

вождается уменьшением давления паров ацетона над каплей. Это вызывает перенос ацетона из раствора в каплю через паровую фазу и постепенный рост ее диаметра.

Заключение. При облучении пучком света тонкой пленки раствора поверхностно-инактивного вещества происходит локальное утончение пленки, ее разрыв и образование изолированной подвижной капли раствора с концентрацией больше исходной. Капля следует за световым пятном по стенке кюветы. Образование и движение капли объясняется ростом поверхностного натяжения раствора в облучаемой зоне вследствие испарения растворителя.

Авторы благодарят профессора Е. А. Галашина за внимание к данной работе и участие в обсуждении результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Безуглый Б. А., Галашин Е. А., Дудкин Г. Я. О фотоконденсации йода.— Письма в ЖЭТФ, 1975, 22, № 2, с. 76—78. [2] Безуглый Б. А., Галашин Е. А., Криндач Д. П., Майоров В. С. Разделение примесей в жидкости при тепловом действии лазерного излучения.— Письма в ЖТФ, 1976, 2, № 18, с. 832—838. [3] Безуглый Б. А., Галашин Е. А., Федотов А. Н. Исследование явлений фотоконденсации и фотокристаллизации.— Журн. научн. и прикл. фотогр. и кинематогр., 1977, 22, № 1, с. 3—9. [4] Сумм Б. Д., Горюнов Ю. В. Физико-химические основы смачивания и растекания. М.: Химия, 1976, с. 118, 153.

Поступила в редакцию
20.12.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, Т. 22, № 6

УДК 669.866.018:448.7

ВЛИЯНИЕ МЕДИ НА СТАБИЛЬНОСТЬ СТРУКТУРЫ С14 В КВАЗИБИНАРНОЙ СИСТЕМЕ $Eg(Mn_{1-x}Cu_x)_2$

А. С. Илюшин, В. Т. Гребенкин, Л. А. Кириличева

(кафедра физики твердого тела)

Интерметаллические соединения редкоземельных и переходных металлов представляют огромный интерес для науки и техники, обусловленный, в первую очередь, их уникальными магнитными свойствами [1—3]. Среди множества различных интерметаллических соединений важное место принадлежит фазам Лавеса с плотноупакованными структурами С14 ($MgZn_2$), С15 ($MgCu_2$) и С36 ($MgNi_2$). Эти структуры родственны друг другу в отношении координации атомов, характеризуются большими координационными числами и высокой плотностью упаковки атомов различного размера [4—7].

В последние годы фазы Лавеса широко используются в качестве материалов для создания новой техники [8]. Несмотря на то что наиболее перспективными для практического использования являются тройные и многокомпонентные интерметаллические соединения, внимание большинства исследователей было сосредоточено в основном на изучении структуры и свойств двойных соединений.

Целью настоящей работы явилось изучение влияния изоморфного замещения атомов марганца атомами меди на стабильность гексагональной плотноупакованной фазы С14 в квазибинарной интерметаллической системе $Eg(Mn_{1-x}Cu_x)_2$.

Образцы и методика эксперимента. Образцы интерметаллических соединений квазибинарной системы $Eg(Mn_{1-x}Cu_x)_2$ выплавлялись из

металлов чистотой 99,99% в индукционной печи в атмосфере аргона методом бестигельной плавки [9]. Вес слитков не превышал 2,5 г, отклонение веса слитков от веса шихты было не более 0,1%. Все слитки переплавлялись по 3—4 раза, после чего запаивались в кварцевые ампулы, наполненные аргоном, и подвергались гомогенизирующему отжигу при температуре 980°C в течение двух недель. Были приготовлены интерметаллические соединения квазибинарной системы $\text{Eg}(\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x)_2$ следующих составов: $x=0; 0,1; 0,2; 0,3$.

Рентгеновское исследование проводилось на дифрактометре УРС-50ИМ в фильтрованном излучении от медного анода. Запись дифракционных спектров осуществлялась как в режиме автоматической записи на ленту электронного потенциометра, так и вручную «по точкам».

Порошки для рентгеновского исследования получали путем растирания кусочков сплава в агатовой ступке под слоем бензина.

