

УДК 539.21 : [539.216.25+681.51.015.26 : 681.3]

© 1991

## МЕЖФАЗНЫЕ ГРАНИЦЫ ДВОЙНИКОВОГО ТИПА

В. М. Иевлев, А. В. Бугаков, Б. П. Ирхин, Т. Л. Тураева

Рассчитаны характер зависимости энергии межфазных границ (МГ) двойникового типа от угла разориентации фаз и их релаксированная атомная структура для кристаллов с ГЦК решеткой. Показано, что существование таких МГ по плоскости  $(110)$  энергетически оправдано до отношения параметров сопрягаемых кристаллических решеток  $\alpha = a_1/a_2 = 0.9$ . При этом несоответствие по параметру и отклонение от точной двойниковой ориентации могут компенсироваться одной системой граничных дислокаций.

Как показывают результаты экспериментальных исследований [1-4], основная доля границ зерен (ГЗ) в материалах с невысокой энергией дефекта упаковки приходится на границы двойников, характеризующиеся обратной плотностью совпадающих узлов кристаллических решеток  $\Sigma = 3$ . Наблюдаемый спектр границ в общем согласуется с наличием приходящегося на двойниковую разориентацию зерен самого глубокого минимума на зависимости энергии ГЗ  $E(\theta)$  из всех возможных при углах  $\theta > 0^\circ$  [5].

Согласно экспериментальным данным, многим системам подложка — пленка свойственны ориентационные соотношения двойникового типа. Например, параллельной ориентации пленок ГЦК металлов на слюдах, флюорите [6], кремнии [7] сопутствует 180-градусная азимутальная ориентация; аналогичные соотношения наблюдают в ряде силицидов металлов на  $(111)$  Si (Pd<sub>2</sub>Si [8], NiSi<sub>2</sub> [9], CoSi<sub>2</sub> [10]).

Поскольку в МГ двойникового типа в отличие от когерентных границ двойников даже при точно двойниковом ориентационном соотношении неизбежна хотя бы частичная некогерентность, связанная с несоответствием параметров кристаллических решеток,<sup>1</sup> естественна постановка вопроса о предельной величине отношения параметров  $\alpha = a_1/a_2$ , допускающей энергетическую выгодность МГ этого типа.

Задача решалась двумя путями: расчет зависимости  $E(\theta)$  для различных  $\alpha$  и анализ возможной релаксированной атомной структуры МГ для ориентационных соотношений, близких к двойниковому  $\langle 110 \rangle$  ГЦК,  $\theta_k = 70^\circ 36'$ ; электронно-микроскопическое исследование ориентационных изменений в системе монокристаллическая пленка  $(110)$  одного металла — островковая одноориентационная пленка  $(110)$  другого металла и дислокационной структуры МГ (пары Pt—Au,  $\alpha \approx 0.96$ ; Cu—Ag,  $\alpha \approx 0.9$ ).

#### 1. Расчет зависимости $E(\theta)$ и релаксированной атомной структуры МГ с изменением $\alpha$

Для расчета энергии использовали метод машинного моделирования, описанный в [11]. Основные допущения следующие.

Для описания взаимодействия использован потенциал Морзе

$$\{\varphi = D \{ \exp[-2\alpha(r - r_0)] - 2 \exp[-\alpha(r - r_0)] \} \}.$$

<sup>1</sup> В данном случае — это компенсация несовпадения базисных векторов решетки совпадающих узлов (PCY).

Принято, что параметры  $D$  и  $\alpha$  одинаковы для взаимодействия в 1 и 2 кристаллах и на МГ;  $r_0$  определяется по параметру решетки из условия минимума энергии кристалла. Рассматривается взаимодействие только ближайших соседей, при этом  $r_{01}=a_1/\sqrt{2}$ ,  $r_{02}=a_2/\sqrt{2}$ , для межфазного взаимодействия принимали  $r_{012}=(r_{01}+r_{02})/2$ .

Приняты периодические граничные условия: расчет проводится для одной ячейки РСУ на границе.

В отличие от метода Гибсона, используемого в [11], здесь применен статический метод, в котором определяется положение равновесия атома в поле его соседей. Релаксация считается завершенной, когда сила, действующая на каждый атом, меньше заданной величины ( $10^{-3}$  эВ на Å).

