

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»

В.Н. Яльцев, В.И. Скрытный

ВЗАИМНЫЕ РАЗВОРОТЫ КРИСТАЛЛОВ

*Допущено Федеральным учебно-методическим
объединением в системе высшего образования
по УГСН 14.00.00 «Ядерная энергетика и технологии»
в качестве учебного пособия для студентов высших
учебных заведений, обучающихся по направлению 14.04.02
«Ядерные физика и технологии»*

Москва 2022

УДК 548.0:53(075)
ББК 22.37я7
Я 53

Яльцев В.Н., Скрытный В.И. **Взаимные развороты кристаллов:**
Учебное пособие [Электронный ресурс]. – М.: НИЯУ МИФИ, 2022. – 48 с.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлению бакалавриата 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов», магистров и аспирантов, специализирующихся в области физики конденсированных сред и материаловедения. Может быть полезно молодым специалистам в области физики металлов, твердого тела и материаловедения.

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. В.Ф. Шамрай

ISBN 978-5-7262-2735-1

© *Национальный исследовательский
ядерный университет «МИФИ», 2022*

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	4
1. Влияние границ зерен на физико-механические свойства поликристаллов	5
2. Методы описания разворота зерен	10
2.1. Эйлеровские углы поворота	10
2.2. Параметры поворота угол-ось	12
2.3. Кватернионы	13
3. Симметрия кристаллической решетки и разворот зерен	15
3.1. Элементы симметрии кристаллографических групп	15
3.2. Матрица разворота кристаллов (зерен)	16
3.3. Матричное представление группы	19
3.4. Правило Вигнера	21
3.5. Эквивалентные развороты кубических и гексагональных кристаллов	22
4. Разворот зерен в поликристаллах	28
4.1. Плотность распределения предельных углов разворота	28
4.2. Специальные развороты кристаллов	31
5. Определение матрицы взаимного разворота кристаллов	34
Приложение 1. Матрицы элементов симметрии группы чистых вращений O кубического кристалла	39
Приложение 2. Кватернионы элементов группы чистых вращений O кубического кристалла	41
Приложение 3. Матрицы элементов симметрии группы чистых вращений D_6 гексагонального кристалла	42
Приложение 4. Кватернионы элементов группы чистых вращений D_6 гексагонального кристалла	43
Приложение 5. Определение следов матриц эквивалентных разворотов гексагональных кристаллов	44
Список рекомендуемой литературы	45

Предисловие

Механические и функциональные свойства металлических поликристаллических материалов в значительной степени зависят от их микроструктуры. В последние годы активно развивается новый подход в получении материалов с улучшенными или заранее заданными свойствами за счет создания в них требуемых структурных характеристик поликристаллов. Одним из наиболее важных структурных параметров, влияющим на свойства металлических материалов, является вид и распределение границ зерен.

В последнее время проектирование границ зерен (или так называемый «дизайн границ зерен»), направленное на разработку оптимального распределения границ зерен в структурированных металлических материалах, привлекает огромный интерес материаловедов всего мира. Традиционное представление границ зерен связано с разделением по трем факторам – границы с решетками совпадения и без них, специальные и общие границы, мало- и большеугловые границы. Интерес к границам зерен особенно возрастает в связи с появлением и развитием технологий получения мелкозернистых, нанокристаллических и квазикристаллических материалов.

В связи с этим возникает необходимость полного и корректного описания границ зерен, в частности определения характеристик разворотов зерен в поликристалле. Данное пособие дает необходимую информацию о различных способах описания разворотов зерен, учете симметрии при определении разворотов кубических и гексагональных материалов. Пособие предназначено для студентов, специализирующихся в области материаловедения.

1. Влияние границ зерен на физико-механические свойства поликристаллов

Большинство конструкционных материалов являются поликристаллическими твердыми телами, представляющими собой агрегаты монокристаллитов (зерен), разделенных между собой внутренними поверхностями раздела – межкристаллитными (межзеренными) или межфазными границами. Свойства такой системы определяются как индивидуальными свойствами зерен, так и их коллективным поведением, которое во многом зависит от характеристик ансамбля межкристаллитных границ.

Анизотропия распределения зерен поликристалла задается *кристаллографической текстурой*, для описания которой используются *прямые полюсные фигуры* (ППФ), *обратные полюсные фигуры* (ОПФ) и *функция распределения ориентаций* (ФРО).

Для описания простейшего случая – бикристалла (два кристалла с плоской границей) с *макроскопической точки зрения* необходимы 5 параметров: 3 – для описания взаимного разворота двух кристаллов и 2 – для задания *n*-нормали к плоскости границы. В качестве угловых параметров разворота используют три эйлеровских угла (φ , θ , ψ) или угол разворота α и ось разворота \mathbf{u} с кристаллографическими индексами $\langle mnp \rangle$. Из трех компонентов оси разворота m , n , p независимыми являются только два, поскольку $m : n : p = l_1 : l_2 : l_3$, но $l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 1$, где l_1 , l_2 , l_3 – направляющие косинусы. При *микроскопическом* рассмотрении необходимо ввести вектор $\mathbf{t} = t_1\mathbf{a}_1 + t_2\mathbf{a}_2 + t_3\mathbf{a}_3$, соединяющий начала координат соседних кристаллов, где t_1 , t_2 , t_3 выражаются в долях трансляций. Таким образом, в общем случае требуется восемь параметров.

Анизотропия распределения разворота соседних зерен поликристалла задается *текстурой взаимных разворотов*.

При рассмотрении структуры *высокоугловых границ* первоначально использовалась модель *аморфной прослойки* по границам зерен, обеспечивающей сцепление соседних зерен. Однако модель аморфной прослойки противоречит многим позднее установленным фактам. Во-первых, свойства аморфной границы не должны зависеть от взаимной ориентации соседних зерен. В действитель-

ности же энергия границ зерен, скорость диффузии по границам, скорость миграции границ, зернограничное скольжение зависят от взаимной разориентировки зерен. Следовательно, границы зерен не аморфны, не бесструктурны и должны иметь определенное строение, зависящее от кристаллографической разориентировки. Во-вторых, аморфная прослойка должна иметь достаточно большую толщину (порядка сотни атомных диаметров), чтобы обеспечить скольжение зерен неправильной формы. В то же время прямые экспериментальные данные, полученные с помощью ионного проектора, показывают, что границы имеют толщину всего в несколько межатомных расстояний.

В настоящее время считается доказанным, что границы зерен не являются аморфными, а имеют определенную структуру.

Решетка совпадающих узлов – РСУ (в английской терминологии – coincidence site lattice, CSL), возникает при определенных

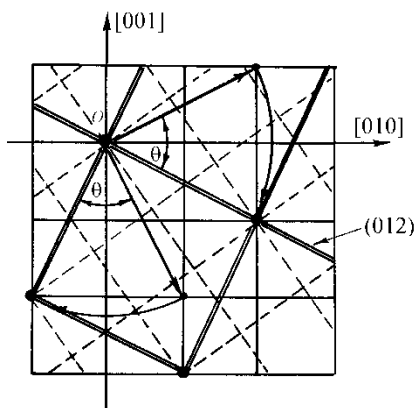


Рис. 1.1. Решетка совпадающих узлов с $\Sigma = 5$

строга фиксированных значениях оси и угла разворота соседних кристаллов (*соотношения Кронберга–Вильсона*). Например, при повороте кубического кристалла на угол $\theta = 2 \arctg(1/2) = 36,9^\circ$ вокруг оси $[100]$ возникает решетка, в которой совпадающие узлы лежат в каждой пятой плоскости (012) (рис. 1.1).

Для характеристики РСУ часто используют обратную плотность совпадающих узлов, обозначаемую Σ – число узлов решетки, приходящихся на один совпадающий узел, причем число Σ всегда простое. Так, $\Sigma = 1$ означает полное совпадение решеток и отсутствие границы. При $\Sigma = 3$ возникает двойник в ГЦК-решетке. Для случая, изображенного на рис. 1, $\Sigma = 5$, а ячейка решетки совпадающих узлов является тетрагональной.

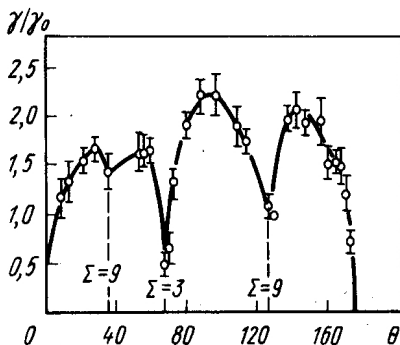
Границы зерен оказывают значительное влияние на физические и механические свойства материалов, поскольку служат источниками дислокаций, путями ускоренной диффузии, местами зарождения дислокационных скоплений, трещин и сегрегаций примесных и растворенных атомов. Поведением границ зерен во многом определяется протекание таких важных процессов как рекристаллизация и рост зерен.

Ориентационные соотношения между кристаллами оказывают значительное влияние на такие свойства, как энергия границы зерна, выделения по границам зерен, зернограничная диффузия, миграция границ зерен, проскальзывание по границам зерен.

При рассмотрении высокоугловых границ для задания зависимости от угловых параметров разворота требуется 4-мерное пространство. Обычно стремятся связать свойства границы зерна с какой-либо скалярной величиной, чаще всего ограничиваются углом разворота.

В результате теоретического и экспериментального определения зависимости энергии границы зерна от угла разворота установлено, что при некоторых угловых соотношениях энергия границы зерна имеет резкие спады (рис. 1.2). Причем эти ориентационные соотношения соответствуют границам с относительно хорошей атомной укладкой. Весьма малые значения имеет энергия границ для зерен с двойниковой ориентацией. Резкие спады для углов разворота равных $70,5^\circ$ и $129,5^\circ$ соответствует двойниковым ориентациям (111) и (113), т.е. решеткам совпадения с обратной плотностью совпадающих узлов Σ , равной 3 и 11.

Рис. 1.2. Зависимость для алюминия энергии границ зерен, разориентированных вокруг оси [011], от угла разворота: γ – зернограничная энергия; γ_0 – энергия свободной поверхности; θ – угол разворота



Структура границ зерен или субзерен заметно влияет на морфологию, кинетику зарождения и роста выделений по границам зерен. Скорость зарождения на границах совпадения меньше, чем на произвольных высокоугловых границах, что связывают с меньшей свободной энергией специальных границ.

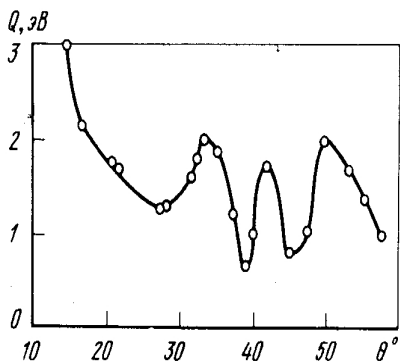


Рис. 1.3. Ориентационная зависимость энергии активации миграции границ наклона в алюминии: Q – энергия активации; θ – угол разворота

Ориентационные соотношения между зернами являются одним из главных факторов, определяющих миграцию границ зерен. Результаты изучения на поликристаллах и бикристаллах показывают, что границы совпадения имеют большую подвижность, чем произвольные границы, причем этот эффект наиболее заметен в металлах обычной чистоты, что связывают с сегрегацией примесей преимущественно на произвольных границах (рис. 1.3).