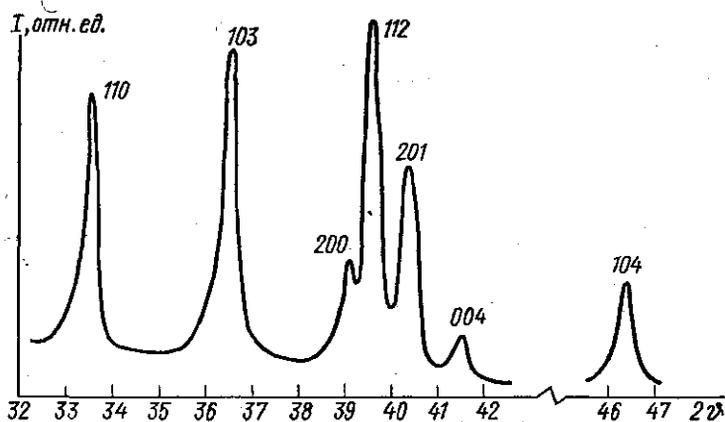


Рис. 1. Фрагмент дифрактограммы интерметаллического соединения $\text{Eg}(\text{Mn}_{0,9}\text{Cu}_{0,1})_2$

Экспериментальные результаты и их обсуждение. Рентгеноструктурный анализ интерметаллического соединения EgMn_2 показал, что оно является однофазным и его структура изотипна гексагональной плотноупакованной структуре фазы Лавеса C14 (MgZn_2). Фаза Лавеса C14 относится к пространственной группе $R\bar{6}_3/mmc-D^{6h}_4$ и содержит в элементарной ячейке 12 атомов, т. е. четыре формульные единицы [4, 5]. Измерения параметров элементарной ячейки интерметаллида EgMn_2 показали, что $a=5,300\pm 0,005$ Å, $c=8,655\pm 0,005$ Å и отношение $c/a=1,633$ практически равно идеальному отношению для гексагональных плотноупакованных структур. Полученные данные о величине параметров элементарной ячейки интерметаллида EgMn_2 достаточно хорошо согласуются с литературными данными [2, 10].

На рис. 1 приведен фрагмент дифрактограммы интерметаллического соединения $\text{Eg}(\text{Mn}_{0,9}\text{Cu}_{0,1})_2$. Как показал анализ, дифрактограмма этого соединения по числу, положению, ширине и относительной интенсивности дифракционных максимумов практически идентична дифрактограмме интерметаллида EgMn_2 . Это свидетельствует о том, что при изоморфном замещении 10% атомов марганца атомами меди структура и фазовый состав интерметаллида не изменяются, т. е. соединение $\text{Eg}(\text{Mn}_{0,9}\text{Cu}_{0,1})_2$ остается изоструктурным фазе Лавеса C14.

Заметная трансформация дифракционных спектров наблюдается при изоморфном замещении в квазибинарной системе $\text{Er}(\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x)_2$ 20 и 30% атомов марганца атомами меди (рис. 2 и 3).

На дифрактограмме интерметаллического соединения $\text{Er}(\text{Mn}_{0,8}\text{Cu}_{0,2})_2$ присутствуют все дифракционные максимумы, характерные для гексагональной плотноупакованной структуры C14 , однако ширина некоторых из них, а именно ширина максимумов 103, 200, 201, 104, 205 заметно превышает ширину максимумов 110, 112, 302, 004, 220. Отметим, что ширина размытых максимумов зависит не только от угла дифракции φ , но и от индексов дифракционного максимума hkl .

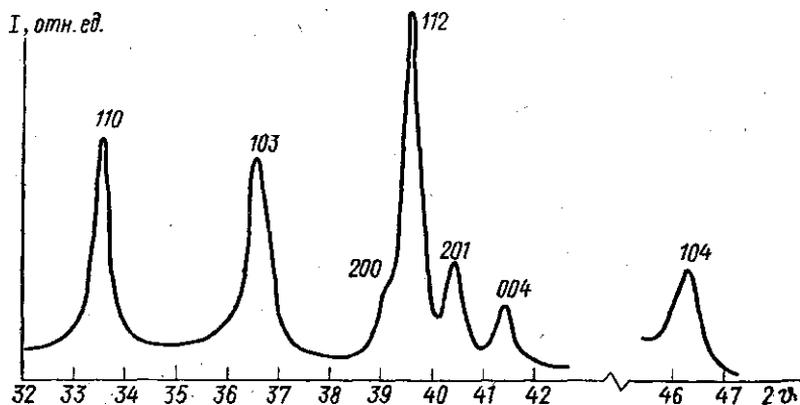


Рис. 2. Фрагмент дифрактограммы интерметаллического соединения $\text{Er}(\text{Mn}_{0,8}\text{Cu}_{0,2})_2$

