

**Ближний порядок и статические смещения
в сплавах магний -индий**

Л.Энхтор
Кафедра физики,
Монгольский Государственный
Университет

Параметр ближнего порядка по Каули на i -той координационной сфере часто выражают в виде:

$$\alpha_i = 1 - \frac{N_i^{AB}}{Nc_Ac_Bc_i} = 1 - \frac{p_i^{AB}}{c_B},$$

где N_i^{AB} - число пар атомов A и B , находящихся на расстоянии ρ_i один от другого; $Nc_Ac_Bc_i$ - число пар атомов A и B , которые будут располагаться на расстоянии ρ_i при полностью неупорядоченном расположении атомов по узлам решетки; N - общее количество атомов в кристалле; c_i - число узлов на i -той координационной сфере; c_A и c_B концентрации атомов сорта A и B ; p_i^{AB} - вероятность нахождения атома B на i -той координационной сфере около атома A , находящегося в начале координат. При этом p_i^{AB} является усредненным по всем атомам i -той координационной сферы значением вероятности нахождения атома B около атома A .

$$\alpha_i = \frac{\varepsilon_i}{c_Ac_B}$$

где ε_i - параметр корреляции.

$$\varepsilon(\rho) = P_{AA}(\rho) - c_A^2$$

Методика изучения ближнего порядка определения методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ)

$$I_{ДС} = N c_A c_B (f_A - f_B)^2 \sum_{i=0} c_i \alpha_i \frac{\sin(q_1 R_i)}{q_1 R_i}.$$

$$I_{ДР} = N c_A c_B (f_A - f_B)^2 \left\{ 1 + \sum_{i \neq 0} \left[c_i \alpha_i \frac{\sin(q_1 R_i)}{q_1 R_i} - c_i \beta_i \left(\frac{\sin(q_1 R_i)}{q_1 R_i} - \cos(q_1 R_i) \right) \right] \right\}$$

где фигурирует коэффициент β_i линейного размерного эффекта, который имеет вид

$$\beta_i = [1/(\eta - 1) \{ -[(c_A/c_B) + \alpha_i] \epsilon_{AA}^i + [(c_B/c_A) + \alpha_i] \eta \epsilon_{BB}^i \}]$$

Здесь $\eta = f_B/f_A$, ϵ_{AA}^i и ϵ_{BB}^i есть относительные смещения атомов из положений идеальной решетки на i -той координационной сфере с радиусом R_i , которые определяются из соотношений $r_{AA}^i = (1 + \epsilon_{AA}^i) R_i$, $r_{BB}^i = (1 + \epsilon_{BB}^i) R_i$, где r_{AA}^i - расстояние между атомом A на i -ой координационной сфере по отношению к атому A и r_{BB}^i - расстояние между атомом B на i -ой координационной сфере по отношению к атому B . По вышеприведенным формулам (2.2) и (2.3) авторы [1] впервые определили параметр ближнего порядка $\alpha_1 = -0.05$ для поликристаллического сплава Ni_3Au_2 с гранцентрированной кубической структурой (ГЦК) при учете статических смещений с коэффициентом $\beta_1 = +0.05$.

[1] Warren B.E., Averbach B.L., Roberts B.W. Atomic Size Effect in the X-ray Scattering by Alloys.// J.Appl.Phys. 1951.V. 22. P.1493-1946.

По этой же методике были исследованы поликристаллические сплавы Mg-In [2,3]. В [2] определены параметры ближнего порядка сплава Mg-13.2 ат.%In с гексагональной плотноупакованной структурой (ГПУ) на первых шести координационных сферах с объединением соответственно третьей и четвертой сфер, пятой и шестой сфер, которые имеют близкие радиусы. В этом сплаве коэффициент линейного размерного эффекта $\beta_2=0.013$ на второй сфере оказался на порядок выше, чем $\beta_1 = 0.002$ на первой сфере.

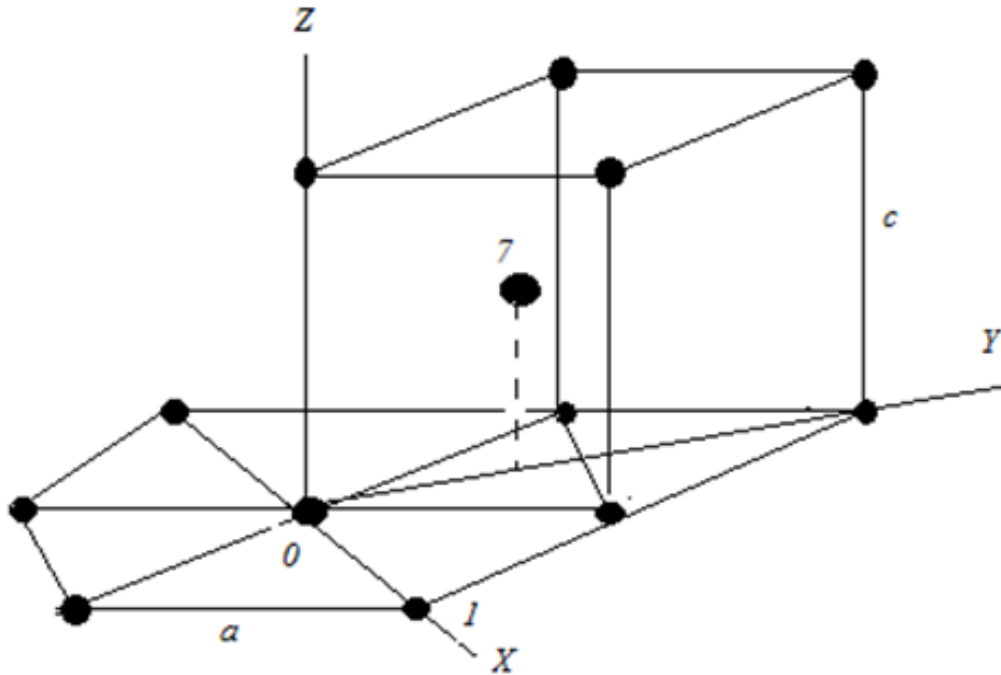
Ближний порядок в α -фазе был исследован в сплавах Mg-In с содержаниями с 10, 13 и 15 ат.%In [3]. Ввиду присутствия на предварительно снятых дифрактограммах этих образцов сверхструктурных линий, сходных со структурными линиями гексагональной фазы, упорядоченной фазы по типу Mg_3Cd , температурная зависимость ближнего порядка изучалась в области твердого раствора: для сплава Mg10ат.%In при температурах от комнатной до 400°C, для сплава Mg -13ат. %In при 250, 300 и 400°C, для Mg 15ат. %In при 300 и 400°C. Расчет параметров ближнего порядка и размерного эффекта проводился методом наименьших квадратов. Из-за небольшого различия между радиусами координационных сфер r_3 и r_4 , r_5 и r_6 выводились эффективные значения r_{3-4} и α_{3-4} , r_{5-6} и α_{5-6} . Распределение интенсивности ДРРЛ и рассчитанные значения параметра ближнего порядка $\alpha_1 < 0$ свидетельствуют о существовании ближнего порядка в изученных сплавах Mg-In с преимущественным соседством разноименных атомов на первой сфере.

