УДК 548.1

СИСТЕМАТИКА РЕШЕТОК СОВПАДАЮЩИХ УЗЛОВ КРИСТАЛЛОВ

© 2018 Б. М. Даринский, А. С. Прижимов, М. К. Шаров

Воронежский государственный университет, Университетская пл., 1, 394018 Воронеж, Россия
e-mail: darinskii@mail.ru

Поступила в редакцию 13.02.2018

Аннотация. Предложена новая методика построения решетки совпадающих узлов для кристаллов кубической структуры, найдены условия принадлежности этой решетки к моноклинной, орторомбической и тетрагональной сингонии. Найдены числа эквивалентных решеток совпадения в зависимости от топологии координационного многогранника. Показаны возможность и найдены условия существования поликристалла, имеющего общую решетку совпадающих узлов.

Ключевые слова: решетка совпадающих узлов, кристалл, разориентация, межфазные границы, структура.

DOI: https://doi.org/10.17308/kcmf.2018.20/476

ВВЕДЕНИЕ

Как показали многочисленные экспериментальные исследования, среди разнообразных межкристаллитных и межфазных границ особую роль играют так называемые специальные границы. Этому вопросу посвящен к настоящему времени обширный круг научных публикаций в виде журнальных статей и монографий [1–15]. Семейством специальных границ являются границы совпадающих узлов. Они получаются, если соединить два кристалла кристаллографическими гранями, такими, что часть атомов грани одного кристалла совпадет с атомами грани другого кристалла. Такая ситуация может сложиться при определенных параметрах разориентации соседних кристаллитов. Для кристаллов кубической структуры возможные разориентации соседних кристаллитов и ориентаций плоскости границы могут быть найдены путем построения решетки совпадающих узлов. Впервые представления о таких структурах были сформулированы Боллманом [1, 2]. В работах [3, 5] предложена методика построения возможных вариантов решетки совпадающих узлов для кристаллов кубической структуры и рассчитаны углы поворота кристаллов для случаев, соответствующих числам атомов в ячейке, не превышающих 50 атомов. Целью настоящей работы является более подробная характеризация строения решеток совпадения, включающая число возможных ориентаций границ совпадения и симметрийных характеристик.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

1. Операция поворота. Поворот твердого тела характеризуется тремя параметрами, которые можно выбрать различными способами. Для поставленной задачи удобно указать следующие параметры поворота: направление оси вращения, которая однозначно определяется единичным вектором $\vec{t}=(t_1,t_2,t_3)$ и углом поворота φ кристалла вокруг этой оси. Отметим, что этот угол считается положительным, если поворот происходит против часовой стрелки, если смотреть на твердое тело с конца вектора $\vec{t}$.

Пусть вектор $\vec{B}_0$ в результате поворота переходит в $\vec{B}$. Рассмотрим сначала случай, когда вектор $\vec{B}_0$ перпендикулярен оси вращения. Тогда после поворота он будет лежать в плоскости, перпендикулярной оси вращения. Вектор $\vec{B}$ находится по формуле:

$$\vec{B}=\cos(\varphi)\vec{B}_0+\sin(\varphi)[\vec{t}\vec{B}_0]. \qquad (1)$$

Вектор $\vec{B}$ общего положения можно представить в виде суммы^:

$$\vec{B}=\left(\vec{B}_0-\vec{t}\,(\vec{t}\vec{B}_0)\right)+\vec{t}\,(\vec{t}\vec{B}_0). \qquad (2)$$

Здесь первое слагаемое в скобках представляет вектор, перпендикулярный оси вращения. Второе слагаемое $\vec{t}\,(\vec{t}\vec{B}_0)$ представляет собой вектор, направленный вдоль оси вращения. При повороте первое слагаемое преобразуется по формуле (1), а второе остается неизменным. Поэтому формула (1) для произвольного вектора преобразуется к виду:

$$\vec{B} = \cos(\varphi)\vec{B}_0 + (1-\cos(\varphi))\vec{t}\,(\vec{t}\vec{B}_0) + \sin(\varphi)[\vec{t}\vec{B}_0]. \quad (3)$$

Формулы (2) и (3) справедливы для любого вектора в пространстве. Переходя к построению решетки совпадающих узлов, будем считать, что начальный и конечный векторы являются решеточными векторами кубической решетки, то есть, они представляются в виде:

$$\vec{B} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3,\ \vec{B}_0 = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3, \quad (4)$$

где $\vec{a}_i, \vec{b}_i$ – векторы ячейки кристаллической решетки, n_i, m_i – целые числа.