Были рассчитаны значения энергии МГ в плоскости (110) ГЦК кристаллов для интервала  $\theta=60\div 80^\circ$ ,  $\alpha=0.85\div 1.0$ . По полученным данным методом интерполяции была построена зависимость  $E(\theta, \alpha)$  (рис. 1) для различных значений  $\alpha$ . Из этого рисунка следует, что глубокий минимум при  $\alpha=1$ ,  $\theta=70.5^\circ$ , характеризующий двойниковую ориентацию в ГЗ, с увеличением несоответствия сглаживается и при  $\alpha\approx 0.9$  исчезает.

Таким образом, при сопряжении ГЦК решеток по плоскостям {110} энергетически оправдано существование МГ двойникового типа при несоответствии параметров не более 0.1.

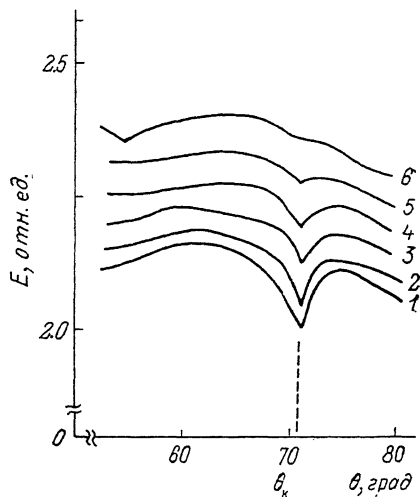


Рис. 1. Зависимость энергии МГ  $E(\theta)$  для  $\alpha=a_1/a_2=1.0$  (1), 0.98 (2), 0.96 (3), 0.94 (4), 0.92 (5), 0.9 (6).

Анализ релаксированной атомной структуры границ показал, что для них характерна периодическая сверхструктура, в общем случае состоящая из чередующихся областей в виде полос двух видов. Одна полоса состоит из участков, образованных ячейками с  $\Sigma_1/\Sigma_2=3/3$  («структурными элементами» двойниковой границы). Эти участки могут частично перекрываться, причем зона перекрытия не характеризуется сильным искажением решеток. Другая полоса — это область плохого сопряжения, которую можно интерпретировать как граничную дислокацию с вектором Бюргера  $\mathbf{b}=1/3\langle 111 \rangle$ .

Примеры структуры приведены на рис. 2 ( $a - \theta=66.9^\circ$ ,  $\Sigma_1/\Sigma_2=81/82$ ,  $\alpha=0.994$ ;  $b - \theta=66.7^\circ$ ,  $\Sigma_1/\Sigma_2=33/38$ ,  $\alpha=0.932$ ) и рис. 3 ( $a - \theta=74.5^\circ$ ,  $\Sigma_1/\Sigma_2=67/68$ ,  $\alpha=0.993$ ;  $b - \theta=74.3^\circ$ ,  $\Sigma_1/\Sigma_2=73/83$ ,  $\alpha=0.938$ ). Характер релаксированных структур позволяет сделать предположение, что компенсация несоответствия параметров и угла отклонения от точной двойниковой ориентации компенсируется одной системой дислокаций с  $\mathbf{b}=1/3\langle 111 \rangle$ . Это предположение подтверждается характером распределения энергии границы в пределах ячейки РСУ. На рис. 3,  $\epsilon, \zeta$  приведены картины распределения энергии для границ, представленных соответственно на рис. 3,  $a, b$ .

На картинах распределения энергии хорошо выделяются чередующиеся полосы двух типов: серые полосы разделяют полосы с чередующимися светлыми и темными участками. Сопоставление этих картин с атомной структурой (рис. 3,  $a, b$  и  $\epsilon, \zeta$ ) показывает, что первые соответствуют областям плохого сопряжения, т. е. граничным дислокациям. Период модуляции черно-белой структуры отвечает периоду ячейки  $\Sigma_1/\Sigma_2=3/3$ . Черные участки отвечают рядам атомов, приходящихся на междоузлия и обладающих малой энергией, белые — совпадающим или почти совпа-