[2]. Kidron A., Rudman P.S. An X-ray diffuse scattering study of local order in an H.C.P. Mg-In alloy.// Acta metallurgica. 1963. V. 11. P.1011-1016.

[3]. Сафронова Л.А., Кацнельсон А.А., Свешников В.С., Львов Ю.М. Ближний порядок в твердых растворах Магний-Индий. //Физ.мет. и металловедение. 1977. Т. 43.С.76-80.

Метод флуктуационных волн в теории ДРРЛ

ГПУ сплавами



Для поликристаллических ГПУ твердых растворов выражение интенсивности ДРРЛ, обусловленного ближним порядком и статическими смещениями имеет вид [2]:

$$I = N \sum_{\gamma\gamma'=1,2} B_{q\gamma} B_{q\gamma'}^* \left[c_A c_B + \sum_{\rho_{\gamma\gamma'}} \varepsilon(\rho_{\gamma\gamma'}) e^{iq\rho_{\gamma\gamma'}} \right], \quad (1)$$

где $\varepsilon(\rho_{\gamma\gamma'})$ - параметры корреляции, $\rho_{\gamma\gamma'}$ - радиус-вектор, соединяющий узлы γ и γ' ,

$$B_{q\gamma} = \langle f \rangle \mathbf{q}_1 \mathbf{A}_{q_1\gamma} e^{i\mathbf{G}_n \mathbf{R}_1} + \langle f \rangle \mathbf{q}_1 \mathbf{A}_{q_2\gamma} e^{i\mathbf{G}_n \mathbf{R}_2} - (f_A - f_B), \quad (2)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 - \mathbf{G}_n$ - вектор рассеяния, приведенный к зоне Бриллюэна в обратном пространстве, \mathbf{G}_n - вектор ближайшего к \mathbf{q}_1 узла в обратном пространстве, $\mathbf{A}_{q\gamma\gamma'}$ - амплитуды волн статических смещений, определяемые выражением:

$$\mathbf{R}_{q\gamma} = \mathbf{A}_{q_1\gamma} c_{q\gamma 1} + \mathbf{A}_{q_2\gamma} c_{q\gamma 2}, \quad (3)$$

где $c_{q\gamma}$, $\mathbf{R}_{q\gamma}$ есть Фурье-компоненты флуктуаций концентрации и статических смещений $\delta \mathbf{R}_{n\gamma}$ для подрешетки γ .

$$\begin{aligned} I(\mathbf{q}) &= N c_A c_B \left\{ (B_{q_1} B_{q_1}^* + B_{q_2} B_{q_2}^*) [1 + \sum_{\rho_{11}} \alpha(\rho_{11}) e^{i\mathbf{q}\rho_{11}}] + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\rho_{12}} \alpha(\rho_{12}) [B_{q_1} B_{q_2}^* e^{i\mathbf{q}\rho_{12}} + B_{q_2} B_{q_1}^* e^{-i\mathbf{q}\rho_{12}}] \right\} = \\ &= N c_A c_B \left\{ F_0(\mathbf{q}) + \sum_{\rho_{11}} \alpha(\rho_{11}) F(\mathbf{q}, \rho_{11}) + \sum_{\rho_{12}} \alpha(\rho_{12}) F(\mathbf{q}, \rho_{12}) \right\}, \quad (4) \end{aligned}$$

где $\alpha(\rho_{\gamma\gamma'})$ - параметры ближнего порядка ($\alpha(\rho_{\gamma\gamma'}) = \varepsilon(\rho_{\gamma\gamma'}) / (c_A c_B)$),

$$F_0(\mathbf{q}) = (B_{q_1} B_{q_1}^* + B_{q_2} B_{q_2}^*),$$

$$F(\mathbf{q}, \rho_{11}) = (B_{q_1} B_{q_1}^* + B_{q_2} B_{q_2}^*) e^{i\mathbf{q}\rho_{11}},$$

$$F(\mathbf{q}, \rho_{12}) = (B_{q_1} B_{q_2}^* e^{i\mathbf{q}\rho_{12}} + B_{q_2} B_{q_1}^* e^{-i\mathbf{q}\rho_{12}}).$$

$$\widehat{D}_{kij}^{11} \mathbf{A}_{kj1\gamma} + \widehat{D}_{kij}^{12} \mathbf{A}_{kj2\gamma} = P_{ki}^{1\gamma},$$

$$\widehat{D}_{kij}^{21} \mathbf{A}_{kj1\gamma} + \widehat{D}_{kij}^{22} \mathbf{A}_{kj2\gamma} = P_{ki}^{2\gamma}.$$