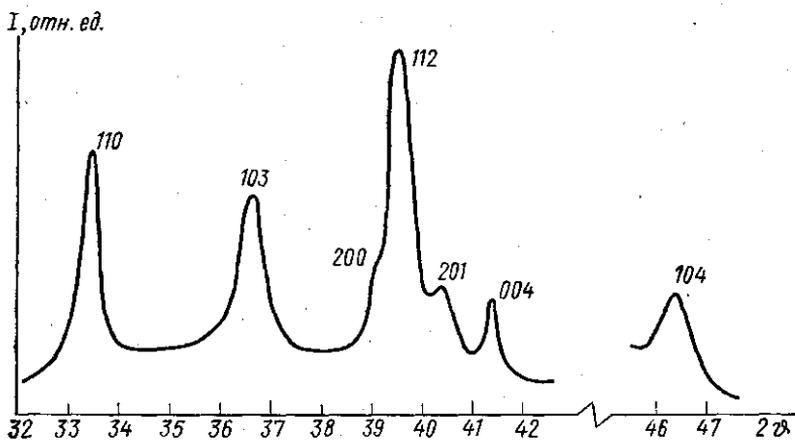


Рис. 3. Фрагмент дифрактограммы интерметаллического соединения $\text{Er}(\text{Mn}_{0,7}\text{Cu}_{0,3})_2$

Повышение содержания меди в системе $\text{Er}(\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x)_2$ приводит к тому, что на дифрактограмме интерметаллида $\text{Er}(\text{Mn}_{0,7}\text{Cu}_{0,3})_2$ ширина максимумов 103, 200, 201, 104, 205 увеличивается, в то время как ширина дифракционных максимумов 110, 112, 302, 004, 220 практически не изменяется и остается равной ширине этих же максимумов на дифрактограммах интерметаллида ErMn_2 .

Из приведенных выше экспериментальных данных видно, что гексагональная плотноупакованная структура С14 в системе $\text{Eg}(\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x)_2$ устойчива при изоморфном замещении 10% атомов марганца атомами меди и становится неустойчивой при замещении 20% атомов марганца. Структурная неустойчивость легко обнаруживается по изменению вида дифракционного спектра, проявляющегося в первую очередь в расширении ряда дифракционных максимумов.

Подобный дифракционный эффект наблюдается в гексагональных плотноупакованных металлах в случае образования в них дефектов упаковки. Известно, что в гексагональных плотноупакованных металлах могут возникнуть дефекты упаковки двух типов: «деформационные» и «двойниковые». В работе [11] было проанализировано их влияние на вид дифракционных спектров и было показано, что образование дефектов упаковки в гексагональных плотноупакованных металлах сопровождается уширением некоторых дифракционных максимумов на дифрактограммах поликристаллов. Величина уширения зависит от индексов отражения следующим образом. Все дифракционные максимумы с индексами hkl , для которых справедливо условие $h-k=3N$, остаются острыми, а максимумы, индексы которых удовлетворяют условию $h-k=3N\pm 1$, будут уширены.

В работе [11] были получены формулы, связывающие абсолютное значение величины полного уширения дифракционного максимума на половине высоты $B_{2\theta}$ в предположении, что известны вероятности появления дефектов упаковки обоих типов. Следуя работе [11], обозначим вероятность появления дефекта упаковки деформационного типа через α , а вероятность появления двойникового дефекта упаковки через β . Тогда для отражений, у которых $h-k=3N\pm 1$ и l — четное, величина полного уширения дифракционного максимума $B_{2\theta}$ будет равна:

$$B_{2\theta} = \frac{360}{\pi^2} \text{tg } \vartheta |l| \left(\frac{d}{c} \right)^2 (3\alpha + 3\beta), \quad (1)$$

а для отражений, у которых $h-k=3N\pm 1$ и l — нечетное, величина полного уширения дифракционного максимума $B_{2\theta}$ будет равна

$$B_{2\theta} = \frac{360}{\pi^2} \text{tg } \vartheta |l| \left(\frac{d}{c} \right)^2 (3\alpha + \beta), \quad (2)$$

где $B_{2\theta}$ — полная ширина дифракционного максимума в градусах 2θ , ϑ — дифракционный угол, d — межплоскостное расстояние.