Для простой кубической решетки векторы $\vec{a}_i$, $\vec{b}_i$ совпадают по направлениям с единичными векторами декартовой системы координат $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$. В этом случае $\vec{a}_1 = a\vec{i}, \vec{a}_2 = a\vec{j}, \vec{a}_3 = a\vec{k}$, где a – длина ребра куба.

Отметим, что поскольку длина a ребра постоянной решетки одинакова для исходной и повернутой решетки, можно в соотношении (3) сократить этот сомножитель. В результате чего в формуле (3) будут присутствовать наборы целых чисел n_i, m_i.

Далее будем полагать, что вектор получается поворотом вектора $\vec{B}_0$ вокруг оси $\vec{A}$, которая также является решеточным вектором. Выбором векторов $\vec{B}$ и $\vec{B}_0$ определяется направление нормали к плоскости возможных осей поворота, которые определяются соотношением:

$$\vec{P} = \vec{B} - \vec{B}_0, \vec{A}\vec{P} = 0. \quad (5)$$

Решение этого уравнения в целых числах позволяет найти полную совокупность осей вращения, являющихся кристаллографическими линиями, направленными вдоль единичного вектора:

$$\vec{t} = \frac{\vec{A}}{A}. \quad (6)$$

Эту совокупность можно представить в виде периодической системы точек на плоскости. Векторы ячейки плоскости определяются с помощью формул:

$$\vec{P}_1 = \left[\vec{B}\vec{B}_0\right], \vec{P}_2 = \left[\vec{B} + \vec{B}_0\right], \quad (7)$$

в которых после подстановки конкретных координат векторов $\vec{B}$ и $\vec{B}_0$ нужно отбросить общие множители. Полная совокупность всех осей поворотов представляется в виде:

$$p_1\vec{P}_1 + p_2\vec{P}_2, \quad (8)$$

где p_1, p_2 – целые числа.

Далее можно определить угол поворота. Для этого умножим скалярно (3) на вектор $\vec{B}_0$. В результате получим:

$$\cos(\varphi) = \frac{(\vec{B}_0\vec{B})A^2 - (\vec{A}\vec{B})^2}{B^2A^2 - (\vec{A}\vec{B})^2}. \quad (9)$$

Формула для $\sin(\varphi)$ получается путем скалярного умножения (3) на $\vec{B}$. В результате придем к выражению:

$$\sin(\varphi) = \\ = \frac{(B^2 - (\vec{B}_0\vec{B}))(B^2A^2 + (\vec{B}_0\vec{B})A^2 - 2(\vec{A}\vec{B})^2)}{B^2A^2 - (\vec{A}\vec{B})^2}\frac{A}{(\vec{B}\vec{A}\vec{B}_0)}. \quad (10)$$

Отметим, что подстановка (6)–(8) в формулу (3) приводит к выражению, в числителе и знаменателе которого стоят целые числа, поэтому применение операции вращения к достаточно длинному решеточному вектору $\vec{C}_0$ исходной решетки приведет также к решеточному вектору $\vec{C}$ этой решетки. Таким образом, три вектора $\vec{C}$ принадлежат исходной кристаллической решетке и полученной после поворота, поэтому они являются векторами ячейки решетки совпадающих узлов этих решеток.

В качестве третьего вектора решетки совпадений можно выбрать вектор:

$$\vec{C} = \left[\vec{A}\vec{B}\right], \quad (11)$$

также имеющий целочисленные координаты.