Динамическая матрица для ГПУ кристаллов

$$D(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} D^{AA} & D^{AB} \\ D^{AB*} & D^{AA} \end{bmatrix};$$

где $D^{AA} = \begin{bmatrix} D_{xx}^{AA} & D_{xy}^{AA} & D_{xz}^{AA} \\ D_{yx}^{AA} & D_{yy}^{AA} & D_{yz}^{AA} \\ D_{zx}^{AA} & D_{zy}^{AA} & D_{zz}^{AA} \end{bmatrix};$

$$D^{AB} = \begin{bmatrix} D_{xx}^{AB} & D_{xy}^{AB} & D_{xz}^{AB} \\ D_{yx}^{AB} & D_{yy}^{AB} & D_{yz}^{AB} \\ D_{zx}^{AB} & D_{zy}^{AB} & D_{zz}^{AB} \end{bmatrix}.$$

$$\begin{aligned}
D_{xx}^{AA} = & -6\beta_1 - (\alpha_1 - \beta_1) \frac{a^2}{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} - \\
& -\beta_2 \left\{ 6 - 2\cos(aq_x) - 4\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right\} - \\
& -(\alpha_2 - \beta_2) \left\{ 2[1 - \cos(aq_x)] + \left[1 - \cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right] \right\} - \\
& -6\beta_3 - \frac{4a^2}{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_3 - \beta_3) - 2\beta_4 \{1 - \cos(cq_z)\} - \\
& -12\beta_5 - (\alpha_5 - \beta_5) \frac{14a^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} - \\
& -\beta_6 \left\{ 6 - 4\cos\left(\frac{3aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) - 2\cos(a\sqrt{3}q_y) \right\} - \\
& -3(\alpha_6 - \beta_6) \left\{ 1 - \cos\left(\frac{3a}{2}q_x\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right\} - \\
& -\beta_7 \left\{ 12 - \left[4\cos(aq_x) + 8\cos\left(\frac{aq_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) \right] \cos(cq_z) \right\} - \\
& -(\alpha_7 - \beta_7) \frac{a^2}{a^2 + c^2} \left\{ 4[1 - \cos(aq_x)\cos(cq_z)] + 2 \left[1 - \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_{xx}^{AB} = & \beta_1 \left[4 \cos \left(\frac{aq_x}{2} \right) e^{i \frac{a}{2\sqrt{3}} q_y} + 2 e^{-i \frac{a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \cos \left(\frac{cq_z}{2} \right) + \\
& + (\alpha_1 - \beta_1) \frac{a^2}{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \left\{ \cos \left(\frac{aq_x}{2} \right) e^{i \frac{a}{2\sqrt{3}} q_y} \cos \left(\frac{cq_z}{2} \right) \right\} + \\
& + \beta_3 \left\{ \left[4 \cos(aq_x) e^{-i \frac{a}{\sqrt{3}} q_y} + 2 e^{i \frac{2a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \cos \left(\frac{cq_z}{2} \right) \right\} + \\
& + \frac{4a^2}{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_3 - \beta_3) \left\{ \cos(aq_x) e^{-i \frac{a}{\sqrt{3}} q_y} \cos \left(\frac{cq_z}{2} \right) \right\} + \\
& + \beta_5 \left\{ 4 \cos \left(\frac{cq_z}{2} \right) \left[\cos \left(\frac{aq_x}{2} \right) e^{-i \frac{5a}{2\sqrt{3}} q_y} + \cos(aq_x) e^{i \frac{2a}{\sqrt{3}} q_y} + \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_{xy}^{AA} = & -(\alpha_2 - \beta_2)\sqrt{3}\sin\left(\frac{aq_x}{2}\right)\sin\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) - \\
& -\sqrt{3}(\alpha_6 - \beta_6)\sin\left(\frac{3aq_x}{2}\right)\sin\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right) - \\
& -(\alpha_7 - \beta_7)\frac{2\sqrt{3}a^2}{a^2+c^2}\sin\left(\frac{aq_x}{2}\right)\sin\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}q_y\right)\cos(cq_z) - \\
& -(\alpha_8 - \beta_8)\sqrt{3}\sin(aq_x)\sin(a\sqrt{3}q_y);
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_{xy}^{AB} = & -(\alpha_1 - \beta_1)\frac{ia^2}{\sqrt{3}\left(\frac{a^2}{3}+\frac{c^2}{4}\right)}\sin\left(\frac{aq_x}{2}\right)e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y}\cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) - \\
& -(\alpha_3 - \beta_3)\frac{4ia^2}{\sqrt{3}\left(\frac{4a^2}{3}+\frac{c^2}{4}\right)}\sin(aq_x)e^{-i\frac{a}{\sqrt{3}}q_y}\cos\left(\frac{cq_z}{2}\right) - \\
& -(\alpha_5 - \beta_5)\frac{ia^2}{\sqrt{3}\left(\frac{7a^2}{3}+\frac{c^2}{4}\right)}\left\{5\sin\left(\frac{aq_x}{2}\right)e^{-i\frac{5a}{2\sqrt{3}}q_y} - 8\sin(aq_x)e^{i\frac{2a}{\sqrt{3}}q_y} - \right. \\
& \left. - 3\sin\left(\frac{3aq_x}{2}\right)e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_y}\right\}\cos\left(\frac{cq_z}{2}\right);
\end{aligned}$$