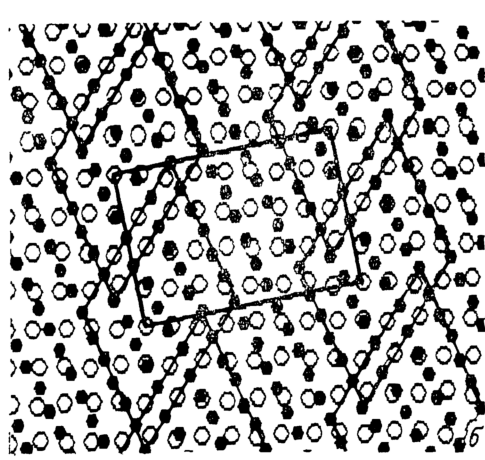
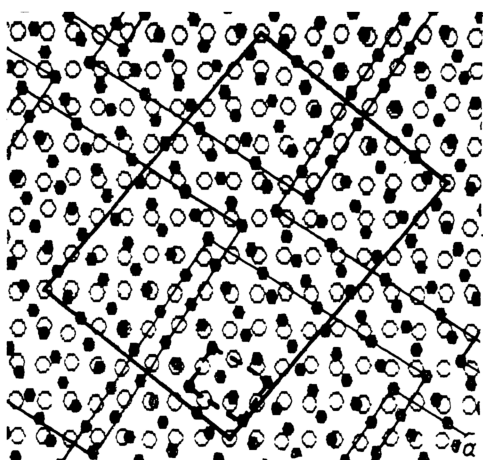


Рис. 2. Рассчитанные релаксированные структуры МГ.

Показано по одной плоскости каждого кристалла. Жирной линией выделены ячейки РСУ, тонкой — области хорошего сопряжения, штриховой — ячейка с  $\Sigma_1/\Sigma_2=3/3$ ; 1 и 2 — атомы первой и второй фаз соответственно.

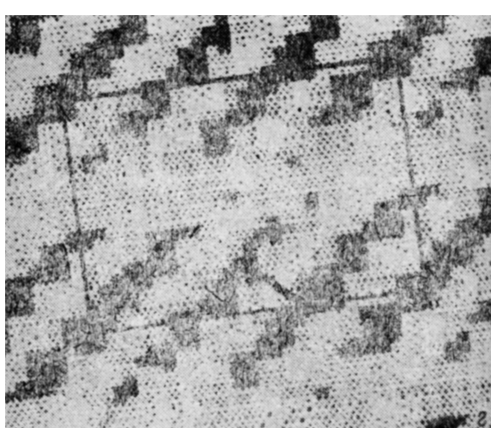
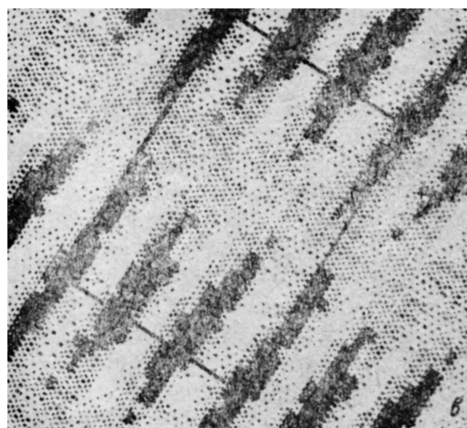
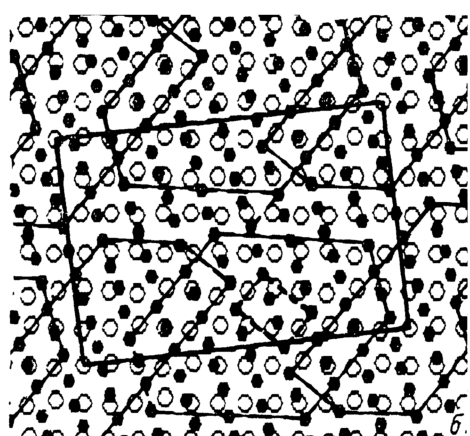
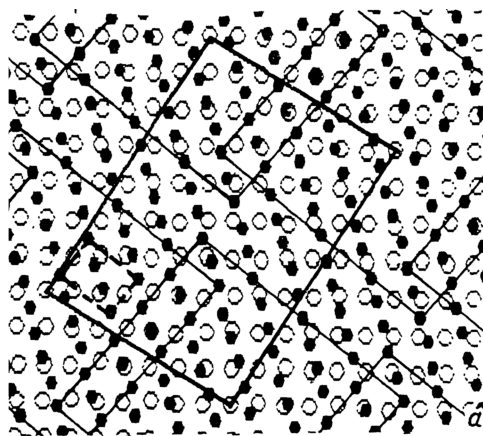


Рис. 3. Рассчитанные релаксированные структуры МГ и распределение энергии по границе.