Число Σ атомов в ячейке решетки совпадений, с учетом (11), определяется выражением:

$$\Sigma = \vec{B}\vec{A}\vec{C} = B^2A^2 - (\vec{A}\vec{B})^2. \quad (12)$$

Отметим, что это выражение совпадает со знаменателем в (9).

Совокупность ориентаций возможных межкристаллитных границ специального вида определяется кристаллографическими плоскостями решетки совпадающих узлов. В частных случаях, если плоскость границы совпадает с плоскостью, в которой лежит ось поворота, то она является границей наклона, если она перпендикулярна оси вращения, то граница является винтовой.

2. Число пар кристаллографических векторов, которые могут быть совмещены путем поворотов, является конечным и определяется количеством узлов в координационной сфере, которой принадлежат начальный и конечный векторы, так как первый и последний имеют одинаковые длины. Для систематизации возможных решеток совпадающих узлов и специальных границ можно воспользоваться координационными многогранниками. Последние можно получать размножением какого-либо вектора решетки по группе точечной симметрии куба, насчитывающей 48 элементов симметрии.

Если исходный вектор задается компонентами, то размножение этого вектора по группе симметрии осуществляется путем произведения группы перестановок шестого порядка на знакопеременную группу восьмого порядка. Строение многогранника, таким образом, полностью определится этим исходным вектором.

Для кристаллов кубической симметрии имеется 7 различных типов многогранников. Они получаются размножением по группе симметрии следующих векторов, имеющих минимальные компоненты: [001], [110], [111], [012], [112], [122], [123]: [001], октаэдр, z = 6, N = 15; [110], усеченный октаэдр, z = 12, N = 66; [111], куб, z = 8, N = 28; [210], ромбокубооктаэдр, z = 24, N = 276; [211], усеченный куб, z = 24, N = 276; [221], кубооктаэдр + [003] октаэдр, z = 30, N = 435; [321], усеченный кубооктаэдр, z = 48; N = 1128.

Здесь z – координационное число, а N – полное число различных пар векторов, определяющих различные плоскости осей поворотов для каждого координационного многогранника. N определяется половиной числа сочетаний из узлов многогранника по два в соответствии с формулой:

$$N = \frac{z(z-1)}{2}. \tag{13}$$

В качестве замечания отметим возможное наличие таких координационных многогранников, которые формируются двумя или большим количеством образующих векторов, не сводимых друг к другу операциями симметрии куба. Примером последних может послужить многогранник, полученный суммированием кубооктаэдра и октаэтра, путем размножением векторов [221] и [300], имеющих одинаковые длины. В этом случае z = 30.

Возможные плоскости осей поворота для каждого многогранника определяются направлениями его ребер и диагоналей, соединяющих разные вершины. Для построения совокупности плоскостей осей поворотов удобно указать вектор – представитель, принимаемый в качестве векторного базиса представления группы симметрии куба и размножить его по этой группе. В результате получится многогранник, один из указанных выше.

Для каждой пары векторов можно указать различные оси поворота, которые однозначно определят соответствующие углы поворота в соответствии с (7). Решетка совпадений общего типа, как это следует из (9) принадлежит моноклинной сингонии. В частных случаях параметров поворота решетка совпадающих узлов может иметь более высокую симметрию, а именно, орторомбическую, тетрагональную и кубическую.

Рассмотрим различные классы решеток совпадающих узлов. Из всей совокупности параметров поворота выделим класс решеток совпадений, который порождается поворотами на 180°. Число плоскостей осей поворотов для каждого координационного многогранника равно $z/2$. Так как оси поворота и поворачиваемые векторы взаимно перпендикулярны, то решетки совпадающих узлов принадлежат орторомбическому семейству. В частных случаях они могут иметь более высокую симметрию.

Другой класс решетки совпадений получается при условии $\vec{A}\vec{B} = 0$. В этом случае получается орторомбическая решетка совпадений, а при условии равенства длин двух векторов ячейки – тетрагональная сингония.