В опытах по селективному росту установлены ориентации между зерном и матрицей, соответствующие максимальной подвижности: в ГЦК металлах – поворот на $30\text{--}40^\circ$ вокруг $\langle 111 \rangle$, в ОЦК металлах – $25\text{--}30^\circ$ вокруг $\langle 110 \rangle$, в ГПУ металлах – 30° вокруг $[0001]$.

Миграции границ зерен уделяется большое значение при рассмотрении проблем текстурообразования. Наиболее важными теориями, объясняющими образование текстур рекристаллизации, являются теории ориентированного зарождения и ориентированного роста. В настоящее время показано, что при рекристаллизации металлов решающее значение принадлежит теории ориентированного роста, основанной на ориентационной зависимости миграции высокоугловых границ, хотя в некоторых случаях дополнительное воздействие может оказать ориентированное зарождение.

Проскальзывание по границам зерен – важный тип деформации металлов при высоких температурах (выше $0,4 T_{пл}$). Скорость про-

скальзывания по границам зерен и энергия активации проскальзывания зависят от ориентационного соотношения между зернами, причем очень низкие скорости проскальзывания характерны для границ с высокой плотностью совпадающих узлов (рис. 1.4).

Получение сведений о характеристиках границ зерен становится актуальным в связи с появлением материалов с нанокристаллической структурой. Наноструктурные материалы, вследствие очень малого размера зерен, содержат большое количество границ зерен, которые играют определяющую роль в формировании их необычных физических и механических свойств. Вследствие этого в проводимых экспериментальных исследованиях и разрабатываемых структурных моделях наноматериалов границы зерен занимают центральное место.

Очевидно, вследствие формирования наноструктур может происходить изменение механизмов деформации, когда наряду с движением решеточных дислокаций активное участие начинают принимать процессы на границах нанозерен, в частности зернограницное проскальзывание.

Кроме того, в последние годы активно развивается новый подход в создании материалов с улучшенными или заранее заданными свойствами за счет создания в них требуемых характеристик зернограницного ансамбля, так называемое «зернограницное проектирование».

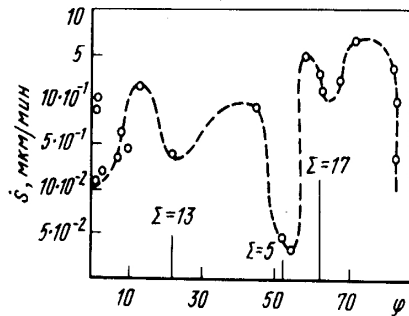


Рис. 1.4. Изменение скорости проскальзывания в зависимости от угла разворота в бикристаллах меди (ось разворота [100]): \dot{s} – скорость проскальзывания; φ – угол разворота

2. Методы описания разворота зерен

При рассмотрении разворота зерен весьма удобен матричный аппарат, применяемый в механике твердого тела для описания поворотов или вращения твердого тела. Как известно, поворот трехмерного пространства вокруг фиксированной точки описывается матрицей ортогонального преобразования

$$\mathbf{g} = \|g_{ik}\| \quad (i, k = 1, 2, 3),$$

для которой $\det \mathbf{g} = +1$ и $\mathbf{g}^{-1} = \tilde{\mathbf{g}}$, где $\tilde{\mathbf{g}}$ – транспонированная матрица \mathbf{g} . В результате ортогонального преобразования сохраняются длины векторов и углы между ними, т.е.:

$$\sum_{i=1}^3 g_{ik} g_{il} = \delta_{kl} \quad (k, l = 1, 2, 3), \quad (2.1)$$

где δ_{kl} – символ Кронекера.

Поскольку из девяти компонентов матрицы \mathbf{g} только три являются независимыми, то поворот характеризуется тремя независимыми параметрами. В общем случае поворот описывается не векторной величиной, а тензором второго ранга, задаваемым матрицей \mathbf{g} .

2.1. Эйлеровские углы поворота

Существует несколько способов выбора параметров поворота. Довольно часто используются *углы Эйлера* φ , θ , ψ (рис. 2.1). При этом поворот можно представить как произведение трех последовательных поворотов $\mathbf{g}(\varphi)$, $\mathbf{g}(\theta)$, $\mathbf{g}(\psi)$. Первый поворот осуществляется на угол φ вокруг оси Ox_3 , в результате которого ось Ox_1 совпадает с линией $O\xi$, называемой *линией узлов*, а ось Ox_2 переходит в $O\xi$. Второй поворот $\mathbf{g}(\theta)$ – на угол θ вокруг линии узлов $O\xi$, после которого ось Ox_3 переходит в Ox'_3 , а ось $O\xi$ – в ось $O\eta$. Последний, третий поворот, $\mathbf{g}(\psi)$ – на угол ψ вокруг оси Ox'_3 , в результате которого совмещаются системы координат $x_1x_2x_3$ и $x'_1x'_2x'_3$.

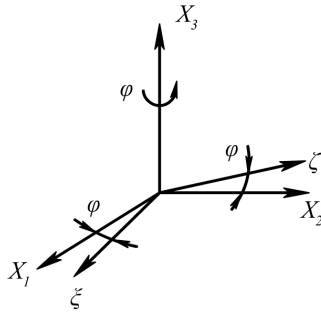
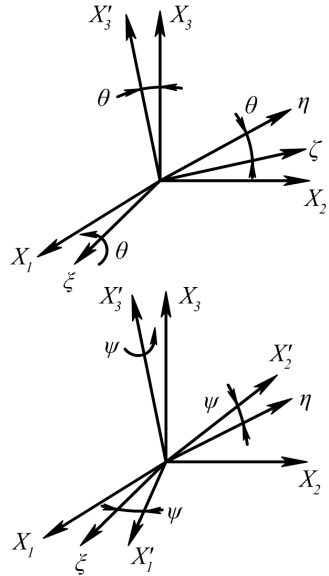


Рис. 2.1. Эйлеровские углы поворота φ , θ , ψ



Каждая из матриц $\mathbf{g}(\varphi)$, $\mathbf{g}(\theta)$, $\mathbf{g}(\psi)$ имеет простой вид в соответствующих *повернутых* системах координат. Так, матрица $\mathbf{g}(\varphi)$ в системе координат $x_1x_2x_3$ есть

$$\mathbf{g}(\varphi) = \begin{vmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (2.2)$$

матрица $\mathbf{g}(\theta)$ в системе координат $\zeta\xi x_3$ имеет вид

$$\mathbf{g}(\theta) = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{vmatrix}, \quad (2.3)$$

матрица $\mathbf{g}(\psi)$ в системе $\zeta\eta x'_3$ аналогична (2.2).

Матрица поворота $\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi)$ обычно записывается в неподвижной системе координат $x_1x_2x_3$, причем если ее выражать через матрицы (2.2) и (2.3), то порядок их перемножения обратен порядку выполняемых поворотов, т.е. $\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi) = \mathbf{g}(\varphi) \cdot \mathbf{g}(\theta) \cdot \mathbf{g}(\psi)$, так что

$$\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi) = \begin{vmatrix} \cos\varphi \cos\psi - \cos\theta \sin\varphi \sin\psi & -\cos\varphi \sin\psi - \cos\theta \sin\varphi \cos\psi & \sin\theta \sin\varphi \\ \sin\varphi \cos\psi - \cos\theta \cos\varphi \sin\psi & -\sin\varphi \sin\psi + \cos\theta \cos\varphi \cos\psi & -\sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi & \sin\theta \cos\varphi & \cos\theta \end{vmatrix}. \quad (2.4)$$

Углы φ и ψ изменяются от 0 до 2π , а угол θ – от 0 до π .

В качестве независимых параметров поворота можно выбрать углы $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ поворота вокруг осей декартовой системы координат. Тогда поворот, задаваемый матрицей \mathbf{g} , является результатом последовательного выполнения поворотов $\mathbf{g}_{x_1}(\varphi_1), \mathbf{g}_{x_2}(\varphi_2), \mathbf{g}_{x_3}(\varphi_3)$, т.е.:

$$\mathbf{g}(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = \mathbf{g}_{x_3}(\varphi_3) \cdot \mathbf{g}_{x_2}(\varphi_2) \cdot \mathbf{g}_{x_1}(\varphi_1).$$

2.2. Параметры поворота угол-ось

В соответствии с теоремой Эйлера в механике твердого тела произвольное перемещение твердого тела, имеющего неподвижную точку, можно осуществить посредством поворота вокруг некоторой оси. Доказательство этой теоремы в матричной форме сводится к нахождению собственных значений и собственных векторов матрицы вращения \mathbf{g} . В случае вещественной ортогональной матрицы собственные значения встречаются комплексно-сопряженными парами, по модулю равными единице, а в матрицах нечетной размерности, по крайней мере, одно собственное значение вещественно. Таким образом, собственные значения матрицы \mathbf{g} должны иметь вид: $1, \exp(-i\alpha), \exp(+i\alpha)$. При этом фаза φ комплексного собственного значения называется *углом поворота*, а собственный вектор \mathbf{u} с собственным значением $\lambda = 1$ – *ось поворота*. Компоненты оси вращения определяются из элементов матрицы поворота \mathbf{g} как

$$u_1 : u_2 : u_3 = (g_{32} - g_{23}) : (g_{13} - g_{31}) : (g_{21} - g_{12}). \quad (2.5)$$

Угол поворота α находят из одного из инвариантов матрицы вращения \mathbf{g} , т.е. из ее следа:

$$\text{tr } \mathbf{g} = 1 + e^{-i\alpha} + e^{+i\alpha} = 1 + 2 \cos \alpha = g_{11} + g_{22} + g_{33}. \quad (2.6)$$

Направляющие косинусы оси поворота \mathbf{u} определяются как

$$\left. \begin{aligned} l_1 &= u_1(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)^{-\frac{1}{2}}; \\ l_2 &= u_2(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)^{-\frac{1}{2}}; \\ l_3 &= u_3(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (2.7)$$

Если выразить компоненты матрицы \mathbf{g} через угол α и направляющие косинусы оси поворота \mathbf{u} , то матрица \mathbf{g} принимает вид

$$g(u, \alpha) = \begin{vmatrix} l_1^2(1 - \cos\alpha) + \cos\alpha & l_1 l_2(1 - \cos\alpha) - l_3 \sin\alpha & l_1 l_3(1 - \cos\alpha) + l_2 \sin\alpha \\ l_1 l_2(1 - \cos\alpha) + l_3 \sin\alpha & l_2^2(1 - \cos\alpha) + \cos\alpha & l_2 l_3(1 - \cos\alpha) - l_1 \sin\alpha \\ l_1 l_3(1 - \cos\alpha) - l_2 \sin\alpha & l_2 l_3(1 - \cos\alpha) + l_1 \sin\alpha & l_3^2(1 - \cos\alpha) + \cos\alpha \end{vmatrix}. \quad (2.8)$$

В ряде случаев поворот задают вектором $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, направленным вдоль оси \mathbf{u} и равным по величине углу поворота φ . Направление вектора выбирается так, чтобы, если смотреть из его конца, угол поворота φ не превосходил π . Координаты векторов, описывающих всевозможные повороты, удовлетворяют условию $\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 \leq \pi$, заполняя шар радиуса π .