Кристаллическая структура С14 представляет собой гексагональную плотную упаковку двойных слоев A и B , чередующихся в последовательности $ABABABAB\dots$ [4—7]. Нарушения правильного чередования двойных слоев A и B в гексагональной структуре может привести к образованию в ней как двойниковых, так и деформационных дефектов упаковки. Подобный случай был обнаружен в работе [12] при изучении квазибинарной системы $\text{Eg}(\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$. В этой работе было показано, что перестройка гексагональной плотноупакованной структуры С14 в кубическую плотноупакованную структуру С15 происходит за счет образования дефектов упаковки в структуре С14. При этом было установлено, что закономерности трансформации дифракционных спектров интерметаллидов системы $\text{Eg}(\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ полностью объясняются в рамках теории, развитой в работе [11]. Более того, из формул (1) и (2) видно, что из величины полного уширения дифракционного максимума можно экспериментально определить концентрации дефектов упа-

ковки. Для этого необходимо измерить экспериментальные значения величин полного уширения двух дифракционных максимумов, у которых $h-k=3N\pm 1$, а l соответственно четное и нечетное, и, решая уравнения (1) и (2) относительно α и β для измеренных значений величин полного уширения $B_{2\theta}$, найти экспериментальные значения концентраций дефектов упаковки деформационного типа α и двойникового типа β .

На экспериментальных дифрактограммах ширина дифракционного максимума, измеренного на половине его высоты, связана с истинным дифракционным уширением следующей формулой [13]:

$$B_{2\theta}^2 = B_{\text{изм}}^2 - b^2, \quad (3)$$

где $B_{\text{изм}}$ — измеренная ширина дифракционного максимума, b — инструментальная ширина, $B_{2\theta}$ — истинное дифракционное уширение.

Обычно в качестве инструментальной ширины b используется ширина дифракционного максимума на дифрактограмме от эталонного образца. Однако в нашем случае в качестве инструментальной ширины b можно использовать ширину тех дифракционных максимумов, для которых $h-k=3N$. Из приведенных рисунков видно, что их ширина практически неизменна для интерметаллидов всех трех составов. Это свидетельствует о том, что блочная структура этих интерметаллидов примерно одинакова. Принимая во внимание зависимость ширины дифракционных максимумов hkl с $h-k=3N$ от угла дифракции θ , эти максимумы были использованы в качестве эталонных для определения величин истинного дифракционного уширения $B_{2\theta}$ по формуле (3).

Экспериментальное определение величин α и β проводилось по уширению дифракционных максимумов 103 и 104. Расчет производился по формулам (1) и (2) с учетом формулы (3). Было найдено, что в интерметаллидах системы $\text{Eg}(\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x)_2$ для состава $x=0,2$ $\alpha=0,027\pm\pm 0,003$, $\beta=0,020\pm 0,003$, а для состава $x=0,3$ $\alpha=0,025\pm 0,003$, $\beta=0,041\pm 0,003$, т. е. с увеличением содержания меди концентрация дефектов упаковки возрастает.