В качестве примеров рассмотрим поворот $\vec{B}_0[00\bar{1}] \to \vec{B} = [001]$. В этом случае поворот совершается на угол π вокруг любой оси, удовлетворяющей условию A_3 = 0. Оси с координатами типа [010] и [110] при этом исключаются, так как поворот вокруг этих осей на угол π является одним из элементов группы симметрии куба. Нетривиальная ось поворота с наименьшими индексами будет иметь индексы типа [210]. Тем самым указываются два вектора ячейки решетки совпадения $\vec{B} = [001]$, $\vec{A} = [210]$. Третий вектор ячейки этой решетки получается по формуле (11) $\vec{C} = [\bar{1}20]$. Таким образом, решетка совпадающих узлов будет принадлежать тетрагональной сингонии с осью четвертого порядка, направленной вдоль [001]. Число Σ определяем в соответствии с формулой (12), получаем Σ = 5. Для этой совокупности параметров поворота характерно равенство длин и взаимная перпендикулярность двух ребер ячейки решетки совпадений. Поэтому, если в качестве оси вращения принять вектор $\vec{C}$, то получится такая же решетка совпадающих узлов. Поскольку повороты совершаются вокруг разных осей, внутренняя атомная структура ячеек будет разной. Поэтому возможно существование одномерных, двумерных и трехмерных поликристаллических структур, имеющих общую решетку совпадающих узлов, не требующих введения дисклинаций.

Рассмотрим поворот на угол π такой, что $\vec{B}_0[0\bar{1}\bar{1}] \to \vec{B}[011]$, в этом случае нетривиальной осью вращения с наименьшими индексами будет вектор $\vec{A} = [21\bar{1}]$, третий вектор $\vec{C} = [\bar{1}1\bar{1}]$. Все три вектора перпендикулярны друг другу и имеют разные длины, поэтому решетка совпадающих углов принадлежит орторомбической сингонии. Число атомов в ячейке Σ=7. $\vec{B}_0[\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1}] \to \vec{B} = [111]$, $\vec{A} = [2\,\bar{1}\,\bar{1}]$, $\vec{C} = [01\,\bar{1}]$, Σ = 6. Аналогичные вычисления числа атомов в элементарной ячейке в случае $\vec{A} = [310]$ дают Σ = 10.

В таблице систематизированы расчеты для ряда других случаев.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении сформулируем основные результаты работы. Метод систематизации совокупности решеток совпадающих узлов на основе координационных многогранников представляется простым и удобным для использования. Общим свойством решеток совпадающих узлов является их принадлежность к моноклинной сингонии. В частных случаях они могут принадлежать к орторомбической и тетрагональной сингонии. Обнаружен пример решетки совпадений, имеющей разные параметры поворота, что означает, что возможны поликристаллы специального вида, имеющие общую решетку совпадающих узлов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России высшим учебным заведениям и научным организациям в сфере научной деятельности (проект №4.7972.2017/8.9).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bollmann W. // *Phil. Mag.,* 1967, vol. 16, pp. 363–381.

2. Bollmann W. // *Phil. Mag.*, 1967, vol. 16, pp. 383–399.

3. Grimmer H. // *Acta Cryst.,* 1974, vol. A 30, pp. 680–680.

4. Grimmer H., Bollmann W., Warrington D. T. // *Acta Cryst.*, 1974, vol. A 30, pp. 197–207.

5. Орлов А. Н., Перевезенцев В. Н., Рыбин В. В. *Границы зерен в металлах.* М.: Металлургия, 1980, 224 с.

6. Глейтер Г., Чалмерс Б. *Большеугловые границы зерен.* М.: Мир, 1975, 376 с.

8. Страумал Б. Б., Швиндлерман Л. С. // *Поверхность. Физика, химия, механика*, 1986, т. 10, с. 5–14.

9. Fortes M. A. // *Phys. Stat. Sol.,* 1977, vol. B 82. pp. 377–382.

8. Bonnet R., Durand F. // *Scripta Met.*, 1975, vol. 9, pp. 935–939.

9. Bonnet R. // *Scripta Met.,* 1976, vol. 10, pp. 801–806.

10. Bonnet R., Cousineau E. // *Acta Cryst*., 1977, vol. A 33, pp. 850–856.

11. Рыбин В. В., Перевезенцев В. Н. // ФТТ, 1975, т. 17, с. 3188–3193.