2.3. Кватернионы

В 1843 г. У. Гамильтон предложил обобщение комплексных чисел $x + iy$ в виде кватернионов (от лат. quaterni – по четыре), состоящих из действительного элемента и трех мнимых единиц с действительными элементами следующего вида:

$$\mathbf{R} = v_0 + v_1 \mathbf{i}_1 + v_2 \mathbf{i}_2 + v_3 \mathbf{i}_3 = \text{scal } \mathbf{R} + \text{vect } \mathbf{R}, \quad (2.9)$$

где $\text{scal } \mathbf{R} = v_0$, $\text{vect } \mathbf{R} = v_1 \mathbf{i}_1 + v_2 \mathbf{i}_2 + v_3 \mathbf{i}_3$.

При описании поворота с помощью угла φ вокруг оси с направляющими косинусами l_1, l_2, l_3 оси поворота \mathbf{u} и с использованием эйлеровских углов φ, θ, ψ компоненты кватерниона \mathbf{R} имеют вид

$$\left. \begin{aligned} v_0 &= \cos \frac{\alpha}{2} = \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi+\psi}{2}; \\ v_1 &= l_1 \sin \frac{\alpha}{2} = \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi-\psi}{2}; \\ v_2 &= l_2 \sin \frac{\alpha}{2} = \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi-\psi}{2}; \\ v_3 &= l_3 \sin \frac{\alpha}{2} = \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi+\psi}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

Если два последовательных поворота заданы кватернионами \mathbf{L} и \mathbf{M} , причем

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \lambda_0 + \lambda_1 \mathbf{i}_1 + \lambda_2 \mathbf{i}_2 + \lambda_3 \mathbf{i}_3, \\ \mathbf{M} &= \mu_0 + \mu_1 \mathbf{i}_1 + \mu_2 \mathbf{i}_2 + \mu_3 \mathbf{i}_3, \end{aligned}$$

то результирующий поворот $\mathbf{N} = \mathbf{L} \mathbf{M}$ описывает кватернион

$$\mathbf{N} = v_0 + v_1 \mathbf{i}_1 + v_2 \mathbf{i}_2 + v_3 \mathbf{i}_3,$$

где

$$\begin{aligned} v_0 &= \lambda_0 \mu_0 - \lambda_1 \mu_1 - \lambda_2 \mu_2 - \lambda_3 \mu_3; \\ v_1 &= \lambda_0 \mu_1 + \lambda_1 \mu_0 + \lambda_2 \mu_3 - \lambda_3 \mu_2; \\ v_2 &= \lambda_0 \mu_2 + \lambda_2 \mu_0 + \lambda_3 \mu_1 - \lambda_1 \mu_3; \\ v_3 &= \lambda_0 \mu_3 + \lambda_3 \mu_0 + \lambda_1 \mu_2 - \lambda_2 \mu_1. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Следовательно, поворот твердого тела или кристалла можно задать:

- матрицей $\mathbf{g}(\varphi, \theta, \psi)$ с эйлеровскими углами φ, θ, ψ ;
- матрицей $\mathbf{g}(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ с углами поворота $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ вокруг осей выбранной декартовой системы координат;
 - матрицей $\mathbf{g}(\alpha, \mathbf{u})$ с углом поворота α вокруг оси \mathbf{u} ;
 - кватернионом.

Эйлеровские углы часто используются при теоретическом рассмотрении движения твердого тела, углы $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ – при установке кристалла на гониометрической головке.

При изучении разворота кристаллов интересуются кристаллографическими индексами оси разворота и значением угла разворота, поэтому в дальнейшем, в основном, используются параметры α и \mathbf{u} или $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$.

При проведении расчетов эквивалентных разворотов в поликристаллах предпочтение отдается кватернионам.

3. Симметрия кристаллической решетки и разворот зерен

Как указывалось, для математического рассмотрения разворота зерен весьма удобен матричный аппарат, применяемый в механике твердого тела для описания поворотов или вращения твердого тела. При этом принятое в металловедении понятие «разворот зерен» будем считать эквивалентным таким понятиям механики твердого тела, как «поворот твердого тела» или «вращение твердого тела», хотя предпочтение будем отдавать «металловедческим» терминам.

С другой стороны, при описании эквивалентных разворотов зерен, когда для учета симметрии кристаллов используется теория групп, термин «разворот зерен» заменяется «физическим» термином «разворот кристаллов».

3.1. Элементы симметрии кристаллографических групп

Симметрия некоторого тела определяется заданием всех преобразований, которые сохраняют расстояние между любыми парами точек тела и совмещают тело с самим собой. Такие преобразования называются *преобразованиями симметрии*.

Совокупность всех преобразований симметрии тела образует *группу симметрии* данного тела.

Все преобразования, сохраняющие расстояния, можно получить из преобразований трех основных типов:

поворотов на некоторый угол вокруг какой-либо оси;

зеркального отражения в некоторой плоскости;

параллельного переноса (трансляции).

Последний элемент симметрии – трансляция – может встретиться только в том случае, если тело имеет бесконечную протяженность (например, бесконечная кристаллическая решетка).

Для тела конечной протяженности возможны лишь два первых типа симметрии. В самом деле, все преобразования, принадлежащие группе симметрии конечного тела, должны оставлять неподвижной, по крайней мере, одну точку тела. Группы симметрии конечных тел называются *точечными группами*. Трансляционная симметрия *кристаллического* тела накладывает определенные ограничения на возможные оси вращения тела, так что могут быть только оси вращения 2, 3, 4 и 6 порядков (т.е. C_2 , C_3 , C_4 , C_6).

Таким образом, возможны только 11 кристаллографических групп вращения, которые принадлежат семи сингониям (табл. 3.1).

Таблица 3.1

Распределение поворотных осей симметрии по сингониям

Сингония	Обозначение	Поворотные оси симметрии	Число осей симметрии
Триклинная	C_1	E	1
Моноклинная	C_1	E, C_2	2
Ромбическая	D_2	E, C_2, C_2, C_2	4
Тетрагональная	C_4	E, $2C_4, C_2$	4
	D_4	E, $2C_4, C_2, 2C_2, 2C_2$	8
Ромбоэдрическая	C_3	E, $2C_3$	3
	D_3	E, $2C_3, 3C_2$	6
Гексагональная	C_6	E, $2C_6, 2C_3, C_2$	6
	D_6	E, $2C_6, 2C_3, C_2, 3C_2, 3C_2$	12
Кубическая	T	E, $8C_3, 3C_2$	12
	O	E, $8C_3, 3C_2, 6C_2, 6C_4$	24

В табл. 3.1 число, стоящее перед индексом элемента симметрии, показывает количество эквивалентных осей симметрии (например, $8C_3$ для группы O означает восемь осей симметрии третьего порядка типа $\langle 111 \rangle$); неэквивалентные оси показаны отдельно (например, для группы: $3C_2$ – три оси $\langle 100 \rangle$ второго порядка; $6C_2$ – шесть осей $\langle 110 \rangle$ второго порядка).

С учетом таких операций симметрии, как вращение и отражение, получаются 32 точечные группы.

При добавлении трансляционной симметрии возникают 230 пространственных или федоровских групп.

3.2. Матрица разворота кристаллов (зерен)

Рассмотрим два соседних зерна поликристаллического материала. Выберем в каждом из них декартовые системы координат одного типа, например правые XYZ – в первом зерне и $X'Y'Z'$ – во вто-

ром зерне, так чтобы оси координат совпадали с физически эквивалентными направлениями, например в кубических кристаллах с направлениями типа $\langle 100 \rangle$. Будем считать, что начала выбранных систем координат совпадают. Теперь задача нахождения параметров разворота зерен сводится к определению разворота выбранных систем координат XYZ и $X'Y'Z'$, т.е. к определению вращения, переводящего одну систему координат в другую.

Как уже отмечалось, в случае разворота зерен наиболее удобной формой матрицы разворота \mathbf{g} является выражение ее через угол разворота α и ось \mathbf{u} , т.е. $\mathbf{g}(\alpha, \mathbf{u})$. Матрицу $\mathbf{g}(\alpha, \mathbf{u})$ называют *матрицей разворота зерен* \mathbf{A} .

В результате поворота произвольный вектор \mathbf{r} первого зерна совмещается с физически эквивалентным вектором \mathbf{r}' второго, что в матричном виде записывается как

$$\mathbf{r}' = \mathbf{A} \mathbf{r}, \quad (3.1)$$

т.е.

$$\begin{pmatrix} r'_X \\ r'_Y \\ r'_Z \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \cdot \begin{pmatrix} r_X \\ r_Y \\ r_Z \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

где a_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) – элементы матрицы \mathbf{A} ; (r_X, r_Y, r_Z) – компоненты вектора \mathbf{r} ; (r'_X, r'_Y, r'_Z) – компоненты \mathbf{r}' .

Вообще говоря, матрица \mathbf{A} , как и любая матрица ортогонального преобразования \mathbf{g} , допускает двойную интерпретацию: «активную» и «пассивную». В первом случае в соотношении (3.1) матрицу рассматривают как оператор, переводящий вектор \mathbf{r} в \mathbf{r}' , причем оба вектора задаются в одной системе координат (XYZ или в $X'Y'Z'$).

Во втором случае – при пассивной интерпретации – можно считать, что матрица \mathbf{A} устанавливает связь между компонентами одного и того же вектора \mathbf{r} , записанными в двух различных системах координат, повернутых друг относительно друга, т.е. матрица \mathbf{A} описывает вращение системы координат. При этом базисные векторы \mathbf{e}_i ($i = 1, 2, 3$) системы координат XYZ переходят в базисные векторы \mathbf{e}'_j ($j = 1, 2, 3$) системы $X'Y'Z'$:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{e}'_1 \\ \mathbf{e}'_2 \\ \mathbf{e}'_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_3 \end{vmatrix}. \quad (3.3)$$

Если матрица \mathbf{A} задает изменение системы координат, то координаты произвольного вектора \mathbf{r} преобразуются посредством матрицы \mathbf{A}^* :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{A}^* \mathbf{r}, \quad (3.4)$$

где $\mathbf{A}^* = \tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ (\sim – знак транспонирования матрицы).

В случае поворота, т.е. ортогонального преобразования, $\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = \mathbf{A}$, так что координатное преобразование для вектора \mathbf{r} имеет вид (3.1).