дающим атомам. Картина распределения энергии для когерентной двойниковой границы ( $\alpha=1$ ) действительно показывает чередование темных и светлых участков, которые, естественно, не соответствуют каким-либо граничным дислокациям.

## 2. Результаты экспериментальных исследований

Исследованы образцы двух типов первой системы: монокристаллическая пленка Pt—островковая пленка Au и монокристаллическая пленка Au—островковая пленка Pt с исходной разориентацией пленок

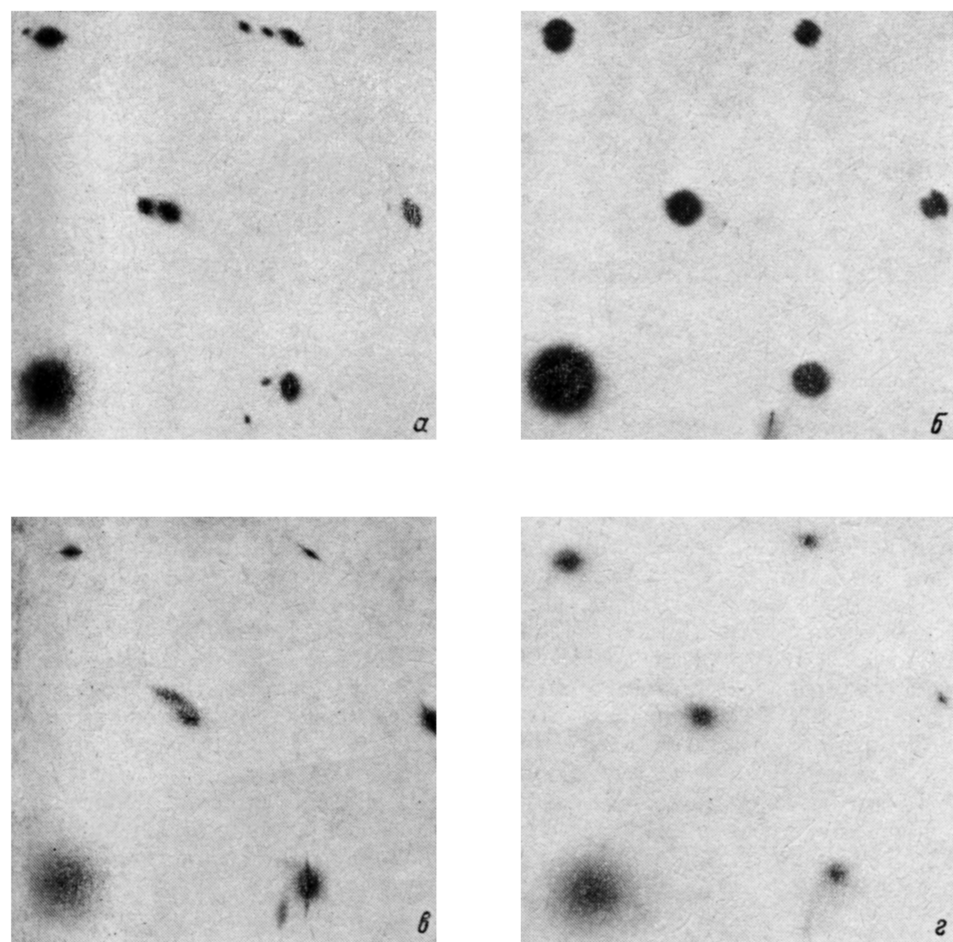


Рис. 4. Фрагменты электронограмм исходных образцов монокристаллическая пленка (110) Pt—островковая пленка (110) Au с  $\theta_u \approx 65^\circ$  (а), монокристаллическая пленка (110) Au—островковая пленка (110) Pt с  $\theta_u \approx 63^\circ$  (в) и после отжига (б) и (г) соответственно.