12. Андреева А. В., Фионова Л. К. // ФММ, 1977, т. 44, с. 395–400.

13. Кайбышев О. А., Валиев Р. З. *Границы зерен и свойства металлов*. М.: Металлургия, 1987, 214 с.

14. Копецкий Ч. В., Орлов А. Н., Фионова Л. К. *Границы зерен в чистых материалах*. М.: Наука, 1987, 160 с.

15. Бокштейн Б. С. *Структура и свойства внутренних поверхностей раздела в металлах*. М.: Металлургия, 1988, 272 с.

Таблица. Характеристики ячейки решетки совпадающих узлов и угла поворота кристалла
[**Table.** Characteristics of the lattice cell of matching nodes and the angle of rotation of the crystal]

B_0	B	p_1	p_2	P_1	P_2	A	C	φ	Σ
[100]	[010]	1	2	[001]	[110]	[221]	$[\bar{1}02]$	143°	5
[100]	[010]	2	1	[001]	[110]	[112]	$[\bar{2}01]$	101°	5
[100]	[010]	1	3	[001]	[110]	[331]	$[\bar{1}03]$	154°	10
[100]	[010]	3	1	[001]	[110]	[113]	$[\bar{3}01]$	96°	10
[110]	[101]	1	1	$[11\bar{1}]$	[211]	[320]	$[23\bar{2}]$	76°	17
[110]	[101]	2	1	$[11\bar{1}]$	[211]	$[43\bar{1}]$	$[35\bar{3}]$	66°	43
[112]	[211]	1	1	$[\bar{1}\bar{3}\bar{1}]$	[323]	$[2\bar{1}2]$	$[\bar{3}\bar{2}4]$	46°	29
[112]	[211]	1	2	$[\bar{1}\bar{3}\bar{1}]$	[323]	[515]	$[\bar{4}\bar{5}3]$	91°	50

Б. М. ДАРИНСКИЙ, А. С. ПРИЖИМОВ, М. К. ШАРОВ

SYSTEMATICS OF COINCIDENCE SITE LATTICES OF CRYSTALS

 B. M. Darinsky, A. S. Prizhimov, M. K. Sharov

Voronezh State University, 1 Universitetskaya pl., 394018 Voronezh, Russia
e-mail: darinskii@mail.ru

Received 13.02.2018

Abstract. The object of this study is polycrystalline materials containing intercrystalline boundaries as one of the accompanying components of the defective structure. A wide variety of geometric characteristics that determine the atomic structure and physical properties of intergranular boundaries, gives rise to the expediency of systematization of the entire set of possible intergranular boundaries. The intercrystalline boundaries obtained on the basis of the coincidence of nodes are an important family of defects in polycrystals, so these defects are given a lot of research, but currently there is no complete systematization. The construction of such systematization was the purpose of this paper.

The basis of classification is the coordination polyhedron of the simple cubic lattice. Seven different polytopes with different topological characteristics are given. As parameters defining the geometry of the lattice matching of the nodes of the selected pair of vectors the vertices of these polyhedra and the lattice vector that defines the axis of rotation was used. Using algebraic methods used in studies of solid rotation, formulas are obtained for the crystallographic plane in which all possible axes of turns and vectors of the lattice cell of matching nodes should lie. As a result, it was shown that the coincidence lattices of General form belong to monoclinic crystal structure. In particular cases they may belong to orthorhombic and tetragonal crystal structure. It is shown that such lattices of coinciding nodes are possible, which are obtained at different parameters of rotation, so polycrystals on the basis of the common lattice of coincidences are possible. A table is constructed in which the data are systematized for the vectors of the cell of the lattice of coincidences, rotation angles, the number of atoms in the cell at different initial characteristics of rotation.

Keywords: lattice matching of the nodes of the crystal, disordering, interfaces, structure.