Матрицу разворота \mathbf{A} удобно рассматривать в «пассивной» интерпретации, если определение разворота зерен связывать с нахождением разворота систем координат. Необходимо учитывать, что, несмотря на совпадение при повороте матрицы преобразования базисных векторов (3.2) и матрицы координатного преобразования компонентов векторов, они описывают развороты с точностью до знака. Если матрица \mathbf{A} в выражении (3.1) соответствует повороту $\mathbf{g}(\alpha, \mathbf{u})$, то в (3.4) она задает поворот системы координат $\mathbf{g}(-\alpha, \mathbf{u})$.

При рассмотрении разворота зерен представляет интерес модуль угла разворота, поскольку его знак будет зависеть от того, какое из зерен принимается за исходное.

Если матрица \mathbf{A}_1 задает переход от системы координат $X'Y'Z'$ к $X_0Y_0Z_0$, а матрица \mathbf{A}_2 – от системы координат $X''Y''Z''$ к $X_0Y_0Z_0$, то переход от системы координат $X'Y'Z'$ к $X''Y''Z''$, очевидно, задается матрицей \mathbf{B} :

$$\mathbf{B} = \mathbf{A}_2^{-1} \mathbf{A}_1, \quad (3.5)$$

и так как матрица \mathbf{A}_2 – ортогональная, то

$$\mathbf{B} = \tilde{\mathbf{A}}_2 \mathbf{A}_1. \quad (3.6)$$

Если в системе координат XYZ (рис. 3.1) матрица \mathbf{L} производит линейное преобразование $\mathbf{y} = \mathbf{L}\mathbf{x}$, то в системе координат $X'Y'Z'$ это

линейное преобразование будет задаваться матрицей эквивалентного преобразования L' :

$$L' = A^{-1}LA, \quad (3.7)$$

где A – матрица перехода от $X'Y'Z'$ к XYZ .

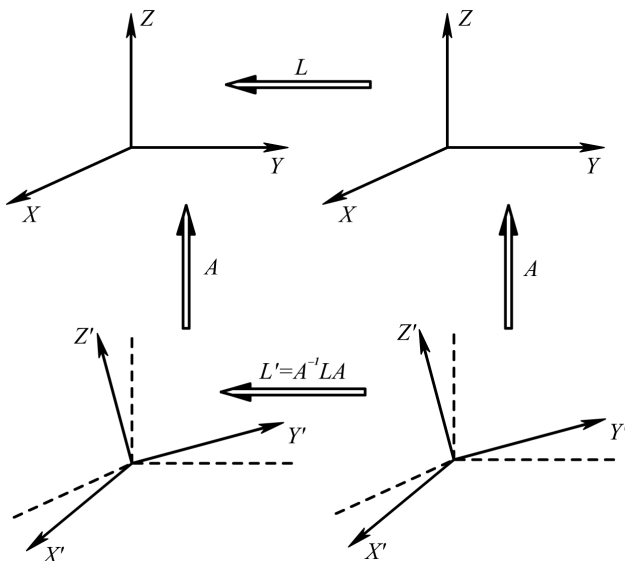


Рис. 3.1. Схема определения матриц L и L'

3.3. Матричное представление группы

Один из разделов теории групп – теория представлений групп – нашел наибольшее распространение в физике твердого тела.

Представление группы есть группа матриц, которой гомоморфна представляемая группа. Таким образом, оно состоит в сопоставлении каждому элементу группы g_i , такой матрицы A_{g_i} , что соотношение:

$$A_{g_i} \cdot A_{g_j} = A_{g_i g_j}$$

выполняется для всех матриц A . Если все матрицы, сопоставленные различным элементам группы, различны, то группа матриц *изоморфна* группе, которую она представляет.

В физических задачах чаще всего отправляются не от абстрактной группы, а от *группы преобразований конфигурационного пространства* некоторой физической системы. Элементы такой группы в матричной записи сами образуют представление этой группы в трехмерном пространстве.

В дальнейшем рассматриваются только группы чистых вращений O , D_6 , D_4 , D_2 , поскольку именно к ним принадлежат металлы и соединения новой техники. Так, большинство тугоплавких металлов (W, Mo, Nb, Ta, V) имеют кубическую решетку, некоторые (Be, α -Zr, Re, α -Ti) – гексагональную, а α -U, высокотемпературные сверхпроводники – ромбическую, при этом металлы в пределах соответствующих сингоний обладают наивысшей симметрией, т.е. в кубической – O , в гексагональной – D_6 , в тетрагональной – D_4 .

Элементы симметрии группы O приведены в табл. 3.2.

Таблица 3.2

Элементы симметрии группы O

E	$C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}$	$C_3^{[111]}$	$C_2^{[01\bar{1}]}$	$C_2^{[10\bar{1}]}$	$C_2^{[\bar{1}\bar{1}0]}$
$C_2^{[100]}$	$C_3^{[\bar{1}\bar{1}1]}$	$C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}$	$C_2^{[011]}$	$C_4^{[010]}$	$C_4^{[00\bar{1}]}$
$C_2^{[010]}$	$C_3^{[11\bar{1}]}$	$C_3^{[1\bar{1}\bar{1}]}$	$C_4^{[\bar{1}00]}$	$C_2^{[101]}$	$C_4^{[001]}$
$C_2^{[001]}$	$C_3^{[\bar{1}11]}$	$C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}$	$C_4^{[100]}$	$C_4^{[0\bar{1}0]}$	$C_2^{[110]}$

Матричная запись элементов группы чистых вращений O кубического кристалла представлена в прил. 1.

Кватернионы элементов группы чистых вращений O кубического кристалла даны в прил. 2.

Элементы симметрии гексагональных кристаллов группы D_6 приведены в табл. 3.3, а соответствующие матрицы и кватернионы элементов симметрии приведены в прил. 3 и 4.

Таблица 3.3

Элементы симметрии группы D_6

E	$C_2^{[0001]}$	$C_2^{[01\bar{1}0]}$	$C_2^{[10\bar{1}0]}$	$C_2^{[\bar{1}\bar{1}20]}$	$C_2^{[\bar{1}\bar{1}00]}$
$C_2^{[2\bar{1}\bar{1}0]}$	$C_2^{[10\bar{1}0]}$	$C_3^{[0001]}$	$C_3^{[000\bar{1}]}$	$C_6^{[0001]}$	$C_6^{[000\bar{1}]}$

Группа D_2 состоит из элементов симметрии E , $C_2^{[100]}$, $C_2^{[010]}$ и $C_2^{[001]}$, к ней относятся ВТСП-материалы типа $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ($T_c = 93$ K), $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ ($T_c = 94$ K), $Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10+x}$ ($T_c = 125$ K), $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$ ($T_c = 133$ K) в несверхпроводящем состоянии.

3.4. Правило Вигнера

Теперь предположим, что задана некоторая группа преобразований \mathbf{G} конфигурационного пространства (например, группа симметрии кристалла). Тогда две точки (x_1, x_2, x_3) и (x'_1, x'_2, x'_3) пространства, которые преобразуются друг в друга с помощью заданного преобразования \mathbf{R}_i из \mathbf{G} являются физически эквивалентными:

$$x' = \mathbf{R}_i x.$$

Если какое-либо физическое свойство характеризуется функцией $\psi(\vec{\mathbf{r}})$, то теория групп позволяет определить влияние симметрии координатного (в общем случае конфигурационного) пространства на свойства функции $\psi(\mathbf{r})$. При этом из-за преобразований \mathbf{R}_i появляются физически эквивалентные функции $P_{\mathbf{R}_i} \psi(\mathbf{r})$, где $P_{\mathbf{R}_i}$ – оператор, соответствующий \mathbf{R}_i .

По правилу Вигнера

$$P_{\mathbf{R}_i} \psi(\mathbf{R}_i \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}), \quad (3.8)$$

или $P_{\mathbf{R}_i} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}_i^{-1} \mathbf{r})$.

При рассмотрении разворота зерен в качестве функции $\psi(\mathbf{r})$ выступает матрица разворота \mathbf{A}_0 , так что матрицы эквивалентных разворотов \mathbf{A}_i находятся как

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_0 \mathbf{R}_i^{-1}, \quad (3.9)$$

где \mathbf{R}_i^{-1} – элементы, обратные элементам \mathbf{R}_i группы чистых вращений. Каждый элемент группы имеет один и только один обратный элемент, поэтому если \mathbf{R}_i принимает все значения элементов группы чистых вращений, то \mathbf{R}_i^{-1} тоже принимает все значения элементов этой же группы, но в другом порядке. С учетом этого формулу (3.9) можно записать как

$$\mathbf{A}_j = \mathbf{A}_0 \mathbf{R}_j, \quad (3.10)$$

где \mathbf{R}_j – один из элементов соответствующей группы чистых вращений.

3.5. Эквивалентные развороты кубических и гексагональных кристаллов

Каждый эквивалентный разворот, определяемый матрицей \mathbf{A}_i , характеризуется осью эквивалентного разворота \mathbf{u}_i и углом эквивалентного разворота φ_i .

Необходимо отметить, что матрицы эквивалентных разворотов не являются эквивалентными матрицами. Действительно, матрица эквивалентного разворота определяется как $\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_0 \mathbf{R}_i^{-1}$, тогда как эквивалентные или подобные матрицы задаются соотношением $\mathbf{A}_{\text{эkv}} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{A}_0 \mathbf{R}$. Точно так же оси эквивалентных разворотов \mathbf{u}_i не являются эквивалентными осями, так как эквивалентными называются оси, которые можно совместить с помощью какой-либо операции, принадлежащей группе, т.е. в данном случае с помощью операции группы чистых вращений.

Для нахождения матриц \mathbf{A}_i эквивалентных разворотов необходимо найти матрицы \mathbf{R}_i соответствующих групп чистых вращений, т.е. матричное представление группы.

Теперь элементы \mathbf{R}_i ($i = 0, 1, \dots, 23$) группы чистых вращений \mathbf{O} удобно записать в виде табл. 3.2. Для каждой матрицы \mathbf{R}_i из таблицы находим $\mathbf{R}_i^{-1} = \tilde{\mathbf{R}}_i$ и по формуле (3.9) определяем матрицу эквивалентного разворота \mathbf{A}_i . Если матрицу \mathbf{A}_0 представить в виде векторов-столбцов $\mathbf{A}_0 = (\mathbf{a}_{*1}, \mathbf{a}_{*2}, \mathbf{a}_{*3})$, то $\mathbf{A}_0 \mathbf{R}_i^{-1}$ соответствует перестановке векторов-столбцов \mathbf{a}_{*i} ($i = 1, 2, 3$) и умножению их на ± 1 . Таким образом, элементами матриц эквивалентных разворотов \mathbf{A}_i являются элементы матрицы \mathbf{A}_0 .

Для нахождения углов эквивалентных разворотов необходимо вычислить следы соответствующих матриц \mathbf{A}_i . С целью упрощения расчетов в табл. 4.1 показаны знаки соответствующих элементов матрицы \mathbf{A}_0 для определения следов матриц \mathbf{A}_i .