Итак, экспериментально установлено, что изоморфное замещение атомов марганца атомами меди в системе $\text{Eg}(\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x)_2$ дестабилизирует ГПУ структуру C14 и приводит к образованию в ней дефектов упаковки деформационного и двойникового типов. С увеличением содержания меди концентрация дефектов упаковки возрастает и в их взаимном расположении возможна корреляция. Скоррелированное распределение дефектов упаковки может привести к образованию новых структурных типов плотноупакованных структур, аналогичных наблюдавшимся в работе [14]. В пользу подобного утверждения свидетельствуют эффекты независимого рассеяния от отдельных областей интерметаллидов, наблюдавшиеся под большими углами дифракции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Wallace W. E. Rare earth intermetallics. N. Y.—Ld., 1973, 266 p.
 [2] Тейлор К. Интерметаллические соединения редкоземельных металлов. М.: Мир, 1974, 222 с. [3] Тейлор К., Дарби Н. Физика редкоземельных соединений. М.: Мир, 1974, 371 с. [4] Теслюк М. Ю. Металлические соединения со структурами фаз Лавеса. М.: Наука, 1969, 136 с. [5] Лавес Ф. Факторы, определяющие кристаллическую структуру.— В кн.: Интерметаллические соединения. М.: Металлургия, 1970, с. 139—161. [6] Berry P., Raynor G. The crystal chemistry of the Laves phases.— Acta Cryst., 1953, 6, p. 178—186. [7] Крипьякевич П. И. Структурные типы интерметаллических соединений. М.: Наука, 1977, 288 с. [8] Herget C., Domazet H. G. Methods for the production of rare earth-3d metal alloys with particular emphasis on the cobalt alloys. Goldschmidt Informiert, 1975, 35, p. 3—33. [9] Ilyushin A. S., Wallace W. E. Magnetic and structural studies of rare earth-iron-manganese Laves

phase ternaries.—J. Solid State Chemistry, 1976, 17, p. 131—133. [10] Wernik J. H., Geller S. Rare earth compounds with $MgCu_2$ structure.—Trans. Met. Soc. AIME, 1960, 218, p. 866. [11] Warren B. E. X-Ray Diffraction. Addison—Wesley Pub. Co., N. Y., 1969, p. 298—316, 868. [12] Илюшин А. С. Структурные состояния квазибинарной системы.—Физ. мет. и металловедение, 1977, 43, с. 1249—1252. [13] Ивернова В. И., Ревкевич Г. П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. Изд. 2. М.: Изд-во МГУ, 1978, 278 с. [14] Hennig G. Rare earth-cobalt magnets in modern medicine. Goldschmidt Informiert, 1975, 35, p. 85—90.

Поступила в редакцию
20.12.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, Т. 22, № 6

УДК 521.13

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ЗВЕЗДНОЙ ДИНАМИКИ

В. П. Долгачев

(ГИАИШ)

Изучение эволюции некоторой звездной системы сводится к численному интегрированию дифференциальных уравнений, описывающих движение такой системы. В процессе эволюции компоненты системы могут достаточно близко проходить друг относительно друга и тогда говорят о почти соударении или тесном сближении. Наиболее часто имеют место парные сближения звезд (материальных точек), которые и рассматриваются в этой работе. Такое парное сближение вызывает большие взаимные гравитационные силы и резкое изменение орбит этих звезд. При численном интегрировании такая ситуация приводит к уменьшению длины шага и быстрому увеличению количества шагов в зоне тесного сближения. Из-за ошибок округления и ошибок метода точность численного интегрирования после прохождения почти соударения будет довольно низкой. Если же происходит настолько тесное сближение, что взаимное расстояние стремится к нулю, то вычисления вообще не могут быть продолжены вследствие переполнения разрядной сетки ЭВМ. Как в том, так и в другом случае необходимы такие преобразования, которые устраняли бы указанные трудности. Такие преобразования получили название регуляризирующих преобразований.

Целью настоящей работы является построение алгоритма регуляризации некоторой системы дифференциальных уравнений звездной динамики.

§ 1. Исходные дифференциальные уравнения. Рассматривается произвольное число n звезд (материальных точек) P_0, P_1, \dots, P_{n-1} , двигающихся в трехмерном пространстве и имеющих соответственно массы m_0, m_1, \dots, m_{n-1} . Предположим, что n_1 ($n_1 < n$) звезд движутся в шаровом однородном облаке, плотность которого δ ; n_2 ($n_2 < n$) звезд движутся в однородном концентрическом шаровом слое (облаке), окружающем шаровое облако и имеющем плотность δ_1 ($\delta_1 < \delta$). Оставшиеся $n - n_1 - n_2$ звезд движутся вне упомянутых облаков, т. е. в свободном пространстве.

Пусть центры масс указанных облаков совпадают с барицентром рассматриваемой системы звезд. Условимся называть шаровое облако ядром, а окружающий его шаровой слой — короной. Предполагается, что массы рассматриваемых звезд значительно меньше масс