G. Myagmarsuren, Ts. Amartaivan, L. Enkhtor Expressions for elements of dynamical matrix for HCP crystals// // Defects and Diffusion Forum.-2024.- Vol. 436, P. 155-162. SJR=0.156

$$\begin{aligned}
P_x^{AA} = & -2i\sigma_2 \left\{ \sin(ak_x) + \sin\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}k_y\right) \right\} - 2i\sqrt{3}\sigma_6 \sin\left(\frac{3ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}k_y\right) - \\
& -i \frac{4a}{\sqrt{a^2 + c^2}} \sigma_7 \left\{ \sin\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}k_y\right) + \sin(ak_x) \right\} \cos(ck_z) - \\
& -2i\sigma_8 \left\{ \sin(ak_x) \cos(\sqrt{3}ak_y) + \sin(2ak_x) \right\};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_x^{AB} = & -i \frac{2a}{\sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}} \sigma_1 \sin\left(\frac{ak_x}{2}\right) e^{i\frac{aky}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{ck_z}{2}\right) - i \frac{4a}{\sqrt{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}} \sigma_3 \sin(ak_x) e^{-i\frac{aky}{\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{ck_z}{2}\right) + \\
& -i \frac{2a}{\sqrt{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}} \sigma_5 \left\{ \sin\left(\frac{ak_x}{2}\right) e^{-i\frac{5aky}{2\sqrt{3}}} + 2\sin(ak_x) e^{i\frac{2aky}{\sqrt{3}}} + 3\sin\left(\frac{3ak_x}{2}\right) e^{i\frac{aky}{2\sqrt{3}}} \right\} \cos\left(\frac{ck_z}{2}\right);
\end{aligned}$$

Коэффициенты Фурье-образов компонент квазиупругой силы P_{qi} брали равным произведениям радиальных силовых постоянных $\bar{\alpha}_j$ и статических смещений Δr_i , варьированием которого добивались минимума суммы квадратичных отклонений синтезированных согласно выражению (1) значений интенсивности ДРРЛ от экспериментальных значений.

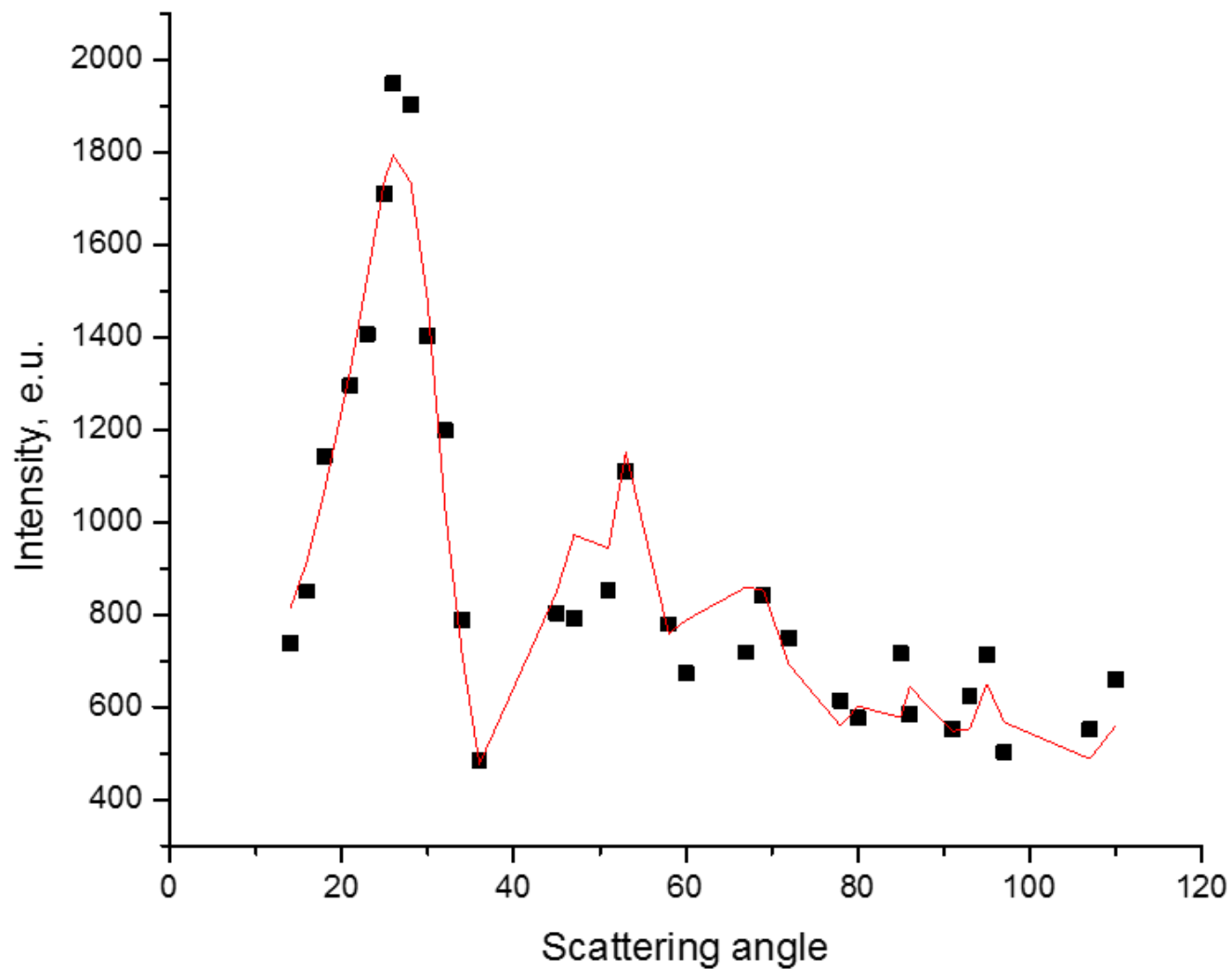


Рис.1. Интенсивность ДРРЛ сплавом Mg-10ат.%In , отожженного при 200°C :

■ – экспериментальные точки;

— — синтезированная кривая интенсивности .