Так, для операции $C_2^{[011]}$ след матрицы A_i есть $\text{tr}A_i = -a_{11} + a_{23} + a_{32}$, поскольку для $C_2^{[011]}$ указаны знаки $-, +, +$ для a_{11}, a_{23}, a_{32} . Компоненты $[m_i n_i p_i]$ осей u_i ($i = 0, 1, \dots, 23$) эквивалентных разворотов вычисляют по формуле (2.5) для каждой матрицы A_i .

Каждый эквивалентный разворот характеризуется осью эквивалентного разворота u_i и углом эквивалентного разворота α_i . Так, для кубических кристаллов с группой симметрии O существует 24 эквивалентных описания одного и того же разворота, для гексагональных кристаллов с группой симметрии D_6 – 12 эквивалентных описаний, а для межфазных разворотов кубических и гексагональных кристаллов (группа O и D_6 , соответственно) – 30 эквивалентных описаний. Расположение элементов симметрии на стандартном стереографическом треугольнике для кубических и гексагональных кристаллов представлено на рис. 3.2.

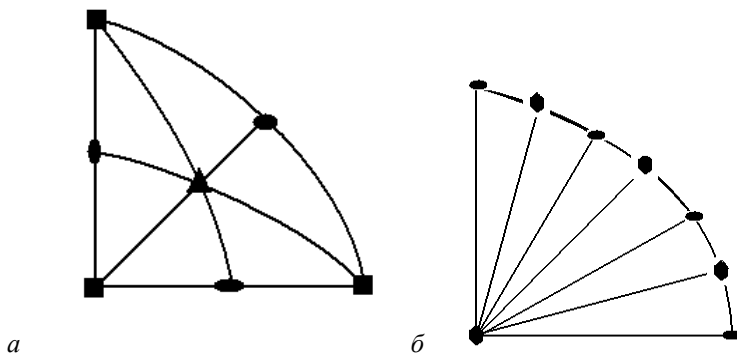


Рис. 3.2. Стереографические проекции элементов симметрии: *a* – O ; *б* – D_6

При рассмотрении разворота соседних зерен обычно интересуются минимальным значением угла эквивалентного разворота, поэтому среди $\{\alpha_i\}$ выбирают наименьшее значение α_{\min} , которое соответствует развороту вокруг оси α_{\min} с кристаллографическими индексами $[mnp]$. Предельным углом разворота $\alpha_{\text{пр}}$ вокруг оси $[mnp]$ является максимальное значение α_{\min} .

В качестве примера предложенного подхода получены графики зависимости углов эквивалентных разворотов от угла поворота вокруг осей $[001]$, $[111]$, $[101]$ кубических кристаллов (рис. 3.3).

6

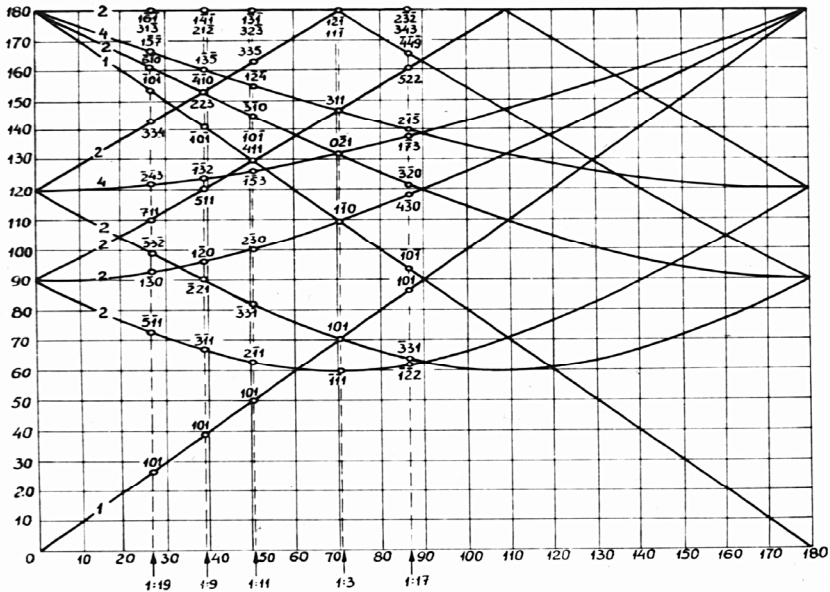


Рис. 3.3. График зависимости углов эквивалентных разворотов от угла поворота (окончание): ν – вокруг оси $[101]$

Для каждой оси разворота $[mnp]$ существует, вообще говоря, свое значение предельного угла разворота $\alpha_{\text{пр}}$. Распределение предельных углов разворота можно представить на стандартном стереографическом треугольнике. Для кубических кристаллов такое распределение представлено на рис. 3.4.

Для кубических кристаллов для оси $[100]$ $\alpha_{\text{пр}} = 45^\circ$, для оси $[110]$ $\alpha_{\text{пр}} = 60^\circ 44'$, для оси $[111]$ $\alpha_{\text{пр}} = 60^\circ$. Максимальное значение предельного угла разворота для кубических кристаллов составляет $62^\circ 48'$ для оси $[122]$.

Аналогично получены предельные углы разворота гексагональных кристаллов – для оси $[0001]$ $\alpha_{\text{пр}} = 30^\circ$, для оси $[2110]$ $\alpha_{\text{пр}} = 90^\circ$, для оси $[1010]$ $\alpha_{\text{пр}} = 92^\circ$. Максимальное значение предельного угла разворота для гексагональных кристаллов – $93^\circ 50'$ для оси $[\bar{1}435]$.

Распределение предельных углов разворота для гексагональных кристаллов представлено на рис. 3.5.

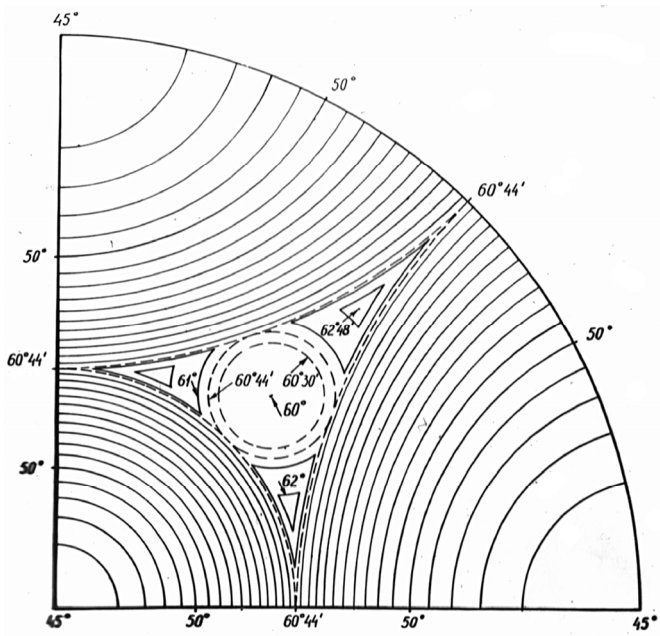


Рис. 3.4. Предельные углы разворота кубических кристаллов

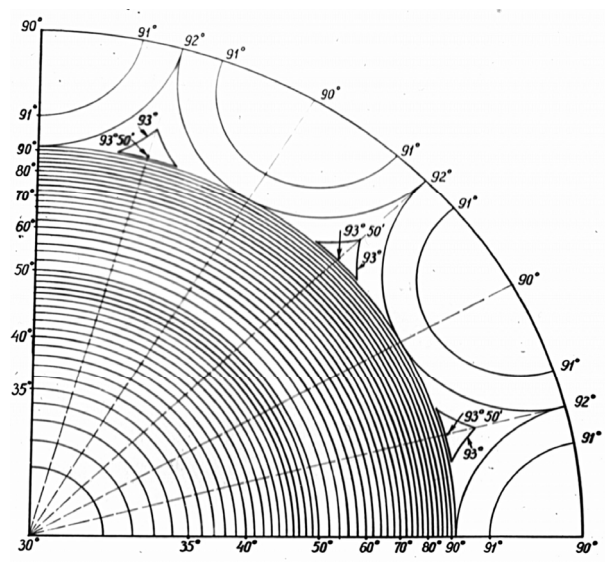


Рис. 3.5. Предельные углы разворота гексагональных кристаллов

При рассмотрении межфазных разворотов кристаллов, принадлежащих фазам с различными группами симметрии, эквивалентные развороты задаются соотношением $A_i = C_j A_0 C_i^{-1}$, где C_j и C_i – элементы симметрии групп чистых вращений соседних кристаллов.

Для межфазных разворотов кубических и гексагональных кристаллов для оси $[100]$ $\alpha_{пр} = 30^\circ$, для оси $[110]$ $\alpha_{пр} = 60^\circ 7'$, для оси $[111]$ $\alpha_{пр} = 62^\circ 8'$. Максимальное значение предельного угла разворота для кубических и гексагональных кристаллов – $62^\circ 8'$ для оси $[122]$.

Распределение предельных углов разворота для кубических и гексагональных кристаллов представлено на рис. 3.6.

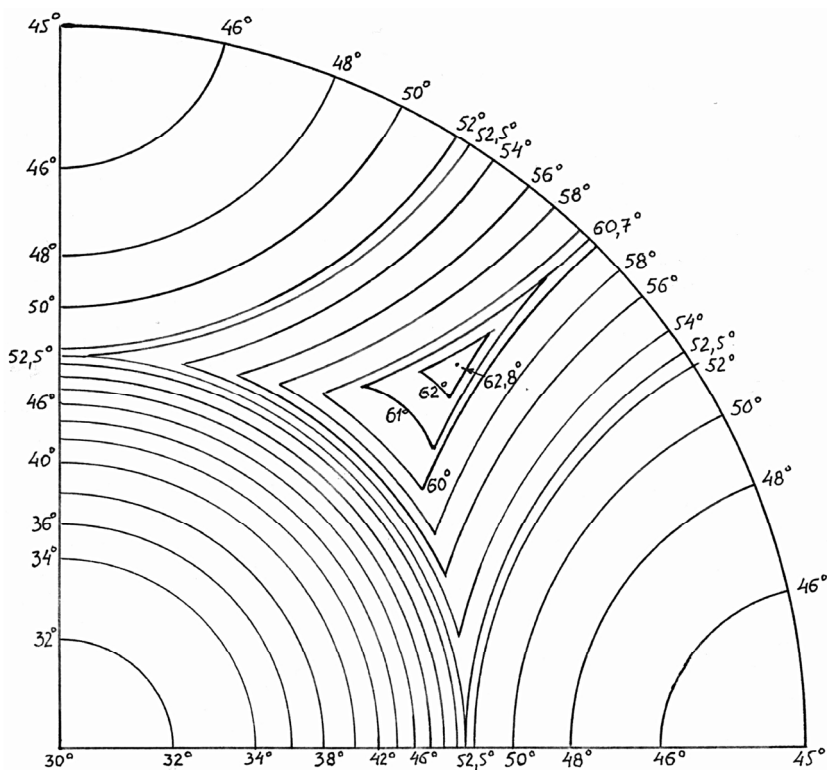


Рис. 3.6. Предельные углы взаимного разворота кубических и гексагональных кристаллов

4. Разворот зерен в поликристаллах

4.1. Плотность распределения предельных углов разворота

Если рассматривать поликристалл, то совокупность всевозможных углов разворота представляет собой шар радиусом π . Разворот в этом случае определяется вектором вдоль оси \mathbf{u} , определяемой углами θ и φ , длиной α . При рассмотрении поликристалла представляет интерес расчет плотности распределения углов разворота $p(\alpha)$. Для определения плотности распределения углов разворота кристаллов $p(\alpha)$ необходимо выполнить инвариантное интегрирование только по параметрам θ, φ , задающим положение осей разворота, в пределах объема области минимальных разворотов V_E , т.е.

$$p(\alpha) = \frac{r(1 - \cos \alpha)}{8\pi^2} \int_{V_E} \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (4.1)$$

где r – порядок группы чистых вращений кристаллов; α – предельный угол разворота для данной оси, а принцип определения углов θ и φ представлен на рис. 4.1. Интегрирование в (4.1) соответствует вычислению площади сечения области V_E минимальных разворотов сферой радиусом α .