DOI: https://doi.org/10.17308/kcmf.2018.20/476

ACKNOWLEDGMENTS

The work was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Education and Science of Russia to higher educational institutions and scientific organizations in the field of scientific activity (project No. 4.7972.2017 / 8.9).

REFERENCES

1. Bollmann W. *Phil. Mag.,* 1967, vol. 16, pp. 363–381.

2. Bollmann W. *Phil. Mag.*, 1967, vol. 16, pp. 383–399.

3. Grimmer H. *Acta Cryst.,* 1974, vol. A 30, pp. 680–680. DOI: 10.1107/S056773947400163X

4. Grimmer H., Bollmann W., Warrington D. T. *Acta Cryst.*, 1974, vol. A 30, pp. 197–207. DOI: 10.1107/S056773947400043X

5. Orlov A. N., Perevezentsev V. N., Rybin V. V. *Granitsy zeren v metallakh* [Grain Boundaries in Metals]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1980, 224 p. (in Russ.)

6. Gleyter G., Chalmers B. *Bol'sheuglovye granitsy zeren* [High-angle Grain Boundaries]. Moscow, Mir Publ., 1975, 376 p. (in Russ.)

8. Straumal B. B., Shvindlerman H. P. *Surface. Physics, Chemistry, Mechanics*, 1986, vol. 10, pp. 5–14. (in Russ.)

9. Fortes M. A. *Phys. Stat. Sol.,* 1977, vol. B 82, pp. 377–382. DOI: 10.1002/pssb.2220820143

8. Bonnet R., Durand F. *Scripta Met.*, 1975, vol. 9, pp. 935–939. DOI: 10.1016/0036-9748(75)90548-7

9. Bonnet R. *Scripta Met.,* 1976, vol. 10, pp. 801–806. DOI: 10.1016/0036-9748(76)90297-0

10. Bonnet R., Cousineau E. *Acta Cryst.*, 1977, vol. A 33, pp. 850–856. DOI: 10.1107/S0567739477002058

11. Rybin V. V., Perevezentsev V. N. *FTT* [Technical Physics], 1975, vol. 17, pp. 3188–3193. (in Russ.)

12. Andreeva A. V., Fionova L. K. *Fizika Metallov i Metallovedenie* [Physics of Metals and Metallography], 1977, vol. 44, pp. 395–400. (in Russ.)

13. Kaibyshev O. A., Valiev R. Z. *Granitsy zeren i svoistva metallov* [Grain Boundaries and Properties of Metals]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1987, 214 p. (in Russ.)

14. Kopetsky H. V., Orlov A. N., Fionova L. K. *Granitsy zeren v chistykh materialakh* [Grain Boundaries in Pure Materials]. Moscow, Nauka Publ., 1987, 160 p. (in Russ.)

15. Bokshtein B. S. *Struktura i svoistva vnutrennikh poverkhnostei razdela v metallakh* [Structure and Properties of Internal Interfaces in Metals]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1988, 272 p. (in Russ.)

Даринский Борис Михайлович – д. ф.-м. н., профессор, профессор кафедры материаловедения и индустрии наносистем, Воронежский государственный университет; тел.: +7 (473) 2208735, e-mail: darinskii@mail.ru

Прижимов Андрей Сергеевич – к. ф.-м. н., доцент кафедры материаловедения и индустрии наносистем, Воронежский государственный университет; тел.: +7 (473) 2208735, e-mail: rnileme@mail.ru

Шаров Михаил Константинович – к. х. н., доцент, доцент кафедры материаловедения и индустрии наносистем, Воронежский государственный университет; тел.: +7 (473) 2208735, e-mail: sharov-mk@mail.ru

Boris M. Darinskiy – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Full Professor, Voronezh State University; tel.:+7 (473) 2208735, e-mail: darinskii@mail.ru

Andrey S. Prizhimov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Voronezh State University; tel.:+7 (473) 2208735, e-mail: rnileme@mail.ru

Mikhail K. Sharov – Cand. Sci. (Chem.), Assistant Professor, Voronezh State University; tel.:+7 (473) 2208735, e-mail: sharov-mk@mail.ru