Измерения интенсивности ДРРЛ проводились на автоматизированном рентгеновском дифрактометре типа ДРОН на $\text{Co K}\alpha$ -излучении. В качестве монохроматора использовался монокристалл кремния, вырезанный в плоскости /111/. Для регистрации рассеянного излучения применялся сцинтилляционный счетчик БДС-6-05. Фокусировка проводилась по схеме Брегга-Брэнтано.

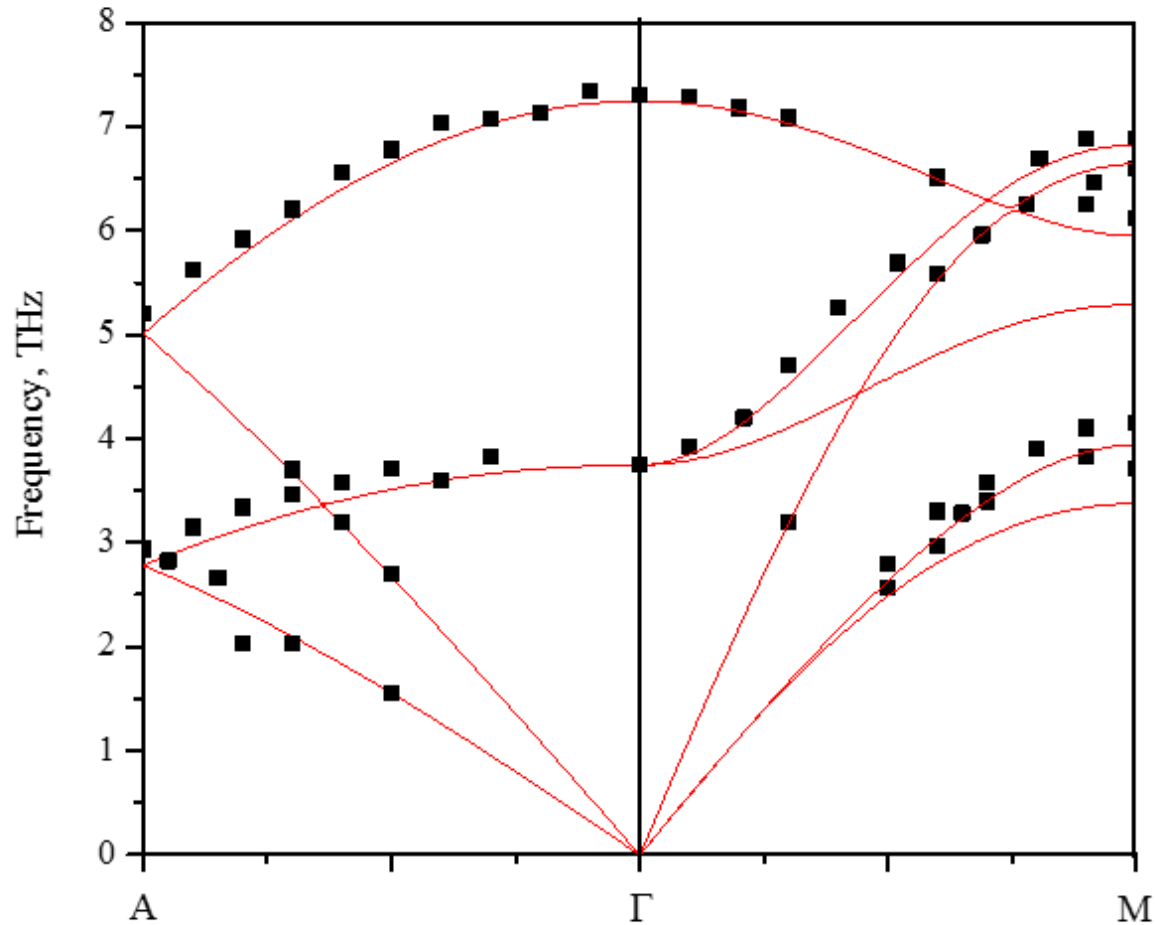
Интенсивность излучения рассеянного сплавом Mg-10 ат.% In приводилась к электронным единицам с помощью измерений интенсивности рассеяния от плавленого кварца при $2\theta=90^\circ$. После вычитания интенсивностей, обусловленных шумом регистрирующей системы, и рассеяния воздухом из измеренных значений интенсивности ДРРЛ исключались побочные компоненты: двойное брэгговское рассеяние, комптоновское рассеяние и тепловое диффузное рассеяние. Атомные факторы рассеяния рентгеновских лучей f для магния и индия рассчитывались с учетом поправок на аномальную дисперсию.

Табл.1 Радиальные $\bar{\alpha}_n$ и тангенциальные $\bar{\beta}_n$ силовые постоянные
магния [Н/м²]

Номер сферы n		1	2	3	4	5	6	7	8
Mg	$\bar{\alpha}_n$ [2]	10.483	10.099	-0.222	0.305	0.748	0.529	-0.049	-0.401
	$\bar{\beta}_n$ [2]	-0.309	-0.292	-0.246	-0.490	0.013	0.091	0.157	0.042