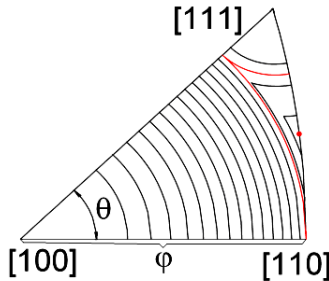


Рис. 4.1. Принцип определения углов θ и φ

Для данного значения φ вычиталась площадь области, соответствующая меньшим значениям φ , для того чтобы избежать повторного учета плотности для меньших углов. При вычислении плот-

ности распределения углов разворота необходимо учитывать симметрию области минимальных разворотов V_E . Поэтому, например, для кубических кристаллов интегрирование в (4.1) можно проводить не по всему объему, а только в пределах стереографического треугольника Δ . Тогда соотношение (4.1) для кубических кристаллов приобретает вид

$$p(\alpha) = \frac{24(1 - \cos \alpha)}{8\pi^2} 48 \int_{\Delta} \sin \theta d\theta d\varphi = \\ = \frac{144(1 - \cos \alpha)}{\pi^2} \int_{\Delta} \sin \theta d\theta d\varphi.$$

На рис. 4.2–4.3 показаны плотности распределения углов разворота $p(\alpha)$ кубических и гексагональных кристаллов.

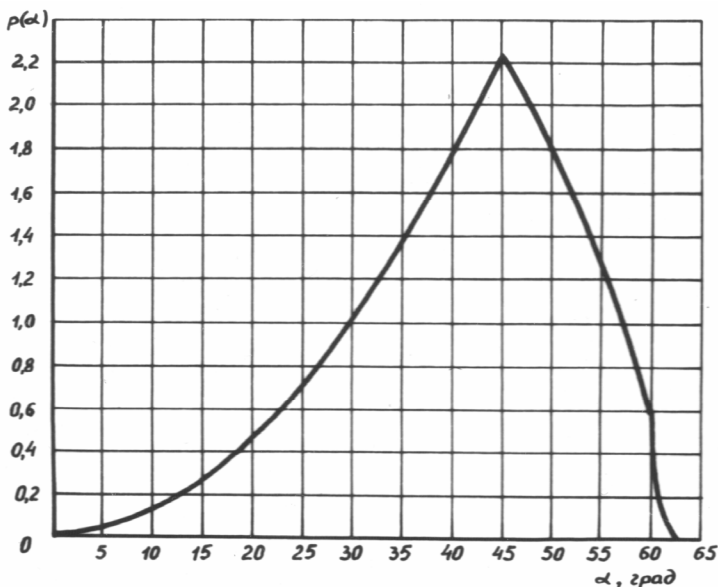


Рис. 4.2. Плотность распределения углов разворота $p(\alpha)$ кубических кристаллов

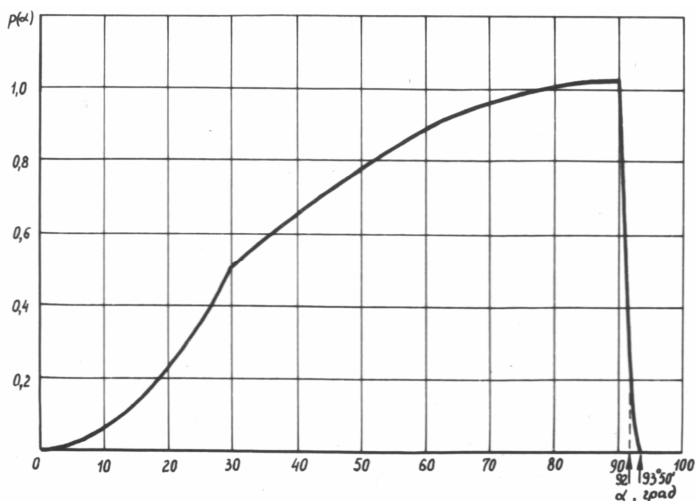


Рис. 4.3. Плотность распределения углов разворота $p(\alpha)$ гексагональных кристаллов

На рис. 4.4 показана плотность распределения углов взаимного разворота $P(\alpha)$ кубических и гексагональных кристаллов.

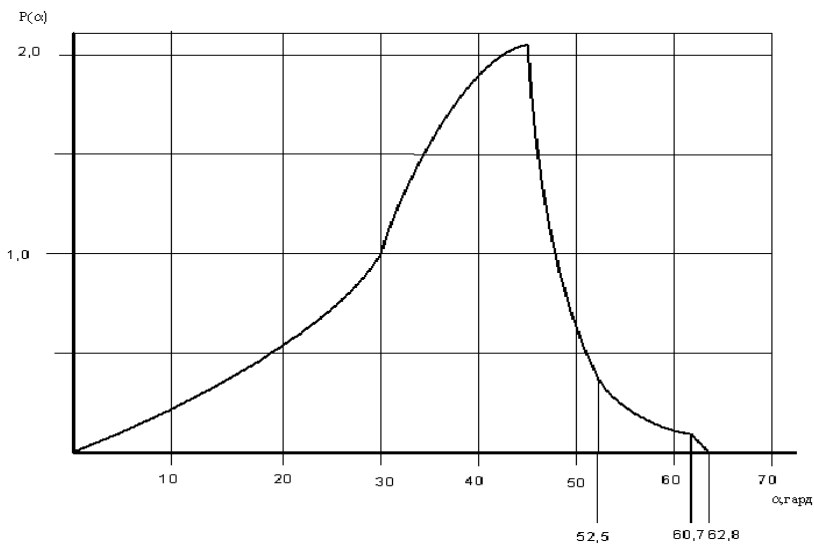


Рис. 4.4. Плотность распределения взаимного разворота кубических и гексагональных кристаллов $P(\alpha)$

4.2. Специальные развороты кристаллов

Как уже отмечалось, при определенных параметрах разворота возникают решетки *совпадения*, причем если граница совпадает с наиболее плотно упакованной плоскостью решетки совпадения, то энергия границы минимальна.

Специальные свойства границ зерен сохраняются при небольших отклонениях взаимной ориентации решеток соседних зерен от специальной. Максимальный угол отклонения (в радианах) от специальной ориентировки, когда еще возможна аккомодация с помощью зернограницных дислокаций и сохраняются специальные свойства, определяется как

$$\Delta\alpha = \frac{10 \div 15}{\pi\sqrt{\Sigma}}. \quad (4.2)$$

Если для описания разворотов кристаллов используют такие параметры, как угол α и ось разворота \mathbf{u} , то множество всевозможных разворотов можно представить в виде шара радиусом π . Объем пространства разворотов, как и ориентационного пространства с эйлеровскими углами, равен $8\pi^2$.

На рис. 4.5 в стандартном треугольнике показаны разориентировки кубических решеток, создающие РСУ с $\Sigma < 150$.

В табл. 4.1 показано, как из элементов матрицы \mathbf{A}_0 образуются величины, пропорциональные m_i , n_i , p_i . Например, для операции $\mathbf{R}_i = C_2^{[011]}$ ось эквивалентного разворота \mathbf{u} по табл. 4.1 имеет компоненты $m : n : p = (+ a_{33} - a_{22}) : (+ a_{12} + a_{31}) : (- a_{21} - a_{13})$.

Для гексагональных кристаллов группы D_6 соответствующие элементы симметрии, таблицы для определения следов матрицы эквивалентных разворотов приведены в приложении.

Таким образом, для описания разворота двух зерен в кубическом материале с группой симметрии O существует 24 эквивалентных описания.

На рис. 4.6 – 4.7 показаны зависимости значений углов эквивалентных разворотов при повороте вокруг направлений $[001]$, $[111]$ и $[101]$, на линиях показано число соответствующих эквивалентных разворотов, а штриховые вертикальные линии соответствуют специальным разворотам, приводящим к появлению решеток сов-

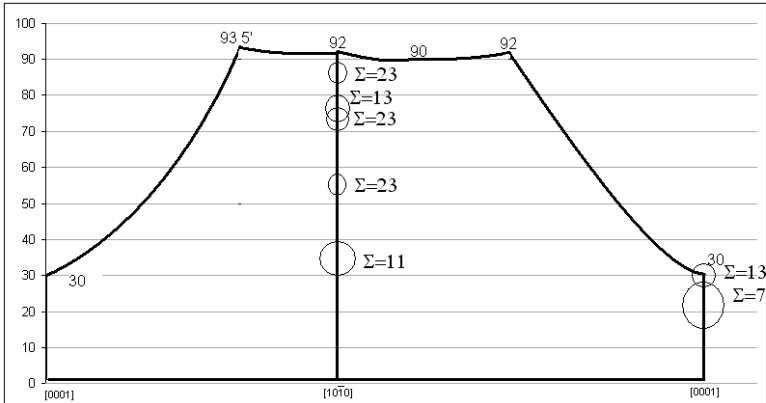


Рис. 4.7. Распределение разворотов, соответствующих появлению решеток совпадающих узлов до $\Sigma = 23$ для гексагональных кристаллов, по сторонам стандартного стереографического треугольника