$\theta_u = 60 \div 80^\circ$ . На рис. 4 приведены соответствующие электронограммы исходных образцов и после отжига, из которых следует, что отжиг образцов первого типа при 600—800 К в течение 0.5 ч приводит к повороту части островков Au в позицию  $\theta_x = 70.5^\circ$ . Кроме того, на электронограмме формируются отражения, свидетельствующие о параллельном сопряжении фаз (см. выделенные фрагменты). Отжиг образцов второго типа приводил к повороту островков Pt в позицию  $\theta_x = 70.5^\circ$ . Различие в поведении этих систем связано с тем, что парциальные коэффициенты диффузии для пары Pt—Au различаются почти на два порядка величины [12]. Поэтому



в образцах первого типа островки Au являются источниками для преобладающей диффузии в Pt и формируются островки твердого раствора в параллельной ориентации к монокристаллической пленке Au.

Поворот островков в образцах обоих типов к  $\theta_k = 70.5^\circ$  подтверждает существование локального минимума на зависимости  $E^{(1)}$  для системы Pt—Au ( $\alpha \approx 0.96$ ), отвечающего двойниковой ориентации.

Как видно из рис. 1, вырождение этого минимума при  $\alpha \approx 0.9$  сопровождается появлением нового, отвечающего ориентации совпадения на МГ при  $\theta_k = 54.74^\circ$  ( $\Sigma_1/\Sigma_2 = 4/3$ ), т. е. специальной межфазной границе.



Рис. 5. Электронограмма (а) и микрофотография (б) образца (110) Cu—(110) Ag с  $\theta \approx 54^\circ$  после отжига.

Электронно-микроскопические исследования ориентационных изменений при отжиге системы монокристаллическая пленка Cu (110)—островковая одноориентационная пленка Ag (110) для исходных разориентировок  $\theta_u$ , близких к  $\theta_k = 54.74^\circ$ , и структуры образующейся МГ показали следующее: происходит вращение островков Ag от  $\theta_u$  к  $\theta_k$ , межфазная граница образована одной системой дислокаций.

Последнее было подтверждено исследованием МГ, образованных спеканием монокристаллических пленок (110) Cu и (110) Ag. На рис. 5 приведено изображение участка МГ для  $\theta \approx 54^\circ$ . Хорошо выделяются области спекания, образованные системой межфазных дислокаций с вектором Бюргерса  $1/3 \langle 111 \rangle$  Cu ( $1/2 \langle 001 \rangle$  Ag). Наблюдаемая дислокационная структура соответствует рассчитанной релаксированной атомной структуре данной МГ.

Таким образом, положение о компенсации несоответствия в МГ, проходящей по плоскости (110), одной системой дислокаций может быть распространено на весь интервал углов разориентации кристаллических решеток фаз.

#### Список литературы

- [1] Постников В. С., Иевлев В. М., Поваляев А. Д. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1977. Т. 41. С. 2341—2344.
- [2] Сухомлин Г. Д., Копецкий Ч. В., Андреева А. В. // ФММ. 1986. Т. 62. № 2. С. 349—357.
- [3] Герцман В. Ю., Даниленко В. Н., Валиев Р. З. // ФММ. 1989. Т. 66. № 2. С. 348—352.
- [4] Копецкий Ч. В., Орлов А. Н., Фионова Л. К. Границы зерен в чистых материалах. М., 1987. 158 с.
- [5] Hasson G., Boos J. Y., Herbenval Y. // Surf. Science. 1972. V. 31. P. 115—136.
- [6] Иевлев В. М., Трусов Л. И., Холмянский В. А. Структурные превращения в тонких пленках. М., 1988. 325 с.
- [7] Le Goues F. K., Licher M., Reinier M., Krakow W. // Phil. Mag. B. 1988. V. 57. N 2. P. 179—189.
- [8] Chiu K. C. R., Poate J. M., Rowe J. E., Sheng T. T., Cullis A. G. // Appl. Phys. Lett. 1981. V. 38. N 12. P. 988—990.

- [9] Tung R. T., Peate J. M., Bean J. C., Gibson J. M., Jacobson D. C. // Thin Solid Films. 1982. V. 93. N 1/2. P. 77—90.
- [10] Krakow W. // Thin Solid Films. 1982. V. 93. N 1/2. P. 109—125.
- [11] Бугаков А. В., Иевлев В. М., Тураева Т. Л. // ФТТ. 1990. Т. 33. № 9. С. 2711—2718.
- [12] Бокштейн Б. С., Бокштейн С. З., Жуховицкий А. А. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах. М., 1974. 280 с.

Воронежский  
политехнический институт

Поступило в Редакцию  
3 апреля 1991 г.

---