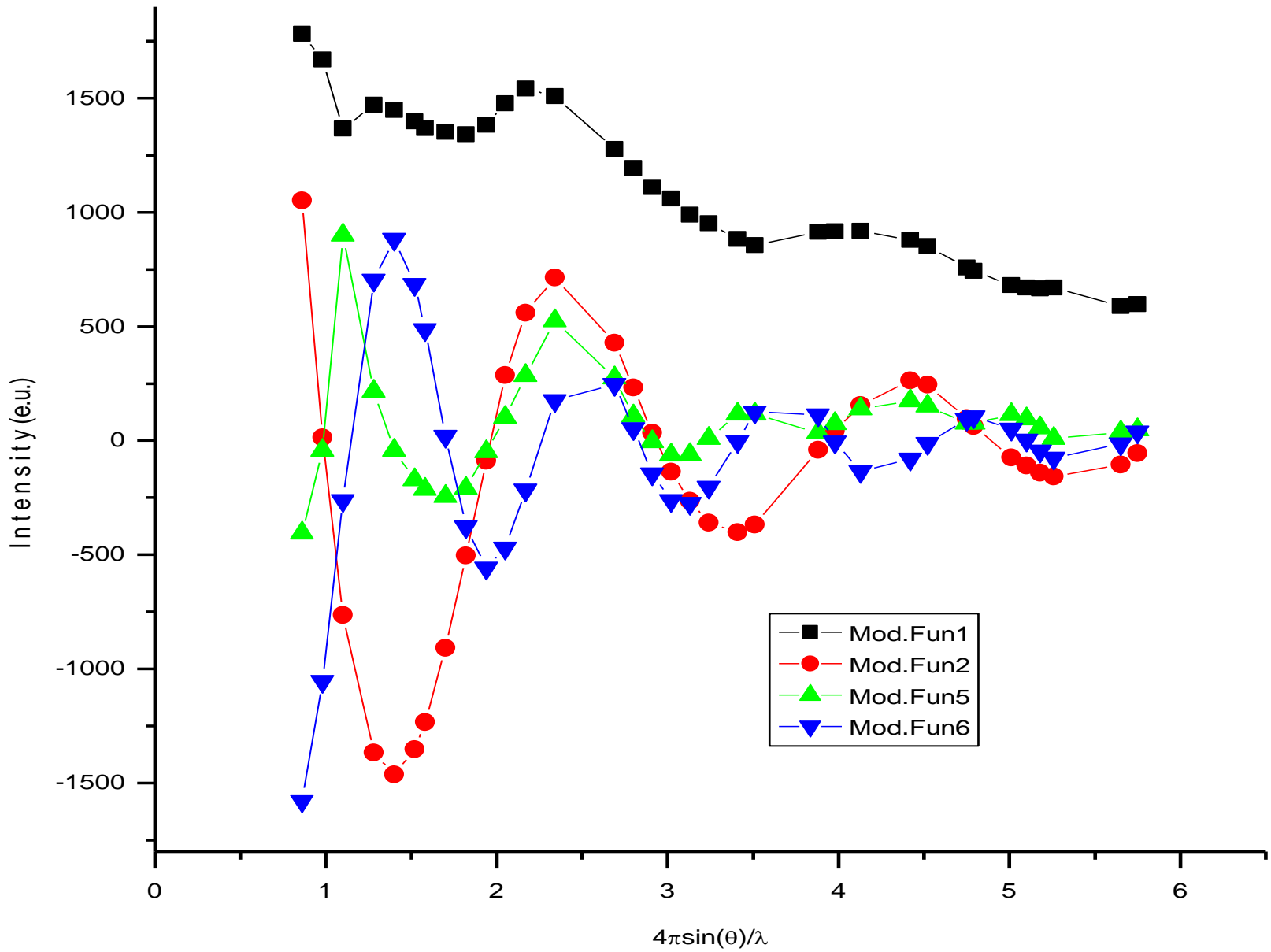
Iyengar P.K., Venkataram G., Vijiagargharan P.K., Roy A.P. Lattice Dynamics,
Pergamon Press. Oxford. 1965.

$$|D(\mathbf{q}) - 4\pi^2 m v^2 I| = 0,$$



P.K. Iyengar, G. Venkataram, P.K.Vijiagarathan, A.P. Roy, Inelastic Scattering of neutrons, International Atomic Energy Agency. 1(1965) 153-156.

G. Myagmarsuren, Ts. Amartaivan, L. Enkhtor Expressions for elements of dynamical matrix for HCP crystals// // Defects and Diffusion Forum.-2024.- Vol. 436, P. 155-162. SJR=0.156



i Номер сферы	C_i коорд. число	$R_i, \text{Å}$ Радиус сферы	α_i [2] Mg- 12.3 at.%In	α_i [3] Mg-10 at.%In	α_i [4]	α_i Эта работа T = 473K	$\Delta r_i,$ Å статич. смещение	α_i Mg ₃ Cd
1	6	3.194			-0.060	-0.038	-0.06	-0.333
2	6	3.197	-0.12	-0.11	-0.064	-0.001	0.09	-0.333
3	6	4.519	0.21	0.00	0.105	-0.055	0.06	1
4	2	5.219	0.04	-0.01	0.789	0.4028	0.00	1
5	12	5.536			0.015	0.000	0.10	-0.333
6	6	5.537	-0.06	-0.04	-0.112	-0.001	-0.20	-0.333
7	12	6.116			0.000	-0.005		-0.333
8	6	6.394			-0.042	-0.017		1

2. Kidron A., Rudman P.S. An X-ray diffuse scattering study of local order in an H.C.P. Mg-In alloy.// Acta metallurgica. 1963. V. 11. P.1011-1016.

3. Сафронова Л.А., Кацнельсон А.А., Свешников В.С., Львов Ю.М. Ближний порядок в твердых растворах Магний-Индий. //Физ.мет. и металловедение. 1977. Т. 43.С.76-80.

4. Силонов В.М., Рохлин Л.Л., Энхтор Лхамсурэнгийн, Глянченко И.А., Чернокозов О.Б. Исследование ближнего порядка в твердом растворе на основе магния в сплавах Mg-In.// Металлы.- 2002.- №6.- С. 111-114.

Видно, что параметры ближнего порядка на первой, второй, шестой и восьмой сферах совпадают по знаку с соответствующими параметрами ближнего порядка сплава после сплавления.

На второй, третьей, пятой сферах статические смещения имеют положительный знак, на шестой сфере – отрицательный знак.

Отрицательное значение статического смещения на первой сфере находится в качественном согласии с результатом [2], согласно которому связь Mg-In укорачивается на -0.2 \AA в сплаве Mg-12.3at.%In, отожженного при $400 \text{ }^\circ\text{C}$.