Таблица 4.1

Определение компонентов осей эквивалентных разворотов кубических кристаллов

	m	n	p		m	n	p
E	$+a_{32} -$ $-a_{23}$	$+a_{13} -$ $-a_{31}$	$+a_{21} -$ $-a_{12}$	$C_2^{[01\bar{1}]}$	$-a_{33} +$ $+a_{22}$	$-a_{12} +$ $+a_{31}$	$-a_{21} +$ $+a_{13}$
$C_2^{[100]}$	$+a_{32} -$ $-a_{23}$	$+a_{13} -$ $-a_{31}$	$+a_{21} -$ $-a_{12}$	$C_2^{[011]}$	$+a_{33} -$ $-a_{22}$	$+a_{12} +$ $+a_{31}$	$-a_{21} -$ $-a_{13}$
$C_2^{[010]}$	$+a_{32} -$ $-a_{23}$	$+a_{13} -$ $-a_{31}$	$+a_{21} -$ $-a_{12}$	$C_4^{[\bar{1}00]}$	$-a_{33} -$ $-a_{22}$	$+a_{12} -$ $-a_{31}$	$+a_{21} +$ $+a_{13}$
$C_2^{[001]}$	$+a_{32} -$ $-a_{23}$	$+a_{13} -$ $-a_{31}$	$+a_{21} -$ $-a_{12}$	$C_4^{[100]}$	$+a_{33} +$ $+a_{22}$	$-a_{12} -$ $-a_{31}$	$+a_{21} -$ $-a_{13}$
$C_3^{[111]}$	$+a_{33} -$ $-a_{21}$	$+a_{11} -$ $-a_{32}$	$+a_{22} -$ $-a_{13}$	$C_2^{[10\bar{1}]}$	$-a_{32} +$ $+a_{21}$	$-a_{11} +$ $+a_{33}$	$-a_{23} +$ $+a_{12}$
$C_3^{[\bar{1}\bar{1}1]}$	$-a_{33} +$ $+a_{21}$	$-a_{11} -$ $-a_{32}$	$+a_{22} +$ $+a_{13}$	$C_4^{[010]}$	$+a_{32} -$ $-a_{21}$	$+a_{11} +$ $+a_{33}$	$-a_{23} -$ $-a_{12}$
$C_3^{[1\bar{1}\bar{1}]}$	$+a_{33} +$ $+a_{21}$	$-a_{11} +$ $+a_{32}$	$-a_{22} -$ $-a_{13}$	$C_2^{[101]}$	$-a_{32} -$ $-a_{21}$	$+a_{11} -$ $-a_{33}$	$+a_{23} +$ $+a_{12}$
$C_3^{[\bar{1}1\bar{1}]}$	$-a_{33} -$ $-a_{21}$	$+a_{11} +$ $+a_{32}$	$-a_{22} +$ $+a_{13}$	$C_4^{[0\bar{1}0]}$	$+a_{32} +$ $+a_{21}$	$-a_{11} -$ $-a_{33}$	$+a_{23} -$ $-a_{12}$
$C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}$	$+a_{31} -$ $-a_{22}$	$+a_{12} -$ $-a_{33}$	$+a_{23} -$ $-a_{11}$	$C_2^{[1\bar{1}0]}$	$-a_{31} +$ $+a_{23}$	$-a_{13} +$ $+a_{32}$	$-a_{22} +$ $+a_{11}$
$C_3^{[1\bar{1}1]}$	$-a_{31} +$ $+a_{22}$	$-a_{12} -$ $-a_{33}$	$+a_{23} +$ $+a_{11}$	$C_4^{[00\bar{1}]}$	$+a_{31} -$ $-a_{23}$	$+a_{13} +$ $+a_{32}$	$-a_{22} -$ $-a_{11}$
$C_3^{[11\bar{1}]}$	$+a_{31} +$ $+a_{22}$	$-a_{12} +$ $+a_{33}$	$-a_{23} -$ $-a_{11}$	$C_4^{[001]}$	$-a_{31} -$ $-a_{23}$	$+a_{13} -$ $-a_{32}$	$+a_{22} +$ $+a_{11}$
$C_3^{[\bar{1}11]}$	$-a_{31} -$ $-a_{22}$	$+a_{12} +$ $+a_{33}$	$-a_{23} +$ $+a_{11}$	$C_2^{[110]}$	$+a_{31} +$ $+a_{23}$	$-a_{13} -$ $-a_{32}$	$+a_{22} -$ $-a_{11}$

5. Определение матрицы взаимного разворота кристаллов

Метод Лауэ. Рентгенографические методы позволяют определять положение нормалей к отражающим плоскостям, т.е. векторов обратной решетки. В случае кубических кристаллов направления векторов прямой и обратной решеток совпадают.

Вектор \mathbf{H}_{hkl} обратной решетки, который, как известно, параллелен нормали к плоскости $(h k l)$, записывается в виде

$$\mathbf{H}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3,$$

где \mathbf{b}_i – базисные векторы обратной решетки ($i = 1, 2, 3$).

Единичный вектор нормали к плоскости $(h k l)$ имеет вид

$$\mathbf{n}_{hkl} = \frac{\mathbf{H}_{hkl}}{|\mathbf{H}_{hkl}|} = \frac{h\mathbf{i}_1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} + \frac{k\mathbf{i}_2}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} + \frac{l\mathbf{i}_3}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}},$$

где $\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2, \mathbf{i}_3$ – орты декартовой системы координат, параллельные базисным векторам \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$) прямой решетки.

При работе с монокристаллами обычно рассматривают две системы координат. Первая система координат связана с внутренними кристаллографическими осями, направленными вдоль осей $[100]$, $[010]$ и $[001]$. Вторая – лабораторная система координат – связана с внешними ортогональными осями. Вектор \mathbf{n}_{hkl} в лабораторной системе координат имеет координаты $\mathbf{n}_{XYZ}(n_X, n_Y, n_Z)$. Связь между координатами одного и того же единичного вектора нормали к плоскости (hkl) в двух различных системах записывается как

$$\mathbf{n}_{XYZ} = \mathbf{U}\mathbf{n}_{hkl}, \quad (5.1)$$

где \mathbf{U} – матрица перехода от внутренних кристаллографических осей к внешней системе координат XYZ .

Раскрывая матричное соотношение, имеем

$$\begin{pmatrix} n_X \\ n_Y \\ n_Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h(h^2 + k^2 + l^2)^{-\frac{1}{2}} \\ k(h^2 + k^2 + l^2)^{-\frac{1}{2}} \\ l(h^2 + k^2 + l^2)^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Матрица \mathbf{U} , которая осуществляет переход от внутренних кристаллографических осей к внешней лабораторной системе координат, называется *ориентационной*.

Как видно из соотношения (5.2), вектор $[100]$ переходит в вектор с координатами (u_{11}, u_{21}, u_{31}) , вектор $[010]$ – в вектор с координатами (u_{12}, u_{22}, u_{32}) , а вектор $[001]$ – в вектор (u_{13}, u_{23}, u_{33}) . Иногда матрицу \mathbf{U} рассматривают как матрицу, состоящую из векторов-столбцов, т.е.

$$\mathbf{U} = (\mathbf{u}_{*1}, \mathbf{u}_{*2}, \mathbf{u}_{*3}) = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \\ \mathbf{u}_{*1} & \mathbf{u}_{*2} & \mathbf{u}_{*3} \end{pmatrix}.$$

Тогда можно сказать, что матрица \mathbf{U} состоит из векторов-столбцов, которыми являются базисные векторы исходной системы, т.е. $\langle 100 \rangle$, записанные в *новой системе* координат.

Рассмотрим два соседних кристалла (зерна) кубической сингонии. Если $X_0Y_0Z_0$ – внешняя (лабораторная) система координат, $X_1Y_1Z_1$ – система координат, связанная с внутренними кристаллографическими осями первого кристалла, а $X_2Y_2Z_2$ – второго кристалла и ориентационная матрица первого кристалла – \mathbf{U}_1 , а второго – \mathbf{U}_2 , то матрица

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_2^{-1}\mathbf{U}_1 = \tilde{\mathbf{U}}_2\mathbf{U}_1 \quad (5.3)$$

является матрицей перехода от кристаллографических осей первого кристалла к кристаллографическим осям второго кристалла или *матрицей разворота* соседних кристаллов (зерен) (рис. 5.1).

Знание матрицы разворота двух кристаллов позволяет легко определить угол разворота α и ось разворота \mathbf{u} . Действительно, одним из инвариантов матрицы ортогонального преобразования является след (шпур) матрицы, т.е. сумма диагональных элементов:

$$\text{tr } \mathbf{A} = \text{Sp } \mathbf{A} = a_{11} + a_{22} + a_{33}.$$

При этом, как указывалось ранее, для матрицы вращения:

$$\text{tr } \mathbf{A} = 1 + 2\cos\alpha, \quad (5.4)$$

где α – угол разворота.

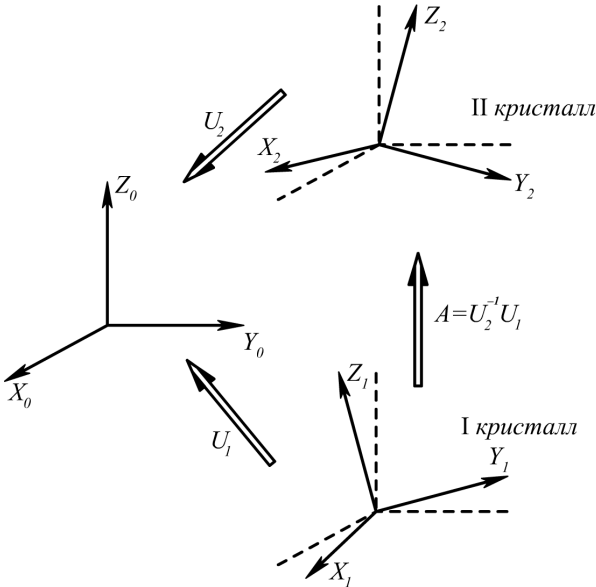


Рис. 5.1. Схема определения матрицы разворота A через матрицы U_1 и U_2

Компоненты оси вращения \mathbf{u} ($\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma$) находятся из соотношений:

$$m : n : p = \cos \alpha : \cos \beta : \cos \gamma = (a_{32} - a_{23}) : (a_{13} - a_{31}) : (a_{21} - a_{12}).$$

Для вычисления углов и компонентов осей эквивалентных разворотов необходимо воспользоваться табл. 4.1 и 5.1.

Таблица 5.1

Определение следов матриц эквивалентных разворотов кубических кристаллов

	a_{11}	a_{22}	a_{33}		a_{12}	a_{23}	a_{31}		a_{13}	a_{21}	a_{32}
E	+	+	+	$C_3^{\left[\bar{1}\bar{1}\bar{1}\right]}$	+	+	+	$C_3^{\left[111\right]}$	+	+	+
$C_2^{\left[100\right]}$	+	+	-	$C_3^{\left[1\bar{1}1\right]}$	+	+	-	$C_3^{\left[\bar{1}\bar{1}1\right]}$	+	+	-
$C_2^{\left[010\right]}$	-	+	-	$C_3^{\left[11\bar{1}\right]}$	-	+	-	$C_3^{\left[1\bar{1}\bar{1}\right]}$	-	+	-
$C_2^{\left[001\right]}$	-	-	+	$C_3^{\left[\bar{1}11\right]}$	-	-	+	$C_3^{\left[\bar{1}1\bar{1}\right]}$	-	-	+

	a_{11}	a_{23}	a_{32}
$C_2^{[01\bar{1}]}$	-	-	-
$C_2^{[011]}$	-	+	+
$C_4^{[\bar{1}00]}$	+	-	+
$C_4^{[100]}$	+	+	-

	a_{13}	a_{22}	a_{31}
$C_2^{[10\bar{1}]}$	-	-	-
$C_4^{[010]}$	-	+	+
$C_2^{[101]}$	+	-	+
$C_4^{[0\bar{1}0]}$	+	+	-

	a_{12}	a_{21}	a_{33}
$C_2^{[1\bar{1}0]}$	-	-	-
$C_4^{[00\bar{1}]}$	-	+	+
$C_4^{[001]}$	+	-	+
$C_2^{[110]}$	+	+	-

Графическое определение угла и оси разворота кристаллов.

