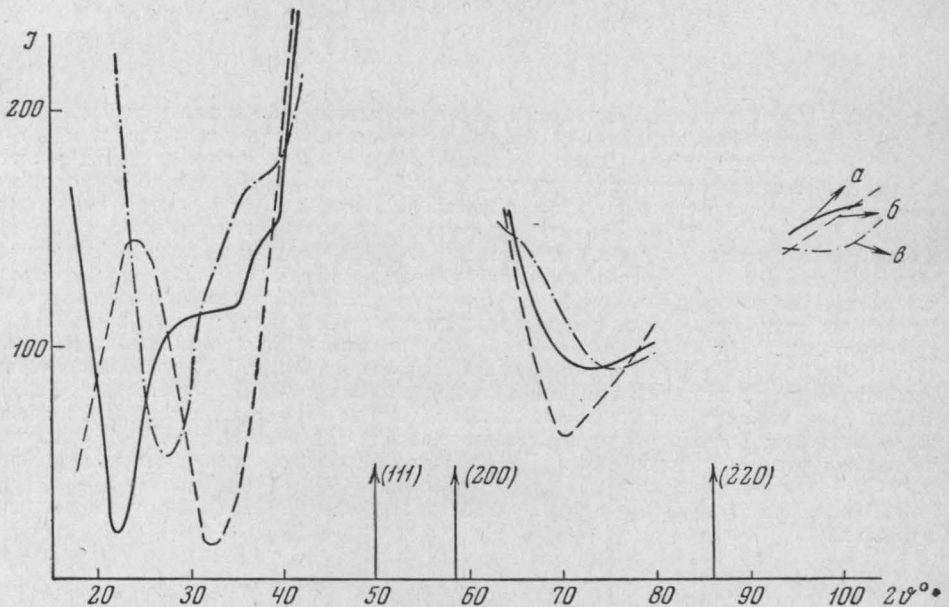


А. А. КАЦНЕЛЬСОН, Г. П. РЕВКЕВИЧ

ОБ АНОМАЛЬНОМ ПОВЫШЕНИИ ДИФФУЗНОГО ФОНА В α — CuAl

В [1] было показано, что интенсивность диффузного рассеяния для всех углов θ на поликристаллических образцах сплава CuAl с 16 ат.% Al, деформированных точением на станке, а затем отполированных, значительно выше, чем на отожженных. Для уточнения условий возникновения этого явления нами было проведено дополнительное исследование сплава CuAl и было обнаружено, что отжиг при 200°С в течение 4 часов, проведенный после пластической деформации, также вызывает повышение диффузного рассеяния. Это означает, что наблюдаемый эффект связан с нагревом образца после или в процессе деформаций (обработка поверхности образца на станке).

Внимательное рассмотрение работ [2, 3] указывает на то, что для сплавов TiNb и NiAl при некоторых обработках наблюдается общее повышение уровня фона. В [4] авторы также отмечают некоторое повышение уровня фона для сплава AuPd.



Рассчитанные значения I д.д.р в произвольных единицах. a — дырки сферической формы, размер в одну координационную сферу, b — дырки сферической формы, размер в две координационные сферы, c — дырки в форме параллелепипеда в виде двух элементарных ячеек, взятых вдоль плоскости (111)

Развивая гипотезу, высказанную в [1], можно предположить, что наблюдаемый эффект связан с появлением при нагреве после или в процессе пластической деформации локальных дефектов, весьма малых по размеру. Если эти дефекты некогерентно связаны с матрицей и хаотически распределены в ней, то интенсивность рассеяния от такого кристалла равна сумме интенсивности двух членов: I_1 — интенсивности рассеяния на правильной части кристалла и I_2 — интенсивности рассеяния на некогерентных областях. I_1 приблизительно можно рассчитать, если рассматривать кристалл с дырками, как твердый раствор «дырок» в кристалле. При расчете предположим, что в этой модели форма дырок и число атомов, необходимых для их заполнения, принимаются одинаковыми, причем весь кристалл построен из таких «элементарных» ячеек. Тогда

$$I_1 = F_{\text{cp}}^2 \sum_j^{N'} \sum_{j'}^{N'} e^{2\pi i (\vec{s} \cdot \vec{R}_j - \vec{R}_{j'})} + N' C'_A C'_B (F_M - 0)^2, \quad (1)$$

где N' — полное число выбранных «элементарных» ячеек, $F_M = \sum_i^m f_{im} e^{2\pi i(\vec{s} \cdot \vec{r}_i)}$ m — число

атомов в «элементарной» ячейке, C'_B — концентрация дырок, которая равна $\frac{n}{N'}$, где n — число дырок в кристалле, F_{cp} — средний структурный фактор для кристалла с дырками.

$$F_{cp} = \frac{N' - n}{N'} F_M.$$

Первый из членов (1) представляет интенсивность рентгеновских линий. Второй член есть диффузное рассеяние, обусловленное различными рассеивающими способностями дырок и остальной части кристалла.

$$I_2 = n |F_{нек}|^2,$$

где $F_{нек} = \sum_i^m f_{ni} e^{2\pi i(\vec{s} \cdot \vec{r}_i)}$. При расчете I_1 и I_2 необходимо учесть, что и матрица и

дефекты состоят из атомов Al и Cu, вследствие чего и в I_1 и в I_2 есть обычное диффузное рассеяние твердого раствора. Однако легко показать, что неосциллирующая часть этого диффузного фона (лауэвский фон) будет такой же, как и для случая однородного раствора Al в Cu данной концентрации, если m и n невелики.

Тогда суммарное дополнительное диффузное рассеяние (повышение интенсивности относительно лауэвского фона) есть $I_{д.д.р} = n |F_M|^2 + n |F_{нек}|^2$.

Величина этого рассеяния, численно рассчитанного для случая, когда «дырки» имеют сферическую форму и размер в одну или две координационные сферы, а также форму параллелепипеда в виде двух элементарных ячеек, взятых вдоль плоскости (III), показана на рисунке.

Видно, что в области углов $\theta > \theta_{200}$ угловая зависимость этого фона практически не зависит от формы и размеров «дырок». В области углов $\theta < \theta_{111}$ такая зависимость есть. Однако если предположить, что в кристалле реализуются области различного размера и формы, то и для углов $\theta < \theta_{111}$ можно получить монотонный ход интенсивности рассчитанного дополнительного фона с углом.

Для согласования численных значений экспериментально найденных величин дополнительного фона с рассчитанным достаточно допустить, что общий объем «дырок» составляет 3—4% от общего объема кристалла.

Если предположить, что области, обогащенные Al, когерентно связаны с остальной частью кристалла, то $I_{д.д.р} = n(F_M - F_K)^2$, и в этом случае мы не можем получить количественного согласования эксперимента и расчета.

Таким образом, повышение фона можно объяснить появлением в процессе последеформационного отжига в кристалле твердого раствора обогащенных вторым компонентом областей, некогерентно связанных с основной частью кристалла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Иверонова В. И., Кацнельсон А. А., Ревкевич Г. П. «Изв. АН СССР», сер. неорганические материалы, **2**, 823, 1966.
2. Rudman P. S. Acta met., **12**, 1381, 1964.
3. Starke E. A., Gerald V., Guy A. I. Acta met., **13**, 957, 1965.
4. Иверонова В. И., Кацнельсон А. А. «Кристаллография», **11**, вып. 4, 1966.

Поступила в редакцию
12. 6 1966 г.

Кафедра
общей физики для физиков