2 . Kidron A., Rudman P.S. An X-ray diffuse scattering study of local order in an H.C.P. Mg-In alloy.// Acta metallurgica. 1963. V. 11. P.1011-1016.

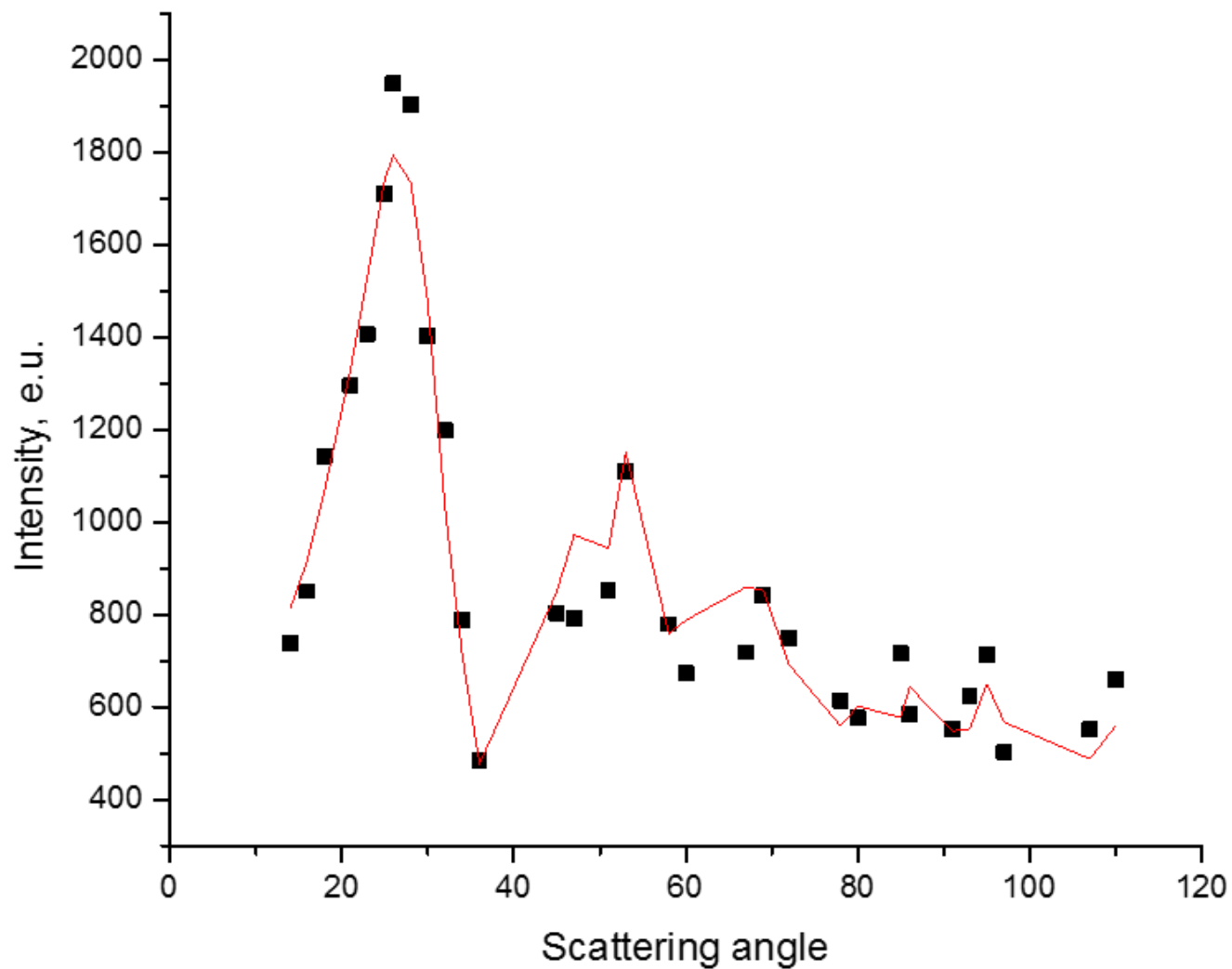


Рис.1. Интенсивность ДРРЛ сплавом Mg-10ат.%In , отожженного при 200°C :

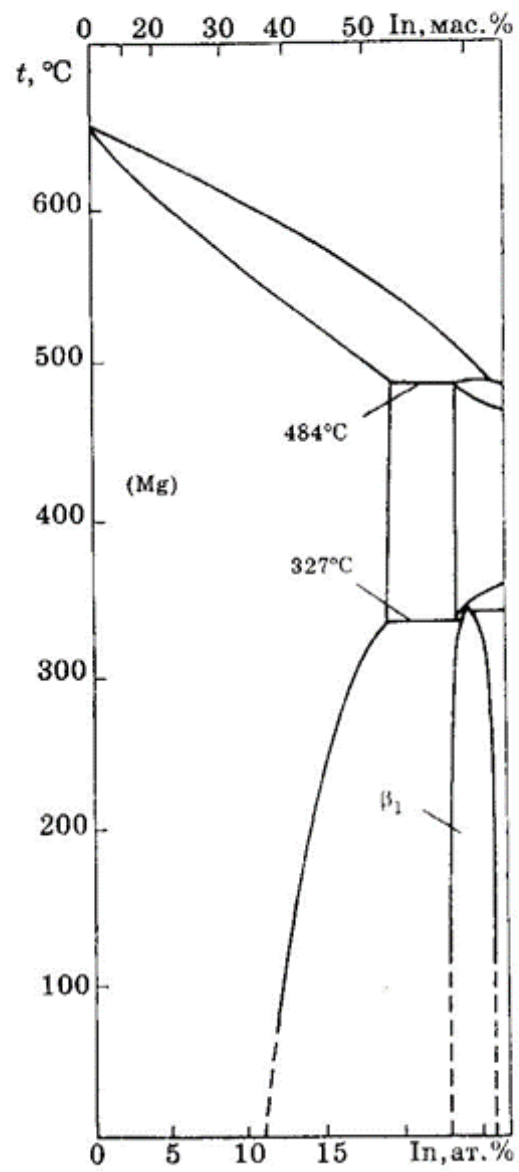
■ – экспериментальные точки;