При повороте твердого тела вокруг оси l на угол α произвольное направление 1 переходит в $1'$, а направление 2 – в $2'$ (рис. 5.2). Ось разворота l лежит на пересечении биссекторных плоскостей B_1 и B_2 , каждая из которых проходит через соответствующую биссектрису (между 1 и $1'$ или 2 и $2'$) и нормаль к плоскости $N_{11'}$ или $N_{22'}$.

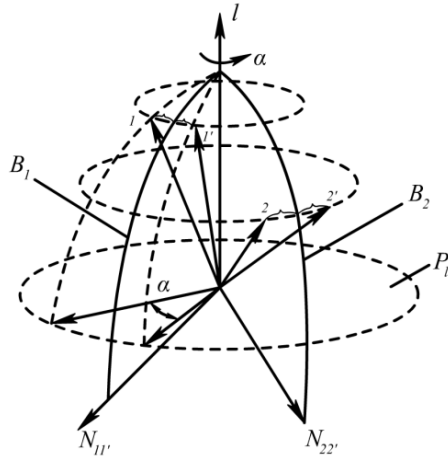


Рис. 5.2. Схема поворота вокруг оси l на угол α ; B_1, B_2 – биссекторные плоскости; P_l – отсчетная плоскость

В случае разворота кристаллов, заданных системами координат XYZ и $X'Y'Z'$ (рис. 5.3), ось разворота расположена на пересечении биссекторных плоскостей $B_{YY'}$ и $B_{ZZ'}$. Биссекторная плоскость $B_{YY'}$ проходит через $N_{YY'}$ на равных угловых расстояниях относительно Y и Y' , а плоскость $B_{ZZ'}$ через $N_{ZZ'}$ и биссектрису между Z и Z' .

Угол разворота α можно определить как угол между проекциями Z_p и $Z_{p'}$ направлений Z и Z' на отсчетную плоскость P_l , нормалью к которой является ось разворота l (рис. 5.4).

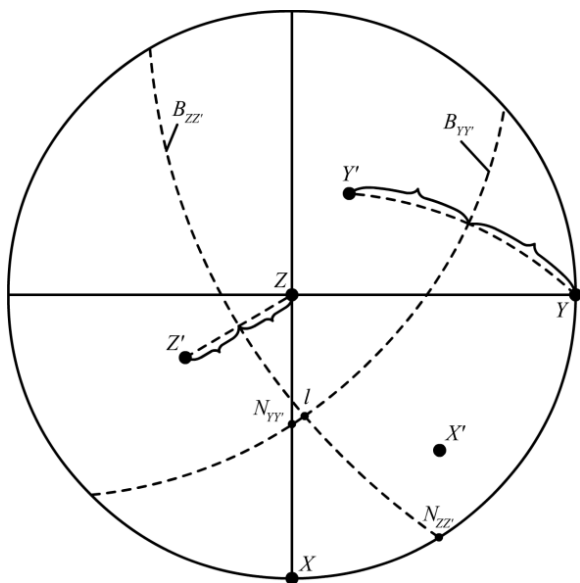


Рис. 5.3. Графическое определение оси разворота l

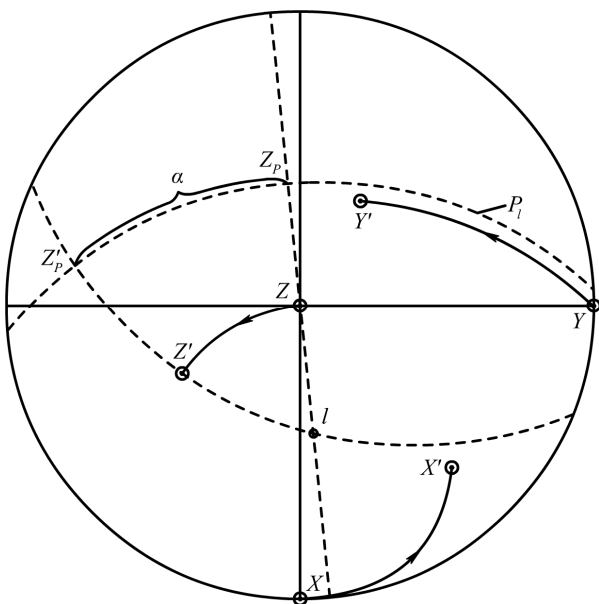


Рис. 5.4. Графическое определение угла разворота α

**Матрицы элементов симметрии группы чистых вращений O
кубического кристалла**

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_2^{[100]} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad C_2^{[010]} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{[001]} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_4^{[100]} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_4^{[010]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_4^{[001]} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_4^{[\bar{1}00]} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_4^{[0\bar{1}0]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_4^{[00\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_3^{[111]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_3^{[1\bar{1}\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3^{[\bar{1}1\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3^{[11\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_2^{[011]} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3^{[\bar{1}\bar{1}1]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3^{[1\bar{1}\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_3^{[\bar{1}11]} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, C_2^{[101]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, C_2^{[10\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_2^{[01\bar{1}]} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, C_2^{[1\bar{1}0]} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, C_2^{[110]} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

**Кватернионы элементов группы чистых вращений O
кубического кристалла**

Элемент группы	v_0	v_1	v_2	v_3	Элемент группы	v_0	v_1	v_2	v_3
E	1	0	0	0	$C_2^{[100]}$	0	1	0	0
$C_2^{[010]}$	0	0	1	0	$C_2^{[001]}$	0	0	0	1
$C_4^{[100]}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	0	$C_4^{[010]}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0
$C_4^{[001]}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$C_4^{[\bar{1}00]}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	0
$C_4^{[0\bar{1}0]}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$C_4^{[00\bar{1}]}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	0	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$
$C_3^{[111]}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$C_3^{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$C_3^{[1\bar{1}\bar{1}]}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$C_3^{[\bar{1}\bar{1}1]}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$C_3^{[11\bar{1}]}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$C_3^{[\bar{1}\bar{1}1]}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$C_3^{[1\bar{1}1]}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$C_3^{[111]}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$C_2^{[011]}$	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$C_2^{[110]}$	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0
$C_2^{[101]}$	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$C_2^{[01\bar{1}]}$	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$
$C_2^{[1\bar{1}0]}$	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$C_2^{[10\bar{1}]}$	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$

**Матрицы элементов симметрии группы чистых вращений
 D_6 гексагонального кристалла**

$$\begin{aligned}
 E &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & C_2^{[2\bar{1}\bar{1}0]} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
 C_2^{[\bar{1}2\bar{1}0]} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & C_2^{[01\bar{1}0]} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
 C_2^{[\bar{1}\bar{1}20]} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & C_2^{[0001]} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 C_2^{[10\bar{1}0]} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & C_2^{[\bar{1}100]} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
 C_3^{[0001]} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & C_3^{[000\bar{1}]} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 C_6^{[0001]} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & C_6^{[000\bar{1}]} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

**Кватернионы элементов группы чистых вращений D_6
гексагонального кристалла**

Элемент группы	v_0	v_1	v_2	v_3
E	1	0	0	0
$C_2^{[2\bar{1}\bar{1}0]}$	0	1	0	0
$C_2^{[01\bar{1}0]}$	0	0	1	0
$C_2^{[0001]}$	0	0	0	1
$C_2^{[10\bar{1}0]}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
$C_2^{[\bar{1}\bar{1}20]}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	0
$C_2^{[\bar{1}2\bar{1}0]}$	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0
$C_2^{[\bar{1}100]}$	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
$C_3^{[0001]}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$
$C_3^{[000\bar{1}]}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$
$C_6^{[0001]}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$
$C_6^{[000\bar{1}]}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0	0	$-\frac{1}{2}$

**Определение следов матриц эквивалентных разворотов
гексагональных кристаллов**

	a_{11}	a_{12}	a_{21}	a_{22}	a_{33}
E	+ 1	0	0	+ 1	+ 1
$C_2^{[2\bar{1}\bar{1}0]}$	+ 1	0	0	- 1	- 1
$C_2^{[01\bar{1}0]}$	- 1	0	0	+ 1	- 1
$C_2^{[0001]}$	- 1	0	0	- 1	+ 1
$C_2^{[10\bar{1}0]}$	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	- 1
$C_2^{[\bar{1}\bar{1}20]}$	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{1}{2}$	- 1
$C_2^{[\bar{1}2\bar{1}0]}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{1}{2}$	- 1
$C_2^{[\bar{1}100]}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	- 1
$C_3^{[0001]}$	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	+ 1
$C_3^{[000\bar{1}]}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	+ 1
$C_6^{[0001]}$	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+ 1
$C_6^{[000\bar{1}]}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{\sqrt{3}}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+ 1

Список рекомендуемой литературы

Основная

1. Физическое материаловедение: *Учебник для вузов*: В 6 т. / Под общей ред. Б.А. Калина. М.: МИФИ, 2012. Т. 1. Физика твердого тела / Г.Н. Елманов, А.Г. Залужный, В.И. Скрытный, Е.А. Смирнов, Ю.А. Перлович, В.Н. Яльцев. Гл. 1. Физическая кристаллография. М.: МИФИ, 2012. – 764 с.

Дополнительная

1. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. – М.: Металлургия, 1980. – 156 с.

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

3. Копецкий Ч.В., Орлов А.Н., Фионова Л.К. Границы зерен в чистых материалах. – М.: Наука, 1987. – 158 с.

4. Вустер У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов: Пер. с англ. – М.: Мир, 1977. – 384 с.

5. Бранец В.Н., Шмыглевский И.П. Применение кватернионов в задачах ориентации твердого тела. – М.: Наука, 1973. – 320 с.

6. Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 587 с.

Валерий Николаевич Яльцев
Владимир Ильич Скрытный

ВЗАИМНЫЕ РАЗВОРОТЫ КРИСТАЛЛОВ

Учебное пособие

Редактор *М.В. Макарова*

Подписано в печать 06.12.2022. Формат 60×84 1/16.

Печ. л. 3,0. Уч.-изд. л. 3,0. Изд. № 001-1.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».
155409 Москва, Каширское шоссе, 31.

