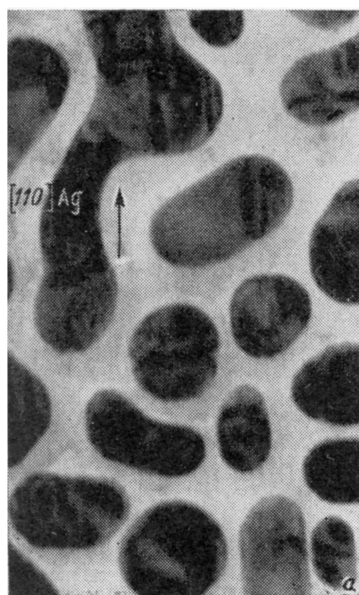


Рис. 7. Изображение структуры исходного образца с углом разориентации, близким к  $\theta_k=26.6^\circ$  (а), и после отжига (б).

вследствие ослабления условий двойной дифракции и формирования муара контраст систем линий не имеет синусоидального профиля, позволяет интерпретировать эти линии как межфазные дислокации, тем более что этот вывод согласуется с результатами работы [15].

Механизм поворота островков при отжиге системы в дислокационных представлениях может быть связан с выходом межфазных дислокаций, поскольку их избыточная плотность быстро нарастает при увеличении  $\theta-\theta_k$  увеличивая упругую энергию двух систем дислокаций, входящую в полную энергию МГ.

Сформулировать некоторые выводы можно с учетом результатов работ [13, 16, 17]. В [13] экспериментально установлено, что в системе Pt—Au при любых исходных  $\theta$  до  $45^\circ$  вращение островков (001) одного металла на поверхности (001) монокристаллической пленки другого при отжиге происходит к нулевой разориентации ( $\Sigma=1$ ,  $F_0 \equiv f_0 \approx 4\%$ ), а специальные МГ, отвечающие возможным собственным РСУ (для МГ) и РСУ, свойственным однофазным материалам<sup>2</sup> (для ГЗ), не реализуются. В [16] диффузионным спеканием монокристаллических пленок (001) Ag и Au создана специальная МГ  $\Sigma_1/\Sigma_2=5/5$  ( $\theta_k=36.94^\circ$ ,  $F_0 \equiv f_0=0.0017$ ), т. е. отвечающая зернограничной РСУ; в этой МГ выявлены межфазные дислокации типа ЗГД. В то же время в аналогичной границе Au—Pd дислокации не были выявлены. Положительный результат достигнут в [17] для специальной МГ того же типа в системе (001) PbTe—(001)PbSe, однако только в результате сближения параметров: несоответствие при отжиге уменьшалось с 0.0524 до  $\sim 0.02$ .

Таким образом, выявление локальных минимумов, отвечающих разориентировкам фаз, приводящим к достаточно плотным собственным РСУ на МГ, и соответственно образование специальных МГ возможны только для пар с большими  $f_0$  ( $> 0.1$ ), например Ag—Cu, Ag—Ni, Ni—Cr, Au—Co, Ag—Co, Ni—Fe, Si—Au и др. Образование специальных МГ, отвечающих  $\theta_k$ , приводящим к однофазным РСУ, возможно при очень малых  $f_0$  ( $< 0.02$ ), например Ag—Au, Cu—Ni. Для некоторых промежуточных значений  $f_0$  специальные МГ могут не образовываться (системы Au—Pt, Au—Pd). Исключение для кубических фаз могут составлять случаи однофазных РСУ с  $\Sigma_1/\Sigma_2=3/3$ , т. е. аналоги двойниковых границ.

#### Список литературы

- [1] Bollmann W. // Crystal defects and crystalline interfaces. Berlin—Heidelberg—New York, Springer—Verlag, 1970. 270 p.
- [2] Косевич В. М., Иевлев В. М., Палатник Л. С. и др. // Структура межкуристаллических и межфазных границ. М., 1980. 256 с.
- [3] Weins M., Chalmers B., Gleiter H., Ashby M. // Scr. Met. 1969. V. 3. P. 601—604.
- [4] Sutton A. P., Vittek V. // Philos. Trans. Roy. Soc. London A. 1983. V. 309. N 506. P. 1—68.
- [5] Kvam E. P., Balluffi R. W. // Phil. Mag. A. 1987. V. 56. P. 137—148.
- [6] Иевлев В. М., Трусов Л. И., Холмянский В. А. // Структурные превращения в тонких пленках. М., 1988. 325 с.
- [7] Girifalco L. A., Weizer V. G. // Phys. Rev. 1959. V. 114. P. 687.
- [8] Kaneko T., Imafuku M., Yamamoto R., Doyama M. // Trans. Jap. Inst. Metals. 1986. V. 27. P. 323—328.
- [9] Das S. K., Roy D., Seggupta S. // J. Phys. F: Metal Phys. 1977. V. 7. P. 5.
- [10] Takayanagi K., Yagi K., Honjo G. // Thin Solid Films. 1978. V. 48. P. 137—152.
- [11] Даль Р., Билер Д., Буркуин Р. Машинное моделирование при исследовании материалов / Под ред. О. Б. Позднева, М., 1974. 250 с.
- [12] Иевлев В. М., Бурова С. В. // ФММ. 1984. Т. 58. № 6. С. 1200—1205.
- [13] Иевлев В. М., Тураева Т. Л., Кушев С. Б. // Поверхность. 1989. № 4. С. 48—52.
- [14] Siu-Wai Chan, Balluffi R. W. // Acta Met. 1985. V. 33. P. 1113—1119.
- [15] Liu J. S., Balluffi R. W. // Acta Met. 1985. V. 19. P. 123—126.
- [16] Hwang M., Laeghlin D. E., Bernstein J. M. // Acta Met. 1980. V. 28. N 5. P. 621—632.
- [17] Григоров С. Н., Гладких А. Н., Ветчинкина З. К. // Поверхность. 1988. № 3. С. 85—90.

Воронежский политехнический институт

Поступило в Редакцию  
10 апреля 1990 г.

<sup>2</sup> Можно назвать их в случае МГ несобственными или однофазными РСУ.