— — синтезированная кривая интенсивности .

$$-2 \sum_{n'} \alpha_{n'} W_{nn'} - k_B T \ln \left\{ 1 + \frac{\alpha_n}{c_A c_B (1 - \alpha_n)^2} \right\} = 0,$$

$$T_c = -\frac{2c_A c_B}{k_B} (-2W_1 - 2W_2 + 6W_3 + 2W_4 - 4W_5 - 2W_6 - 4W_7 + 6W_8 - 4W_9 - -4W_{10})$$

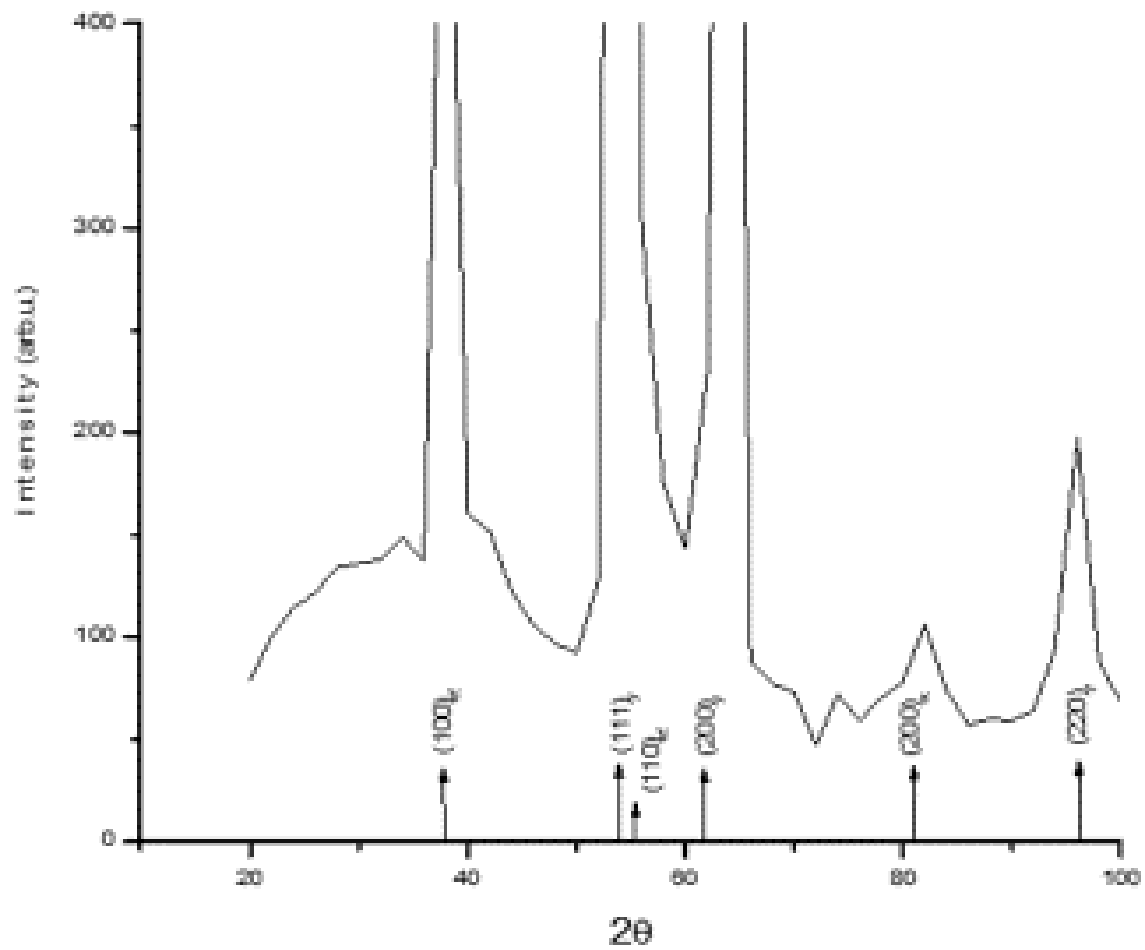
i	$\alpha_i [4]$	W_i, k_B	α_i	W_i, k_B
1	-0.060	33.3	-0.027	3.4
2	-0.064	500.5	-0.050	-3.1
3	0.105	-81.4	0.060	-242.9
4	0.789	-144.2	0.827	-20.6
5	0.150	-31.5	-0.004	-796.9
6	-0.112	-1247.2	-0.100	-7.9
7	0.000	-249.9	0.009	412.7
8	-0.042	72.5	-0.048	222.2
9	0.028	-48.7	0.009	87.0
10	-0.009	1165.5		
	$T_c = 123^\circ\text{C}$		$T_c = ^\circ\text{C}$	



Заключение

1. С применением полученных выражений Фурье –образов компонент квазиупругих сил и элементов динамической матрицы для ГПУ структур рассчитаны амплитуды волн статических смещений A_q , с использованием которых из интенсивности ДРРЛ отождествленным поликристаллическим сплавом Mg-10 ат.%In определены параметры ближнего порядка на первых восьми координационных сферах и статические смещения на первых шести сферах. Выявленное укорочение межатомной связи на первой сфере подтверждается с результатом других работ.
2. С использованием полученных параметров ближнего порядка проведен расчет энергий упорядочения сплава Mg-10 ат.%In на первых восьми сферах, через которых оценена критическая температура фазового перехода порядок –беспорядок, не противоречащая фазовой диаграмме системы Mg-In.

Спасибо за внимание



Дифрактограмма сплава Fe-25ат.%Rh